



**HAL**  
open science

# Construction et évaluation d'un modèle de transport de contaminants réactifs couplé surface-subsurface à l'échelle du versant

Laure-An Gatel

## ► To cite this version:

Laure-An Gatel. Construction et évaluation d'un modèle de transport de contaminants réactifs couplé surface-subsurface à l'échelle du versant. Sciences de l'environnement. Doctorat, Spécialité: Sciences de la Terre et Univers, Environnement, Communauté Université Grenoble Alpes (France) et Institut National de Recherche Scientifique Québec (Canada), 2018. Français. NNT : 2018GREAU001 . tel-02607327v1

**HAL Id: tel-02607327**

**<https://hal.inrae.fr/tel-02607327v1>**

Submitted on 16 May 2020 (v1), last revised 28 Mar 2018 (v2)

**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.

## THÈSE

Pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE LA COMMUNAUTE UNIVERSITE  
GRENOBLE ALPES**

**préparée dans le cadre d'une cotutelle entre la  
Communauté Université Grenoble Alpes (Grenoble,  
France) et l'Institut National de Recherche Scientifique  
(Québec, Canada)**

Spécialité : **Sciences de la Terre et Univers, Environnement**

Arrêté ministériel : le 6 janvier 2005 - 7 août 2006

Présentée par

**Laura GATEL**

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

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

## **Construction et évaluation d'un modèle de transport de contaminants réactifs couplé surface-subsurface à l'échelle du versant.**

Thèse soutenue publiquement le **9 janvier 2018**,  
devant le jury composé de :

**Mme Clémentine Prieur**

Professeure à l'université de Grenoble, présidente

**Mr Marnick VanClooster**

Professeur à l'université catholique de Louvain, rapporteur

**Mr Marc Voltz**

Directeur de recherche à l'INRA Montpellier, rapporteur

**Mr Laurent Lassabatère**

IDTPE, ENTPE, examinateur

**Mr Sylvain Payraudeau**

Professeur à l'ENGEES, examinateur

**Mme Nadia Carluer**

ICPEF HDR, Irstea Lyon Villeurbanne, co-directrice de thèse

**Mme Claire Lauvernet**

Chargée de recherche, Irstea Lyon Villeurbanne, co-encadrante de thèse

**Mr Claudio Paniconi**

Professeur à l'INRS-ETE, co-directeur de thèse





# Remerciements

Ce travail a été réalisé en cotutelle et financé par Irstea Lyon-Villeurbanne (France) et l'INRS-ETE à Québec (Canada). L'organisation des séjours dans les deux instituts a été facilitée par une bourse Explora'doc de la région Auvergne-Rhône Alpes.

En premier lieu je tiens à remercier mes trois encadrants qui ont su encadré mes travaux de manière toujours cohérente, en laissant une grande place à la prise en considération des autres avis et notamment du mien malgré leur éloignement géographique et leur différents domaines d'expertises. Claire Lauvernet, tu as été présente tout au long des travaux de thèse, à Lyon ou en correspondance depuis Québec. C'est ton énergie qui a permis la concrétisation du projet de thèse, et surtout de sa réalisation sous le statut de cotutelle malgré les denses méandres administratifs. Travailler avec toi est très gratifiant, tu guides sans imposer, tu conseilles sans déprécier. Merci de m'avoir ouverte au monde merveilleux et sensible (ah bon ?) de la modélisation, merci pour la qualité de nos échanges, pour tes relectures plus qu'exhaustives, pour ta disponibilité et ton optimisme constant. Claudio Paniconi, tu as suivi mes avancées lors de mes séjours à Québec avec beaucoup de disponibilité et de gentillesse. Je retiens ta maîtrise de la modélisation hydro-géologique et ta pédagogie à toute épreuve, même quand il s'agit de former une étudiante en deux jours sur un modèle aussi complexe que CATHY. Un jour peut-être saurais-je rédiger des articles aussi concis et clairs que les tiens, en attendant ton avis et tes excellentes corrections étaient plus que bienvenus pour me guider. Nadia Carluer, tu as participé à l'encadrement de la thèse à Lyon, mais aussi en suivi régulier lors de mes séjours à Québec. Ton expertise a apporté une vision plus appliquée à la problématique de la thèse assez théorique. Merci pour tes remises en questions avisées et tes relectures des derniers mois.

Je remercie également les membres du comité de thèse, Sylvain Weill, Julien Tournebize, Cécile Dagès et Hocine Henine. Ces séances annuelles ont été précieuses pour mon travail, dans la critique des travaux déjà effectués et surtout dans les suggestions qui en ont émergées, notamment la collaboration avec Julien et Irstea Antony pour l'utilisation des données de MASHYNS. Un merci particulier à Sylvain, qui a pris le temps de se replonger dans le code CATHY pour m'aider à partir sur des bases solides. Merci aux membres du jury Clémentine Prieur, Marc Voltz, Marnick Vanclooster, Sylvain Payraudeau et Laurent Lassabatère pour avoir pris le temps de lire et d'évaluer mon travail, ainsi que pour leurs questions et leurs remarques pertinentes durant la discussion lors de la soutenance. Merci à Marc Neyra d'avoir soutenu la mise en place du projet de cotutelle et combattu les lourdeurs administratives, et à Vanessa Aburegaiba pour son aide

précieuse dans le montage des dossiers de missions longues durées à l'étranger.

Une grande pensée pour mes parents, Marie et Serge. Merci de m'avoir soutenue, d'avoir été là et d'avoir toujours eu confiance en moi et mes choix. Merci Caro, mention spéciale aux promenades de fin d'automne dans les vignes et pour ton accueil cet été, sans toi la phase de rédaction de l'état de l'art aurait été bien moins détendue.

Bien sûr la période de mon doctorat n'aurait pas été la même sans mes collègues et amis d'Irstea et de l'INRS-ETE. Je remercie l'équipe Polldiff dans son ensemble pour son accueil. Un merci particulier aux grandes dames Cécile et Lucie, infatigables machines à fabriquer de bons moments. Ce fut aussi un vrai plaisir de partager le bout du couloir avec les co-bureaux qui se sont succédés au cours de la thèse Romain, Xavier et Karima puis Emilie et Christine. L'ambiance studieuse à l'intérieur du bureau m'a bien aidé à avancer, et à l'extérieur les pauses thé et/ou les soirées bières m'ont souvent fait l'effet d'un bol d'air frais. Je ne peux pas évoquer les soirées bières sans Martin, ciao et merci pour l'ensemble de ton œuvre à Lyon, en Serbie ou dans le Lot. Merci à Anne-Laure et Eric pour votre bonne humeur à toute épreuve, à Adrien pour tes super séances de boxe et tes galettes de blé noir, à Emilie, Ivan, Clotaire, François, Grégoire, et tous les sympathiques escapadiens dont j'ai croisé le chemin. Côté Québec, un merci s'impose naturellement à Carlotta pour son accueil et son soutien dans nos dérives numériques mutuelles. Merci à l'inébranlable quator Lauriane, Yohann, Anne-sophie et Nishodi, les rigolos avec qui j'ai sans doute passé mes meilleurs moments à Québec. Anais et Marco, quelle (re)découverte ! J'ai hâte de vous retrouver pour de nouvelles aventures canadiennes. Merci à Claudia, je n'aurais pas rêvé meilleure guide et amie pour mes premiers mois à Québec.

Merci aux copains de Strasbourg et d'ailleurs, merci Manu d'avoir été là, et d'avoir ramené à Lyon tes discussions passionnées et tes danses enflammées, ça m'avait manqué ! Et enfin, un très grand merci aux colocs, mon éphémère famille de Lyon. Ils ont participé bien plus qu'ils ne le pensent à m'amener au bout de la thèse. Flo, Colin, Léa, Antho, Coline, Pierre-Lou, Sarah, Armand : c'est une vraie chance pour moi de vous avoir trouvés. J'ai cherché comment résumer ces 3 ans et demi de vie commune, impossible bien sûr. En tout cas c'était rempli de toutes sortes d'aventures, de toutes sortes de non-aventures, et c'était bien. Pour finir, merci à toi Pierre, pour ton soutien dans les derniers mois, ton énergie et ta curiosité. Parfois la facilité abrite l'évidence.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	Contexte général . . . . .	1
1.2	Problématique générale et objectifs . . . . .	2
1.3	Démarche . . . . .	3
<b>2</b>	<b>État de l'art</b>	<b>5</b>
2.1	État de l'art des transferts des produits phytosanitaires dans l'environnement . . .	5
2.1.1	Problématique des pollutions agricoles diffuses par les produits phytosanitaires . . . . .	6
2.1.1.1	Devenir des produits phytosanitaires à l'échelle de la parcelle . . .	6
2.1.1.2	Limiter les transferts : le rôle des zones tampons . . . . .	8
2.1.2	Propriétés hydrodynamiques d'un sol . . . . .	11
2.1.2.1	Porosité et teneur en eau . . . . .	12
2.1.2.2	Potentiel matriciel . . . . .	12
2.1.2.3	Conductivité hydraulique à saturation . . . . .	13
2.2	État de l'art de la modélisation des transferts à l'échelle du versant et du bassin versant . . . . .	14
2.2.1	Représentation mécaniste des flux d'eau et de solutés . . . . .	14
2.2.1.1	Courbes de rétention et de conductivité . . . . .	14
2.2.1.2	Flux d'eau en subsurface . . . . .	15
2.2.1.3	Flux d'eau en surface . . . . .	16
2.2.1.4	Modélisation du devenir des solutés dans le sol . . . . .	17
2.2.2	Aspects pratiques pour la résolution numérique dans le cadre des modèles hydrologiques . . . . .	21
2.2.2.1	Techniques de résolution d'équations aux dérivées partielles . . .	21
2.2.2.2	Stratégies de couplage surface-subsurface . . . . .	25
2.2.3	Les modèles hydrologiques et de transfert à base physique . . . . .	27

2.2.3.1	Les modèles de transfert de solutés . . . . .	27
2.2.3.2	Les modèles hydrologiques distribués . . . . .	29
2.2.3.3	Conclusion sur les modèles et choix de CATHY . . . . .	30
2.2.4	La paramétrisation des modèles et leur validation . . . . .	31
2.2.4.1	Alimenter un modèle à base physique : les paramètres d'entrée . .	31
2.2.4.2	Comment évaluer un modèle ? . . . . .	33
2.3	Démarche . . . . .	36
<b>3</b>	<b>Matériel et méthodes</b>	<b>39</b>
3.1	Outil de modélisation : le code CATHY . . . . .	39
3.1.1	Les équations de base du modèle d'écoulement . . . . .	40
3.1.2	Construction du maillage . . . . .	41
3.1.3	Direction des écoulements pour le ruissellement de surface . . . . .	42
3.1.4	Couplage surface-subsurface des écoulements d'eau . . . . .	43
3.1.5	CATHY-FT : un modèle de transport de solutés non réactifs . . . . .	45
3.1.5.1	Les équations de transport . . . . .	45
3.1.5.2	Le couplage surface-subsurface . . . . .	46
3.1.5.3	Revue des applications effectuées sur CATHY-FT . . . . .	46
3.2	Analyse de sensibilité : les méthodes de Morris et de Sobol . . . . .	47
3.2.1	La méthode des effets élémentaires : la méthode de Morris . . . . .	48
3.2.2	Analyse de sensibilité globale : la méthode de Sobol . . . . .	49
3.2.2.1	Principe général de la décomposition de la variance . . . . .	49
3.2.2.2	La méthode de Sobol . . . . .	51
3.2.2.3	Aspects pratiques pour l'application de Sobol . . . . .	52
3.2.2.4	Quelques outils d'échantillonnage et de calcul des indices . . . . .	52
3.3	Données expérimentales : la maquette MASHYNS et le versant de Saint-Joseph . .	53
3.3.1	Données de laboratoire : MASHYNS (Irstea, Antony) . . . . .	54
3.3.1.1	La maquette MASHYNS . . . . .	54
3.3.1.2	L'expérimentation de transfert de contaminants . . . . .	55
3.3.2	Données de terrain : le versant de Saint-Joseph (Beaujolais, France) . . . . .	58
3.3.2.1	Le versant instrumenté . . . . .	58
3.3.2.2	Les propriétés de la bande enherbée . . . . .	62
<b>4</b>	<b>Construction du modèle de transport réactif couplé surface-subsurface</b>	<b>65</b>
4.1	Les étapes de la construction du modèle de transport réactif . . . . .	65

4.2	Transport de solutés en subsurface . . . . .	67
4.2.1	Couplage de CATHY eau et du module TRAN3D . . . . .	67
4.2.2	CATHY-FT : CATHY avec transport non réactif . . . . .	69
4.2.3	CATHY-FTR : implémentation des équations de réactions . . . . .	72
4.2.4	Ajout du module de correction des champs de vitesse . . . . .	72
4.3	Vers un modèle de transport réactif couplé surface-subsurface : CATHY-Pesticide .	74
4.3.1	Algorithme de couplage surface-subsurface pour l'eau et les solutés réactifs	74
4.3.2	Mise à jour des conditions à l'interface du transport en subsurface et des concentrations . . . . .	76
4.3.3	Calcul du terme source pour la surface . . . . .	77
4.3.4	Mélange de la lame ruisselante et de la première couche de sol . . . . .	77
4.3.4.1	Intégration des informations du mélange dans les tétraèdres de subsurface . . . . .	79
4.3.4.2	Correction du mélange après le transport en surface . . . . .	82
4.3.5	Amélioration du bilan de masse du couplage . . . . .	82
4.4	Conclusion sur l'implémentation de CATHY-Pesticide et sur les hypothèses liées .	84
<b>5</b>	<b>Evaluation du modèle réactif de subsurface CATHY-FTR</b>	<b>85</b>
5.1	Méthode d'évaluation des performances du modèle . . . . .	85
5.2	Mise en place de l'expérience SSTM sur le modèle CATHY-FTR . . . . .	87
5.3	Performances initiales du modèle sur les données de MASHYNS . . . . .	90
5.4	Analyse de sensibilité des flux de soluté réactifs dans CATHY-FTR . . . . .	93
5.4.1	Densités de probabilité des paramètres d'entrée . . . . .	93
5.4.2	Résultats de l'analyse de sensibilité de Morris . . . . .	94
5.4.2.1	Comportement hydrodynamique . . . . .	94
5.4.2.2	Transport réactif des solutés . . . . .	96
5.4.3	Amélioration de la paramétrisation de CATHY-FTR . . . . .	97
5.5	Conclusion sur l'évaluation de la partie subsurface de CATHY-FTR . . . . .	101
<b>6</b>	<b>Evaluation du modèle réactif et couplé CATHY-Pesticide</b>	<b>103</b>
6.1	Méthode d'évaluation des performances du modèle . . . . .	103
6.2	Simulation du versant de Saint-Joseph avec CATHY-Pesticide . . . . .	104
6.2.1	Paramétrisation du modèle dans le contexte du versant de St-Joseph . . . .	104
6.2.1.1	Description du domaine 3D modélisé . . . . .	104
6.2.1.2	L'événement du 4 août 2004 . . . . .	107



6.2.1.3	Conditions aux limites et initiales de la simulation . . . . .	108
6.2.2	Cohérence des résultats avec les données terrain . . . . .	109
6.2.3	Analyse du devenir des solutés réactifs . . . . .	111
6.2.4	Synthèse de la simulation du versant de Saint-Joseph . . . . .	115
6.3	Analyse de sensibilité globale . . . . .	116
6.3.1	Construction de l'analyse de sensibilité . . . . .	116
6.3.1.1	Paramétrisation du modèle pour l'analyse de sensibilité : une sim- plification du versant de Saint-Joseph. . . . .	116
6.3.1.2	Variables de sorties analysées . . . . .	117
6.3.1.3	Description des différentes méthodes d'échantillonnage utilisées .	118
6.3.1.4	Densités de probabilité des paramètres d'entrée . . . . .	118
6.3.2	Résultats de l'analyse d'incertitude et de sensibilité . . . . .	120
6.3.2.1	Analyse d'incertitude de CATHY-Pesticide . . . . .	121
6.3.2.2	Analyse de sensibilité des variables de sortie hydrodynamiques et de transport de soluté . . . . .	125
6.3.2.3	Réflexion sur les différentes méthodes d'analyse . . . . .	132
6.4	Conclusion sur l'évaluation de la partie subsurface de CATHY-Pesticide . . . . .	134
<b>7</b>	<b>Conclusion et perspectives</b>	<b>137</b>
7.1	Rappel des objectifs et de la démarche . . . . .	137
7.2	Principaux résultats . . . . .	139
7.2.1	Développement d'un modèle spatialisé de transfert de soluté réactif . . . .	139
7.2.1.1	Retour sur les hypothèses de modélisation . . . . .	139
7.2.1.2	Développements numériques . . . . .	140
7.2.1.3	Application dans différents contextes de transport de solutés . . . .	141
7.2.2	Evaluation du modèle . . . . .	142
7.2.2.1	Retour sur les méthodes d'évaluation . . . . .	142
7.2.2.2	Résultats de l'évaluation du modèle . . . . .	143
7.3	Discussion sur la modélisation à base physique et perspectives . . . . .	144
7.3.1	Les modèles à base physique : quelles difficultés ? . . . . .	144
7.3.2	Quel avenir pour les multiples versions de CATHY et pour CATHY-Pesticide ?	145
7.3.3	Perspectives . . . . .	146
<b>Annexe A</b>	<b>Documents complémentaires sur l'analyse de sensibilité de Morris</b>	<b>169</b>
A.1	Densités de probabilité des paramètres d'entrée . . . . .	169

<b>Annexe B Documents complémentaires sur l'analyse de sensibilité de Sobol</b>	<b>173</b>
B.1 Densités de probabilité des paramètres d'entrée . . . . .	173
B.2 Analyse d'incertitude de Sobol . . . . .	176
B.3 Indices de premier ordre et totaux de l'analyse de sensibilité de Sobol . . . . .	177
<b>Annexe C Temps CPU des principales simulations présentées dans la thèse</b>	<b>179</b>



# Table des figures

2.1	Principales voies de transfert des solutés des zones agricoles aux zones aquatiques (Catalogne C., 2016). . . . .	6
2.2	Localisations possibles des zones tampons de différentes natures à l'échelle d'un bassin versant (Catalogne C., 2016). . . . .	9
2.3	Méthode générale de dimensionnement des bandes enherbées BUVARD développée par Carluer et al. (2017) et illustrée dans le rapport du Groupe Technique Zones Tampons (Catalogne C., 2016). . . . .	11
2.4	Représentation schématique de la dispersion mécanique et de la diffusion moléculaire. . . . .	18
2.5	Interprétation graphique des approximations de la dérivée (méthode des différences finies) avec des schémas numériques amont, aval et centré. . . . .	22
2.6	Illustration de la discrétisation de l'espace et de l'approximation de la fonction $u$ recherchée pour la méthode des éléments finis et pour la méthode des volumes finis. . . . .	23
2.7	Illustration simple de la procédure des switches des conditions aux limites de surface. . . . .	26
2.8	Démarche globale d'implémentation et de validation sur le modèle de transport réactif CATHY. . . . .	36
3.1	Schéma de la construction du maillage en 3D à partir d'un MNT dans le pré-processing de CATHY. . . . .	42
3.2	Schéma explicatif de la méthode D8-LTD. Le coefficient de pondération entre les directions cardinale et diagonale est déduit du rapport des longueurs $\delta_1$ et $\delta_2$ . . . . .	43
3.3	Illustration du fonctionnement du couplage dans les cas où la cellule est en situation de ponding. D : condition de Dirichlet et N : condition de Neuman. Les valeurs sont exprimées en unité neutre. . . . .	44
3.4	Exemple d'échantillonnage d'une trajectoire pour trois paramètres. $X_1$ correspond au jeu de paramètres initial et $\Delta$ au pas d'échantillonnage (Dairon, 2017). . . . .	48

3.5	Exemple d'interprétation d'un graphe de Morris (adapté de Saltelli et al. (2004)). $\mu^*$ est la moyenne absolue et $\sigma$ est l'écart type des effets élémentaires. . . . .	50
3.6	(a) Photo de la maquette MASHYNS et (b) représentation du niveau de nappe en régime permanent avec une pluie en surface et le drain ouvert. . . . .	54
3.7	Intensité des précipitations appliquées de façon homogène durant l'expérimentation. Les trois lots composés chacun d'un traceur et de plusieurs pesticides ont été appliqués pendant une heure à $t = 0$ , $t = 24$ h, et $t = 72$ h. . . . .	56
3.8	Chroniques de concentration à la sortie de drain de tous les solutés réactifs testés dans l'expérimentation de Marcon sur MASHYNS. Les solutés sont classés selon leur timing d'aspersion sur la maquette : batch 1, batch 2 et batch 3. . . . .	57
3.9	Situation géographique du site d'étude et du cours d'eau de la Morcille (Peyrard, 2016). . . . .	59
3.10	Photo du bassin versant de la Morcille et localisation du site d'étude de Saint-Joseph (Lacas, 2005). . . . .	59
3.11	Photo d'une rase sur le versant de Saint-Joseph . . . . .	60
3.12	Représentation schématique du versant de Saint-Joseph et de la redirection du ruissellement de la vigne sur la placette instrumentée par le système des rases et de la demi-buse. . . . .	61
3.13	Données de pluie et de hauteur de nappe dans les piézomètres en 2012 (jour 1 : 1er janvier 2012). En haut : chroniques de pluie (cumul par jour en mm) et en bas : variation de la hauteur d'eau dans les piézomètres par rapport la surface du sol, les piézomètres sont classés par groupe en fonction de leur distance par rapport à l'amont du versant. . . . .	62
4.1	À gauche : les conditions aux limites du cas test de Huyakorn. À droite : répartition de la pression (m) dans le domaine 3D (régime permanent). . . . .	67
4.2	Test Huyakorn : comparaison du front de concentration de TRAN3D seul et de CATHY+TRAN3D. . . . .	68
4.3	Cas test Huyakorn avec une dispersion latérale divisée par deux par rapport au cas test original ( $\alpha_l = 0.005$ m) : apparition de concentrations supérieures à $1 \text{ g.m}^{-3}$ anormales (zones délimitées par les pointillés). . . . .	69
4.4	Exemple 2D du phénomène de diffusion numérique dans une situation sans advection ni diffusion ou dispersion. La couleur bleue représente la présence de soluté. . . . .	70

4.5	Influence de la diffusion numérique sur le transport de soluté illustré sur le cas test Huyakorn ( $t=1,25$ h). A gauche de l'advection pure et à droite de l'advection et de la diffusion numérique (le coefficient de diffusion est fixé à $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ). . . . .	71
4.6	Schéma simplifié mettant en valeur la localisation de l'information des vitesses et de la saturation dans le calcul des flux d'eau et du transport de soluté dans CATHY-Pesticides lors du pas de temps $t$ . . . . .	73
4.7	Schéma général de la gestion du transport et du couplage dans CATHY-Pesticide. . . . .	75
4.8	Mise à jour des concentrations de surface et calcul des conditions à l'interface entre la surface et la subsurface du transport en subsurface en fonction des variables de pression en surface $P_{surf}$ , de flux d'échange $F_{ech}$ et de flux atmosphérique $F_{atm}$ . . . . .	76
4.9	Calcul du flux massique, terme source pour le transport de surface au pas de temps suivant. . . . .	78
4.10	Principe de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol. . . . .	79
4.11	Position de l'information de concentration en marge de la sous-routine de mélange sur une coupe verticale d'un maillage simple (deux couches de sol). . . . .	80
4.12	Méthode générale suivie par l'algorithme de passage des nœuds aux tétraèdres (coupe verticale d'un maillage simple de deux couches de sol). $M$ est la masse [M], $CM$ est la contribution massique des nœuds aux tétraèdres [M] et $V$ est un volume d'eau [ $L^3$ ]. . . . .	81
4.13	Méthode spécifique suivie par l'algorithme de passage des nœuds aux tétraèdres lors du mélange (coupe verticale d'un maillage simple de deux couches de sol). $M$ est la masse [M], $V$ est un volume d'eau [ $L^3$ ], $k$ correspond à la situation avant le mélange et $k + 1$ à celle d'après. . . . .	81
4.14	Illustration de deux cas problématiques posés par la mise en place du mélange entre la lame ruisselante et la première couche de subsurface. . . . .	83
5.1	Illustration pour les conductivités à saturation horizontales et verticales de toutes les valeurs à disposition. Les lignes bleues en pointillé représentent l'incertitude des mesures de Kao (2002). . . . .	87
5.2	Maillage 3D du domaine avec les conditions aux limites appliquées pour représenter les conditions de l'expérience SSTM (maillage : $5 \text{ cm} * 5 \text{ cm}$ et 16 couches de sol). . . . .	89

5.3	Test et évaluation des flux d'eau et de traceurs non réactifs lors de l'expérience de traçage : (a) flux de sortie d'eau et (b) cumul massique de sortie du traceur Amino-G (haut) et Uranine (bas). L'évaluation doit être lue conjointement avec la colonne de l'intervalle de confiance de NSE pour une interprétation correcte des résultats. . . . .	90
5.4	. . . . .	92
5.5	Test et évaluation des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage : cumul massique de sortie du clomazone et de l'imazamox (batch 1), du mesosulfuron et de l'isoproturon (batch 2) et du bentazone et du sulcotrione (batch 3). . . . .	92
5.6	Résultats de l'analyse de sensibilité de Morris sur la recharge de la nappe à trois temps donnés : à la fin de la phase estivale ( $t = 25$ h), à la fin de la phase hivernale ( $t = 72$ h) et à la fin de la phase printanière ( $t = 93$ h). $\mu^*$ est la moyenne absolue des effets et $\sigma$ est l'écart-type des effets élémentaires. Les indices ont été normalisés sur les deux axes. . . . .	95
5.7	Résultat de l'analyse de sensibilité de type Morris pour le clomazone et l'imazamox (phase estivale), et l'isoproturon et le mesosulfuron (phase hivernale) pour quatre variables de sorties : temps de percée (B. time), timing du pic de concentration (P.time), valeur du pic de concentration (P. conc) et NSE sur le cumul des flux massiques en sortie de drain dans les données observées et dans la simulation. $\mu^*$ est la moyenne absolue des effets et $\sigma$ est l'écart-type des effets élémentaires. Les indices ont été normalisés sur les deux axes. . . . .	96
5.8	Représentation des cinq jeux de paramètres les plus efficaces sur chaque soluté. Le classement est basé sur la valeur de la NSE sur le cumul de masse à la sortie du drain. Les paramètres sont représentés sur une grille uniforme de 0% à 100%, ces valeurs extrêmes correspondant au minimum et maximum de chaque paramètre dans l'échantillonnage de Morris. En revanche, les conductivités à saturation $K_{s_v}$ et $K_{s_h}$ sont représentées sur une grille logarithmique de leur gamme de variation. Une combinaison commune pour l'Imazamox, l'Isoproturon et le Mesosulfuron est mise en valeur en rouge. . . . .	98
5.9	Courbes de rétention correspondant à la moyenne des distributions de Morris (donc issues des données de MASHYNS) en rouge, toutes les combinaisons utilisées dans l'analyse de sensibilité de Morris en noir, et la courbe de rétention de la combinaison optimale en bleu. . . . .	100

5.10	Test et évaluation des flux cumulés de solutés réactifs du batch 3. Les paramètres d'entrée du modèle correspondent au jeu de paramètres sélectionné avec l'analyse de sensibilité Morris. . . . .	100
6.1	Domaine modélisé dans CATHY avec, pour rappel, la localisation des zones de vigne et de bande enherbée, ainsi que les rases et la demi-buse bétonnée (voir section 3.3.2). . . . .	105
6.2	Photo d'une rase et de la demi-buse bétonnée sur le versant de Saint-Joseph et schéma explicatifs de la représentation topographique des rases dans CATHY. . . . .	106
6.3	Événement orageux du 4 août 2004. La ligne pointillée correspond à la conductivité à saturation du 1er horizon de la vigne. . . . .	107
6.4	Profil longitudinal du versant de Saint-Joseph mesures hauteurs de nappe relevées dans les piézomètres, et l'extrapolation du niveau de nappe jusqu'à la limite amont du domaine. . . . .	109
6.5	Comparaison du cumul des flux dans les gouttières 1 et 2 entre les données observées et les simulations. . . . .	110
6.6	Vue aérienne de la concentration en soluté en Diuron dans le ruissellement de surface à différents temps donnés repérés sur le graphe de l'événement simulé. . . . .	111
6.7	Cumul de la masse de soluté (Diuron et Tebuconazole) mesuré à l'exutoire des quatre rases. . . . .	112
6.8	Évolution dans le temps des masses de soluté en surface de l'ensemble du versant (lignes continues) et en subsurface (lignes pointillés), en relatif par rapport à la situation initiale. En rouge : la masse de soluté en surface au cours du temps, en vert, le cumul de masse sortant du domaine par l'exutoire, et bleu et violet la masse (relative à la masse initiale) de soluté en subsurface respectivement en solution ou absorbés. . . . .	113
6.9	Evolution de la concentration de soluté dans l'eau de ruissellement de surface à la limite vigne-bande enherbée (rouge) et 10 m plus en aval (bleu). . . . .	115
6.10	Illustration des trois zones de mêmes propriétés hydrodynamiques (à gauche) et des variables de sortie choisies pour l'analyse de sensibilité. Localisation des 3 zones à distinguer pour les sorties : la vigne, la bande enherbée 1 (BE1) et la bande enherbée 2 (BE2) (à droite). . . . .	117
6.11	Densité de probabilité de la différence de volume d'eau ( $m^3$ ) en subsurface entre l'état final et l'état initial dans les trois zones (vigne, bande enherbée 1 et bande enherbée 2). . . . .	122



- 6.12 Densité de probabilité de la différence de masse de pesticide en subsurface entre l'état final et l'état initial dans les trois zones (vigne, bande enherbée 1 et bande enherbée 2). En haut : la densité non tronquée et en bas : la densité tronquée pour plus de lisibilité. . . . . 123
- 6.13 La conservation de la masse : (a) densité de probabilité des erreurs de bilan de masse pour l'eau et les deux solutés Diuron et Tebuconazole (les courbes concernant le Diuron et le Tebuconazole sont difficilement différenciables car quasi superposées) et (b) détail de la paramétrisation des quatre simulations qui ont abouti à une erreur de bilan de masse supérieure à 1% pour les deux solutés. Les conductivités à saturation sont représentées sur une échelle logarithmique. . . . . 124
- 6.14 Détail des combinaisons de paramètres correspondant aux simulations extrêmes extraites (57 sur 17 000 soit 0.33 %) pour stabiliser l'incertitude sur les indices totaux à une valeur inférieure à 0.5. Les conductivités à saturation sont représentées sur une échelle logarithmique. . . . . 126
- 6.15 Indices de Sobol de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de quatre variables de sorties qui concernent exclusivement l'eau. Le bleu qui est visible correspond donc aux interactions. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. Les paramètres "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les paramètres "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon. 128
- 6.16 Indices de deuxième ordre pour la variable de sortie d'évolution du volume d'eau sous la vigne entre l'état initial et l'état final. Les lignes grises représentent les barres d'erreur (intervalle de confiance de 95%). . . . . 129
- 6.17 Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent le transport du Tebuconazole. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. Les suffixes "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les suffixes "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon. . . . . 130
- 6.18 Indices de deuxième ordre pour la variable de sortie du cumul des flux massiques en surface entre la vigne et BE1. Les lignes grises représentent les intervalles de confiance à 95% associées aux indices. . . . . 131
- 6.19 Comparaison des indices de premier ordre et indices totaux pour le bilan de masse des solutés (Tebuconazole) selon le seuil choisi pour exclure les valeurs extrêmes. . 132

6.20	Comparaison des indices de premier ordre pour le cumul du volume d'eau à l'exutoire ( $m^3$ ) et l'erreur de bilan de masse du Tebuconazole (%) pour les trois calculs : fonction Martinez $N = 1000$ , fonction Martinez $N = 500$ , et fonction Roalhs. Les résultats de Sobolmartinez avec $N=1000$ sont présentés en prenant en compte l'extraction des 57 simulations (voir section 6.3.2.2 (a)). . . . .	134
A.1	Densité des fonctions de probabilité des paramètres de van Genuchten : porosité, $\alpha$ , $n$ et pluie initiale. . . . .	170
A.2	Densité des fonctions de probabilité du coefficient d'adsorption pour les quatre solutés étudiés. . . . .	170
A.3	Densité des fonctions de probabilité de la constante d'équilibre pour les quatre solutés étudiés. . . . .	171
B.1	Densité des fonctions de probabilité des conductivités à saturation. . . . .	173
B.2	Densité des fonctions de probabilité de la porosité et du niveau de nappe par rapport au niveau moyen. . . . .	174
B.3	Densité des fonctions de probabilité des paramètres de van Genuchten $n$ et $\alpha$ . . . . .	174
B.4	Densité des fonctions de probabilité des paramètres du coefficient d'adsorption des deux solutés étudiés. . . . .	175
B.5	Densité des fonctions de probabilité des paramètres du coefficient de rugosité, du ponding minimum et de la hauteur de la couche de mélange. . . . .	175
B.6	Densité de probabilité des sorties concernant l'exutoire pour l'eau (volume) et les solutés diuron et tebuconazole (masse) : (a) cumul du volume ou de la masse sortant et (b) temps de percée. . . . .	176
B.7	Densité de probabilité des sorties concernant les transferts en surface pour l'eau (volume) et les solutés diuron et tebuconazole (masse). V-BE : vigne - bande enherbée et BE1 - BE2 : bande enherbée 1 - bande enherbée 2. . . . .	176
B.8	Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent exclusivement l'eau. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. . . . .	177
B.9	Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent le transport du tebuconazole. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. . . . .	178



# Liste des tableaux

2.1	Gestion des réactions dans les modèles à base physique avec transport préférentiel fréquemment utilisés dans la prédiction du devenir des solutés (Koehne et al., 2009). M : matrice, TP : macroporosité dans laquelle il y a du transport préférentiel, T : température, $\theta$ teneur en eau. Pour l'adsorption en multi-sites, le nombre de sites considéré est indiqué. . . . .	28
2.2	Caractéristiques des principaux modèles hydrologiques intégrés surface-subsurface. TP : transport préférentiel, DF : différences finies, EF : éléments finis, VF : volumes finis, CL : conditions aux limites, P : pression, Nd : non déterminé. . . . .	30
3.1	Mesures des paramètres hydrodynamiques dans MASHYNS lors des études référencées. . . . .	55
3.2	Caractéristiques des quatre phases de traçage de l'expérimentation de Marcon. Le type de culture est associé aux herbicides à titre informatif. . . . .	56
3.3	Propriétés hydrodynamiques du sol de la bande enherbée de la Morcille (Lacas et al., 2005). $n$ , $\theta_r$ et $\alpha$ sont les paramètres de van Genuchten (van Genuchten, 1980) définissant les courbes de rétention (voir équations 2.7, chapitre 2). ET : écart-type. . . . .	63
3.4	Résumé des coefficients d'adsorption déterminés dans le bassin versant de la Morcille par l'étude de Randriambololohasinirina (2012) pour le Diuron et le Tebucnazole. . . . .	64
4.1	Résumé des différentes versions de Cathy avec quelques unes de leurs caractéristiques principales. En haut du tableau : les versions pré-existantes et en bas de tableau : les principales versions testées durant la thèse. Les acronymes des versions de CATHY correspondent aux processus pris en compte : FT Flow-Transport, VR Velocity reconstruction, FTR Flow-Transport-Reaction. A : transport Advectif de soluté, D : transport Dispersif de solutés, R : Réactions, VF : volumes finis, EF : éléments finis, DF : différences finies, VR : reconstruction des champs de vitesse. . . . .	66

4.2	Paramètres liés au transport dans le test de Huyakorn. . . . .	68
5.1	Constante de demi-vie et coefficient d'adsorption des six solutés étudiés durant les trois différents batchs de l'expérience SSTM. Les valeurs sont issues de la IUPAC (2007), exceptée <sup>(a)</sup> qui est issue de la base de donnée de Cornell University. . . . .	88
5.2	Performance des flux d'eau et de traceurs non réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets). On rappelle que l'évaluation doit être lue conjointement avec la colonne de l'intervalle de confiance de NSE pour une interprétation correcte des résultats. . . . .	91
5.3	Performance des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets). . . . .	91
5.4	Bilan de masse calculé 300 heures après le début de l'expérience pour les six solutés réactifs. . . . .	91
5.5	Les fonctions de densité de probabilité des paramètres de l'analyse de sensibilité Morris sont décrites par leur moyenne $\mu$ et leur variance $\sigma^2$ pour les lois LN (lognormal) et N (normal), et par le minimum et maximum pour la loi U (Uniforme). . . . .	94
5.6	Comparaison des valeurs moyennes des distributions des paramètres et de celles de la combinaison choisie pour le Bentazone ("Benta") et le Sulcotrione ("Sulco."). . . . .	99
5.7	Performance des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets). Les paramètres d'entrée du modèle correspondent à la combinaison choisie. . . . .	101
6.1	Paramétrisation de CATHY appliqué au versant de Saint-Joseph. R : rases, DB : demi-buse, BE : bande enherbée, V : vigne. La couche 1 fait partie du premier horizon, mais sur les rases et la demi-buse, ses caractéristiques hydrodynamiques sont distinctes. . . . .	107
6.2	Densités de probabilité des paramètres sélectionnés pour l'analyse de sensibilité. <sup>a</sup> : la zone 1 correspond au premier horizon de la bande enherbée et la zone 2 au premier horizon de la vigne et à la totalité du deuxième horizon (voir figure 6.10). Les fonctions sont décrites par leur moyenne $\mu$ et leur variance $\sigma^2$ pour les lois LN (lognormale) et N (normale), par le minimum, le centre et le maximum pour la loi T (Triangulaire) et par le minimum et le maximum pour la loi U (Uniforme). . . . .	119
6.3	Description des différentes analyses menées dans ce chapitre, avec les nombres de simulations correspondants et leur utilité dans l'analyse des résultats. . . . .	121
C.1	Temps CPU (s) des trois principaux groupes de simulations présentées dans la thèse.	179

# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Contexte général

L'utilisation de pesticides de synthèse a débuté dans les années 30 avec le développement de l'agriculture intensive, dans l'objectif d'améliorer les rendements. Herbicides, fongicides ou insecticides, les pesticides regroupent les substances chimiques de synthèse épandus sur les cultures pour lutter contre les organismes nuisibles. Depuis quelques décennies, leur utilisation s'est généralisée, les produits se sont diversifiés et les nouvelles molécules sont plus actives à faible dose que les anciens produits utilisés ce qui les rend également plus difficiles à détecter. La France est un grand consommateur de pesticides, avec dans la dernière décennie plus de 60 000 tonnes vendues chaque année (9<sup>e</sup> rang européen de consommation par hectare cultivé). Au Québec en 2015 plus de 4 000 tonnes de pesticides ont été vendues. Si la consommation par hectare est moins importante qu'en France, cette dernière connaît une augmentation croissante depuis une dizaine d'années. Une attention particulière est portée aujourd'hui aux conséquences de cette large utilisation, tant sur la santé humaine que sur ses impacts écologiques. En effet, selon les conditions et les pratiques culturales, une partie des produits épandus est retrouvée dans l'air, dans notre alimentation, mais également dans les milieux naturels, et en particulier dans les eaux de surface et les eaux souterraines. En France en 2014, plus de 50 % des points de mesure sur les cours d'eau et plus de 30% des points de mesure dans les nappes révèlent une concentration totale moyenne en pesticides d'au moins  $0.1 \mu\text{g.L}^{-1}$  (SOeS, 2016). La directive européenne directive 98/83/CE fixe une concentration maximale de  $0.1 \mu\text{g.L}^{-1}$  pour un produit et une concentration maximale totale de  $0.5 \mu\text{g.L}^{-1}$  pour que l'eau soit considérée comme potable. La contamination généralisée des eaux engendre une augmentation progressive des coûts de l'eau potable liés à sa décontamination ou à la mise en place de nouveaux captages. D'un point de vue environnemental, cette contamination par les pesticides menace la biodiversité : elle constitue une part importante des

diverses pressions qui pèsent sur les zones aquatiques et menacent l'équilibre de leur faune et de leur flore aquatiques.

Afin de limiter cette contamination, l'expertise scientifique collective sur les pesticides conduite par l'INRA et le Cemagref propose plusieurs niveaux d'action (Aubertot et al., 2005) : avant la mise sur le marché de nouveaux pesticides (homologation), avant son utilisation sur les cultures, et avant son transfert des zones agricoles aux zones aquatiques. L'homologation des pesticides est soumise à un règlement (directive cadre 91/414/CEE) qui contient notamment une évaluation du risque de transfert du produit vers la ressource en eau via la modélisation de scénarios de "pires cas réalistes". Une fois le produit autorisé sur le marché, des actions peuvent être mises en place pour réduire son utilisation : guider les utilisateurs vers des changements de pratiques agricoles, relever les critères de déclenchement de traitements, ou même inciter les utilisateurs à avoir recours à d'autres méthodes non chimiques. Enfin, un dernier niveau d'action vise à limiter le transfert des pesticides depuis la parcelle vers les eaux de surface par la mise en place de certaines pratiques agricoles, ainsi que d'éléments du paysage tels que les zones tampons. Ce dernier nécessite de comprendre et caractériser les chemins d'écoulement des pesticides après l'épandage.

## 1.2 Problématique générale et objectifs

Dans cette thèse, on s'intéresse au contexte général des transferts hydriques de pesticides. Les études de ce type de transfert peuvent être menées à différentes échelles, de la parcelle au grand bassin versant en passant par le versant, qui définit une surface topographique inclinée dont la limite amont se confond avec une limite du bassin versant et la limite l'aval est située dans le talweg principal du bassin versant, en général donc sur un cours d'eau. L'échelle du versant est particulièrement appropriée à ce type d'étude, puisque les principales voies de transfert y sont présentes, et on peut, de manière plus décomposée qu'à l'échelle du bassin versant donc moins complexe, distinguer la partition des écoulements et le processus en jeu. Une meilleure connaissance des voies de transfert, des processus qui y sont liés et de leurs interactions est indispensable à la mise en place de zones tampons efficace. Il en existe plusieurs types qui influent sur des voies de transfert variées : bande enherbée, haie, fossé, ... Les transferts d'eau et de pesticides dépendent de beaucoup de facteurs, comme le climat, la topographie, les caractéristiques du sol, le type de culture, les caractéristiques chimiques des pesticides. Il est donc nécessaire d'approfondir, de quantifier et de formaliser les connaissances sur les processus en jeu, sur le terrain à l'aide d'expérimentations, mais également par la modélisation pour permettre ensuite la généralisation et la transposition des résultats acquis. Les modèles à base physique sont basés sur des équations mécanistes et sont les plus à même de représenter les processus de la manière la plus proche

possible de la physique du terrain dans la mesure où l'on sait renseigner tous leurs paramètres d'entrée. D'un côté, il existe de nombreux modèles de transfert de solutés réactifs qui prennent en compte de façon relativement exhaustive les processus liés aux solutés comme par exemple HYDRUS 1D (Simunek et al., 2005, 2008), RZWQM (Ahuja et al., 2000; Malone et al., 2004) ou MACRO (Larsbo and Jarvis, 2003, 2005), mais il s'agit souvent de représentations en une dimension (colonne de sol) ou à l'échelle de la parcelle. De plus, ils ne représentent pas les écoulements de surface et de subsurface et leur interactions. D'un autre côté, il existe des modèles hydrologiques distribués à l'échelle du versant ou du bassin versant qui simulent en trois dimensions les flux d'eau de manière couplée entre la surface et la subsurface comme par exemple CATHY (Camporese et al., 2010), HydroGeo-Sphere (HGS) (AquantyInc., 2013; Brunner et al., 2012) ou ParFlow (Kollet and Maxwell, 2006). Ces deux approches sont complémentaires, et peu de modèles permettent actuellement de lier des processus complexes de transport de solutés à une modélisation des écoulements d'eau distribuée et couplée en surface et en subsurface. Pourtant, il s'agit d'un enjeu particulièrement important pour certains types de contextes, tels que un socle peu profond ou une nappe peu profonde, qui induisent des interactions fortes entre la surface et la subsurface.

L'objectif général de cette thèse est donc d'aboutir à un modèle capable de modéliser de façon couplée surface-subsurface et spatialisée le transport de pesticides à l'échelle du versant à partir du modèle hydrologique à base physique CATHY (CATchment HYdrology). A terme, ce type de modèle pourrait être utilisé dans le diagnostic de versants ou de bassins versants et dans l'aide à la décision pour la mise en place de zone tampons (localisation et dimensionnement). Le choix du modèle CATHY est fortement lié à l'objectif de la thèse : il s'agit d'un modèle spatialisé capable de simuler les écoulements d'eau en trois dimensions de façon couplée surface-subsurface ainsi que le transfert non réactif de solutés, il a été validé et appliqué à des échelles et dans les conditions agropédologiques variés, et son code est accessible. La réalisation de l'objectif énoncé dépend de l'implémentation des processus de transport dans le modèle hydrologique qui nécessite de nombreux développements numériques. Elle dépend également de l'évaluation de ce modèle, c'est pourquoi une grande partie du travail portera sur ce second point, menant à l'étude approfondie du fonctionnement du modèle. Ainsi, on peut classer les objectifs de cette thèse en deux catégories. D'abord, on cherche à simuler les transferts de solutés à l'échelle du versant. Puis, il s'agit d'explorer le modèle à base physique auquel on aura abouti, afin de comprendre et d'évaluer son fonctionnement.

### 1.3 Démarche

Les transferts de solutés et leur modélisation sont présentés dans le chapitre 2. Le travail de thèse s'appuiera sur le modèle à base physique CATHY : CATchment HYdrology (Camporese



et al., 2010). CATHY intègre déjà dans une de ses versions le transfert des solutés non réactifs (Weill et al., 2011) mais il n'a été que peu testé pour l'instant. Ce modèle, ainsi que les données utilisées durant le travail de thèse sont présentés dans le chapitre 3. La phase de développement de la nouvelle version que l'on nommera CATHY-Pesticide consiste en l'implémentation de processus réactifs, l'amélioration de la conservation de la masse dans le couplage surface-subsurface du transport, ainsi que l'ajout d'un module de mélange permettant de reproduire le processus de remobilisation des solutés de la subsurface par la lame ruisselante. Toutes ces étapes sont détaillées dans le chapitre 4. La validation du modèle est progressive. Le chapitre 5 est quant à lui consacré à la validation de la partie subsurface de CATHY-Pesticide. Celle-ci est confrontée à petite échelle à des données de laboratoire puis soumise à une analyse de sensibilité. La maquette sur laquelle CATHY est testée est composée d'un sol homogène soumis à une pluie uniforme et où toutes les conditions sont contrôlées. Dans le chapitre 6, le modèle couplé est appliqué sur des données issues d'un versant réel viticole sur un événement de pluie naturel. Il s'agit d'un petit versant, constitué d'un vignoble en amont et d'une bande enherbée en aval. Cette fois, les processus en surface et en subsurface interagissent et on évalue la capacité du modèle à gérer la forte hétérogénéité d'un terrain réel. Une analyse de sensibilité globale et une analyse d'incertitude sont conduites dans ce contexte. Elles permettent notamment :

- d'évaluer l'effet de l'incertitude des entrées (erreurs de mesure ou variabilité par exemple) sur les variables de sortie,
- d'expliquer la variance des sorties par rapport aux paramètres d'entrée,
- de hiérarchiser les paramètres d'entrée et de déterminer leurs interactions.

Enfin, pour conclure les travaux, les résultats sont mis en relation et discutés dans la conclusion. On cherche à répondre aux questions posées dans les objectifs, ainsi qu'à comprendre les intérêts et les limites des travaux menés dans cette thèse, avant de proposer des pistes d'amélioration.

# Chapitre 2

## État de l'art

La dégradation de la qualité des eaux de surface est en partie due aux produits phytosanitaires qui, épanchés sur les surfaces agricoles, peuvent être transférés jusqu'aux cours d'eau. Le flux qui atteint les milieux aquatiques est marginal par rapport aux traitements et dépend fortement du contexte géographique, pédologique, agronomique et climatique, mais aussi des caractéristiques chimiques des produits concernés. Ainsi, dans certains cas, les transferts peuvent engendrer des concentrations préjudiciables pour l'environnement. Ce chapitre s'attache d'abord à présenter les voies de transfert principales des solutés depuis les parcelles traitées jusqu'aux zones aquatiques, en particulier l'influence des éléments du paysage sur la limitation ou l'accélération de ces transferts, ainsi que les propriétés hydrodynamiques du sol liées au transfert. Dans un second temps, les aspects de modélisation seront abordés. Cette dernière est particulièrement utile pour mieux comprendre les dynamiques de transfert selon les contextes. On s'attachera en particulier à décrire les équations régissant les principaux processus de transfert, leur résolution et couplage, et finalement les modèles intégrés et spatialisés.

### **2.1 État de l'art des transferts des produits phytosanitaires dans l'environnement**

Les voies de transfert des molécules chimiques appliquées sur les cultures ont été beaucoup étudiées depuis quelques décennies. La contamination des eaux de surface et de profondeur par les produits phytosanitaires comme les herbicides, les fongicides ou les insecticides est liée à des enjeux multiples : diversité des écosystèmes, potabilité de l'eau, qualité des productions piscicoles,... Les travaux de cette thèse s'intéressent exclusivement à ce type de molécule.

### 2.1.1 Problématique des pollutions agricoles diffuses par les produits phytosanitaires

L'origine de la contamination des cours d'eau par les produits phytosanitaires peut être identifiable dans l'espace et dans le temps, on parle alors de pollution ponctuelle. Il s'agit généralement d'une erreur de manipulation des stocks ou de déversement accidentel d'une grande quantité de produit. A l'inverse, on parle de pollution diffuse quand on se réfère à une contamination dont la source n'est pas localement identifiable, et issue de l'application globale des produits sur les cultures. Cette section a pour objectif de décrire les voies de transfert suivies par les molécules dans un contexte de pollution diffuse.

#### 2.1.1.1 Devenir des produits phytosanitaires à l'échelle de la parcelle

Le transfert des produits phytosanitaires des zones agricoles aux environnements aquatiques suit des voies connues et est principalement lié aux flux d'eau. Le schéma 2.1 présente les voies de transfert majeures après application : transport atmosphérique par dérive, ruissellement, écoulement latéral de subsurface, percolation vers la nappe, ainsi que les principales réactions des produits avec le milieu : adsorption et dégradation.

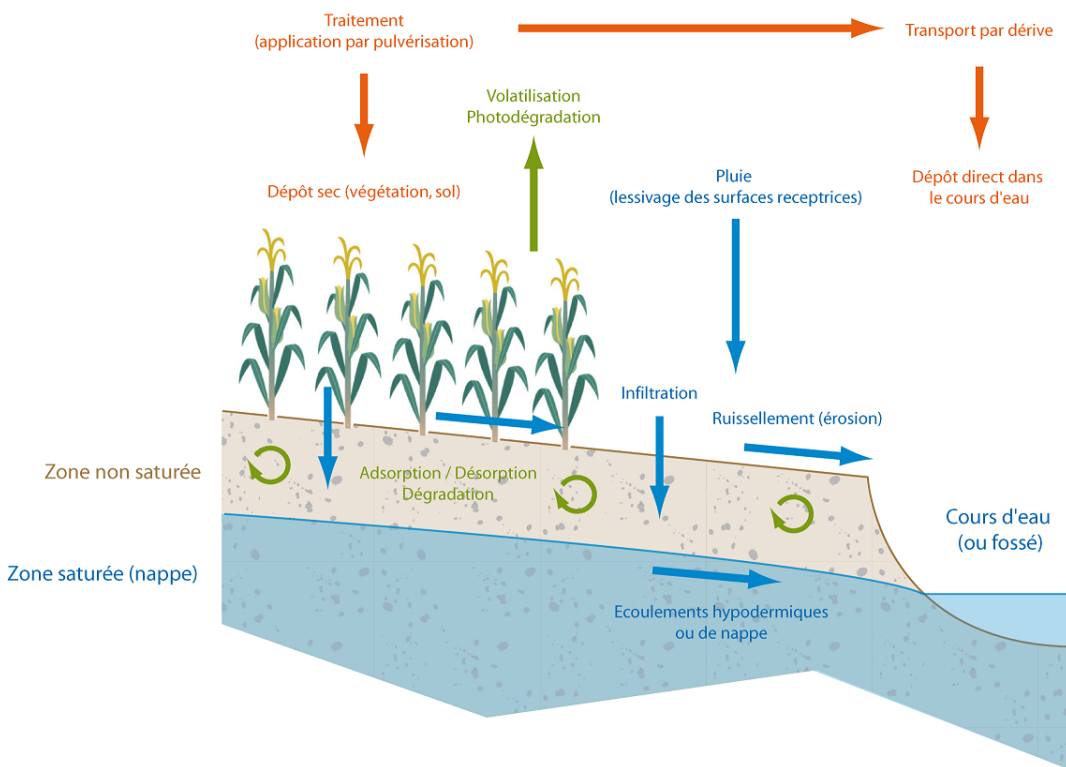


Figure 2.1 – Principales voies de transfert des solutés des zones agricoles aux zones aquatiques (Catalogne C., 2016).

**a) Les voies de transfert**

Lors de l'application de produits phytosanitaires, une partie de la solution appliquée sur la zone agricole peut être transportée par la voie atmosphérique vers les zones aquatiques à proximité. L'ampleur des transferts dépend notamment des conditions météorologiques au moment du traitement et du matériel utilisé. En fonction des caractéristiques physico-chimiques du produit, il peut être remobilisé dans la phase gazeuse après son dépôt à la surface du sol et des plantes, on parle dans ce cas de volatilisation (Bedos et al., 2002). Selon les conditions, le transport atmosphérique par dérive ou volatilisation peut atteindre jusqu'à 90% de la dose appliquée et peut intervenir jusqu'à quelques semaines après l'application pour certains produits (Taylor and Spencer, 1990; Rüdél, 1997).

Le ruissellement est la voie de transfert la plus importante en terme de concentration, et donc la plus dangereuse pour les eaux de surface. Il peut être déclenché lors d'une pluie intense, si la capacité d'infiltration du sol est inférieure à l'intensité des précipitations (on parle alors de ruissellement Hortonien (Horton, 1933)) ou alors si le sol est saturé (dans ce cas on parle de ruissellement de Dunne (Betson and Marius, 1969; Dunne and Black, 1970)). Outre la part de produit phytosanitaire en solution, le ruissellement peut être chargé en matière en suspension sur laquelle est adsorbée une part des molécules appliquées, en fonction de leurs propriétés physico-chimiques. Selon le contexte agro-pédologique et la topographie, il arrive que du ruissellement concentré se forme : il s'agit alors d'un cas aggravant en terme de transfert. En effet, par rapport à la même situation avec un ruissellement non concentré, la surface de ruissellement est restreinte, donc les probabilités d'infiltration sont plus faibles. De plus le débit est fort ce qui augmente le potentiel d'érosion.

Les écoulements latéraux interviennent principalement dans des cas de changement de texture du sol à faible profondeur, par exemple si le profil de sol compte un horizon argileux (Hardie et al., 2012). Dans cette situation, l'eau s'accumule et peut s'écouler dans la direction de la pente. Si la pente est faible, des nappes perchées peuvent se former. Ces écoulements rejoignent plus ou moins rapidement les cours d'eau aval et la quantité des solutés transportés via les écoulements latéraux dépend de leurs interactions avec le sol (Peyrard, 2016).

La percolation correspond à un flux d'eau vertical qui s'infiltré vers les eaux souterraines. Selon la nature du sol, ces écoulements peuvent être plus ou moins rapides. Dans certains cas, la structure du sol peut localement favoriser la percolation et provoquer un transfert rapide : on parle alors de transfert préférentiel (Jarvis, 2007; Beven and Germann, 2013). C'est le cas dans les macropores par exemple, qui sont définis comme des pores de plus grandes dimensions que le reste des pores de la matrice, dans lesquels la force de gravité prend le dessus sur les forces de

capillarité. Plus généralement, tous les sols présentent des structures variables dans l'espace et observables à des échelles différentes selon les cas. Cette hétérogénéité peut fortement influencer les flux : selon l'échelle, la structure prendra une importance non négligeable dans le transfert.

Selon les voies de transfert, les quantités de solutés concernées sont très variables et dépendent fortement des facteurs du milieu (sol, climat, hydrologie), des pratiques agricoles (traitement, travail du sol) et des substances (mobilité, dose, toxicité).

### **b) Les rétention des pesticides**

Les pesticides interagissent avec le milieu dès leur application par des réactions physiques, chimiques ou biologiques. Ces processus contribuent à la dissipation des produits. Les réactions en jeu sont fortement liées aux caractéristiques physico-chimiques du produit et du milieu. Dans ce paragraphe, les deux réactions principales régissant le devenir des solutés sont abordées.

Les pesticides interagissent avec le sol : ils peuvent s'adsorber aux particules solides. La matière organique est le sorbant principal des solutés à faible polarité et solubilité, tandis que les solutés à plus haute polarité s'adsorbent davantage aux surfaces minérales. L'intensité de cette réaction dépend des caractéristiques chimiques de pesticides (hydrophobicité, constante de dissociation acide, groupements fonctionnels, ...) et des caractéristiques du milieu (matière organique, pH, minéralogie du sol). L'adsorption est plus ou moins réversible et les cinétiques de réactions sont variables, même si généralement la désorption est un phénomène plus lent que l'adsorption (Boesten and Van der Pas, 1988; Coquet and Barriuso, 2002; Coquet, 2003).

La dégradation est un terme général qui regroupe plusieurs types de processus ayant tous en commun de transformer le produit initial en métabolites ou jusqu'à la minéralisation quand la dégradation est complète. Les dégradations abiotiques, l'hydrolyse et la photolyse font intervenir respectivement l'eau et la lumière. L'hydrolyse est particulièrement influencée par le pH et la température, et la photolyse dépend plutôt de l'humidité et de la localisation des solutés par rapport à la surface (Frank et al., 2002). Quand les micro-organismes, champignons et bactéries, entrent en jeu, on parle de dégradation biotique. Ils dégradent les pesticides présents en solution, en particulier dans les zones fortement chargées en matières organiques comme les zones racinaires.

#### **2.1.1.2 Limiter les transferts : le rôle des zones tampons**

L'effet de ces contaminants sur les zones aquatiques dépend de la masse transférée mais aussi très fortement de la concentration à laquelle ils arrivent dans le milieu. Des éléments du paysage peuvent être mis en place pour limiter, diluer ou retarder les transferts. L'ensemble de ces éléments d'atténuation de natures variées sont regroupés sous l'appellation "zones tampons".

### a) Variété des zones tampons à l'échelle du bassin versant

Les zones tampons sont généralement situées sur des zones inter-parcellaires ou directement entre les parcelles agricoles et les zones aquatiques à protéger. Selon le contexte, des dispositifs enherbés ou ligneux, des plans d'eau ou des fossés sont mis en place. La figure 2.2 montre la diversité des zones tampons que l'on peut trouver à l'échelle du versant. Sur cet exemple, les zones tampons interviennent à différents stades du transfert et agissent sur toutes les voies de transfert. Par exemple les dispositifs ligneux peuvent être mis en place pour réduire la drêve, les haies et les fascines pour lutter contre l'érosion, et les bandes enherbées notamment pour réduire le ruissellement et le transport des sédiments. Un système de drainage peut être mis en place pour faciliter l'exploitation agricole pour certains types de sols, en particulier pour les sols hydromorphes avec un substrat peu perméable et peu profond. Il s'agit de tuyaux enterrés, de puits ou de fossés qui facilitent le désengorgement des sols et accélère les transferts. Les zones tampons peuvent aussi permettre de réduire le transfert de contaminants en contexte de drainage, par exemple avec une zone humide artificielle.

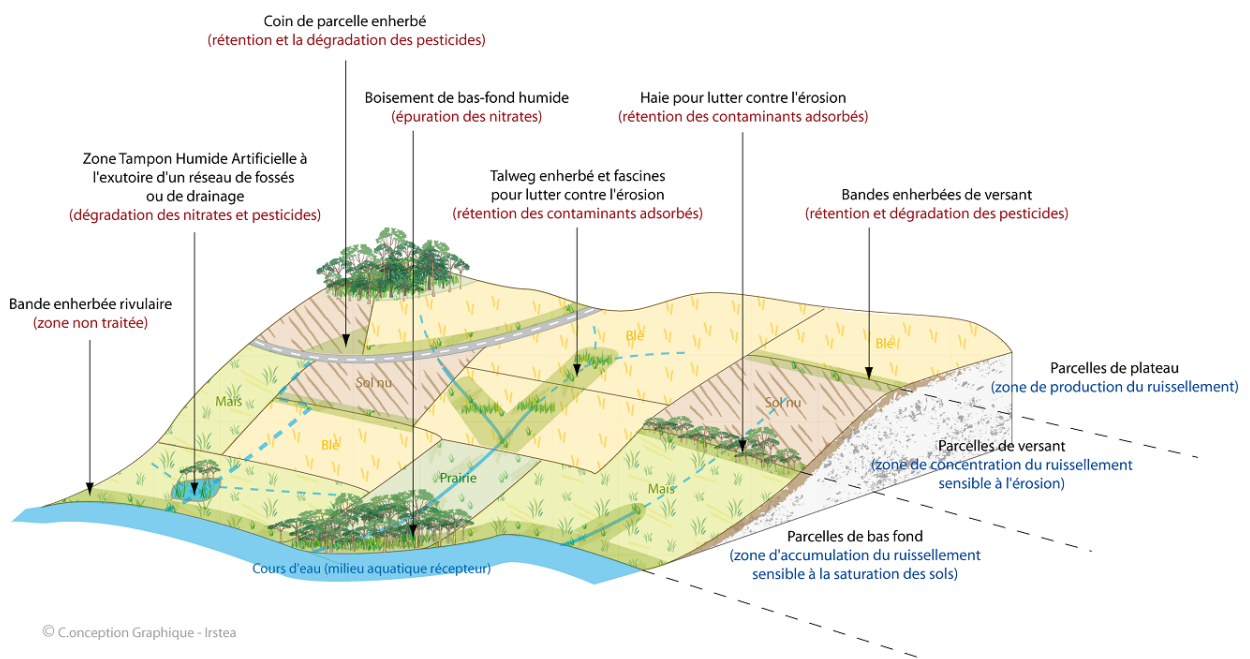


Figure 2.2 – Localisations possibles des zones tampons de différentes natures à l'échelle d'un bassin versant (Catalogne C., 2016).

Pour que les zones tampons soient efficaces, leur nature, leur localisation et leur dimensionnement doivent être réfléchis et adaptés au contexte. L'équipe pollutions diffuses agricoles d'Irstea et le Groupe de Travail Zones Tampons (GTZT) ont développé des guides qui permettent d'accompagner les professionnels concernés dans la mise en place de tels éléments de mitigation (Catalogne C., 2016). La phase de diagnostic prend en compte le type de transfert et la nature des

produits visés, et mène au choix du type de zone tampon le plus pertinent (haie, bande enherbée, ...).

### **b) Les bandes enherbées**

La mise en place de bandes enherbées est recommandée en France voire obligatoire. Les Bonnes Conduites Agro-Environnementales (BCAE) imposent l'utilisation de bandes enherbées entre les cultures et les cours d'eau, mais on peut aussi en trouver entre deux parcelles ou au bord des routes. Elles sont particulièrement efficaces pour limiter le ruissellement en agissant à plusieurs niveaux (Dosskey, 2001; Lacas et al., 2005) :

- Le premier horizon de la bande enherbée est particulièrement perméable, notamment grâce au réseau racinaire et à la présence d'organismes vivants, créant une zone de conductivité élevée et favorisant l'infiltration.
- La végétation dense induit une forte rugosité de surface, ce qui provoque la diminution de la vitesse de ruissellement et facilite la sédimentation des matières en suspension.
- Le taux de matière organique élevé dans le premier horizon du sol qui découle de la présence de végétation pérenne sur les bandes enherbées favorise l'adsorption et la dégradation des produits en solution.
- La bande enherbée permet de conserver une distance entre la parcelle et les zones aquatiques, et ainsi les protège du phénomène de dérive.

Dans la littérature, de nombreuses études visent à déterminer le taux d'abattement des solutés via les bandes enherbées (Arora et al., 1996; Vellidis et al., 2002; Hussein et al., 2007) et donnent des résultats très variables. Ces études s'accordent sur l'importance des choix de dimensionnement et de localisation en fonction du contexte. L'idéal serait d'accompagner la mise en place des bandes enherbées d'un diagnostic préalable. Celui-ci peut s'appuyer sur des données terrain, mais les expérimentations sont coûteuses aussi bien en temps que financièrement et les résultats sont rarement transposables sur des sites différents (Lacas et al., 2005; Poletika et al., 2009). L'utilisation des modèles numériques représente une approche alternative aux études terrain. Les modèles à base physique en particulier décrivent de façon détaillée les processus en jeu et il est possible d'aboutir à une représentation réaliste des transferts pour déterminer une localisation et un dimensionnement optimal des bandes enherbées.

Ainsi pour la France, une méthode de dimensionnement a été développée (Carluer et al., 2017) et comprend l'utilisation du modèle mécaniste VFSSMOD (Muñoz-Carpena et al., 1999; Lauvernet and Muñoz Carpena, 2017) pour mieux prendre en compte le contexte de la parcelle amont (géométrie, coefficient de ruissellement), le climat, le fonctionnement hydrodynamique de la zone (hauteur de la nappe), etc. (voir figure 2.3).

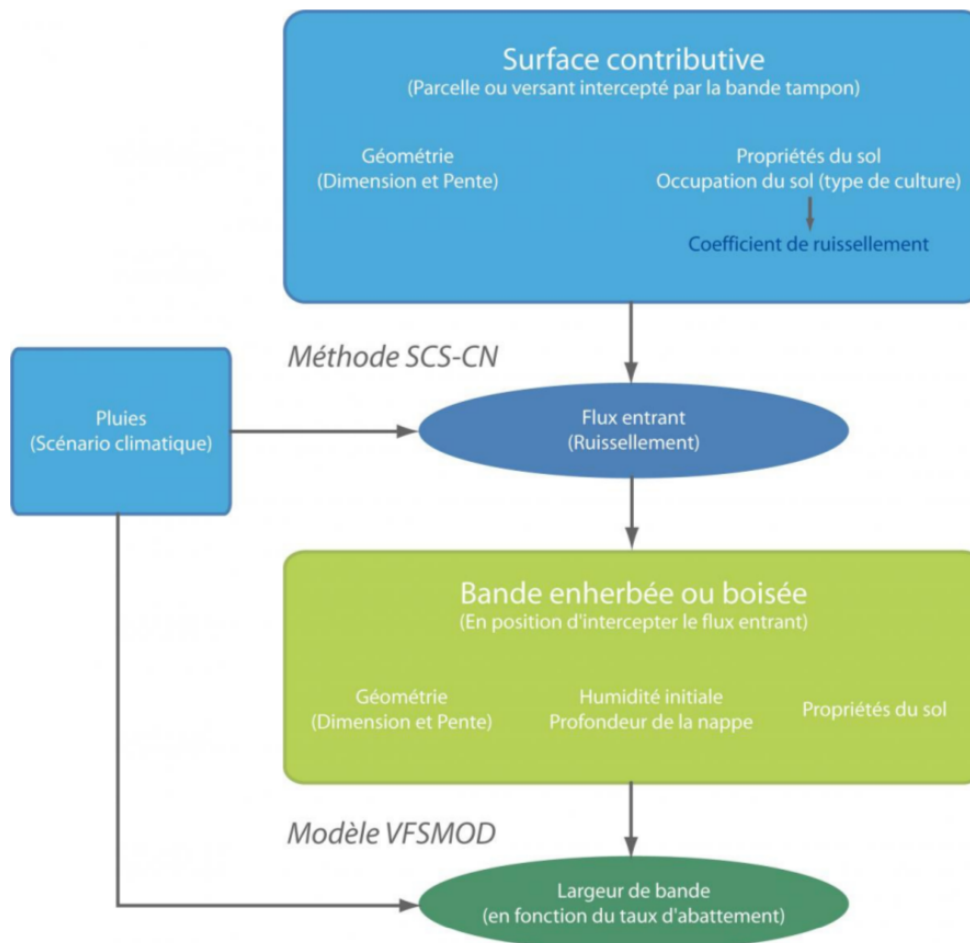


Figure 2.3 – Méthode générale de dimensionnement des bandes enherbées BUVARD développée par Carlier et al. (2017) et illustrée dans le rapport du Groupe Technique Zones Tampons (Catalogne C., 2016).

### 2.1.2 Propriétés hydrodynamiques d'un sol

Pour mieux comprendre les processus en jeu dans le transfert des solutés dans le sol, il faut s'intéresser à la structure de celui-ci, et aux propriétés hydrodynamiques qui en découlent. Le sol est un milieu poreux composé d'un mélange de gaz, de liquide, de solide et d'organismes vivants. L'hétérogénéité de la structure du sol complexifie la définition de ses propriétés physiques : la porosité par exemple ne peut pas être définie en un point ou sur un volume trop petit, au risque de ne pas être représentative du milieu. Pour y remédier, la représentation conceptuelle du volume élémentaire représentatif (VER) a été adoptée (Bear, 1972; Corey, 1977), il correspond au plus petit volume pour lequel les mesures effectuées sont valables sur le reste du milieu. Pour un sol non structuré, le VER est d'environ  $100 \text{ cm}^3$  (Kutílek and Nielsen, 1994) mais en fonction du milieu poreux, cette valeur peut varier d'un ou plusieurs ordres de grandeur.



### 2.1.2.1 Porosité et teneur en eau

Dans un VER, le volume total  $V_{tot}$  [ $L^3$ ] est la somme des volumes de l'air  $V_a$ , de l'eau  $V_w$  et des particules solides  $V_s$ . Le volume des pores  $V_p$  correspond à tous les espaces occupés par l'air et l'eau. On obtient donc :  $V_{tot} = V_a + V_w + V_s$  et  $V_p = V_{tot} - V_s$ . La porosité  $\phi$  [-] est définie par le rapport entre le volume des pores et le volume total de sol (équation 2.1). Selon les types de sols, elle peut varier entre 30% et 70% environ.

$$\phi = \frac{V_p}{V_{tot}} \quad (2.1)$$

On peut exprimer la porosité en terme de masse volumique si on considère que la masse totale du sol  $M_{tot}$  [ $M$ ] est égale à la masse des éléments solides du sol  $M_s$  [ $M$ ] :

$$\phi = \frac{V_{tot} - V_s}{V_{tot}} \quad \text{donc} \quad \phi = \frac{\frac{1}{V_s} - \frac{1}{V_{tot}}}{\frac{1}{V_s}} \quad \text{et} \quad \phi = \frac{\rho_s - \rho_t}{\rho_s} \quad (2.2)$$

avec  $\rho_s$  et  $\rho_t$  [ $M.V^{-3}$ ] les masses volumiques des éléments solides et du sol total respectivement. La teneur en eau  $\theta$  [-] correspond au rapport du volume occupé par l'eau et du volume total (équation 2.3). En pratique la teneur en eau à saturation  $\theta_s$  est légèrement inférieure à la porosité, certains pores restant isolés, non accessibles pour l'eau, mais on assimile souvent la porosité et  $\theta_s$ . On définit la teneur en eau effective  $\theta_E$  [-] en lien avec la teneur en eau résiduelle  $\theta_r$  [-] :

$$\theta = \frac{V_w}{V_{tot}} \quad \text{et} \quad \theta_E = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (2.3)$$

Pour mesurer la teneur en eau d'un sol, il existe des méthodes variées, directes si on mesure la masse d'eau dans un volume de sol ou indirectes si on mesure un paramètre physique dépendant de la teneur en eau. La méthode directe la plus simple consiste à prélever un volume d'échantillon de sol, et comparer ses masses humides et sèches en laboratoire. Cette approche est précise si le prélèvement a été soigné, mais destructrice et ne peut pas être utilisée pour des séries de mesures temporelles au même endroit. Les humidimètres sont des appareils de mesure indirecte et non destructeurs. Certains utilisent le concept de réflectométrie pour mesurer la permittivité du sol comme par exemple les TDR (Time Domain Reflectometry). La teneur en eau est liée à celle-ci par une relation empirique. Pour que la mesure soit précise, une calibration est nécessaire (Lacas, 2005).

### 2.1.2.2 Potentiel matriciel

Dans un sol homogène, l'eau est soumise principalement à deux forces : la gravité et les forces de capillarité, qui sont la conséquence de la tension superficielle de l'eau à la limite avec les par-

ticules de sol. Plus un sol est sec, plus son potentiel matriciel sera bas. Le potentiel total de l'eau dans le sol  $H [L]$  peut s'exprimer en fonction de la profondeur  $z [L]$  et du potentiel matriciel  $h [L]$  appelé aussi charge hydraulique :

$$H = z + h \quad (2.4)$$

La profondeur est classiquement exprimée négativement à partir d'un repère et vers le bas, et la charge hydraulique en mètre de colonne d'eau à l'équilibre hydrostatique.

### 2.1.2.3 Conductivité hydraulique à saturation

Dans ses expérimentations, Darcy a montré qu'il existait pour les fluides newtoniens une relation linéaire entre le flux et le gradient hydraulique dans le cas d'un écoulement laminaire en régime permanent :

$$q = -K_s \text{ grad}(H) \quad (2.5)$$

avec  $q [L.T^{-1}]$  le flux,  $H [L]$  le potentiel total de l'eau dans le sol, et  $K_s [L.T^{-1}]$  la conductivité à saturation, elle correspond à la facilité pour un fluide de traverser un média poreux.

Pour mesurer la conductivité à saturation, les méthodes terrain sont préférées aux méthodes de laboratoire pour leur précision et leur meilleure représentation des conditions naturelles, ainsi que l'intégration de l'hétérogénéité si les mesures sont multiples. Les méthodes les plus utilisées sont le double anneau de Müntz (Smith and Mullins, 1991), et l'infiltrométrie à charge variable (Reynolds and Elrick, 1991), même si cette dernière n'est pas idéale si le terrain est riche en macropores. Les protocoles de mesures sont assez lourds à mettre en place et les résultats parfois incertains (Mohanty et al., 1994). Compte tenu de la grande hétérogénéité spatiale de ce paramètre (Beven et al., 1988; Ceddia et al., 2009; Mulla and McBratney, 2010), la caractérisation des conductivités à saturation à l'échelle du versant ou même de la parcelle est souvent peu sûre. A cette problématique de variabilité spatiale s'ajoute la non-additivité de la perméabilité : on ne peut pas définir une valeur de perméabilité équivalente sur un volume en combinant plusieurs valeurs ponctuelles de perméabilité par une simple moyenne arithmétique (Renard and de Marsily, 1997). Il existe des inégalités plus ou moins complexes qui encadrent de manière théorique la perméabilité équivalente. La plus basique d'entre elles est l'inégalité fondamentale :

$$\mu_h \leq K_s \leq \mu_a \quad (2.6)$$

avec  $\mu_h$  la moyenne harmonique et  $\mu_a$  la moyenne arithmétique de la conductivité hydraulique à saturation  $K_s$  sur un domaine donné. On gardera en tête que le passage d'une valeur locale

de conductivité hydraulique à saturation à la caractérisation d'une zone plus ou moins étendue par une valeur effective doit être réfléchi avec prudence et se baser si possible sur des données multiples et l'utilisation des géostatistiques.

## 2.2 État de l'art de la modélisation des transferts à l'échelle du versant et du bassin versant

Cette section établit dans un premier temps le lien entre les propriétés hydrodynamiques du sol décrites dans la section précédente et la modélisation hydrologique. Elle met en lumière les étapes successives nécessaires pour aboutir à une modélisation spatialisée et intégrée : les relations fonctionnelles décrivant les propriétés hydrodynamiques du sol, la mise en équation des processus dans les différents compartiments, la résolution numérique spatialisée de ces équations, leur couplage au sein d'un modèle. Dans un deuxième temps, une revue succincte des différents modèles existants permet de rendre compte de leur diversité, tant du point de vue des processus représentés que de leur niveau de complexité. Enfin, la question de la validation des modèles est abordée.

### 2.2.1 Représentation mécaniste des flux d'eau et de solutés

#### 2.2.1.1 Courbes de rétention et de conductivité

Pour rendre compte de la dynamique de l'eau dans un sol, il faut d'abord expliciter les relations qui lient ses propriétés hydrodynamiques. La courbe de rétention permet d'exprimer la relation entre le potentiel matriciel et la teneur en eau, c'est le modèle de van Genuchten (1980) qui est le plus utilisé aujourd'hui :

$$\theta_E = (1 + (\alpha|h|)^n)^{-m} \quad (2.7)$$

avec  $\theta_E$  [-] la teneur en eau effective,  $h$  [L] la pression,  $\alpha$  et  $n$  des paramètres empiriques calés.  $\alpha$  [ $L^{-1}$ ] est lié à la pression d'entrée d'air,  $n$  [-] est une mesure de la distribution de la taille des pores ( $n \geq 1$ ). On considère souvent que  $m$  est égal à  $1 - \frac{1}{n}$ . Les courbes de conductivité qui lient la conductivité et la pression sont le plus souvent exprimée par le modèle de Mualem (1976) :

$$K_r(\theta_E) = \theta_E^b [1 - (1 - \theta_E^{1/m})^m]^a \quad (2.8)$$

avec  $K_r$  [-] la conductivité relative ( $K_r = K/K_s$ ) et  $m = 1 - c/n$ . Le modèle de Mualem prévoit de fixer les coefficients empiriques  $a$ ,  $b$  et  $c$  respectivement à 2, 0.5 et 1. On note que la base de données sur laquelle s'est appuyé Mualem pour fixer  $a$ ,  $b$  et  $c$  est discutée, ainsi que la pertinence de la valeur de  $b$  pour certains types de sols. Des améliorations ont été apportées à ces modèles,

comme par exemple les corrections de Vogel and Cislérova (1988); Vogel et al. (2000) qui précisent les courbes de conductivité à l'approche de la saturation.

### 2.2.1.2 Flux d'eau en subsurface

#### a) L'équation de Richards

Les écoulements de l'eau en milieu poreux, à saturation variable et en régime transitoire sont décrits par l'équation de Richards (équation 2.9). Elle combine la loi de Darcy en non saturé (équation 2.5) et une équation de continuité qui permet d'assurer la conservation de la masse :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ K_x(h) \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ K_y(h) \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ K_z(h) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (2.9)$$

avec  $t$  [T] le temps,  $K_x$ ,  $K_y$  et  $K_z$  [L.T<sup>-1</sup>] les conductivités hydrauliques dans les trois directions de l'espace,  $h$  [L] le potentiel matriciel,  $z$  [L] l'élévation par rapport à un niveau de référence et  $x$  et  $y$  les coordonnées dans les deux autres axes. À cette équation peut être ajouté un terme source ou puits représentant divers processus (évapotranspiration, prélèvement par les végétaux, etc.).

#### b) Gestion des écoulements préférentiels

Certains sols présentent une telle hétérogénéité dans leur structure qu'elle en influence profondément les flux d'eau. C'est le cas des structures favorisant un écoulement préférentiel, notamment la présence de macropores (Jarvis, 2007). La problématique porte encore plus d'enjeu quand il ne s'agit pas que de dynamique de l'eau mais de transfert des solutés. Les écoulements préférentiels sont une voie de transport rapide, dans lesquels interviennent peu de réaction ou de dilution des flux. Les modèles à double porosité ou à double perméabilité ont pour objectif de rendre compte des écoulements préférentiels. Il est important de garder à l'esprit que la structure d'un sol est généralement très complexe, et si l'hétérogénéité est présente à des échelles multiples, il est très difficile de la connaître et de la représenter, même avec des modèles à multiple perméabilité (Djabelkhir, 2015).

Dans les modèles à double porosité, l'eau présente dans le sol est répartie dans deux compartiments (eau mobile et eau immobile) et un terme d'échange régit leur relation (Gärdenäs et al., 2006; Cheviron and Coquet, 2009). Les modèles à double perméabilité sont une complexification du système à double porosité : l'eau est mobile dans les deux compartiments définis, mais avec des vitesses d'écoulement différentes. Certains modèles résolvent les mêmes équations d'écoulement dans les deux compartiments, généralement via l'approche proposée par Gerke and van Genuchten (1993, 1996) comme c'est le cas dans HYDRUS (Simunek et al., 2005, 2008) avec l'équation de Richards. Dans d'autres modèles, les écoulements dans le compartiment qui correspond aux macropores ne sont pas représentés par les équations de Richards, mais par exemple par

une onde cinématique (voir paragraphe 2.2.1.3), comme dans MACRO (Larsbo and Jarvis, 2003, 2005). D'autres modèles combinent les approches à double porosité et double perméabilité et définissent plus de deux compartiments. C'est le cas du modèle RZWQM (Ahuja et al., 2000; Malone et al., 2004) qui représente le sol avec trois compartiments : la matrice du sol où l'eau est immobile, la matrice où l'eau est mobile, et les macropores.

Les choix du niveau de complexité de la représentation du transport préférentiel dans un modèle dépendent des objectifs de celui-ci. En effet, le principe de la double porosité a été validé dans des contextes d'expériences laboratoires et terrains (Gaudet et al., 1977; Goltz and Roberts, 1986) mais n'est pas optimal dans certains contextes, par exemple dans les cas où l'hétérogénéité est présente à plusieurs échelles ou ne peut pas être simplifiée par un nombre réduit de compartiments. Le concept de double perméabilité permet de rendre compte de façon plus complexe les différents contextes. Cependant, il est important de garder à l'esprit que plus la complexité de la conceptualisation des flux préférentiels est grande, plus le nombre de nouveaux paramètres d'entrée, dont certains empiriques, est élevé. On reviendra dans le paragraphe 2.2.4.1 sur les problématiques de paramétrisation des modèles.

### 2.2.1.3 Flux d'eau en surface

Les écoulements à surface libre en eau peu profonde peuvent être décrits par les équations de Saint-Venant (1871). Les deux équations se réfèrent respectivement à la conservation de la masse et de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial Q}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{1}{A} \frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{Q^2}{A} \right) + g \frac{\partial y}{\partial x} - g(S_o - S_f) = 0 \quad (2.10)$$

avec  $Q [L^3.T^{-1}]$  le débit,  $A [L^2]$  l'aire de la section transversale,  $y [L]$  la hauteur de l'eau,  $x [L]$  la distance longitudinale dans le sens du ruissellement,  $g [LT^{-2}]$  l'accélération due à la gravité  $S_o [-]$  la pente et  $S_f [-]$  le coefficient de friction.  $S_f$  peut être défini de la manière suivante :

$$C = \frac{1}{n} R^{2/3} S_f^{1/2} \quad (2.11)$$

avec  $C [L.T^{-1}]$  la vitesse moyenne de l'eau,  $R [L]$  le rayon hydraulique et  $n [TL^{-1/3}]$  le coefficient de Manning (voir équation 2.14). Le ruissellement de surface sur un versant est un cas parmi d'autres décrits par ces équations, et les modèles hydrologiques traitant du transport à cette échelle utilisent des approximations des équations de Saint-Venant. Les deux équations principalement utilisées sont, par ordre croissant de simplification, l'onde diffusive (Cunge et al., 1980) (équation 2.12) et l'onde cinématique (Wooding, 1965), vérifiant l'hypothèse 2.13 :

ne pas dire que l'onde cinématique est l'eq 2.13 mais qu'elle est une simplification de St Venant

(2.10) avec l'hyp 2.13

$$S_f = S_o - \frac{\partial y}{\partial x} \quad (2.12)$$

$$S_f = S_o \quad (2.13)$$

L'onde cinématique représente un flux uniforme, en mouvement à la vitesse  $c [L.T^{-1}]$ , sans aucune atténuation ou changement le long du versant. Bien que l'onde cinématique ne soit pas adaptée à des situations d'écoulement en canaux, cette représentation est robuste et a été validée de nombreuses fois à l'échelle du versant par comparaison à des événements naturels (Muñoz-Carpena et al., 1999). L'onde de diffusion quant à elle prend en compte le terme de pression différentielle et permet de représenter la diffusion des flux. L'onde diffusive est un bon compromis pour simuler des cas à plus grande échelle. La représentation plus complexe des écoulements permet de différencier les canaux, fossés ou cours d'eau des versants, et même si la résolution de cette équation entraîne des imprécisions dans la gestion des effets des remous (Fread, 1993), elle permet la simulation de flux sur versant ou dans des canaux (Orlandini and Rosso, 1996). La relation entre hauteur d'eau et débit peut être estimée par l'équation empirique de Manning. Elle repose notamment sur un coefficient de rugosité  $n$  variable selon les surfaces et s'écrit :

$$Q = Ay^{2/3} \sqrt{\frac{S_o}{n}} \quad (2.14)$$

avec  $Q [L^3.T^{-1}]$  le débit,  $y [L]$  la hauteur d'eau,  $A [L^2]$  la section transversale de la surface de l'écoulement,  $S_o [-]$  la pente de la surface de l'écoulement et  $n [TL^{-1/3}]$  le coefficient de Manning. Plus le coefficient de Manning est petit, plus la surface est lisse.

#### 2.2.1.4 Modélisation du devenir des solutés dans le sol

Dans le sol, les contaminants sont présents en solution ou adsorbés à des particules de sol. La phase en solution est peut être mobile, et dans ce cas se déplace avec les écoulements de l'eau.

##### a) Advection-Dispersion

Dans un milieu homogène et conservatif, l'équation d'advection-dispersion se définit ainsi :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.15)$$

avec  $C [M.L^{-3}]$  la concentration du contaminant en solution,  $D [L^2.T^{-1}]$  la diffusivité hydrodynamique et  $v [L.T^{-1}]$  la vitesse de l'eau. Un terme source ou puits peut être ajouté à l'équation d'advection dispersion pour représenter par exemple à la dégradation ou à l'adsorption. Le terme

dispersif  $D$  intègre à la fois la dispersion mécanique  $D_m [L^2.T^{-1}]$ , qui correspond aux variations microscopiques de la vitesse du fluide se déplaçant dans un milieu poreux hétérogène à cette échelle, et la diffusion moléculaire  $d [L^2.T^{-1}]$  liée à l'agitation thermique (figure 2.4 et équation 2.16). Cette dernière a été définie en 1855 par la loi de Fick, elle traduit notamment la tendance des molécules en solution à se déplacer d'une zone à forte concentration vers une zone à faible concentration.

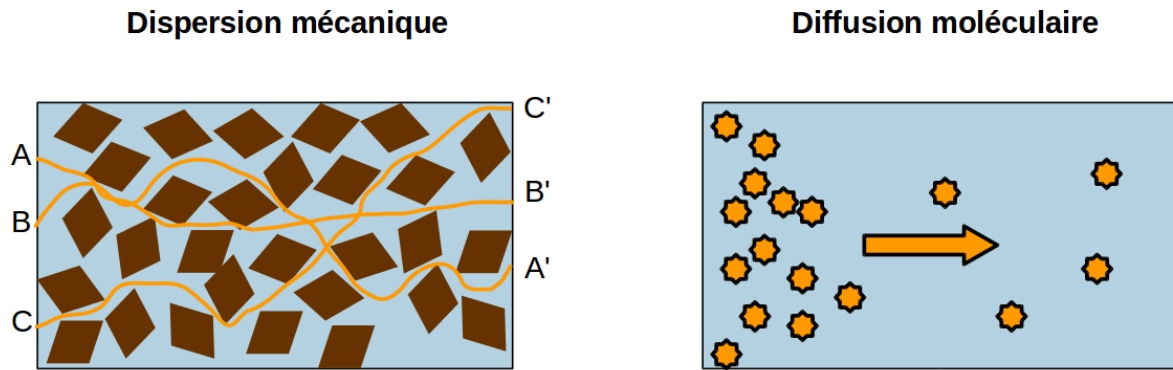


Figure 2.4 – Représentation schématique de la dispersion mécanique et de la diffusion moléculaire.

$$D = D_m + d \quad \text{avec} \quad D_m = \alpha v_p \quad \text{et} \quad d = \tau D_e \quad (2.16)$$

avec  $D [L^2.T^{-1}]$  la diffusivité hydrodynamique,  $D_m [L^2.T^{-1}]$  la dispersion mécanique,  $d [L^2.T^{-1}]$  la diffusion moléculaire,  $\alpha [L]$  la dispersivité,  $v_p [L.T^{-1}]$  la vitesse de l'eau dans les pores qui correspond au produit de la vitesse de Darcy et de la porosité,  $\tau [-]$  la tortuosité du sol,  $D_e [L^2.T^{-1}]$  la coefficient de diffusion du soluté dans l'eau. Souvent, la diffusion moléculaire longitudinale et transversale n'est pas la même, et introduit les dispersivités correspondantes :  $\alpha_l [L]$  et  $\alpha_t [L]$ . L'ordre de grandeur de la diffusion moléculaire des solutés inorganiques est d'environ  $10^{-5} \text{ cm}^2.\text{s}^{-1}$ , et celui des solutés organiques est plus faible. Son influence sur la diffusivité hydrodynamique totale est faible et négligée dans de nombreux cas (Vanderborght and Vereecken, 2007).

La valeur de la dispersivité est dépendante de l'échelle concernée (Gelhar et al., 1992). Elle peut se déduire de mesures de laboratoire, par exemple d'analyses de profils de concentration de traceurs inertes ou de courbes de percées en sortie de colonne. Dans leur revue Vanderborght and Vereecken (2007) ont répertorié et analysé les résultats de 57 études sur la mesure de la dispersivité. Plusieurs conclusions ont été tirées :

- Les valeurs de dispersivité mesurées sont dépendantes des dimensions de l'expérimentation. Une valeur mesurée ne peut donc pas être intégrée dans un modèle si les échelles des simulations et de l'expérimentation ne sont pas les mêmes. En outre, aucune tendance

asymptotique n'a été remarquée en fonction de la distance, et comme les temps de transferts trop élevés empêchent des expérimentations sur de longues distances, la dispersivité dans ce contexte n'est pas connue (Javaux and Vanclooster, 2004a,b).

- Les mesures ont toutes été réalisées en considérant que la dispersivité était homogène sur un profil de sol vertical. Il n'y a donc aucune information sur la possible hétérogénéité verticale de la dispersivité.
- Comme pour des sols grossiers le volume représentatif est plus grand que pour les sols fins : il y a un risque que pour les sols grossiers, les expériences de lixiviation sur colonne ne soient pas représentatives du terrain.
- De manière générale, tous les éléments sources d'hétérogénéité spatiale tels que des horizons de sol de largeurs variables (Van Wesenbeeck and Kachanoski, 1994) ou des traces de pneus (Coquet et al., 2005) peuvent fortement influencer la distribution de l'eau sur des distances de l'ordre du mètre et par conséquent fortement influencer la valeur de la dispersivité.
- Les origines possibles de variabilité présentées ci-dessus ne peuvent pas à elles seules expliquer la totalité de la variance de l'ensemble des mesures.

La dispersivité et par extension la diffusivité hydrodynamique est un phénomène reconnu et mesurable. Malgré tout, les données expérimentales sont valables dans le contexte très restreint de leur obtention. L'utilisation du paramètre de dispersivité reste délicat, surtout à des grandes échelles comparées aux expérimentations (échelle de la parcelle, du versant, du bassin versant) et elle sera discutée dans d'autres parties de ce manuscrit.

### b) Adsorption

La grande majorité des modèles simulant le devenir des pesticides dans un sol prennent en compte l'adsorption, avec cependant des degrés variés de complexité dans sa représentation. Considérer une adsorption à l'équilibre et linéaire est la méthode la plus simple et la plus classique (voir le tableau 2.1 pour plus de détails). Dans ce cas, l'adsorption est représentée par une constante d'équilibre  $K_d [L^3 M^{-1}]$  (Wauchope et al., 2004). Plus le  $K_d$  est élevé, plus le produit est hydrophobe, peu soluble et sera fortement adsorbé aux particules de sol. A l'inverse, un produit dont le  $K_d$  est faible est hydrophile et aura tendance à rester en solution et ne pas s'adsorber aux particules de sol. Selon sa composition en matière organique, un sol est plus ou moins propice à l'adsorption. Par simplification, on peut retrouver le  $K_d$  d'un pesticide dans un contexte selon son  $K_{oc} [L^3 M^{-1}]$  (supposé constant par pesticide) et le taux de matière organique du sol  $F_{oc} [-]$ . Pour prendre quelques exemples, l'atrazine, avec un  $K_{oc}$  de 100 est particulièrement hydrophile alors que le DDT est extrêmement hydrophobe avec un  $K_{oc}$  de 151000 (IUPAC, 2007). Il est rare cepen-



dant que le  $K_{oc}$  d'une molécule soit si grand, celui-ci est en général compris entre 50 et 5000.  $K_d$  définit le rapport entre les concentrations d'un produit dans le sol et dans l'eau (respectivement  $C_S [MM^{-1}]$  et  $C_W [ML^{-3}]$ ) :

$$K_d = K_{oc} F_{oc} \quad \text{et} \quad K_d = \frac{C_S}{C_W} \quad (2.17)$$

Cependant la linéarité de l'adsorption est une approximation. En effet, à haute concentration, le coefficient d'équilibre apparent dérive par rapport au  $K_d$  mesuré à plus faible concentration (Wauchope et al., 2002). L'isotherme de Freundlich (1907) (équation 2.18) et l'isotherme de Langmuir (1918) sont les deux méthodes les plus utilisées pour représenter la non linéarité de l'adsorption.

$$C_S = K_f + C_W^{1/n} \quad (2.18)$$

avec  $K_f [L^3M^{-1}]$  le coefficient d'adsorption de Freundlich et  $n_f$  le coefficient de Freundlich.

Un niveau supplémentaire de précision est la représentation de l'adsorption comme un phénomène non instantané donc cinétique et en partie non réversible. Dans ce cas, l'adsorption se décompose en trois phases et peut être modélisée comme une réaction multi-sites : (i) réaction instantanée et réversible, (ii) réaction plus lente (complétée en plusieurs heures ou jours) et réversible, (iii) réaction encore plus lente et non réversible. Selon les processus pris en compte, on parle de modèles à deux sites (Dusek et al., 2015) ou à trois sites (Wauchope et al., 2002). Le processus réversible intervenant à la phase (ii) est défini par une cinétique du premier ordre :

$$\frac{dC_S^{ads}}{dt} = k_{ads}C_W - k_{des}C_S^{ads} \quad (2.19)$$

avec  $t$  le temps,  $C_S^{ads} [MM^{-1}]$  la concentration adsorbée sur le site de type 2. Les constantes d'adsorption et de désorption  $k_{ads}$  et  $k_{des}$  peuvent être déduites de mesures en laboratoire des concentrations adsorbées et en solution après quelques heures à un jour d'exposition (durée assez longue pour considérer les réactions de type 2 et assez courte pour négliger les réactions de type 3).

### c) Dégradation

Comme pour l'adsorption, la dégradation linéaire est la représentation la plus simple à prendre en compte. Il s'agit d'un modèle de dégradation qui s'appuie sur le temps de demi-vie  $T_{1/2} [T]$  de la molécule, c'est-à-dire le temps qu'il faut pour dégrader la moitié de sa quantité :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C \quad (2.20)$$

avec  $\lambda [T^{-1}]$  la constante de dégradation. Une molécule dont le temps de demi-vie est inférieur à 30 jours est considérée comme non persistante, et au contraire, on peut estimer qu'une molécule est persistante si son temps de demi-vie est supérieur à 100 jours environ. Par exemple, le glyphosate est peu persistant avec un temps de demi-vie de 15 jours et l'atrazine est moyennement persistante avec un temps de demi-vie de 75 jours (IUPAC, 2007). Le devenir et la persistance de ses métabolites n'est pas pris en compte dans ces 75 jours. Selon les choix de représentation de la dégradation,  $\lambda$  peut être considérée comme constante ou dépendante de la température et de l'humidité du sol :

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}} \quad \text{ou} \quad \lambda = \frac{\ln(2)}{T_{1/2}} F_T F_W \quad (2.21)$$

avec  $F_T$  et  $F_W$  des facteurs dépendants respectivement de la température et de l'humidité du sol. Ces facteurs influents sont généralement représentés respectivement par la loi d'Arrhénius (équation 2.22) et l'équation de Walker (1974) (équation 2.23) :

$$F_T = e^{\frac{E_a}{R} \left( \frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right)} \quad (2.22)$$

$$F_W = \left( \frac{\theta}{\theta_{ref}} \right)^{B_2} \quad (2.23)$$

avec  $E_a [J.mol^{-1}]$  l'énergie d'activation,  $R [J.mol^{-1}.K^{-1}]$ ,  $T [K]$  la température et  $T_{ref} [K]$  la température à laquelle a été mesurée le temps de demi-vie,  $\theta [-]$  la teneur en eau volumique et  $\theta_{ref} [-]$  la teneur en eau à laquelle a été mesurée le temps de demi-vie et  $B_2$  une constante.

## 2.2.2 Aspects pratiques pour la résolution numérique dans le cadre des modèles hydrologiques

### 2.2.2.1 Techniques de résolution d'équations aux dérivées partielles

#### a) Les schémas de résolution : différences finies, éléments finis, volumes finis

Les solutions à une équation aux dérivées partielles sont définies par l'ensemble des fonctions dont les dérivées partielles vérifient les conditions de l'équation. Par exemple, la résolution de l'équation d'advection-dispersion (équation 2.15), consiste à chercher les fonctions  $C(x, t)$  dont les dérivées partielles vérifient l'équation. Imposer des conditions aux limites ou des conditions initiales au problème permet de réduire le nombre de solutions d'une équation aux dérivées partielles. Les cas où la solution s'écrit de manière explicite (on parle aussi de solution analytique) sont rares, et les méthodes numériques de résolution utilisées consistent plutôt à trouver les approximations locales de la fonction solution sur un sous-domaine défini. Le domaine de

résolution est discrétisé en temps et en espace : la discrétisation dans l'espace forme un maillage, et celle dans le temps définit des pas de temps. La stratégie de résolution consiste à trouver des solutions locales en s'appuyant sur le maillage et les pas de temps définis en construisant une approximation de la fonction inconnue. Trois méthodes principales d'approximation, dites méthodes eulériennes, peuvent être utilisées : les différences finies, les éléments finis et les volumes finis.

- La méthode des différences finies développe une stratégie d'approximation de la fonction inconnue qui s'appuie sur les dérivées. La formule de Taylor permet de discrétiser une dérivée partielle en une fonction polynôme et la méthode des différences finies consiste à tronquer le polynôme de Taylor, et ainsi de faire une approximation d'une dérivée partielle d'une fonction sous forme d'une combinaison linéaire des valeurs de cette fonction aux points du maillage. Le maillage peut être régulier ou irrégulier. La figure 2.5, montre l'interprétation graphique de l'approximation de la dérivée partielle de la fonction  $u$  au point  $i$  avec trois types de schémas : amont, aval, et centré. Pour chacun des schémas, la valeur de la dérivée de  $u$  est approximée par une combinaison linéaire des valeurs de la fonction aux points discrétisés  $i - 1$ ,  $i$  et  $i + 1$ .

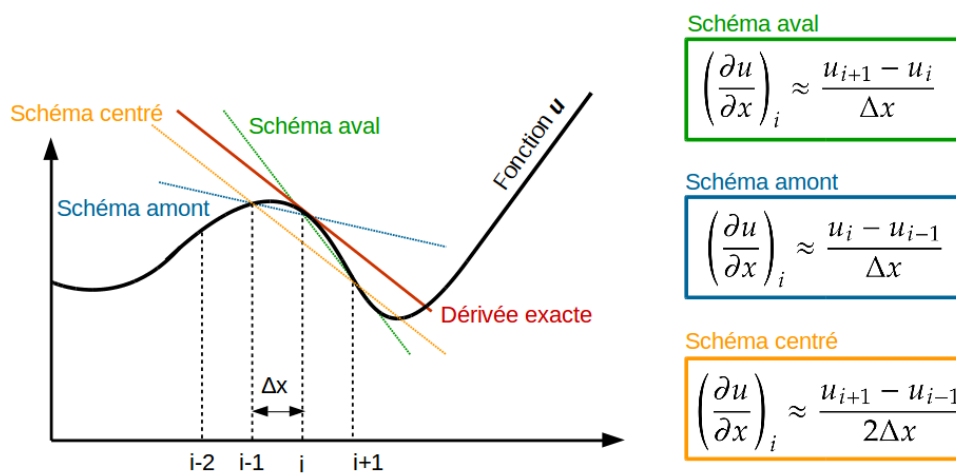


Figure 2.5 – Interprétation graphique des approximations de la dérivée (méthode des différences finies) avec des schémas numériques amont, aval et centré.

- Les méthodes des éléments finis et des volumes finis ne se basent pas sur une approximation de la dérivée comme la méthode aux différences finies, mais sur une approximation de l'intégrale. Les deux méthodes utilisent, pour une même discrétisation de l'espace, des stratégies de résolution différentes. La figure 2.6 illustre l'approximation de la fonction  $u$  sur le domaine discrétisé pour les deux méthodes. Dans la méthode des éléments finis, la valeur de  $u$  est recherchée pour tous les noeuds et une approximation de la fonction est

calculée entre les noeuds. Sur la figure, il s'agit d'une approximation linéaire, mais des approximations plus complexes peuvent être envisagées (quadratiques, cubiques, ...). Dans la méthode des volumes finis, on cherche la valeur de  $u$  dans les éléments. De même que pour la méthode des éléments finis, la fonction est approximée avec des degrés de complexité variés. Sur la figure il s'agit d'une approximation dite centrée, mais on peut également utiliser les approximations amont et aval. Dans les deux méthodes, l'exactitude des résultats dépend du nombre d'éléments, et de la fonction d'approximation choisie. Initialement, la méthode des volumes finis a été construite pour résoudre des lois de conservation sous forme hyperbolique.

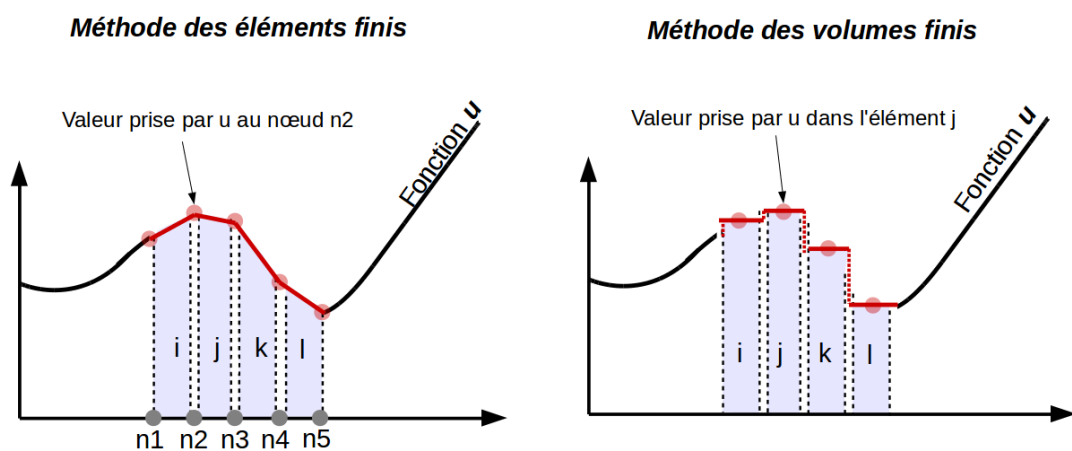


Figure 2.6 – Illustration de la discrétisation de l'espace et de l'approximation de la fonction  $u$  recherchée pour la méthode des éléments finis et pour la méthode des volumes finis.

### b) Techniques classiques de résolution des équations des écoulements et du transport

Les équations de Richards sont classiquement résolues avec une méthode des éléments finis linéaire dite de Galerkin (Huyakorn et al., 1986; Paniconi and Putti, 1994; Simunek et al., 2008), qui est reconnue pour sa capacité à bien gérer des maillages irréguliers et l'anisotropie ainsi que pour son efficacité en terme de coût de calcul. Cependant, la résolution de Galerkin produit des valeurs de pression et les champs de vitesse calculés à partir de ces pressions ne vérifient pas les deux conditions localement conservatrices des schémas de discrétisation (Farthing et al., 2002) : (i) la somme des flux sur chaque face d'un élément est égale au changement du stockage dans l'élément, plus ou moins le terme source, et (ii), les flux sont continus à travers chaque limite inter-éléments (Edwards et al., 2002; Klausen and Russell, 2004). Cela vient du fait que les pressions sont définies sur les noeuds dans la méthode de Galerkin, tandis que les flux locaux sont définis sur des volumes. Le non-respect local de la conservation de la masse induit des erreurs dans toutes les futures opérations qui seront basées sur les flux entre les éléments, dont le calcul du transport advectif. Pour éviter ce type d'erreur, on peut jouer sur la résolution en elle-

même des écoulements, ou ajouter un post processing à la résolution de Galerkin pour retrouver des flux conservatifs entre les éléments. En fait, les études visant à développer des méthodes de discrétisation qui respectent les deux principes de conservation locale sont nombreuses, mais les solutions trouvées ne sont pas totalement satisfaisantes, avec des introductions d'effets non-linéaires notamment (Bertolazzi and Manzini, 2005; Le Potier, 2005). Il existe quand même des schémas conservatifs linéaires qui produisent des champs de vitesse localement conservatifs, par exemple via l'utilisation des volumes finis centrés (Arbogast et al., 1998) ou la méthode des éléments mixtes finis (Brezzi and Fortin, 1991; Farthing et al., 2002). Cette dernière est assez utilisée pour les calculs de flux et de transport couplés (Mazzia et al., 2001; Mazzia and Putti, 2005), il s'agit d'approximer simultanément les variables de la pression et des flux. Elle présente cependant des désavantages non négligeables : mauvaise gestion des coefficients fortement anisotropiques (Mazzia et al., 2011) et coût de calcul très élevé. La méthode des volumes finis pour les flux d'eau est également peu efficace en terme de coûts de calcul. Si les méthodes alternatives de résolution des écoulements ne sont pas satisfaisantes, on peut envisager d'effectuer un post processing sur les résultats issus de la méthode des éléments finis de Galerkin pour aboutir à des champs de vitesse localement conservatifs. La technique de reconstruction des champs de vitesse développée par Larson and Niklasson (2004) est robuste et a été appliquée aux écoulements d'eau en milieu insaturé avec succès (Kees et al., 2011; Povich et al., 2013). L'étude comparative de Scudeler et al. (2016b) sur le modèle CATHY (Camporese et al., 2010) a montré que le recours aux éléments finis mixtes ou à la correction des champs de vitesses était aussi précis en terme de conservation de la masse l'un que l'autre mais la seconde option était plus avantageuse en temps de calcul.

L'équation d'advection-dispersion est un problème complexe à résoudre, en partie puisqu'elle montre un comportement double en fonction de l'importance relative du terme advectif ou du terme dispersif. Pour les flux à dominance advective, l'équation est de type hyperbolique ; dans le cas où les phénomènes dispersifs dominent, elle devient une équation de type parabolique (Yeh, 2000). La résolution simultanée de l'advection et de la dispersion est possible avec un schéma explicite, mais cette stratégie impose des limitations strictes en terme de pas de temps et peut mener à des coûts de calculs importants. La résolution du transport de solutés peut aussi être réalisée en deux temps, en séparant l'opérateur advectif de l'opérateur diffusif. Dans ce cas, la méthode de résolution la plus adaptée à chaque opérateur pourra être utilisée. La partie advective de l'équation est de forme hyperbolique, et bien adaptée à une résolution basée sur les volumes finis, qui en plus assure la conservation de la masse (Mazzia et al., 2000, 2002; Weill et al., 2011). Cette résolution est soumise à une condition de convergence, la condition de Courant-Friedrichs-

Lewy (*CFL*) (équation 2.24) qui régit la discrétisation en temps par rapport à la discrétisation dans l'espace et à la vitesse des flux.

$$CFL = V \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad (2.24)$$

avec  $V [L.T^{-1}]$  la vitesse de fluide,  $\Delta x [L]$  et  $\Delta t [T]$  les discrétisations dans l'espace et dans le temps respectivement. La partie dispersive est une équation aux dérivées partielles moins exigeante en terme de résolution, et les méthodes des différences finies, des éléments finis de Galerkin (Weill et al., 2011) ou des éléments mixtes finis (Mazzia and Putti, 2005) sont adaptées.

### 2.2.2.2 Stratégies de couplage surface-subsurface

#### a) Le couplage surface-subsurface des flux d'eau

Le couplage entre les processus de surface et de subsurface est une étape délicate expliquant qu'un certain nombre de modèles se consacrent à la surface ou à la subsurface (HYDRUS-3D par exemple). Des méthodes diverses ont été développées. Dans une étude de comparaison des modèles hydrologiques couplés, Maxwell et al. (2014) classe les modèles selon la stratégie de couplage : échange du premier ordre, continuité de la pression et switch des conditions aux limites.

Les échanges de premier ordre sont définis comme le produit de la différence de potentiel entre le sol et la surface et d'un coefficient d'échange, notamment dépendant de la perméabilité, de la densité de viscosité de l'eau et de l'épaisseur de la couche d'échange (VanderKwaak and Loague, 2001; Panday and Huyakorn, 2004). Il s'agit d'une méthode conceptuelle, et en pratique il est difficile d'établir avec des données terrain que le coefficient d'échange soit constant (Cardenas and Zlotnik, 2003; Kollet and Zlotnik, 2003).

Une formulation du couplage surface-subsurface plus générale consiste à imposer la continuité de la charge et des flux et donc éviter de passer par un flux d'échange (Kollet and Maxwell, 2006; Dawson, 2008). Plus complexe à implémenter, elle évite néanmoins d'introduire dans le modèle des paramètres d'entrée supplémentaires incertains, comme la hauteur de la couche d'échange.

Il existe une troisième manière d'envisager le couplage surface-subsurface qui vérifie la continuité des flux et des pressions : la procédure de switch des conditions aux limites (Camporese et al., 2010). Dans ce cas, le forçage atmosphérique (précipitation/évaporation) est traité comme une condition à l'interface spéciale par le module de subsurface, et la condition à l'interface pour chaque nœud de surface peut switcher entre Dirichlet (charge forcée) ou Neumann (flux forcé) selon les conditions de pluie, de saturation et de ponding. Deux exemples de la procédure de switch sont illustrés sur la figure 2.7. Cette solution conserve la masse et requiert un faible coût

de calcul. Par contre, elle est délicate à mettre en place car il est nécessaire que tous les cas soient traités et réfléchis individuellement. Davantage de détails sont disponibles dans la section 3.1.4.

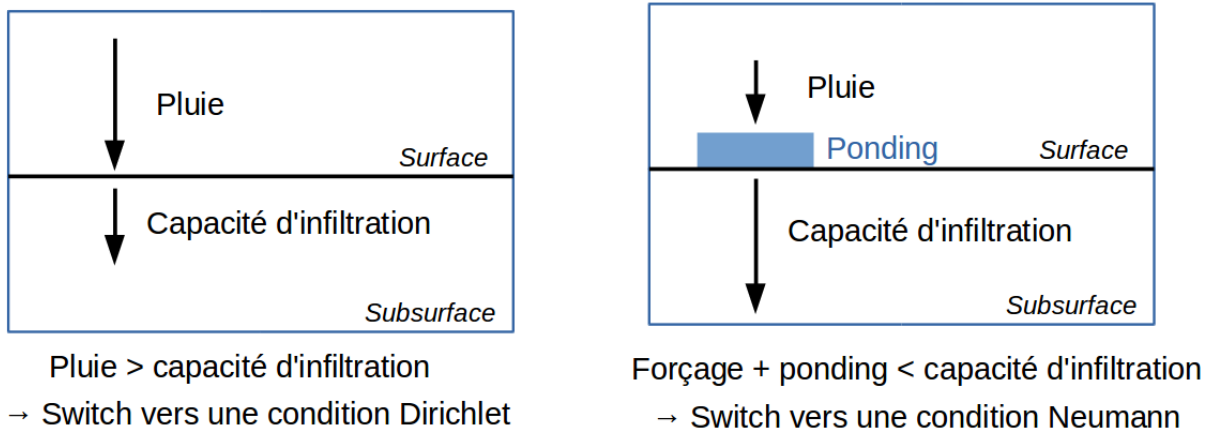


Figure 2.7 – Illustration simple de la procédure des switches des conditions aux limites de surface.

#### b) Le couplage surface-subsurface des flux de soluté

La couplage surface-subsurface des solutés est un exercice encore plus complexe, et peu de modèles intégrés et spatialisés sont capables de gérer cette problématique. Il s'agit de modéliser non seulement le flux advectif de solutés, donc en lien direct avec les flux d'eau, mais également les flux diffusifs.

Concernant les flux advectifs, des méthodes similaires à celles présentées pour l'eau peuvent être appliquées (paragraphe précédent). Par exemple Weill et al. (2011) propose pour le modèle CATHY un couplage surface-subsurface pour solutés qui est en fait la continuité de la méthode du switch des conditions à l'interface en surface pour l'eau Camporese et al. (2010). Il s'agit à chaque pas de temps et sur chaque cellule de fixer une condition à l'interface en lien avec la situation : infiltration ou exfiltration, saturation ou insaturation.

Certains processus ne peuvent pas être pris en compte avec des processus advectifs seulement et certaines stratégies de couplages impliquent de la conceptualisation avec une couche de mélange ou le passage par des flux diffusifs (Gao et al., 2004). Dans la méthode du mélange, on considère qu'il existe à la surface une couche de sol dans laquelle se mélangent les solutés du sol, les solutés de la lame ruisselante et l'apport des précipitations. Le mélange peut être considéré comme instantané, complet ou incomplet selon la complexité du modèle. De manière générale, cette méthode est assez efficace, même si pour reproduire des données expérimentales, les modèles doivent utiliser une couche de mélange beaucoup plus épaisse que celle observable sur le terrain (Zhang et al., 1997, 1999; Gao et al., 2005).

L'approche diffusive consiste à considérer les échanges entre le sol et la lame ruisselante comme des processus diffusifs. Malgré l'incertitude liée au paramètre de diffusion, cette approche

peut donner de bon résultats également (Ahuja, 1990; Wallach et al., 2001). Elle est plus complexe à implémenter, mais présente l'avantage d'éviter la mise en place du paramètre conceptuel de la couche de mélange. Elle permet ainsi de représenter des situations où les solutés échangés étaient initialement présents à une certaine profondeur (Wallach and Shabtai, 1993). Dans son étude, Wallach et al. (2001) met en valeur l'importance de l'infiltration en début d'événement pluvieux, qui, en emportant les solutés en profondeur, diminue leur disponibilité à la remobilisation.

### 2.2.3 Les modèles hydrologiques et de transfert à base physique

Dans l'ensemble des modèles visant à simuler le devenir des pesticides, on peut distinguer les modèles conceptuels des modèles à base physique. Les premiers considèrent souvent le domaine étudié comme un ensemble de compartiments représentant les processus de façon simplifiés. Les modèles à base physique s'appuient sur les équations physiques présentées dans le paragraphe 2.2.1. Les approches conceptuelles ou à base physique ne sont pas incompatibles, et que ce soit dans la représentation des processus même ou dans leur couplage, les modèles à base physique intègrent souvent des parties conceptuelles. Dans cette étude, on s'intéresse en détail aux processus de transport et à leurs interactions, notamment à l'interface surface-subsurface. Cet état de l'art sera donc orienté vers les modèles à base physique. En outre, la question du devenir des solutés peut se poser à des échelles très variées, depuis le profil de sol jusqu'au grand bassin versant. L'étude se place dans le contexte des transferts à l'échelle du versant, on cherchera donc des modèles validés autour de cette échelle, c'est-à-dire de la parcelle au petit bassin versant, ce qui constitue déjà une grande diversité.

#### 2.2.3.1 Les modèles de transfert de solutés

La présentation des équations de transport dans le paragraphe 2.2.1 reste succincte, et de nombreux mécanismes autres influencent le devenir des solutés : érosion, prélèvement d'eau par la plante, transfert de chaleur, volatilisation, etc. La complexité des processus et des interactions en jeu est reflétée par la diversité des modèles existants et validés à différentes échelles. A l'échelle de la parcelle, HYDRUS 1D (Simunek et al., 2005, 2008), RZWQM (Ahuja et al., 2000; Malone et al., 2004), MACRO (Larsbo and Jarvis, 2003, 2005), CRACK-NP (Armstrong et al., 2000), SIMULAT (Aden and Diekkrüger, 2000), et PLM (Nicholls and Hall, 1995) sont largement utilisés et partagent des points communs, comme le transport préférentiel et des processus réactifs. Parmi les processus principaux en jeu, ces modèles diffèrent surtout dans leur gestion de l'eau et des solutés en surface. RZWQM est le plus avancé de ces modèles sur cet aspect en étant le seul capable de simuler le transport des solutés en surface par mélange avec le ruissellement. MACRO, HYDRUS 1D et CRACK-NP présentent un module de surface simplifié de type réservoir et sans



transport. Enfin, SIMULAT et PLM ne simulent pas les processus de surface.

Le tableau 2.1 résume les choix de représentation des réactions des solutés dans les principaux modèles à base physique et à transfert préférentiel à l'échelle de la parcelle et en 1D (Koehne et al., 2009). Même si certains prennent en compte de façon complexe l'adsorption avec des représentations multi-sites, l'isotherme de Freundlich semble être la méthode la plus répandue. Elle est considérée comme un bon compromis entre une représentation précise de la réalité et les coûts de paramétrisation. En effet, les coefficients de sorption sont souvent mesurés en laboratoire à partir d'échantillons de sol. Compte tenu de la difficulté d'extraire, de transporter et de conserver un échantillon de sol sans en altérer la structure, la composition et les processus biologiques qui s'y déroulent, l'incertitude des mesures rend la paramétrisation de modèles complexes hasardeuse (Larsbo and Jarvis, 2005; Dusek et al., 2015). En ce qui concerne la dégradation, les modèles présentés dans le tableau 2.1 sont assez homogènes dans leurs choix : les processus linéaires, fonction de la température et de la teneur en eau  $y$  sont représentés. A noter, plusieurs modèles sont capables en sus de simuler les transferts de chaleur (RZWQM, MACRO, HYDRUS-1D, SIMULAT).

Tableau 2.1 – Gestion des réactions dans les modèles à base physique avec transport préférentiel fréquemment utilisés dans la prédiction du devenir des solutés (Koehne et al., 2009). M : matrice, TP : macroporosité dans laquelle il y a du transport préférentiel, T : température,  $\theta$  teneur en eau. Pour l'adsorption en multi-sites, le nombre de sites considéré est indiqué.

		RZWQM		MACRO		HYDRUS-1D		CRACK-NP		SIMULAT		PLM	
		M	TP	M	TP	M	TP	M	TP	M	TP	M	TP
Adsorption	Linéaire	X		X	X	X	X	X		X		X	
	Freundlich	X		X	X	X	X	X		X			
	Langmuir					X	X			X			
	Multi site	3		2		2	2			3			
Dégradation	Premier ordre	X		X	X	X	X	X		X		X	
	Fonction de T	X		X	X	X	X	X		X		X	
	Fonction de $\theta$	X		X	X	X	X	X		X		X	
	Sur solide					X	X						

Pour Koehne et al. (2009), les modèles MACRO, HYDRUS-1D et RZWQM sont les plus pertinents à utiliser pour diverses raisons : représentation des réactions et des transferts préférentiels, mais aussi les estimations d'incertitudes, des efforts de mise à jour du modèle et des applications et cas tests documentés. Ces trois modèles sont effectivement les plus utilisés pour modéliser le devenir des pesticides dans un sol structuré et à l'échelle de la parcelle (Dairon, 2017). Pourtant, ces modèles présentent tous les processus en une dimension seulement et ainsi les simulations ne peuvent pas refléter la dynamique globale d'un versant réel. Les éléments du paysage, qui influencent pourtant grandement les transferts (voir paragraphe 2.1.1.1) ne peuvent pas être représentés, ainsi que les processus d'écoulement latéraux, de ruissellement spatialisé, ... Le mo-

dèle VFSMOD (Muñoz-Carpena et al., 1999) représente les flux d'eaux par l'onde cinématique en surface en 1D dans la direction principale de l'écoulement et l'équation de Green–Ampt pour l'infiltration, mais les solutés eux sont décrits de façon empirique et il est valide à l'échelle de la bande enherbée uniquement. VFSMOD est à mi-chemin entre des modèles de transfert de solutés 1D, capables de simuler précisément le devenir des solutés dans un sol mais seulement verticalement, et des modèles hydrologiques intégrés et spatialisés, capables de représenter précisément la dynamique de l'eau à l'échelle d'un versant ou d'un petit bassin versant.

### 2.2.3.2 Les modèles hydrologiques distribués

Il existe de nombreux modèles hydrologique, qui, sans intégrer les équations de transfert de solutés, prennent en compte de façon complexe et spatialisée les écoulements de l'eau en résolvant pour la plupart l'équation de Richards en 3D. Une multitude de modèles hydrologiques a été développée au cours du temps, on rappelle que l'étude se concentre ici sur l'échelle de la parcelle au petit bassin versant, et sur les modèles couplés surface-subsurface. Les résultats de sept modèles de ce type ont été comparés dans l'étude de Maxwell et al. (2014) : CATHY (Camporese et al., 2010), HydroGeo-Sphere (HGS) (AquantyInc., 2013; Brunner and Simmons, 2012), ParFlow (Kollet and Maxwell, 2006), OpenGeoSys (Delfs et al., 2012), PAWS (Shen and Phani-kumar, 2010), PIHM (Qu and Duffy, 2007), et tRIBS + VEGGIE (Ivanov et al., 2004). Les tests consistent en la simulation de cas virtuels simples appelés à faire référence dans la validation de ce type de modèle : deux versants idéalisés de 12,8 ha et 1,5 km<sup>2</sup>, respectivement forme de plan incliné simple et de bassin incliné en V. Les conclusions de cette étude montrent que, malgré des différences dans leur gestion de certains processus (ruissellement, stratégies de couplage), les résultats des sept modèles sont similaires sur les cas simples. Pour les cas complexes (dynamique de ruissellement/infiltration, évolution rapide de la hauteur de nappe, etc.), même si les résultats quantitatifs diffèrent, les comportements généraux des modèles s'accordent. Dans la continuité de l'étude Maxwell et al. (2014), une seconde intercomparaison a été menée plus récemment entre sept modèles hydrologiques intégrés (Kollet et al., 2017) : CATHY, HGS, ParFlow, ATS (Painter et al., 2016), CAST3M, GEOtop (Endrizzi et al., 2014; Rigon et al., 2006), MIKE-SHE (Abbott et al., 1986; Butts et al., 2004). Cette fois l'étude s'appuie sur des expériences virtuelles mais aussi sur une simulation d'un terrain expérimental à l'échelle du versant (80 m de long). Les résultats analysés portent sur l'évolution des volumes d'eau dans les zones saturées, insaturées et à la surface, ainsi que les flux de sortie à l'exutoire, et des profils de saturation pour le cas réel. Les modèles s'accordent bien sur la dynamique, mais diffèrent dans les valeurs nettes. Les différences sont particulièrement visibles entre MIKE-SHE et les autres modèles, MIKE-SHE étant moins performant que les autres du fait qu'il traite les zones saturées et insaturées comme deux compartiments dif-

férents. Malgré des différences notables dans les valeurs de saturation locales le long des fronts d'infiltration et près de la nappe, la comparaison globale des profils de saturation montre une bonne cohérence entre les modèles. En ce qui concerne la surface, les modèles intégrant l'onde diffusive plutôt que l'onde cinématique (CATHY, HGS, ATS, CAST3M et MIKE-SHE) ont été plus stables sur les cas des versants à pente multidirectionnelle.

Le tableau 2.2 présente quelques caractéristiques des trois modèles hydrologiques intégrés surface-subsurface présents dans les deux études comparatives de Maxwell et al. (2014) et Kollet et al. (2017) : CATHY, ParFlow et HydroGeo-Sphere.

Tableau 2.2 – Caractéristiques des principaux modèles hydrologiques intégrés surface-subsurface. TP : transport préférentiel, DF : différences finies, EF : éléments finis, VF : volumes finis, CL : conditions aux limites, P : pression, Nd : non déterminé.

		CATHY	ParFlow	HydroGeo-Sphere
Subsurface	Équation	Richards 3D		
	Schéma spatial	EF Galerkin	DF centré	VF
	Schéma temporel	DF	Euler amont implicite	Nd
	Maillage	Structuré		Non structuré
	TP	Non	Non	Oui
Surface	Dimension	Pseudo 2D	2D	2D
	Équation	Onde diffusive	Onde cinématique	Onde diffusive
	Schéma spatial	Muskingum-Cunge	VF amont	VF
	Schéma temporel	DF explicite	Euler amont implicite	Nd
Autre	Stratégies de couplage	Switch CL	Continuité de P	Échanges du 1er ordre
	Solutés	Traceurs non réactifs	Non	Oui
	Sédiments	Non	Non	Non

Ces modèles sont tous les trois entièrement distribués, c'est à dire que l'hétérogénéité d'un terrain peut être représentée de façon assez réaliste. Leurs différences principales se situent dans leur gestion du ruissellement (onde cinématique pour ParFlow, onde diffusive pour CATHY et HGS) et dans leur stratégie de couplage surface-subsurface. Pour cette dernière en particulier, HydroGeo-Sphere s'appuie sur la description d'une couche d'échange conceptuelle qui entraîne dans certains cas des résultats non représentatifs de la réalité (voir section 2.2.2.2). Malgré une différence dans l'implémentation du ruissellement de surface, CATHY et ParFlow sont très proches dans leur construction et dans la façon dont ils représentent les processus (Sulis et al., 2010). Notons que HydroGeo-Sphere est un modèle fermé.

### 2.2.3.3 Conclusion sur les modèles et choix de CATHY

Les modèles intégrés surface-subsurface sont rigoureux, capables de simuler de façon précise et couplée les flux de surface et de subsurface. Contrairement aux modèles de transfert de pesticides (paragraphe précédent), ils sont à même de simuler la dynamique hydrologique d'un

paysage complexe avec en particulier des éléments accélérant ou ralentissant les transferts. Or, on a montré dans cet état de l'art que le transfert des solutés pouvait être fortement influencé par le contexte agropédoclimatique et les éléments du paysage. De ce constat découle naturellement un besoin d'implémenter des processus de transport réactifs dans les modèles hydrologiques intégrés.

Parmi tous les modèles distribués et couplés surface-subsurface existant, trois modèles ressortent comme particulièrement utilisés et performants dans la littérature : CATHY, ParFlow et HGS. Deux études majeures d'intercomparaison (Maxwell et al., 2014; Kollet et al., 2017) ont permis de montrer que ces trois modèles ont des performances équivalentes malgré des choix de résolution différents selon les processus. Le choix du modèle sur lequel est basé les travaux de thèse s'est appuyé en particulier sur la gestion du couplage surface-subsurface, la représentation du transport de solutés, et le caractère open source du modèle :

- Comme décrit précédemment (voir tableau 2.2), le couplage dans CATHY et ParFlow est géré de façon mécaniste (changement des conditions à l'interface ou continuité de la pression) et celui de HGS est conceptualisé avec une couche d'échange.
- HGS intègre du transport simplifié, et la version de CATHY de Weill et al. (2011) intègre le transport non réactif de solutés.
- L'argument open source du modèle est essentiel du point de vue technique compte tenu l'objectif d'implémenter des processus concernant le devenir des solutés dans un modèle existant, mais également important pour éviter l'effet "boite noire" et s'assurer de maîtriser la compréhension des processus qui sont simulés, de la façon dont les équations sont résolus numériquement et couplés entre eux. CATHY et ParFlow sont des modèles non commercialisés et ouverts en cas de collaboration avec leurs équipes de développeurs.

Pour toutes ces raisons, c'est le modèle CATHY qui a été choisi comme base du travail de cette thèse. CATHY est un outil avancé d'expérimentation dont on connaît les performances sur la simulation des flux d'eau en terme de stabilité numérique, et de conservation du bilan de masse ainsi que concernant sa capacité à reproduire des données observées ou simulées par d'autres modèles validés.

## 2.2.4 La paramétrisation des modèles et leur validation

### 2.2.4.1 Alimenter un modèle à base physique : les paramètres d'entrée

Les modèles à base physique s'appuient sur des équations physiques pour représenter les processus. Un des points faibles de cette approche est le grand nombre de paramètres d'entrée impliqués et des conditions aux limites et initiales quand les simulations sont distribuées, c'est-à-dire représentent un terrain hétérogène : caractéristiques hydrodynamiques du sol, topogra-

phie pour les modèles en 3D, état initial de l'humidité du sol et les conditions aux limites du système. Comme tous les modèles à base physique intègrent une part de conceptuel, certains paramètres d'entrées ne sont pas mesurables mais empiriques (Muleta and Nicklow, 2005). C'est le cas par exemple de la hauteur de la couche d'échange dans certaines stratégies de couplage surface-subsurface (voir la section 2.2.2.2) ou des paramètres  $\alpha$  et  $n$  des courbes de rétention de van Genuchten (1980) qui sont certes liés à la physique (ils concernent respectivement la pression d'entrée d'air et la distribution des tailles des pores), mais très difficilement mesurables en laboratoire ou sur le terrain. La qualité et la précision des paramètres d'entrée a un effet direct sur les résultats obtenus. Dans beaucoup de cas, et pour diverses raisons, il n'est pas possible de mesurer l'ensemble des paramètres d'entrée d'un modèle à base physique sur le terrain. On a vu par exemple dans le paragraphe 2.1.2 que pour des terrains hétérogènes, les mesures sur le terrain de la teneur en eau ou de la conductivité hydraulique à saturation sont délicates, coûteuses en temps et parfois imprécises. Dans ce cas, l'utilisateur s'appuiera sur des tables comme par exemple Rawls et al. (1982), ou sur d'autres mesures obtenues dans les contextes plus ou moins similaires comme par exemple pour le coefficient de rugosité de Manning. La modélisation est dépendante des mesures terrain et l'interprétation des résultats par le modélisateur doit se faire à la lumière de ses connaissances sur les données d'entrées, leur origine comme leur précision (Beven, 1989).

Outre la précision des mesures des paramètres d'entrée du modèle sur le terrain, leur spatiation est en jeu. Par exemple à l'échelle du versant, on sait que la conductivité hydraulique à saturation ou la microtopographie, sont particulièrement hétérogènes. Sachant que l'on ne pourra pas représenter exactement les caractéristiques du terrain sur l'ensemble du domaine, il est essentiel de garder à l'esprit les incertitudes induites par le changement d'échelle des paramètres spatialisés comme la conductivité à saturation. Une étude préliminaire sur le versant de Saint-Joseph, sur le bassin de la Morcille (Beaujolais, France), a été réalisée sur ce sujet au début des travaux de thèse et a fait l'objet d'un article (Gatel et al., 2016). Dans ces travaux, l'impact de l'hétérogénéité de surface et de subsurface, en particulier la conductivité à saturation et la microtopographie, sur les réponses hydrologiques d'une bande enherbée a été étudié. De nombreux scénarios avec des hétérogénéités différentes ont été testés en se basant sur les données terrain issues d'une bande enherbée instrumentée du bassin versant Morcille. Les résultats montrent que l'hétérogénéité de la conductivité à saturation joue un rôle majeur dans la capacité d'infiltration de la bande enherbée ainsi que sur le cheminement du ruissellement. Les scénarios dans lesquels la conductivité à saturation et la microtopographie sont tous les deux décrits de façon hétérogène ont mis en lumière que cette dernière influence en comparaison moins le comportement hydrologique de

la bande enherbée. Dans cette étude, il a été montré que la représentation de l'hétérogénéité par une fonction de distribution représentative du paramètre peut être une bonne hypothèse.

#### 2.2.4.2 Comment évaluer un modèle ?

La validation d'un modèle peut prendre plusieurs formes. On peut tester sa capacité à représenter des processus réels dans des contextes variés, ou sa stabilité vis à vis de la variation de ses paramètres d'entrée. Pour faciliter sa future utilisation mais aussi assurer sa cohérence, l'absence de surparamétrisation ou d'équifinalité, il est aussi utile de hiérarchiser l'importance des paramètres d'entrée. Pour Saltelli et al. (2008), la validation d'un modèle doit nécessairement passer par une confrontation de résultats de simulation à des données terrain ou à des résultats issus d'un ou plusieurs autres modèles déjà validés, ainsi que par une analyse de sensibilité.

##### a) Comparaison à des données terrain

La confrontation de résultats de simulation à des données terrain implique que l'utilisateur dispose d'une base de données de qualité en terme de variété, de quantité et de précision. À l'échelle du versant, certaines études sont basées sur des mesures terrain particulièrement variables dans l'espace et le temps et constituent donc des bases de données idéales à la validation de modèles. Par exemple Kampf and Burges (2007) a utilisé des mesures des hydrographes à l'exutoire, des niveaux piézométriques, des teneurs en eau sur un versant expérimental enherbé de 10 m de long sur 2.5 m de large, avec une pente de 5% et un sol composé à 45% de sable et 33% de graviers. D'autres études sont basées sur les données issues d'expérimentations en laboratoire, qui présentent l'avantage d'être contrôlées à tous les niveaux : conditions initiales, conditions aux limites, paramètres hydrodynamiques du sol bien connus. Les données utilisées pour l'inter-comparaison de Kollet et al. (2017) proviennent d'un terrain expérimental au nord de Toronto au Canada (Abdul and Gillham, 1989) qui a été utilisé dans plusieurs études de modélisation orientées vers l'hydrologie (VanderKwaak et al., 2000) ou le transfert de solutés (Goltz and Roberts, 1986). Il s'agit d'un site enherbé de 18 m de large et 90 m de long sillonné par un canal désherbé, encaissé d'environ 1.2 m par rapport au reste du terrain. Plus récent, le versant expérimental LEO (Landscape Evolution Observatory) (Pangle et al., 2015) est une autre base de données riche en information. Il s'agit d'un versant artificiel de 30 m de long, 11 m de large et 1 m de profondeur, avec une pente de 20 % et sur lequel il est possible de procéder à des expérimentations variées et contrôlées. Scudeler et al. (2016a) a reproduit une expérimentation de traçage d'isotopes sur LEO avec le modèle CATHY en se basant sur des données d'hydrographe à l'exutoire et de sorties de concentrations. A plus petite échelle et à un niveau complexité réduit, plusieurs expérimentations sur MASHYNS (Paris Anguela, 2004) ont permis de construire une base de données complète de traçage de solutés non réactifs et réactifs. MASHYNS est une ma-

quette de 2 m de long, 0.5 m de large et 1 m de haut remplie d'un sol homogène sablo-limoneux.

Deux critères de comparaison de séries de données observées et simulées sont classiquement utilisés dans les études hydrologiques : le coefficient de Nash Sutcliffe (NSE) (Nash and Sutcliffe, 1970), le coefficient de détermination ( $r^2$ ) et la racine des moyennes au carré (RMSE). Le NSE est très utilisé pour caractériser la performance des modèles hydrologiques (McCuen et al., 2006; Gupta and Kling, 2011). Pourtant, le NSE est particulièrement sensible aux valeurs extrêmes et aux biais et de ce fait dans certains cas, ce seul critère n'est pas suffisant pour tirer des conclusions (Jain and Sudheer, 2008; Ehret and Zehe, 2011). Le choix des critères pour évaluer des modèles hydrologiques a été discuté dans de nombreux articles (Krause et al., 2005; Schaepli and Gupta, 2007; Gupta et al., 2009) mais peu discutent de l'évaluation des modèles de transport de soluté. Ritter and Munoz-Carpena (2013) proposent de combiner l'information du NSE avec la RMSE, et de prendre en compte l'incertitude de ces critères dans l'outil d'évaluation appelé FITEVAL. L'incertitude de la NSE et de la RMSE est évaluée par bootstrapping, technique consistant à évaluer la sensibilité du critère en analysant des sous-échantillons de celui-ci. Les sous-échantillons peuvent être sélectionnés au hasard, ou, comme dans l'outil FITEVAL, par bloc pour respecter la temporalité de l'échantillon de base.

#### **b) Analyse d'incertitude et de sensibilité**

Les analyses d'incertitude et de sensibilité sont utiles pour améliorer la connaissance générale de la variabilité du modèle et de sa représentation des processus, ou d'aider ses futurs utilisateurs en identifiant les paramètres auxquels le modèle est le plus sensible (Saltelli et al., 2008). En hydrologie, le premier objectif peut être illustré par le cas de VFSMOD (Muñoz-Carpena et al., 1999, 2017) qui a récemment été soumis à une analyse de sensibilité visant à étudier les effets de la hauteur de nappe sur le transfert de solutés. L'étude a montré une forte interaction entre la conductivité hydraulique à saturation et la hauteur de la nappe dans un contexte de faible pluie tandis que dans un contexte d'événement fort et de fort ruissellement, les deux facteurs n'interagissent pas et la conductivité à saturation domine largement. Cette étude permet de confirmer que la nappe est un élément déterminant dans le fonctionnement hydrologique des bandes enherbées (Lauvernet and Muñoz Carpena, 2017). Le second objectif peut être illustré par une étude de Zhou et al. (2012) sur le modèle HYDRUS-1D appliqué à des parcelles agricoles expérimentales. L'analyse de sensibilité a identifié 8 paramètres déterminants sur les 30 testés. Enfin, on citera l'analyse de sensibilité de Muma et al. (2011) sur le modèle CATHY à l'échelle d'un micro bassin versant, qui a permis d'identifier la conductivité hydraulique à saturation comme un paramètre clé dans la détermination de l'hydrographe de sortie à l'exutoire.

Une analyse d'incertitude consiste à évaluer les effets de différentes sources d'incertitudes

sur des variables de sortie, notamment les incertitudes des paramètres d'entrée, des conditions limites, et du modèle. Dans cette étude, on s'intéressera exclusivement aux incertitudes des paramètres d'entrée, ce qui constitue déjà un premier pas conséquent dans l'évaluation d'un modèle. Les paramètres d'entrée sont soumis à une certaine variabilité, par exemple des erreurs de mesure ou le changement d'échelle des mesures du locales à la représentation de zones du domaine. En pratique il s'agit de réaliser un certain nombre de simulations en faisant varier les valeurs des paramètres d'entrée sur une certaine gamme raisonnable, déterminée selon les mesures à disposition ou la littérature, et d'analyser à quelle point les réponses de ces simulations diffèrent en s'intéressant à la distribution des résultats. Ces analyses sont souvent réalisés en même temps que des analyses globales de sensibilité puisqu'un même type échantillonnage est nécessaire.

Une analyse de sensibilité vise à repérer les principales sources d'incertitude parmi les paramètres d'entrée, et à déterminer leurs interactions, ainsi que les hiérarchiser si possible. Plusieurs niveaux de complexité d'analyse de sensibilité sont disponibles selon les objectifs de l'étude et la base de données à disposition :

- Analyse locale One-at-a-time (OAT) : il s'agit d'une analyse de sensibilité intuitive. Le but est de tester la variation d'une ou plusieurs sorties du modèle en fonction de la variation d'un seul paramètre d'entrée à la fois, les autres paramètres restant fixes. Cette approche est largement utilisée dans les études hydrologiques (Persicani, 1996; Lenhart et al., 2002) mais présente deux inconvénients majeurs : elle ne permet pas d'explorer l'étendue des valeurs d'un paramètre d'entrée, et par définition ne peut pas détecter les interactions entre les paramètres d'entrée (Saltelli et al., 2010). Ainsi, les problèmes d'équifinalité ne peuvent pas être détectés avec cette méthode.
- Méthode des effets élémentaires : cette méthode se situe entre l'analyse locale et l'analyse globale. Elle est basée sur l'étude des effets élémentaires et adaptée de Morris (1991) par Campolongo et al. (2007). Il s'agit d'une méthode de screening qui permet de distinguer les effets linéaires, et les effets non linéaires ou avec interactions entre les paramètres. Cette méthode est considérée comme un compromis efficace entre des résultats exhaustifs et un coût de calcul raisonnable. Elle a été appliquée dans de nombreuses études sur des modèles distribués (voir la revue de Herman et al. (2013)).
- Analyse globale (GSA) : cette méthode s'appuie sur la décomposition de la variance et vise à déterminer la contribution de chaque paramètre d'entrée à la variance d'une sortie du modèle, ainsi que ses interactions avec les autres paramètres. Elle permet d'obtenir des résultats exhaustifs, mais, étant basée sur des échantillonnages de type Monte Carlo, elle implique un grand nombre de simulations et donc un coût de calcul important.



Les méthodes de Morris et de Sobol (GSA) utilisées dans la thèse sont détaillées dans le chapitre 3, section 3.2.

## 2.3 Démarche

Les objectifs généraux de la thèse peuvent être classés en deux catégories. La première concerne le transfert de pesticides : il s'agit de simuler les processus de transfert, notamment des interactions surface-subsurface, et d'aboutir à un outil permettant de modéliser de façon efficace et précise les transferts jusqu'à l'échelle du versant. La seconde série d'objectifs concerne la modélisation avec CATHY : le but est de vérifier la capacité du modèle de transport réactif à reproduire des situations observées, tester sa robustesse à la variabilité des paramètres d'entrée, reconnaître les paramètres importants et leurs interactions éventuelles, quantifier l'incertitude de ses résultats.

La méthode générale de ces travaux de thèse consiste à partir du modèle hydrologique 3D à base physique, CATHY, de le faire évoluer en un modèle capable de simuler le devenir des pesticides. Ce modèle a été choisi d'abord pour sa capacité à représenter de façon complexe les interactions surface / subsurface. Le fait qu'il soit en open source et en continuelle amélioration a aussi contribué à sa sélection. On s'attachera tout au long de la thèse à garder à l'esprit, bien sûr l'ensemble des processus physiques représentés par CATHY, mais aussi les principaux processus non représentés tels que le transport préférentiel et le transport des matières en suspension dans le ruissellement de surface, et à tenir compte de cette information dans les analyses et interprétations des résultats.

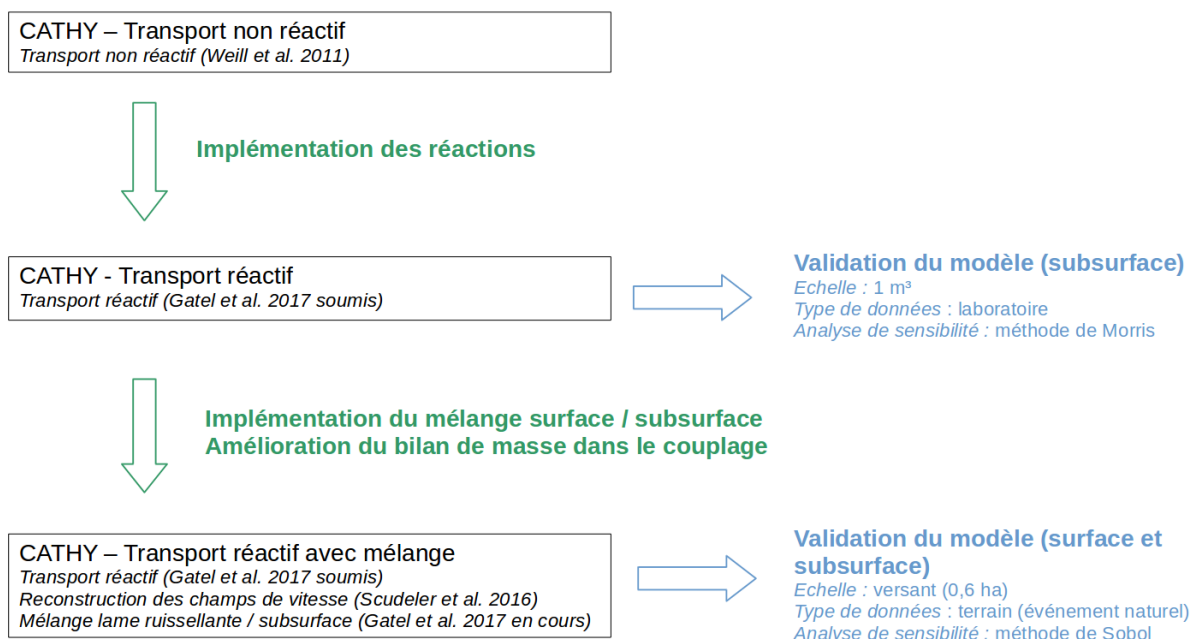


Figure 2.8 – Démarche globale d'implémentation et de validation sur le modèle de transport réactif CATHY.

Les améliorations et additions de processus dans le code CATHY ont été implémentées en deux vagues (figure 2.8). La première concerne la subsurface, avec l'ajout des réactions d'adsorption et de dégradation au code. Ces travaux ont mené à une phase de validation de la partie subsurface. Il s'agit de s'appuyer sur des données de laboratoire issues d'expérimentations entièrement contrôlées, et à petite échelle. Les résultats de simulations ont été confrontés aux données, et une analyse de sensibilité de type Morris a été menée. Suite à cette validation satisfaisante, la deuxième vague d'implémentation sur le code a été lancée : amélioration du bilan de masse du couplage, et ajout d'une option de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol. La nouvelle version a été cette fois testée et validée sur des données terrain, plus complexes mais présentant l'avantage de représenter les processus réels. Les sorties étudiées permettent de se concentrer particulièrement sur les performances du couplage surface/subsurface et du module de mélange. Cette fois, une analyse de sensibilité globale a été menée et a permis de mettre en lumière de façon qualitative l'influence des différents paramètres sur les sorties choisies, ainsi que leurs interactions.

La stratégie de développement du modèle est présentée dans le chapitre 3, avec des détails sur ses versions consécutives et les explications des travaux réalisés sur le code. Les validations des versions successives sont présentées respectivement dans les chapitres 5 et 6. Ces deux chapitres font l'objet d'articles, dont un a déjà été soumis.



## Chapitre 3

# Matériel et méthodes

L'objectif de ce chapitre est la présentation des outils et méthodes principaux utilisés dans cette thèse. Le fonctionnement du modèle y est expliqué en détaillant les deux parties subsurface et surface ainsi que leur couplage. La validation des différentes versions du modèle s'appuie notamment sur deux méthodes différentes d'analyse de données : la méthode des effets élémentaires dit de Morris et une méthode globale dite de Sobol. Enfin, les deux jeux de données utilisés dans les chapitres de validation 5 et 6 sont présentés. Il s'agit de données issues d'une expérimentation en laboratoire sur une maquette de sol, ainsi que de données issues de l'instrumentation d'un versant viticole dans le beaujolais.

### 3.1 Outil de modélisation : le code CATHY

Le principal outil de modélisation utilisé durant cette thèse est le modèle CATHY (CATCHment HYdrology) (Paniconi and Putti, 1994; Camporese et al., 2010). Il s'agit d'un modèle à base physique capable de simuler de façon couplée surface-subsurface les écoulements d'eau dans des milieux saturés ou insaturés. CATHY est un modèle de recherche codé en FORTRAN 90, dont le développement a commencé à la fin des années 80 et continue depuis. En particulier les équipes de l'université de Padova (Italie) et de l'INRS de Québec (Canada) contribuent à l'approfondissement et l'amélioration du code. Les récentes études d'intercomparaison des modèles intégrés surface-subsurface (Maxwell et al., 2014; Kollet et al., 2017) ont mis en valeur la robustesse de CATHY face aux autres modèles de même type (voir section 2.2.3.2). D'autres études, telles que les travaux de Shen and Phanikumar (2010), Sulis et al. (2010) ou Guay et al. (2013), confrontent respectivement CATHY à ParFlow et PAWS, CATHY à Parflow, et CATHY à HELP (Schroeder et al., 1994) combiné à FEFLOW (Diersch, 1998). Elles sont tout aussi ambitieuses que les grandes intercomparaisons en terme de diversité des échelles concernées (du versant virtuel au bassin versant réel) et des variables de sorties comparées (cumul de flux à l'exutoire, profils de satu-

ration, intersection entre la nappe et la zone insaturée, différences de flux selon la discrétisation verticale) (Sebben et al., 2013). Les applications du modèle CATHY sur des données terrain ont aussi permis de montrer la cohérence de ses résultats de l'échelle du versant (Scudeler et al., 2016a) à l'échelle du bassin versant (Sulis et al., 2011). D'un point de vue plus fonctionnel, Dagès et al. (2012) et Fiorentini et al. (2015) ont travaillé sur une meilleure compréhension des erreurs de bilan de masse respectivement dans le couplage surface-subsurface et dans les calculs de flux en surface. Carlotta Scudeler a implémenté dans le code un module de correction des champs de vitesse (voir section 2.2.2.1) permettant de corriger des erreurs de bilans de masse issues de la résolution des équations de Richards (Scudeler et al., 2016b). Plus généralement, le modèle CATHY est en évolution, et ce dans plusieurs domaines. En 2011, le transport de soluté non réactif a été implémenté dans le code CATHY (Weill et al., 2011), les équations correspondantes sont présentées dans la section 3.1.5 et les détails d'implémentation seront discutés dans le chapitre 4. Autre exemple, des méthodes d'assimilation de données ont été ajoutées au modèle (Paniconi et al., 2003; Camporese et al., 2010; Pasetto et al., 2012) et testées à l'échelle du bassin versant (Trudel et al., 2014).

L'objectif de cette section est de décrire le modèle d'écoulement CATHY ainsi que la version de CATHY avec transport de soluté non réactif (Weill et al., 2011), c'est-à-dire l'outil de base à partir duquel le travail de la thèse repose. Les stratégies d'implémentation qui seront décrites dans ce chapitre sont déterminantes dans la construction du modèle de transport réactif décrit dans le chapitre suivant.

### 3.1.1 Les équations de base du modèle d'écoulement

Le modèle d'écoulement est décrit par Camporese et al. (2010) : les écoulements sont représentés en subsurface en trois dimensions par l'équation de Richards (équation 3.1) et en surface l'équation de l'onde diffusive (une simplification des équations de Navier-Stokes) est résolue en 1D (équation 3.2) :

$$S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} + \phi \frac{\partial S_w}{\partial t} = \nabla [K_s K_r (\nabla \psi + \eta_z)] + q_{ss} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + c_k \frac{\partial Q}{\partial s} = D_h \frac{\partial^2 Q}{\partial s^2} + c_k q_s(h, \psi) \quad (3.2)$$

avec  $S_w$  [-] est la saturation ( $S_w = \frac{\theta}{\phi}$ ),  $\theta$  [-] est la teneur en eau volumique,  $\phi$  [-] est la teneur en eau à saturation ou la porosité,  $S_s$  [ $L^{-1}$ ] est le coefficient de stockage spécifique,  $\psi$  [L] est la pression,  $t$  [T] est le temps,  $\nabla$  [ $L^{-1}$ ] est l'opérateur de gradient,  $K_s$  [ $L \cdot T^{-1}$ ] est la conductivité hydraulique à saturation,  $K_r$  [-] est la conductivité relative,  $\eta_z = (0, 0, 1)$ ,  $z$  [L] est la coordonnée

verticale dirigée vers le haut,  $q_{ss}$  [ $L^3 \cdot L^{-3} T^{-1}$ ] est un terme source (positif) ou puits (négatif) qui représente les flux échangés entre la surface et la subsurface,  $Q$  [ $L^3 \cdot T^{-1}$ ] est le débit (flux volumétrique) le long du réseau d'écoulement de surface,  $s$  [ $L$ ] est la direction pour chaque segment du réseau de ruissellement,  $c_k$  [ $L \cdot T^{-1}$ ] est la vitesse de l'onde cinématique,  $D_h$  [ $L^2 \cdot T^{-1}$ ] est la diffusivité hydraulique,  $h$  [ $L$ ] est la hauteur d'eau en surface (variable d'état continue avec la pression en subsurface) et  $q_s$  [ $L^3 \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$ ] est un terme source (positif) ou puits (négatif) qui représente les flux échangés de la subsurface vers la surface. On note que les termes d'échange  $q_{ss}$  et  $q_s$  sont exprimés dans une unité propre à conserver l'homogénéité des équations. Leur équivalence en hauteur de ponding ou flux pour le couplage sont assurés grâce aux données de durée du pas de temps, de géométrie du maillage.

L'équation de Richards 3D est discrétisée dans l'espace par la méthode Galerkin des éléments finis et dans le temps avec un schéma de différences finies pondérées. L'équation est linéarisée par un schéma itératif de Picard ou Newton (Paniconi and Putti, 1994). La solution de l'équation d'onde diffusive est obtenue en utilisant la méthode de Muskingum-Cunge explicite (Orlandini and Rosso, 1996).

Les conditions aux limites peuvent être appliquées en terme de flux (condition de Neuman) ou de pression (condition de Dirichlet) sur toutes les faces du domaine et peuvent être variables dans le temps. Des surfaces de suintement peuvent aussi être représentées sur les faces verticales : une pression hydrostatique est fixée du point le plus bas de la surface de suintement au niveau de pression atmosphérique, et une condition de Neuman à flux nul est appliquée sur tous les nœuds au dessus de ce niveau.

### 3.1.2 Construction du maillage

Les équations (3.1) et (3.2) sont résolues sur un maillage régulier. Il est construit en surface dans une étape de preprocessing à partir d'un modèle numérique de terrain (MNT) fourni par l'utilisateur. Dans le MNT, l'élévation des points doit être fournie de manière régulière et correspondra à l'élévation au centre de chaque maille. Le maillage de surface définit des triangles rectangles à partir des cellules rectangulaires. Le maillage de surface est répliqué verticalement pour former un maillage en 3D, les objets de base du maillage 3D étant donc des tétraèdres (voir figure 3.1).

Les couches peuvent varier d'épaisseur et les valeurs différentes des principales propriétés hydrodynamiques (les conductivités à saturation dans les trois directions, le coefficient de stockage spécifique, la porosité et les trois paramètres de Van Genuchten) peuvent être assignés à chaque nœud.

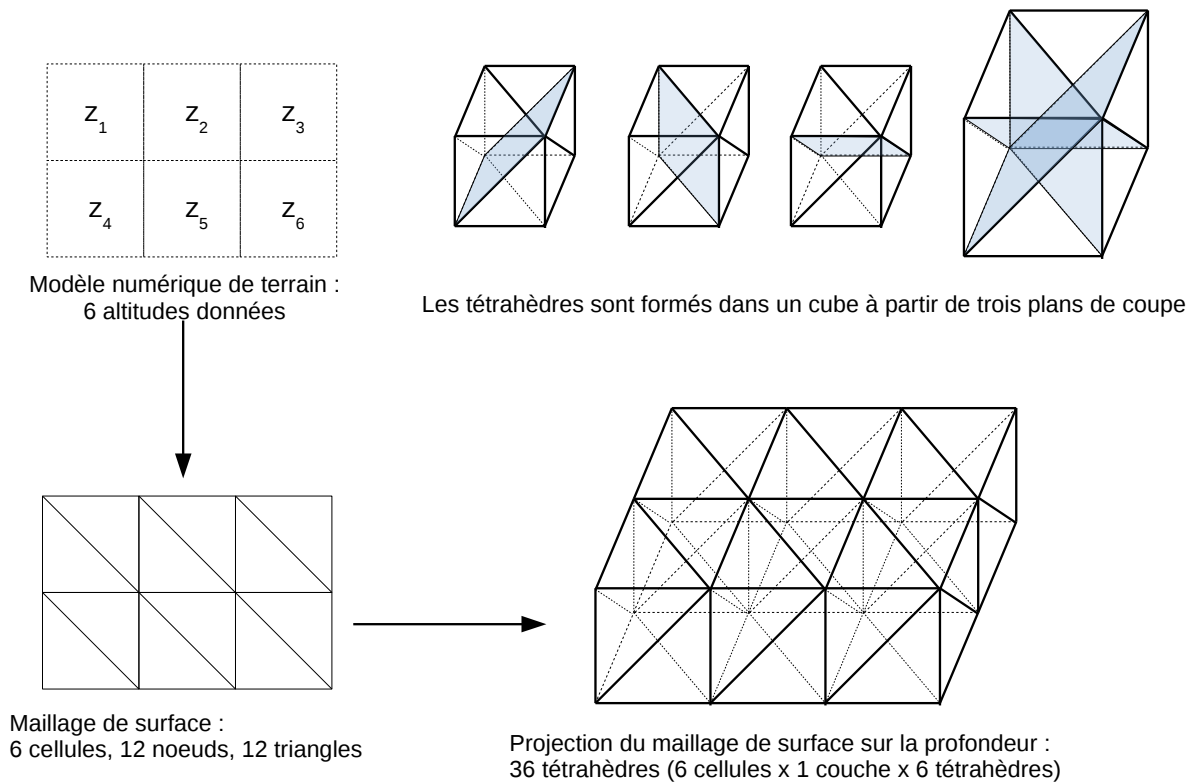


Figure 3.1 – Schéma de la construction du maillage en 3D à partir d'un MNT dans le preprocessing de CATHY.

### 3.1.3 Direction des écoulements pour le ruissellement de surface

Lors du preprocessing et de la construction du maillage de surface à partir du MNT fourni par l'utilisateur, une matrice de directions des écoulements est établie. Selon les paramètres de ruissellement en entrée, les cellules du domaine sont assignées à un écoulement de type ruissellement de versant ou de type canal / ruisseau (Orlandini et al., 2003). Dans la thèse, on s'intéresse à l'échelle de la parcelle et du versant, toutes les cellules du domaine étudié seront du type ruissellement.

Sur chaque cellule, la direction théorique de drainage est calculée selon la topographie et les directions cardinales et diagonales les plus proches de la direction théorique sont retenues. Un coefficient de pondération est attribué à chacune de ces deux directions selon la méthode D8-LTD (least transversal deviation) en fonction des deux longueurs des déviations transversales entre les directions cardinale et diagonale et la direction théorique, soit sur la figure 3.2 les longueurs  $\delta_1$  et  $\delta_2$ . L'onde diffusive est calculée selon les deux directions (cardinale et diagonale) et la masse d'eau présente sur la cellule de départ est partagée selon le coefficient de pondération entre les

$\delta 1$  : déviation transversale entre la direction **cardinale** et la direction théorique

$\delta 2$  : déviation transversale entre la direction **diagonale** et la direction théorique

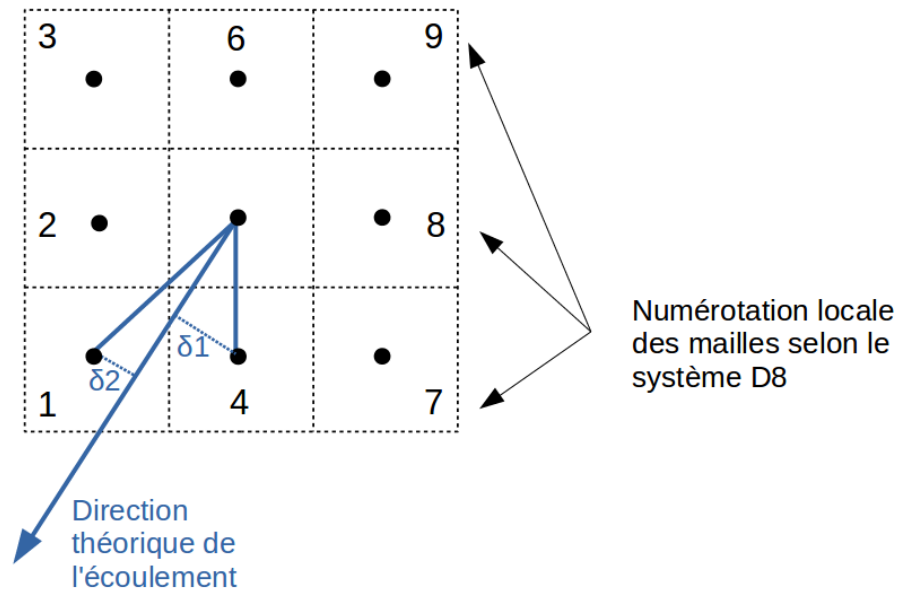


Figure 3.2 – Schéma explicatif de la méthode D8-LTD. Le coefficient de pondération entre les directions cardinale et diagonale est déduit du rapport des longueurs  $\delta 1$  et  $\delta 2$ .

deux cellules d'arrivée. Un point d'exutoire est déduit des champs de direction, ce point doit être unique pour l'ensemble du domaine.

### 3.1.4 Couplage surface-subsurface des écoulements d'eau

Le couplage entre la surface et la subsurface dans CATHY est basé sur un basculement des conditions à l'interface. À chaque pas de temps, chaque cellule en surface est soit en situation de ponding (pression supérieure à 0 à la surface), soit saturée, soit non saturée. Un seuil de ponding minimal déclenchant le routage de la surface permet de distinguer les cellules en ponding et les cellules saturées. Selon la situation de la cellule ainsi que le bilan du forçage atmosphérique (pluie ou évapotranspiration) et de l'infiltration ou de l'exfiltration, des conditions limites en Dirichlet (charge) ou en Neuman (flux) sont appliquées. Le couplage dans les cas où la surface est en situation de ponding est présenté sur la figure 3.3. Sur cette figure, la partie haute représente la situation avant couplage : les informations du forçage atmosphérique viennent des paramètres d'entrée choisis par l'utilisateur, celles de la surface sont issues du calcul du transport en surface et l'information du potentiel d'infiltration est calculée par le module subsurface. En bas de la figure, un tableau résume les résultats du couplage en terme de ruissellement, de quantité d'eau en surface, infiltrée et évaporée le cas échéant ainsi que les conditions s'appliquant à l'interface.



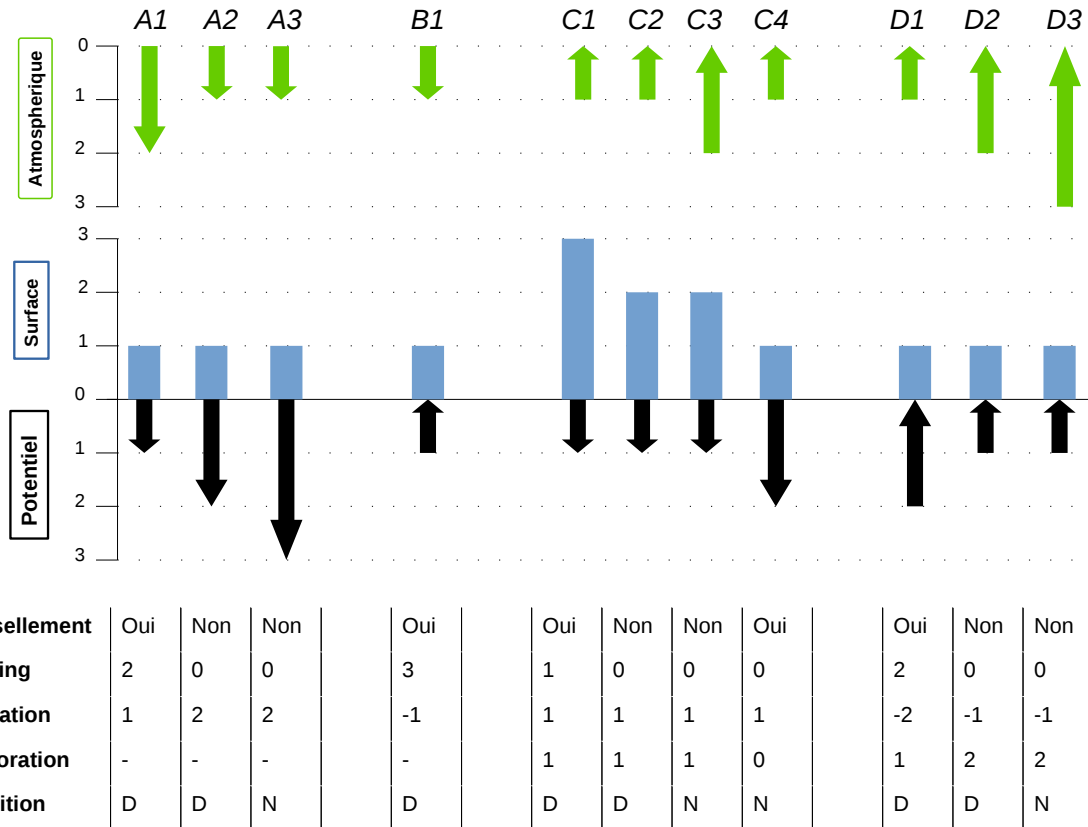


Figure 3.3 – Illustration du fonctionnement du couplage dans les cas où la cellule est en situation de ponding. D : condition de Dirichlet et N : condition de Neuman. Les valeurs sont exprimées en unité neutre.

Quatre groupes de scénarios A, B, C et D se distinguent en fonction du sens du forçage atmosphérique (pluie ou évaporation) et de l'état de la subsurface (potentiel d'infiltration ou d'exfiltration). A chaque fois, le bilan est réalisé entre les trois informations dont on dispose (atmosphère, surface, subsurface). Par exemple, dans le scénario A2, la pluie ajoute une unité au ponding déjà présent, et comme le potentiel d'infiltration est de deux unités, l'ensemble de l'eau s'infiltré. Il n'y aura donc pas de ruissellement au pas de temps suivant, mais la subsurface reste saturée, et la cellule de surface est soumise à une condition de Dirichlet. L'exemple du scénario C4 est légèrement plus complexe. Ici le ponding ne peut pas "comblé" l'évaporation et le potentiel d'infiltration à la fois. Dans ce genre de situation, une priorité est donnée à la subsurface : dans le scénario C4, l'eau en surface s'infiltré et il n'y a pas d'évaporation. La même logique est adoptée si la surface n'est pas en situation de ponding.

### 3.1.5 CATHY-FT : un modèle de transport de solutés non réactifs

Les informations présentées dans cette section sont en grande majorité tirées de l'article de Weill et al. (2011) décrivant en détail le modèle de transport de solutés non réactifs CATHY-FT.

#### 3.1.5.1 Les équations de transport

CATHY-FT est une version du modèle intégrant un module de transport non réactif. La partie de CATHY qui concerne le calcul du flux d'eau est basée sur la version présentée par Camporese et al. (2010) (voir section précédente). Le transport est résolu en subsurface à partir de l'équation classique d'advection-dispersion en 3D (équation 3.3) et en surface à partir de l'équation 1D d'advection-diffusion (équation 3.4) :

$$\frac{\partial \theta c}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (-\vec{U}c + D\vec{\nabla}c) + q_{tss} \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial Q_m}{\partial t} + c_t \frac{\partial Q_m}{\partial s} = D_c \frac{\partial^2 Q_m}{\partial s^2} + c_t q_{ts} \quad (3.4)$$

avec  $\theta$  [-] est la teneur en eau volumique,  $c$  [M.L<sup>-3</sup>] est la concentration de soluté en subsurface,  $\vec{U}$  [L.T<sup>-1</sup>] est le vecteur de la vitesse de Darcy,  $D$  [L<sup>2</sup>.T<sup>-1</sup>] est le tenseur correspondant à la dispersion mécanique et à la diffusion moléculaire,  $q_{tss}$  [M.L<sup>3</sup>.T<sup>-1</sup>] est le flux massique de soluté source (positive) ou puits (négative),  $Q_m$  [M.T<sup>-1</sup>] est le flux massique de soluté en surface,  $c_t$  [L.T<sup>-1</sup>] est la vitesse cinétique des solutés,  $D_c$  [L<sup>2</sup>.T<sup>-1</sup>] est la diffusivité de surface des solutés, et  $q_{ts}$  [M.L<sup>-1</sup>.T<sup>-1</sup>] est le terme massique d'échange de la subsurface vers la surface.  $q_{ts}$  a la dimension d'un flux massique par unité de longueur.

La résolution de l'équation d'advection-dispersion peut se révéler complexe, en particulier parce qu'elle prend une forme parabolique dans les cas où la dispersion domine et une forme hyperbolique dans ceux où l'advection domine (Rubio et al., 2008). Ici, l'advection est calculée à partir de la méthode des volumes finis, tandis que la diffusion et la dispersion sont basés sur les éléments finis (Mazzia and Putti, 2005; Weill et al., 2011). Le choix de séparer les opérateurs a été motivé par l'amélioration des bilans de masse des solutés, la méthode des volumes finis étant conservative. Des pas de temps advectifs sont définis en fonction de la condition de CFL (voir section 2.2.2.1). Les conditions aux limites pour le transport peuvent être imposées sous forme de concentration (Dirichlet) et fixées sur la partie advective du calcul ou de flux (Neumann) et imposées sur la partie diffusive.

### 3.1.5.2 Le couplage surface-subsurface

Le couplage du transport s'appuie sur les termes  $q_{tss}$  [ $M.L^3.T^{-1}$ ] et  $q_{ts}$  [ $M.L^{-1}.T^{-1}$ ] qui représentent les échanges entre la surface et la subsurface. Comme pour l'eau, la conversion de ces termes en flux massique s'appuie sur la durée du pas de temps et les données de géométrie du maillage. Pour gérer le couplage à l'interface entre la surface et la subsurface, des conditions de type Cauchy sont utilisées. La condition totale de Cauchy intègre une composante advective et une composante diffusive et revient à imposer à la fois une condition de Dirichlet et une condition de Neuman. Une condition de Cauchy totale appliquée sur une cellule de surface d'aire  $A[L^2]$  est imposée sous la forme :

$$(D\vec{\nabla}c - \vec{U}c) \cdot \vec{n} = \frac{q_{cauchy}}{A} \quad (3.5)$$

avec  $\vec{n}$  la normale du vecteur unité et  $q_{cauchy}$  [ $MT^{-1}$ ] le flux imposé. Le couplage du transport est analogue au couplage des écoulements : les conditions à l'interface dépendent du bilan entre les conditions de ponding, de forçage atmosphérique et de la situation en subsurface. A noter, dans les cas d'évaporation, seule l'eau s'évapore, et le flux massique atmosphérique est considéré comme nul. Les conditions de Cauchy ont certes une composante dispersive, mais ne sont pas capables de rendre compte des échanges purement dispersifs comme par exemple la remobilisation des solutés de subsurface dans la lame ruissellante.

### 3.1.5.3 Revue des applications effectuées sur CATHY-FT

Les premiers tests de CATHY-FT (Weill et al., 2011) sont des expérimentations numériques. Le domaine d'expérience est un versant très simplifié de 10 m de long, de largeur et 10 m de profondeur au point le plus bas, c'est-à-dire à l'exutoire, dans un des quatre coins. La pente est forte dans la direction  $x$  (10%) et faible dans la direction  $y$  (1%). Les cellules en surface mesurent 0.2 m x 0.2 m et, avec 32 couches de profondeur variées, le domaine est composé de plus de 500 000 tétraèdres. Les paramètres du sol sont homogènes et isotropiques. Des conditions de flux nul sont imposées sur toutes les faces. Trois tests ont été menés dans ces conditions : drainage libre, ruissellement par excès d'infiltration, et ruissellement par saturation. Les sorties à l'exutoire ont été suivies, ainsi que la pression et la concentration dans une coupe du domaine pour la troisième simulation. Les résultats de ces expérimentations virtuelles sont correctes en terme de conservation de la masse. Cependant, ces bons résultats sont à mettre en perspective avec le fait qu'ils n'ont pas été comparés à des données ni à des simulations d'autres modèles semblables. De plus, le domaine étudié est très simplifié et maillé finement.

Les travaux de Scudeler et al. (2016a) se sont appuyés sur CATHY-FT. Il s'agit d'une applica-

tion du modèle sur un versant expérimental de 30 m de long, 10 m de large et 1 m de profondeur, avec une pente de 17 %. Des expériences de traçage isotropiques ont été reproduits avec CATHY-FT, avec un domaine maillé qui comporte plus de 230 000 tétraèdres (résolution de 0.5 m x 0.5 m à la surface et 30 couches numériques). Cette fois, les résultats ont été corrects pour les écoulements d'eau, mais plus mitigés pour le transport des solutés. Il a été notamment constaté que le paramètre de dispersivité avait un impact important sur les résultats, et que les résultats étaient plus proche des données observées lorsque le paramètre de dispersivité était fixé comme faible.

### 3.2 Analyse de sensibilité : les méthodes de Morris et de Sobol

Une analyse de sensibilité correspond à l'étude de l'influence de paramètres d'entrée d'un modèle numérique sur la variabilité de sa ou ses variables de sortie. Lors de la mise en place d'une analyse de sensibilité, il faut d'abord choisir quelles variables de sortie seront analysées. Ensuite, une méthode est choisie en fonction des objectifs de l'étude et du modèle étudié. On distingue trois grands types de méthodes : les analyses locales One-at-a-time (OAT), les analyses de cribale (screening), et les analyses globales (GSA) généralement fondées sur la décomposition de la variance (voir la section 2.2.4.2 b)). Les OAT sont des analyses simples mais qui ne permettent pas de détecter les interactions entre les paramètres. Les analyse de criblage fondés sur les effets élémentaires permettent de reconnaître la présence d'interactions sans les quantifier. Les analyses globales sont plus complexes à mettre en place et demandent un coût de calcul élevé, mais permettent d'obtenir des résultats quantifiés sur l'influence d'un paramètre et ses interactions. De plus, elles permettent d'évaluer le degré d'incertitude des prédictions du modèle par propagation de l'incertitude des paramètres d'entrée sur un large échantillon. Pour les analyses de criblage et les analyses globales, il faut ensuite définir le champ de variation des paramètres d'entrée à tester. Il s'agit de définir pour chacun une fonction de densité de probabilité représentant au mieux sa variabilité probable dans le contexte choisi, notamment les possibles erreurs ou biais : incertitude de mesure, hétérogénéité du paramètre sur le domaine, etc. Les choix des types de distribution et des paramètres associés influencent l'analyse de sensibilité et les interprétations qui en découlent. C'est pourquoi le choix des fonctions de densité de probabilité doit se baser autant que possible sur les données disponibles, l'expertise et la littérature.

L'analyse de sensibilité est valable dans un contexte donné et pour les variables de sortie définies. Il existe un grand nombre de méthodes différentes (Faivre et al., 2013). On décrit dans cette section de façon détaillée deux méthodes d'analyse de sensibilité qui seront appliquées au modèle CATHY dans différents contextes : la méthode de criblage des effets élémentaires et la méthode de Sobol.

### 3.2.1 La méthode des effets élémentaires : la méthode de Morris

La stratégie développée dans la méthode des effets élémentaires de Campolongo et al. (2007) est fondée sur Morris (1991), et se situe à la convergence des stratégies des analyses de sensibilité locales et globales. C'est un méthode de criblage qui consiste à de répéter  $r$  fois une analyse OAT en faisant varier simultanément les paramètres dans l'espace. Considérant  $k$  paramètres d'entrée, la méthode consiste à générer  $r$  trajectoires d'exploration de l'hypercube de dimensions  $k$  de la façon la plus optimale possible (voir figure 3.4). Les trajectoires sont générées pour  $n$  niveaux, c'est-à-dire par section régulière de l'hypercube dans toutes les dimensions (par exemple 4 niveaux correspondent à la division de chaque densité de probabilité en quartiles). Les trajectoires dépendent également d'une discrétisation dans l'espace  $\Delta$ . Chaque trajectoire est composée de  $k + 1$  points représentant chacun un jeu de paramètres qui diffèrent les uns des autres d'un pas  $\Delta$  pour un paramètre seulement. Par exemple sur la figure 3.4, l'hypercube de dimension  $p=3$  est divisé en  $n=4$  niveaux dans chaque dimension. Les jeux de paramètres  $X_1$  et  $X_2$  diffèrent de  $\Delta$  pour le paramètre 1 uniquement et les jeux de paramètres  $X_2$  et  $X_3$  diffèrent de  $\Delta$  pour le paramètre 2 seulement. En pratique  $\Delta$  est souvent défini par  $\Delta = \frac{n}{2(n-1)}$  et  $r$  doit être supérieur à 10 (Campolongo et al., 2007). Le nombre total de combinaisons  $N$  est égal à  $r.(k + 1)$ .

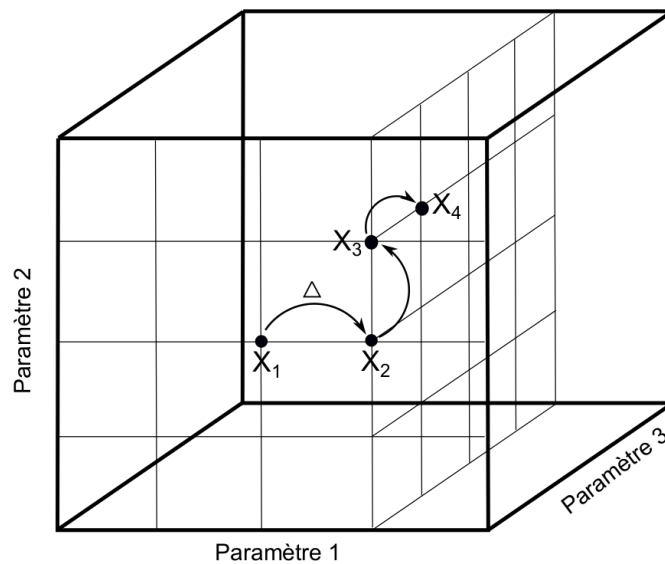


Figure 3.4 – Exemple d'échantillonnage d'une trajectoire pour trois paramètres.  $X_1$  correspond au jeu de paramètres initial et  $\Delta$  au pas d'échantillonnage (Dairon, 2017).

Après avoir appliqué le modèle sur les  $N$  jeux de paramètres, on calcule ce qu'on appelle les effets élémentaires  $EE$  pour chaque paramètre. L'effet élémentaire du  $i$ ème paramètre d'entrée pour une trajectoire est égal à :

$$EE_i = \frac{Y(P_1, P_2, \dots, P_{i-1}, P_i + \Delta, \dots, P_k) - Y(P_1, P_2, \dots, P_k)}{\Delta} \quad (3.6)$$

avec  $Y$  la valeur de la sortie et  $(P_1, P_2, \dots, P_k)$  un jeu de paramètres. La moyenne et l'écart type de chaque effet élémentaire sont calculés pour chaque sortie étudiée et leur valeurs sont présentées sur un graphe de Morris, comme illustré dans la figure 3.5) : la moyenne absolue  $\mu^*$  sur l'axe des abscisses représente l'influence d'un paramètre sur la variable de sortie, et l'écart type  $\sigma$  sur l'axe des ordonnées met en valeur les effets non linéaires ou les interactions avec les autres paramètres. Par exemple sur la figure 3.5, le groupe P2 a des effets linéaires non négligeables, le groupe P3 a à la fois des effets linéaires non négligeables et des effets non linéaires ou interactions avec les autres paramètres d'entrée et le groupe de paramètres P1 a peu d'influence et ses effets peuvent être négligés.

Avec cette méthode, les conclusions doivent rester qualitatives et cette façon de présenter les résultats y incite. Les indices de Morris  $\mu^*$  et  $\sigma$  sont considérés comme une bonne approximation des indices de premier ordre et totaux respectivement (Saltelli et al., 2004; Campolongo et al., 2007). Les comparaisons quantitatives des importances de chaque paramètre sont néanmoins à manipuler avec une grande prudence, puisqu'elles sont toute de même fortement dépendantes du nombre de trajectoires et de niveaux choisis (Yang, 2011). La méthode est pertinente même pour un nombre réduit de trajectoires, et sert donc souvent de première étape d'analyse pour sélectionner les paramètres les plus influents avant de les tester sur une analyse de sensibilité globale, plus coûteuse en temps de calcul mais dont on pourra tirer des conclusions quantitatives.

### 3.2.2 Analyse de sensibilité globale : la méthode de Sobol

#### 3.2.2.1 Principe général de la décomposition de la variance

Dans les méthodes globales de type Sobol, on s'intéresse à la façon dont les différentes entrées contribuent à la variance des résultats d'un modèle. Il s'agit de méthodes dites basées sur la décomposition de la variance, le principe étant de décomposer la variance en parts attribuées à l'effet des différents paramètres d'entrée. On considère un jeu de  $k$  paramètres  $P(P_1, P_2, \dots, P_{k-1}, P_k)$  appliqués en entrée d'un modèle qui produit une réponse  $Y$ . On cherche à quantifier comment les différents paramètres d'entrée contribuent à la variance de la sortie. On peut décomposer la variance de  $Y$  comme la somme des effets principaux des  $K$  paramètres sur  $Y$  et la somme de leurs interactions avec les autres paramètres :

$$\mathbb{V}(Y) = \mathbb{V}_1 + \dots + \mathbb{V}_k + \mathbb{V}_{\{1,2\}} + \dots + \mathbb{V}_{\{k-1,k\}} + \mathbb{V}_{\{1,2,3\}} + \dots + \dots + \mathbb{V}_{\{1,\dots,k\}} \quad (3.7)$$

avec  $\mathbb{V}_i = \mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_i)]$  la part de variance attribuée à l'effet principal de  $P_i$  et  $\mathbb{V}_{\{i,j\}}$  la part de variance

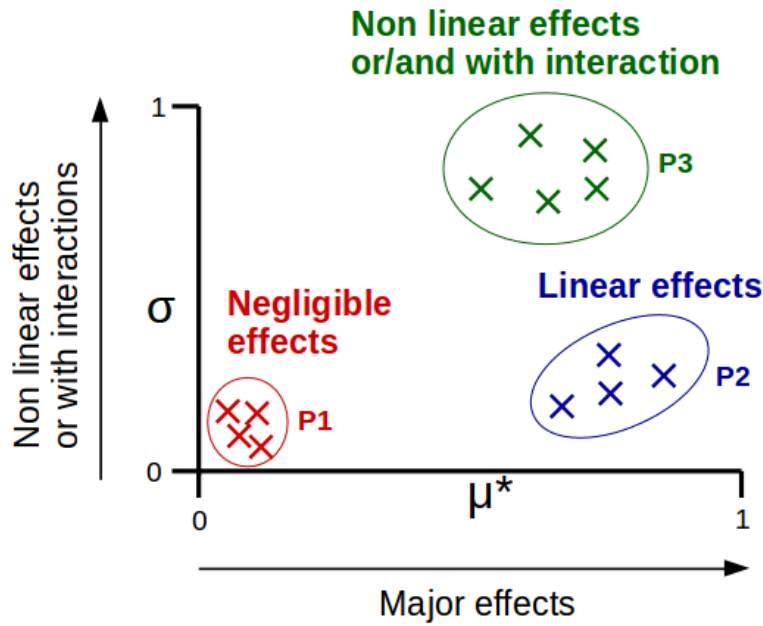


Figure 3.5 – Exemple d’interprétation d’un graphe de Morris (adapté de Saltelli et al. (2004)).  $\mu^*$  est la moyenne absolue et  $\sigma$  est l’écart type des effets élémentaires.

attribuée à l’interaction entre les entrées ( $P_i, P_j$ ). On voit ici que deux paramètres interagissent si leur effet cumulé sur la variance de  $Y$  n’est pas la somme de leurs effets individuels sur la variance de  $Y$ . La variance de  $Y$  peut s’écrire comme la somme des effets directs  $\mathbb{V}(\mathbb{E}(Y|P_i))$  et des résidus, c’est à dire les interactions  $\mathbb{E}(\mathbb{V}(Y|P_i))$  (équation 3.8) :

$$\mathbb{V}(Y) = \mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_i)] + \mathbb{E}[\mathbb{V}(Y|P_i)] \quad (3.8)$$

On peut définir un index  $S_i$  qui correspondra à la sensibilité de premier ordre de  $Y$  par rapport au paramètre d’entrée  $P_i$  :

$$S_i = \frac{\mathbb{V}_i}{\mathbb{V}(Y)} = \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_i)]}{\mathbb{V}(Y)} \quad (3.9)$$

avec  $\mathbb{V}(Y)$  la variance totale de la variable de sortie  $Y$ ,  $P_i$  le  $i$ ème paramètre.  $\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_i)]$  représente la variance de  $Y$  engendré par le paramètre  $P_i$ . De la même manière, on peut définir  $\mathbb{V}(Y)$  en fonction de tous les paramètres sauf  $P_i$  et définir l’indice total du paramètre  $P_i$  qui prend en compte, non pas seulement les effets directs de  $P_i$  (sensibilité du premier ordre) mais également l’effet de toutes les interactions entre  $P_i$  et les autres paramètres (équation 3.10 et 3.11) :

$$S_{Ti} = S_i + \sum S_{i,j} + \dots + \sum S_{1,\dots,k} \quad (3.10)$$

$$S_{Ti} = 1 - \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_{\sim i})]}{\mathbb{V}(Y)} \quad (3.11)$$

avec  $P_{\sim i} = (P_1, P_2, \dots, P_{i-1}, P_{i+1}, \dots, P_k)$ . Si  $S_{Ti}$  est nul, cela signifie que l'ensemble de la variance de  $Y$  est défini par tout ce qui n'est pas  $P_i$  ou en interaction avec  $P_i$ , donc que le paramètre  $P_i$  peut prendre n'importe quelle valeur dans son domaine défini sans affecter la variance de la variable  $Y$  (Sobol et al., 2007).

Les indices d'ordre 2 exprime une sensibilité due à  $P_i$  et  $P_j$  mais qui n'est pas prise en compte dans l'effet direct de ces deux paramètres :

$$S_{ij} = \frac{\mathbb{V}_{ij}}{\mathbb{V}(Y)} \quad (3.12)$$

### 3.2.2.2 La méthode de Sobol

La méthode de Sobol (Sobol, 1993) est basée sur l'analyse de la variance présentée dans le paragraphe précédent. L'échantillonnage de cette méthode est dit apparié intensif, car il s'appuie sur deux échantillons indépendants qu'il combine par sous-ensemble. Ainsi, la première étape consiste à générer par tirage aléatoire de Monte-Carlo par exemple deux matrices de dimension  $(M, k)$  :

$$A = \begin{bmatrix} P_{A1}^{(1)} & P_{A2}^{(1)} & \dots & P_{Ak}^{(1)} \\ P_{A1}^{(2)} & P_{A2}^{(2)} & \dots & P_{Ak}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{A1}^{(M-1)} & P_{A2}^{(M-1)} & \dots & P_{Ak}^{(M-1)} \\ P_{A1}^{(M)} & P_{A2}^{(M)} & \dots & P_{Ak}^{(M)} \end{bmatrix} \quad \text{et} \quad B = \begin{bmatrix} P_{B1}^{(1)} & P_{B2}^{(1)} & \dots & P_{Bk}^{(1)} \\ P_{B1}^{(2)} & P_{B2}^{(2)} & \dots & P_{Bk}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{B1}^{(M-1)} & P_{B2}^{(M-1)} & \dots & P_{Bk}^{(M-1)} \\ P_{B1}^{(M)} & P_{B2}^{(M)} & \dots & P_{Bk}^{(M)} \end{bmatrix} \quad (3.13)$$

Chaque colonne  $i$  représente un échantillon de  $M$  valeurs du paramètre  $P_i$  choisies. Dans un deuxième temps, pour chaque paramètre  $P_i$ , on construit la matrice  $C_i$  égale à la matrice B, à l'exception de la colonne  $i$  qui, elle, provient de la matrice A :

$$C_i = \begin{bmatrix} P_{B1}^{(1)} & P_{B2}^{(1)} & \dots & \mathbf{P}_{Ai}^{(1)} & \dots & P_{Bk}^{(1)} \\ P_{B1}^{(2)} & P_{B2}^{(2)} & \dots & \mathbf{P}_{Ai}^{(2)} & \dots & P_{Bk}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ P_{B1}^{(M-1)} & P_{B2}^{(M-1)} & \dots & \mathbf{P}_{Ai}^{(M-1)} & \dots & P_{Bk}^{(M-1)} \\ P_{B1}^{(M)} & P_{B2}^{(M)} & \dots & \mathbf{P}_{Ai}^{(M)} & \dots & P_{Bk}^{(M)} \end{bmatrix} \quad (3.14)$$

Après avoir appliqué le modèle  $f$  à ces trois matrices on obtient les réponses suivantes sur la



sortie  $y$  :

$$y_A = f(A) \quad y_B = f(B) \quad y_{C_i} = f(C_i) \quad (3.15)$$

Et par la méthode de la décomposition de la variance, on peut calculer la sensibilité du premier ordre et l'indice total du paramètre  $i$  (équation 3.16) :

$$S_i = \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_i)]}{\mathbb{V}(Y)} = \frac{y_A \cdot y_{C_i} - f_o^2}{y_A \cdot y_A - f_o^2} \quad \text{et} \quad S_{Ti} = 1 - \frac{\mathbb{V}[\mathbb{E}(Y|P_{\sim i})]}{\mathbb{V}(Y)} = 1 - \frac{y_B \cdot y_{C_i} - f_o^2}{y_A \cdot y_A - f_o^2} \quad (3.16)$$

avec :

$$f_o^2 = \left( \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M y_A^j \right)^2 \quad (3.17)$$

### 3.2.2.3 Aspects pratiques pour l'application de Sobol

Dans son livre, Saltelli et al. (2008) rappelle les propriétés des indices  $S_i$  et  $S_{Ti}$  utiles à l'interprétation des résultats pour tout paramètre  $P_i$  (avec  $i = 1, \dots, k$ ) :

- Tous les  $S_i$ ,  $S_{Ti}$  et  $S_{ij}$  sont supérieurs à 0.
- $S_i \geq 0$  est la mesure de l'effet principal, et quelles que soient les interactions,  $S_i$  représente la baisse de la variance de la réponse si le paramètre  $P_i$  était fixe.
- $S_{Ti} \geq S_i$  et  $S_{Ti} - S_i$  représente l'importance des interactions de  $P_i$ . L'égalité  $S_{Ti} = S_i$  signifie donc que  $P_i$  n'interagit avec aucun des autres paramètres testés.
- Si  $S_{Ti} = 0$ , cela signifie que  $P_i$  peut être fixe sans que cela influence la variance de la variable de sortie, c'est-à-dire que celle-ci n'est pas sensible au paramètre  $P_i$ .
- $\sum_i S_i$  est égal à 1 si le modèle est purement additif et la différence  $1 - \sum_i S_i$  induit la présence d'interactions dans le modèle.

Notons qu'en pratique, il peut arriver que  $S_i$  soit légèrement inférieur à 0 et que  $S_{Ti}$  soit légèrement supérieur à 1. Il est donc très important d'évaluer la précision des indices que l'on a obtenu. En pratique, on calcul un indice de confiance par bootstrapping, c'est-à-dire en déterminant les indices de sensibilité pour un certain nombre d'extraits des résultats échantillonnés au hasard.

### 3.2.2.4 Quelques outils d'échantillonnage et de calcul des indices

Les analyses de sensibilité des travaux présentés ici ont été construites et analysées à partir de fonctions de R (package sensitivity). Il en existe plusieurs pour la méthode Sobol. Les fonctions

soboljansen (Jansen, 1999; Saltelli et al., 2010) et sobolmartinez (Martinez, 2011), par exemple, permettent de calculer les indices de premier ordre et les indices totaux des différents paramètres. La fonction sobolmartinez a été préférée pour sa capacité à gérer les valeurs manquantes, dans le cas où une simulation n'a pas convergé par exemple. Elle permet d'obtenir des résultats quantitatifs sur les influences des paramètres d'entrée et leurs interactions, mais elle est assez lourde numériquement car elle nécessite un grand nombre de simulations. En considérant  $k$  paramètres d'entrée  $P(P_1, P_2, \dots, P_i, \dots, P_{k-1}, P_k)$ , le nombre de simulations est égal à  $N = M(k + 2)$ , avec  $M$  un nombre se situant entre 500 et 1000 (Saltelli et al., 2008).

Pour un coût de calcul plus modique, la fonction sobolroalhs (Tissot and Prieur, 2015) permet de calculer les indices de premier ou de second ordre en se basant sur un échantillonnage d'hypercube latin sur des tableaux orthogonaux répliqués. La force de la méthode réside dans le fait que le nombre de simulations nécessaire pour calculer les indices de premier ordre et seulement de  $N = 2 \times M$  et ne dépend pas du nombre de paramètres étudiés. Pour les indices de second ordre, la méthode est généralisée avec les tableaux orthogonaux, technique d'échantillonnage qui maximise la couverture des gammes des paramètres tout en minimisant le nombre d'échantillons. Le nombre de simulations pour obtenir des indices de second ordre est  $N = q^2$ , avec  $q \geq k - 1$ .  $k$  est le nombre de paramètres étudiés et  $q$  est un nombre premier qui correspond au nombre de niveaux dans les vecteurs orthogonaux.

### 3.3 Données expérimentales : la maquette MASHYNS et le versant de Saint-Joseph

Une étape essentielle de la validation d'un modèle repose sur la comparaison des résultats de simulations avec des données observées. Pour que la comparaison ait un sens, le jeu de données utilisé doit renseigner de manière détaillée le contexte de l'expérimentation notamment les conditions aux limites, les conditions initiales, ainsi que les propriétés du terrain expérimental. Les données sont plus pertinentes si elles intègrent des variables diverses, comme par exemple l'humidité du sol, les flux de surface, l'infiltration, ainsi que des suivis temporels autant que possible. Dans cette étude, deux types de données ont été utilisés : (i) des données issues d'expériences en laboratoire, un environnement simplifié par rapport à la réalité et où tous les paramètres sont contrôlés (paragraphe 3.3.1) et (ii) des données terrain acquises sur un terrain expérimental du Beaujolais, mais pour lesquelles la totalité des informations n'est pas disponible (paragraphe 3.3.2).

### 3.3.1 Données de laboratoire : MASHYNS (Irstea, Antony)

#### 3.3.1.1 La maquette MASHYNS

Le dispositif MASHYNS (MAquette de Simulation HYdraulique des Nappes Superficielles) illustré par la figure 3.6 a été mis au point à Irstea Antony (France) par Kao (2002). L'objectif premier était de reproduire en laboratoire le fonctionnement hydraulique d'une nappe superficielle drainée en conditions maîtrisées. Dans un deuxième temps, elle a servi de support à des études de transfert de solutés, d'abord dans le cadre de la thèse de Paris Anguela (2004) qui portait sur l'étude du transfert d'eau et de solutés dans un sol à nappe superficielle drainée artificiellement puis avec le projet mené par Marcon en 2014 sur le transfert des solutés réactifs dans une nappe drainée.

La cuve en plexiglas de MASHYNS mesure de 2 m de long, 1.3 m de haut et 0.5 m de large et est remplie de sol sur 1 m de haut, soit d'un volume de  $1 \text{ m}^3$ . Le sol homogène est composé de 50% de sable de Champlan et de 50% de limon d'Orly, le taux de matière organique y est inférieur à 0.2%. La surface du sol est laissée libre, un dispositif d'aspersion simule une pluie spatialement homogène et dont le débit est contrôlé. Sur un des coins inférieurs, un drain est placé horizontalement. Percé dans la longueur, il permet une évacuation de l'eau par le bas. Depuis sa mise en place de 1999, le sol de MASHYNS a été changé une fois en 2013 pour un sol équivalent (même origine et composition, et également homogène).

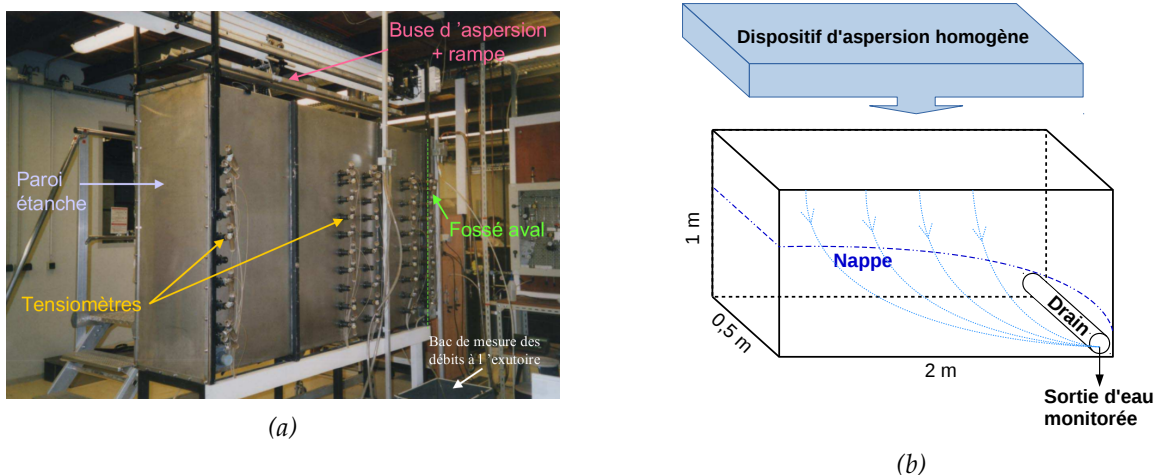


Figure 3.6 – (a) Photo de la maquette MASHYNS et (b) représentation du niveau de nappe en régime permanent avec une pluie en surface et le drain ouvert.

La valeur des paramètres hydrodynamiques de MASHYNS a été déterminée expérimentalement, par plusieurs utilisateurs sur plusieurs années. La courbe de rétention hydrique a été déterminée sur cinq échantillons en se basant sur la méthode de drainage (Musy and Soutter, 1991). Elle a été établie sur une gamme de succion de 0 à -150 cm par paliers de 10 cm. La courbe

de conductivité hydraulique a été déterminée expérimentalement en 2001 (Paris Anguela, 2001) par la méthode "head control method" (Klute and Dirksen, 1986) pour une gamme de 0 à -60 cm de potentiel de pression sur une colonne de sol identique à celui de MASHYNS. La relation entre la conductivité et la teneur en eau repose sur la loi de Mualem-van Genuchten (van Genuchten, 1980) et a été ajustée pour une gamme de 0 à -70 cm de potentiel de pression en calant les paramètres  $\alpha$  et  $n$ . La relation entre le potentiel de pression et la teneur en eau volumique a été calée à partir de sur 16 échantillons de sol prélevés dans la maquette MASHYNS entre 0 et -100 cm de potentiel de pression en fixant les paramètres  $\theta_s$  et  $\theta_r$ . La conductivité à saturation verticale a été mesurée dans MASHYNS en situation de drainage vertical monodimensionnel et en régime permanent. Un niveau d'eau libre constant a été maintenu à la surface du sol saturé tandis que le fond de la maquette était "ouvert" permettant de drainer verticalement la maquette. La conductivité hydraulique à saturation horizontale est estimée à partir de mesures d'un gradient de charge local (Kao, 2002). On constate donc que la conductivité hydraulique est anisotrope dans MASHYNS. Le tableau 3.1 résume les propriétés hydrodynamiques du sol de MASHYNS.

Tableau 3.1 – Mesures des paramètres hydrodynamiques dans MASHYNS lors des études référencées.

Propriété		Valeur	Méthode	Référence
Conductivité à saturation	$K_{sv}$ (m.s <sup>-1</sup> )	$1.17 \times 10^{-5} \pm 5.00 \times 10^{-6}$	Drainage vertical	Kao (2002)
	$K_{sh}$ (m.s <sup>-1</sup> )	$2.44 \times 10^{-5} \pm 3.89 \times 10^{-6}$	Gradient de pression	
Paramètres de van Genuchten	$\theta_s$ (-)	0.43	Ajustés à partir de mesures expérimentales	Paris Anguela (2001) Paris Anguela (2004)
	$\theta_r$ (-)	0.12		
	$n$ (-)	1.800		
	$\alpha$ (cm <sup>-1</sup> )	0.012		

### 3.3.1.2 L'expérimentation de transfert de contaminants

La série de données qui va être utilisée dans cette étude est extraite du travail de Marcon en 2014. Il a mené une expérimentation de traçage complexe sur la maquette MASHYNS avec plusieurs traceurs et différents herbicides. L'objectif de cette étude était de se concentrer sur la dynamique des flux d'eau et de pesticides dans un contexte de drainage, à travers un sol homogène qui exclue les processus de transfert préférentiel que l'on trouve souvent dans les sols sur le terrain. Trois conditions hydrologiques sont représentées en variant le flux des précipitations (voir figure 3.7). Les trois phases composent des conditions représentatives cultures drainées en France. En effet, les phases d'été, d'hiver et de printemps correspondent au total à 250 mm de pluie (voir tableau 3.2). Les doses de solutés réactifs appliquées sont celles classiquement utilisées par les agriculteurs des cultures céréalières. A chaque phase, la solution contenant les produits phytosanitaires est appliquée pendant une heure, puis à la même intensité une pluie de concentration nulle prend le relais jusqu'à la phase suivante.

Tableau 3.2 – Caractéristiques des quatre phases de traçage de l'expérimentation de Marcon. Le type de culture est associé aux herbicides à titre informatif.

	Ete	Hiver	Printemps	Rinçage
Cumul de pluie	24 mm	180 mm	52 mm	350 mm
Durée	24 h	48 h	21 h	207 h
Nappe	basse	haute	intermédiaire	haute
Traceurs	Amino-G	Uranine	-	-
Herbicides et masse appliquée	Clomazone $9.0 \times 10^{-5}$ g	Mesosulfuron $7.0 \times 10^{-6}$ g	Bentazone $1.42 \times 10^{-3}$ g	-
	Imazamox $1.0 \times 10^{-4}$ g	Isoproturon $6.9 \times 10^{-4}$ g	Sulcotrione $2.3 \times 10^{-4}$ g	-
Culture typique	colza	blé et orge	maïs	-

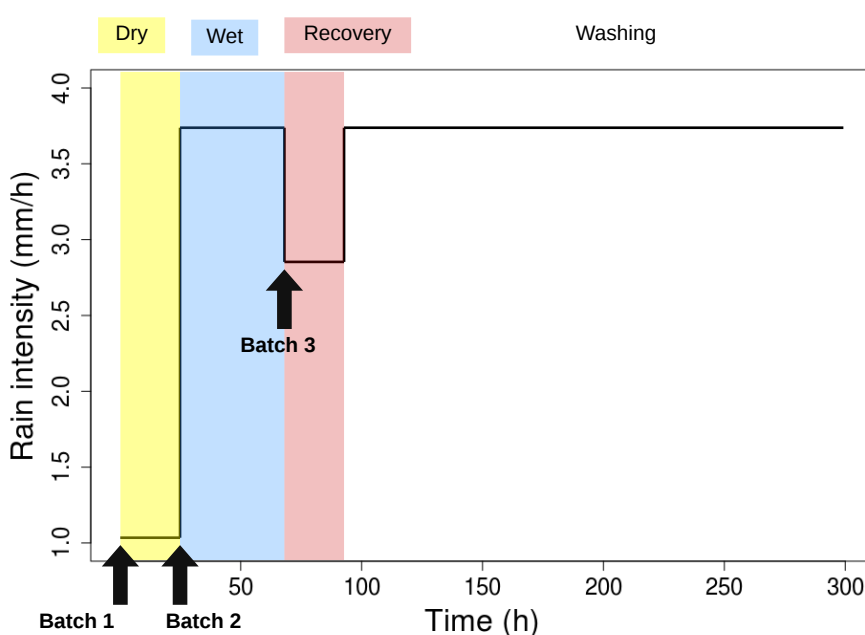


Figure 3.7 – Intensité des précipitations appliquées de façon homogène durant l'expérimentation. Les trois lots composés chacun d'un traceur et de plusieurs pesticides ont été appliqués pendant une heure à  $t = 0$ ,  $t = 24$  h, et  $t = 72$  h.

Les traceurs et les pesticides ont été appliqués manuellement avec une pompe péristaltique, et en vérifiant toutes les 10 min que leur distribution sur la surface de MASHYNS était bien homogène. Les flux de lixiviation étaient monitorés, et toute l'eau sortante a été récupérée dans des flacons de 350 mL avec un préleveur automatique ISCO. La composition d'un échantillon sur trois pendant les phases 1, 2 et 3 et d'échantillons sélectionnés pendant la phase 4, soit en tout 150 échantillons, a été analysée par la société CARSO SA. La limite de détection pour les pesticides appliqués est sous la barre des  $0.005 \mu\text{g/L}$ . La figure 3.8 illustre les chroniques de concentration en sortie de drain de l'ensemble des solutés réactifs utilisés dans l'expérimentation. On remarque que les temps de percée des batch 1 et 2 sont quasiment équivalents, ce qui suggère que la période

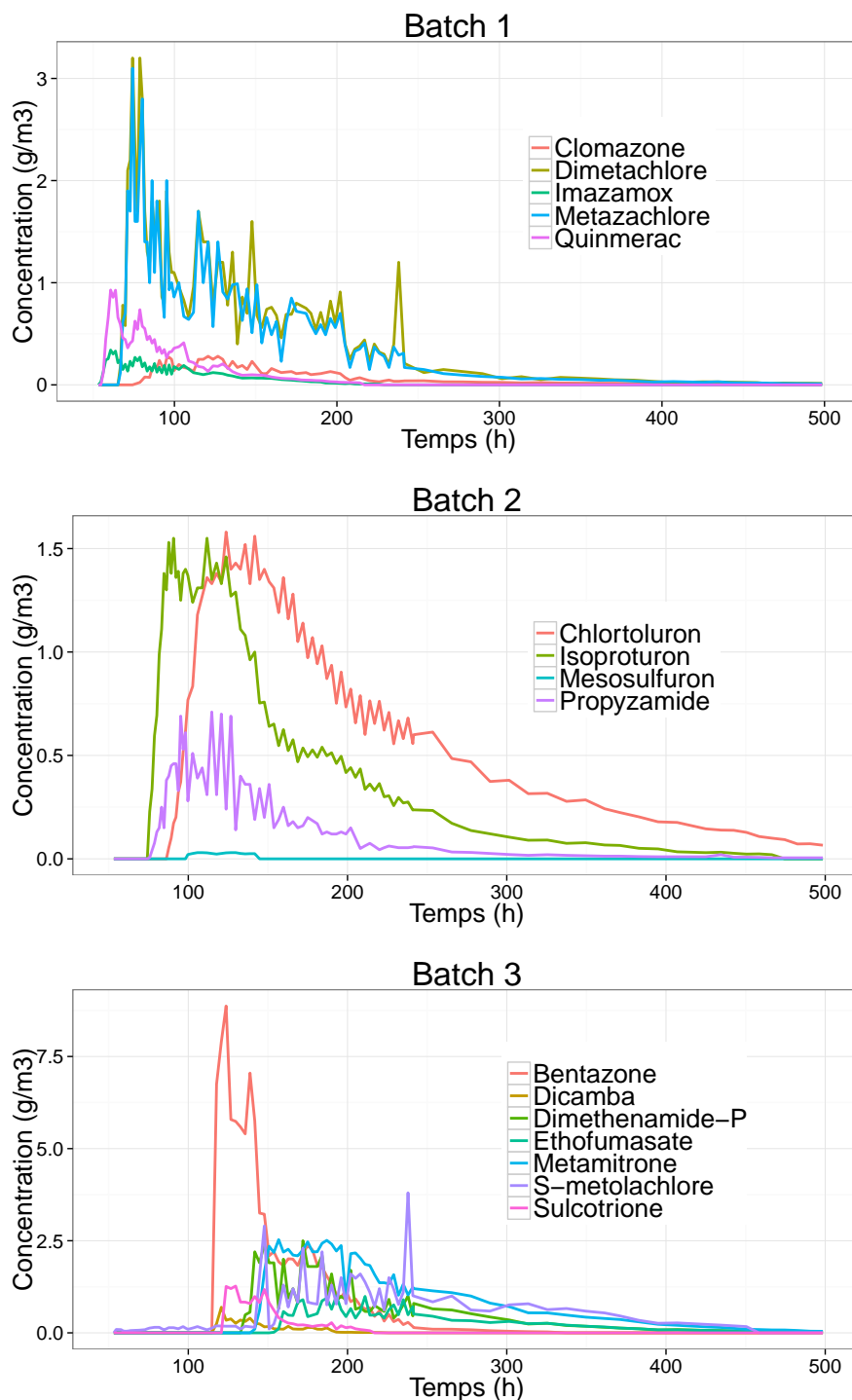


Figure 3.8 – Chroniques de concentration à la sortie de drain de tous les solutés réactifs testés dans l'expérimentation de Marcon sur MASHYNS. Les solutés sont classés selon leur timing d'aspersion sur la maquette : batch 1, batch 2 et batch 3.

sèche n'influence de façon négligeable les transferts. Dans le batch 3, les fortes concentrations en bentazone sont à lier avec sa masse initialement aspergée sur MASHYNS, plus importante pour cette molécule que pour les autres (environ cinq fois plus importante que la sulcotrione par exemple). Durant l'expérience, les tensiomètres n'ont pas été utilisés et on ne dispose donc

pas de donnée de pression interne à la maquette. Compte tenu du taux de matière organique et de la durée de l'expérimentation, il semble raisonnable de poser les hypothèses suivantes : (i) aucune dégradation biotique n'a lieu, (ii) les réactions abiotiques (photolyse, hydrolyse) sont négligeables, (iii) les transferts hydrauliques et l'adsorption sont les deux principaux processus intervenant.

### 3.3.2 Données de terrain : le versant de Saint-Joseph (Beaujolais, France)

La base de données terrain utilisée dans le cadre de cette thèse a été produite par Irstea Lyon (France) sur un versant expérimental du bassin versant de la Morcille (Beaujolais, 69, France). Par rapport aux données de laboratoire, les données terrain sont plus délicates à utiliser. Le domaine expérimental est caractérisé en partie seulement, les propriétés sont mesurées localement et peuvent être très variables spatialement (Gatel et al., 2016). En outre, les conditions expérimentales des événements monitorés ne sont pas complètement contrôlées. En contre-partie, les données mesurées reflètent la réalité du terrain, plus complexe qu'en laboratoire, et les processus qui s'y déroulent.

#### 3.3.2.1 Le versant instrumenté

##### a) Description géographique

La Morcille se situe dans le département du Rhône dans les monts du Beaujolais. Il s'agit d'un cours d'eau d'une dizaine de kilomètres affluent de l'Ardière, et drainant un petit bassin versant de 4.8 km<sup>2</sup> environ. La carte 3.9 situe le bassin versant de la Morcille et le site d'étude. Le débit moyen de la Morcille oscille selon les saisons entre 10 L.s<sup>-1</sup> et 100 L.s<sup>-1</sup>, avec un débit d'étiage à 3 L.s<sup>-1</sup>. A l'image de la région, le bassin versant de la Morcille présente un paysage de collines occupées à 70% par des vignes. Le terrain repose sur un socle granitique peu profond et est globalement assez pentu : 8% de pente en moyenne et jusqu'à 35% à certains endroits (Van den Bogaert, 2011). Selon la classification de Koppen-Geiger (Peel et al., 2007), le climat est continental, d'influence méditerranéenne. La moyenne des précipitations annuelles atteint 860 mm (années 1992-2010).

Le versant de Saint-Joseph est un site d'étude instrumenté par Irstea depuis une vingtaine d'années. Depuis, une grande quantité de données a été acquise sur ce site, ce qui en fait une zone privilégiée pour la modélisation. Sa limite amont se situe au niveau du lieu dit de Saint-Joseph et correspond à la limite du bassin versant (voir figure 3.10), sa limite aval est la Morcille. Le terrain est sur la propriété de Mr. Ducroux et se compose d'un vignoble de 125 m de long environ et d'une bande enherbée de 25 m de long. Les rangs de vigne ne sont pas enherbés, le sol est limono-sableux et la pente forte (25%). Ces facteurs, additionnés au climat propice à des pluies

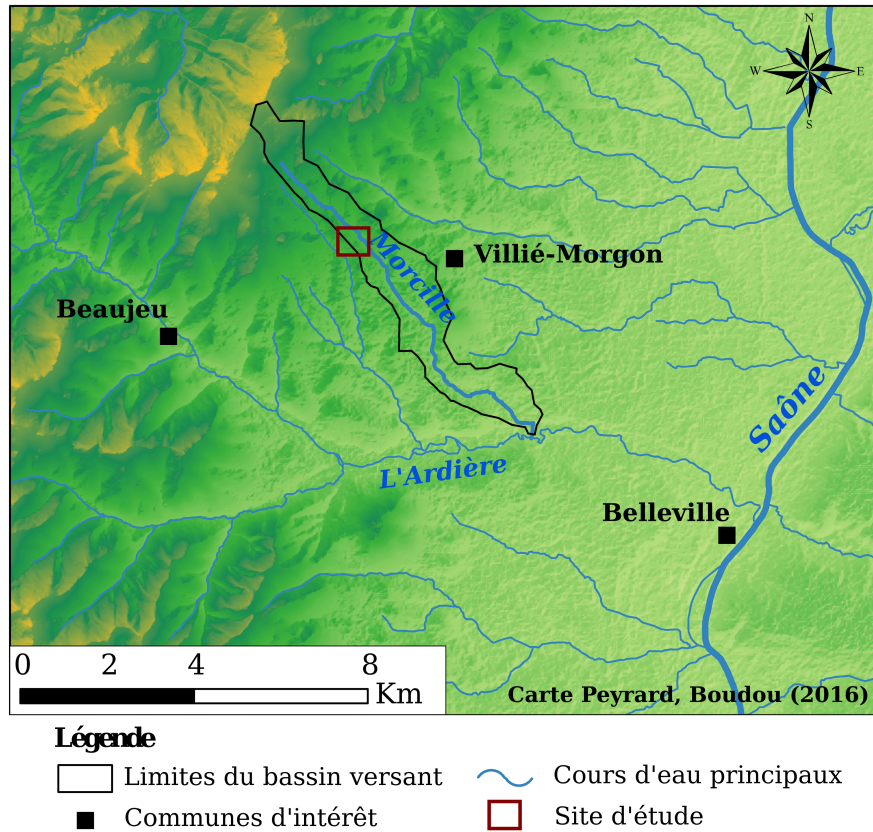


Figure 3.9 – Situation géographique du site d'étude et du cours d'eau de la Morcille (Peyrard, 2016).

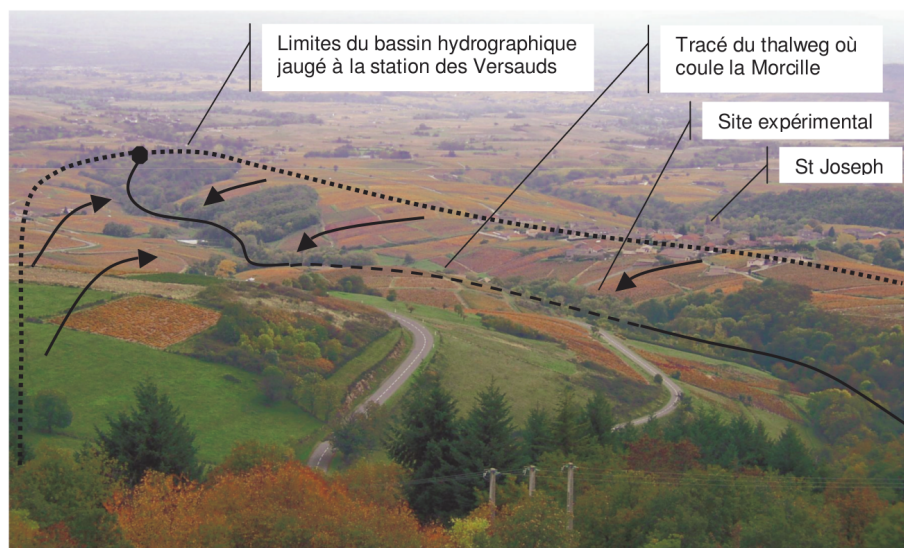


Figure 3.10 – Photo du bassin versant de la Morcille et localisation du site d'étude de Saint-Joseph (Lacas, 2005).

de type orageux (événements intenses et courts), en font un terrain sensible au ruissellement et à l'érosion. Pour limiter ce deuxième phénomène, quatre rases ont été aménagées en travers de pente. Il s'agit de ruptures de pente qui redirigent le ruissellement (voir figure 3.11). Celui-ci est



collecté dans une demi-buse bétonnée. Le sol de la bande enherbée est relativement homogène, sauf les cinq premiers centimètres qui correspondent au mat racinaire, et sa texture est celle d'un sable limoneux.



Figure 3.11 – Photo d'une rase sur le versant de Saint-Joseph

#### b) Instrumentation du site

L'instrumentation du site a été gérée par l'équipe pollutions diffuses d'Irstea Lyon et se concentre principalement sur la bande enherbée. Une grande partie de la base de données utilisée pour cette étude a été construite dans le cadre de la thèse de Lacas (2005). Il s'est intéressé aux processus de dissipation des pesticides dans les bandes enherbées en surface et en subsurface, en s'appuyant sur des expérimentations menées sur une placette de 4 m de large et 6 m de long située sur la bande enherbée (Lacas et al., 2012). Le ruissellement recueilli dans la demi-buse bétonnée via les rases a été redirigé vers cette placette instrumentée par un système de gouttière (voir figures 3.12).

L'instrumentation du site a permis de suivre le comportement hydrologique du versant et de monitorer de façon détaillée la réponse hydrodynamique d'évènements naturels ou artificiels :

- Les évolutions du niveau de la nappe sous la bande enherbée ont été suivies sur deux transects de quatre piézomètres chacun. Certaines périodes ont été monitorées de façon automatique et continue.
- Le long de la placette instrumentée, 4 paires de lysimètres ont été mises en place à 50 cm de profondeur à 0.5 m, 2 m, 4 m et 6 m en aval de la gouttière amont.

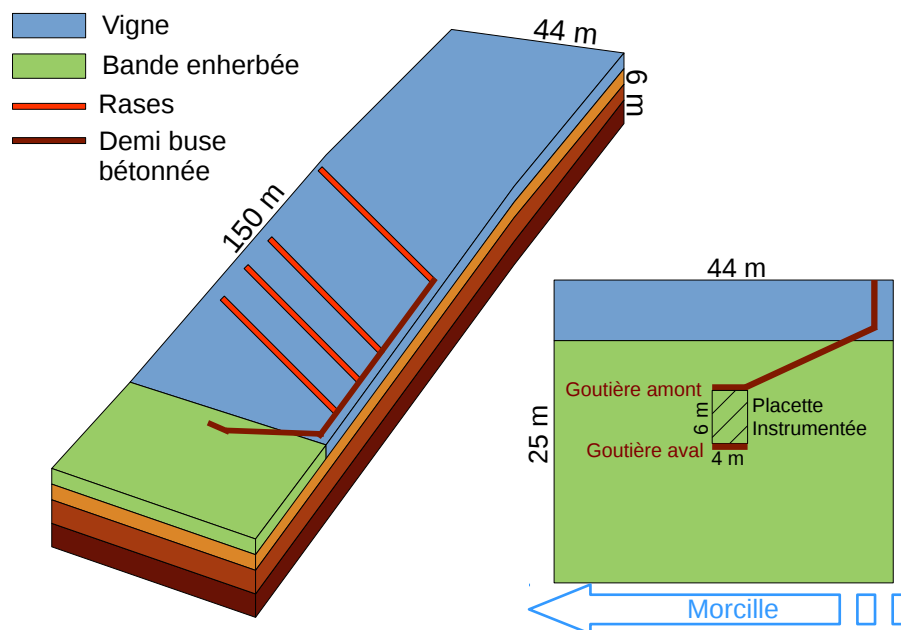


Figure 3.12 – Représentation schématique du versant de Saint-Joseph et de la redirection du ruissellement de la vigne sur la placette instrumentée par le système des rases et de la demi-buse.

- Pour les événements monitorés, des humidimètres et tensiomètres ont été utilisés pour suivre la progression du ruissellement de surface, et les flux d'eau dans les gouttières amont et aval étaient monitorés.

On s'intéressera à l'évènement naturel du 4 août 2004, il s'agit d'un évènement de type orageux pendant lequel la pluie a généré du ruissellement par défaut d'infiltration sur la vigne. Celui-ci a été redirigé par les rases et acheminé jusqu'à la placette instrumentée. Les flux d'eau ont été mesurés dans les gouttières amont et aval, et le niveau de nappe a pu être estimé à partir de données mesurées sur l'année 2012 pour laquelle on dispose des données de pluie et de variation de la hauteur d'eau dans les piezomètres de façon quasi continue (voir figure 3.13). Les conditions initiales de hauteur de nappe pour simuler l'évènement de 2004 ont été calquées sur les données de 2012 en choisissant à la même saison un contexte hydrique semblable, c'est-à-dire un temps sec durant deux semaines avant l'évènement. Les détails de l'évènement du 4 août 2004 sont explicités dans le chapitre 5.

Sur la figure 3.13 on observe que le niveau de base de la nappe dans la bande enherbée (piézomètres à 125 m, 137 m et 143 m) varie peu avec les saisons. Des évènements pluvieux en série mi-avril (jours 100 à 107) provoquent des montées de nappe de 60 cm à 1 m maximum selon les piezomètres et le niveau redescend à l'état de base en une vingtaine de jours. Pour les évènements de moins grande ampleur, la nappe monte également assez rapidement et la redescente dure environ une semaine en moyenne.

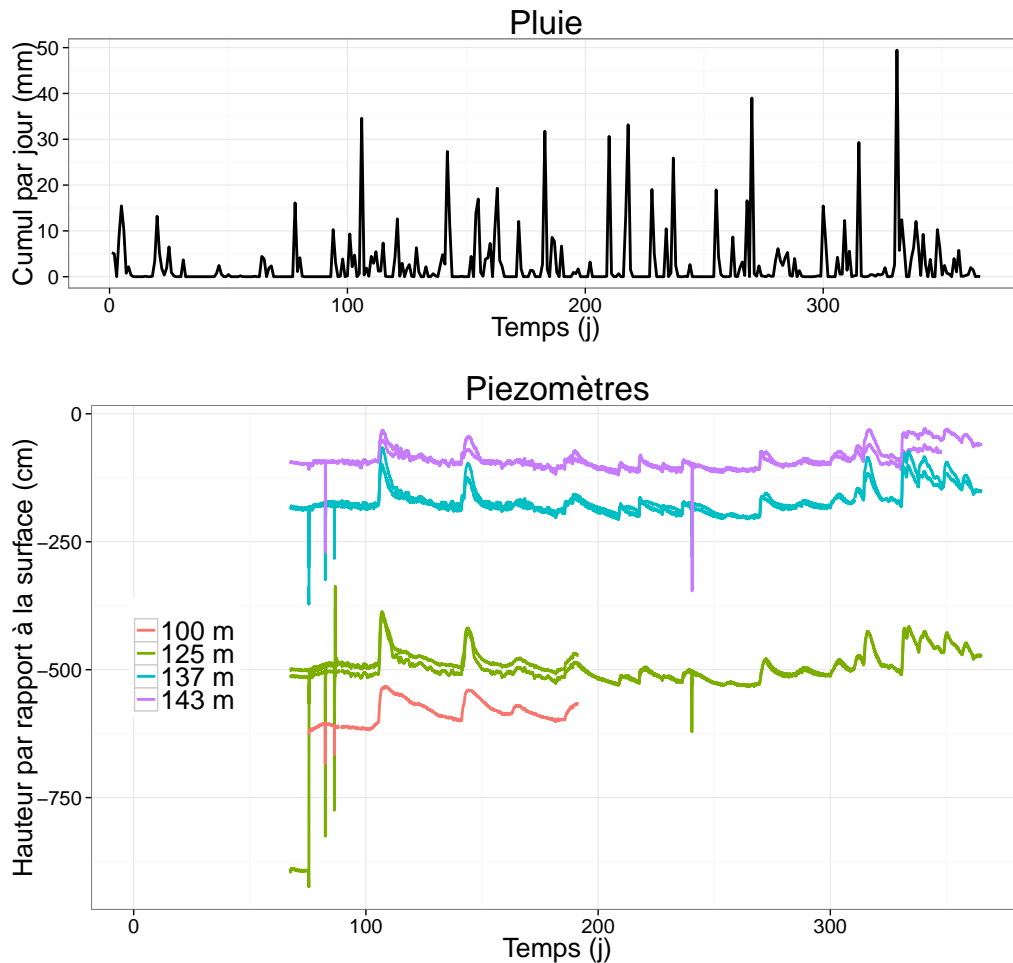


Figure 3.13 – Données de pluie et de hauteur de nappe dans les piézomètres en 2012 (jour 1 : 1er janvier 2012). En haut : chroniques de pluie (cumul par jour en mm) et en bas : variation de la hauteur d'eau dans les piézomètres par rapport la surface du sol, les piézomètres sont classés par groupe en fonction de leur distance par rapport à l'amont du versant.

### 3.3.2.2 Les propriétés de la bande enherbée

#### a) Les propriétés hydrodynamiques

Les paramètres hydrodynamiques ont été mesurés à des profondeurs variables. La porosité a été déterminée à cinq profondeurs différentes en deux lots de mesures prélevés à un an d'intervalle et analysés par deux laboratoires différents. Les mesures ont été répétées trois fois pour le premier lot (0-10 cm, 10-20 cm et 20-30 cm) et deux fois pour le second (30-40 cm, 50-60 cm, 70-80 cm). La conductivité hydraulique à saturation a été mesurée via le dispositif de double anneau de Müntz à trois profondeurs distinctes (0, -15 cm, -25 cm et -40 cm) et sur 8 points de la placette instrumentalisée pour un total de 29 mesures. La courbe de conductivité en milieu insaturé a été déterminée par la méthode de Wind (Wind, 1966) sur une gamme de potentiel de pression de -50 cm à -10 m et aux profondeurs 30-40 cm, 50-60 cm, 70-80 cm. Les paramètres de la courbe de rétention ont été calés sur le modèle de van Genuchten (1980) et ajustés selon les équations de

Vogel and Cislerova (1988).

Tableau 3.3 – Propriétés hydrodynamiques du sol de la bande enherbée de la Morcille (Lacas et al., 2005).  $n$ ,  $\theta_r$  et  $\alpha$  sont les paramètres de van Genuchten (van Genuchten, 1980) définissant les courbes de rétention (voir équations 2.7, chapitre 2). ET : écart-type.

	Horizon 1 (0-10 cm)	Horizon 2 (10-90 cm)	Horizon 3 (90-200 cm)
Porosité $\phi$ (-)	0.55 (ET : 9 %)	0.42 (ET : 12 %)	0.39
Conductivité à saturation $K_s$ (m.s <sup>-1</sup> )	$1.88 \times 10^{-4}$ (ET : 8 %)	$4.0 \times 10^{-5}$ (ET : 42 %)	$1.76 \times 10^{-5}$ (ET : 88 %)
$n$ (-)	1.46	1.52	1.57
$\Theta_r$ (-)	0.15		
$\alpha$ (m <sup>-1</sup> )	0.0313	0.100	0.143

L'analyse de ces mesures par Lacas (2005), ainsi que l'observation visuelle des profils a conduit à la distinction de trois horizons : 0-10 cm, 10-90 cm et 90-200 cm. Il est cependant nécessaire de noter qu'il n'y a pas de discontinuité marquée dans le profil du sol, y compris pour la limite du mat racinaire, et que le choix de ces limites d'horizons est nécessaire à la modélisation, mais que les propriétés semblent évoluer au moins en parti progressivement avec la profondeur. Le choix de la profondeur de l'horizon 1 a été motivé par les mesures de conductivité à saturation et de porosité. Le choix de la profondeur du deuxième horizon a été déterminé par la texture granulométrique et les observation de profil. Comme la conductivité à saturation n'a pas été mesurée à la profondeur de l'horizon 3, la valeur de la conductivité à saturation cette horizon a été fixé avec les mesures les plus profondes à disposition : celles de -40 cm. Le tableau 3.3 résume les caractéristiques du sol sur les trois horizons. Des informations plus détaillées relatives aux protocoles expérimentaux sont disponibles dans le rapport de thèse de Lacas (Lacas, 2005).

#### b) Les coefficients d'adsorption

Les propriétés adsorbantes des sols du bassin versant de la Morcille ont été étudiées par Randriambololohasinirina (2012). Les sols de la Morcille sont classés en trois unités cartographiques de sol (Van den Bogaert, 2011). Sur le versant de Saint-Joseph, la vigne est cultivée sur un sol sableux sur argile (UCS2) et la bande enherbée est plutôt composée d'un sol sableux sur altérite (UCS1). Sur les 20 prélèvements pour les mesures du coefficient d'adsorption, 9 concernent l'UCS1 (5 dans l'horizon 1 et 4 plus en profondeur) et 7 concernent l'UCS2 (1 dans l'horizon 1 et 6 plus en profondeur). Tous types et horizons de sol confondus, le coefficient d'adsorption du Diuron et du Tebuconazole sont de 31.2 L.kg<sup>-1</sup> (écart-type 31.0 L.kg<sup>-1</sup>) et 3.0 L.kg<sup>-1</sup> (écart-type 2.7 L.kg<sup>-1</sup>) respectivement. Les résultats par type de sol et par profondeur sont montrés dans le tableau 3.4.

Tableau 3.4 – Résumé des coefficients d'adsorption déterminés dans le bassin versant de la Morcille par l'étude de Randriambololohasinirina (2012) pour le Diuron et le Tebuconazole.

L.kg <sup>-1</sup>		Diuron	Tebuconazole
UCS1 (BE)	Horizon 1	5.1 (ET : 2.8)	45.1 (ET : 22.9)
	Horizons profonds	0.63 (ET : 0.67)	10.1 (ET : 11.3)
UCS2 (Vigne)	Horizon 1	8.6	109.8
	Horizons profonds	1.98 (ET : 1.77)	27.5 (ET : 38.3)

## Chapitre 4

# Construction du modèle de transport réactif couplé surface-subsurface

Ce chapitre a pour objectif de décrire les approches et méthodes de développement du modèle CATHY-Pesticide, une version de CATHY qui simule les écoulements de l'eau et des solutés réactifs de façon couplée entre la surface-subsurface et qui intègre un module de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol. Plusieurs versions ont été successivement développées et testées et chaque étape a permis d'avancer dans la réflexion et la construction.

### 4.1 Les étapes de la construction du modèle de transport réactif

CATHY étant avant tout un modèle de recherche, différentes versions ont été développées par plusieurs équipes (INRS, Université de Padou, ...). Le tableau 4.1 présente les versions utilisées au cours de la thèse : en haut les versions déjà existantes (détaillées dans la partie 3.1) et en bas de tableau les versions construites et testées au cours de la thèse. Des informations sur leur capacité à représenter les transferts de solutés sont indiquées, ainsi que la méthode avec laquelle les équations sont résolues.

La première méthode pour construire un modèle de transport réactif sur la base de CATHY a consisté à coupler deux modules déjà existants : le modèle CATHY eau (Camporese et al., 2010) et un module de transport réactif TRAN3D (Gambolati et al., 1994) implémenté indépendamment mais sous la même forme, c'est-à-dire avec la même logique d'appellation des variables et de construction des sous-routines. Sans couplage, TRAN3D est capable de gérer des simulations de transport non permanent en régime d'écoulement permanent. Il est possible de simuler du transport en régime d'écoulements non permanent si les champs de vitesse sont renseignés comme paramètre d'entrée. Le code CATHY+TRAN3D s'est révélé capable de simuler des exemples simples de transport mais il manque de stabilité, et selon les paramètres diffusifs appliqués, les résultats

Tableau 4.1 – Résumé des différentes versions de Cathy avec quelques unes de leurs caractéristiques principales. En haut du tableau : les versions pré-existantes et en bas de tableau : les principales versions testées durant la thèse. Les acronymes des versions de CATHY correspondent aux processus pris en compte : FT Flow-Transport, VR Velocity reconstruction, FTR Flow-Transport-Reaction. A : transport Advectif de soluté, D : transport Dispersif de solutés, R : Réactions, VF : volumes finis, EF : éléments finis, DF : différences finies, VR : reconstruction des champs de vitesse.

Nom	Transport			Couplage surf/subsurf		Limites
	A	D	R	eau	solutés	
CATHY Camporese et al. (2010)	-	-	-	oui	non	-
TRAN3D Gambolati et al. (1994)	EF	EF	EF	-	non	-
CATHY-FT Weill et al. (2011)	VF	EF	-	oui	oui	Diffusion numérique
CATHY-VR Scudeler et al. (2016b)	VF	-	-	oui	oui (pas validé)	-
CATHY + TRAN3D	EF	EF	EF	oui	non	Manque de stabilité en régime transitoire
CATHY-FTR (Gatel et al., 2017)	VF	-	VF	oui	non	Néglige les processus dispersifs et diffusifs
CATHY-Pesticide (Chapitre 6)	VF	-	VF	oui	oui	

peuvent être inexacts (voir section 4.2.1). La deuxième approche consiste à prendre pour base le code CATHY-FT (Weill et al., 2011) (voir section 4.2.2) qui permet de simuler les écoulements et le transport non réactif de solutés en régime transitoire de façon couplée entre la surface et la subsurface et d'y implémenter des réactions. Il a été observé durant les premiers tests de ces travaux que CATHY-FT génère de façon significative de la diffusion numérique et pour l'éviter, les processus de diffusion et de dispersion seront négligés dans les versions avec réaction (nommées CATHY-FTR et CATHY-Pesticide, voir sections 4.2.3 et 4.2.4) développées au cours de la thèse. La partie subsurface de cette version a été validée sur des données de laboratoire issues de la maquette MASHYNS et par une analyse de sensibilité (voir chapitre 5). La dernière version (CATHY-Pesticide, voir section 4.3), la plus complète, a pour base CATHY-FTR. Elle intègre en plus un module de reconstruction des champs de vitesse (Scudeler et al., 2016b) ainsi qu'un module de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol. Le développement de cette version a été l'occasion d'adapter le couplage surface-subsurface à l'absence de phénomènes dispersifs et diffusifs. En effet, comme montré dans le chapitre 3, le couplage de CATHY-FT est basé sur les conditions de Cauchy, qui intègrent une part diffusive en plus de la part advective. Les tests sur cette version sont basés sur les données terrain du versant de la Morcille (voir chapitre 6).

## 4.2 Transport de solutés en subsurface

### 4.2.1 Couplage de CATHY eau et du module TRAN3D

TRAN3D (Gambolati et al., 1994) est un modèle de transport réactif qui ne simule pas les écoulements. Il admet en entrée un champ de vitesse correspondant aux flux d'eau dans un domaine 3D et résout le transport advectif, diffusif et réactif des solutés. TRAN3D gère des simulations en situation de saturation variable et les réactions prises en compte sont simples : adsorption et dégradation linéaire. L'équation d'advection-dispersion est résolue sur les nœuds avec la méthode des éléments finis. Le couplage des modèles CATHY et TRAN3D autorise plus facilement la simulation d'événements en régime hydraulique transitoire. A chaque pas de temps, CATHY produit en sortie un champ de vitesse qui est transféré à TRAN3D. Ce couplage a été réalisé à partir de la version de CATHY sans transport détaillée par Camporese et al. (2010). Il garde les spécificités partagées par les deux modèles : simulations 3D dans des conditions de saturation variées. Le modèle CATHY+TRAN3D a été testé sur un cas test utilisé pour valider TRAN3D (Gambolati et al., 1994), le test classique de Huyakorn et al. (1985).

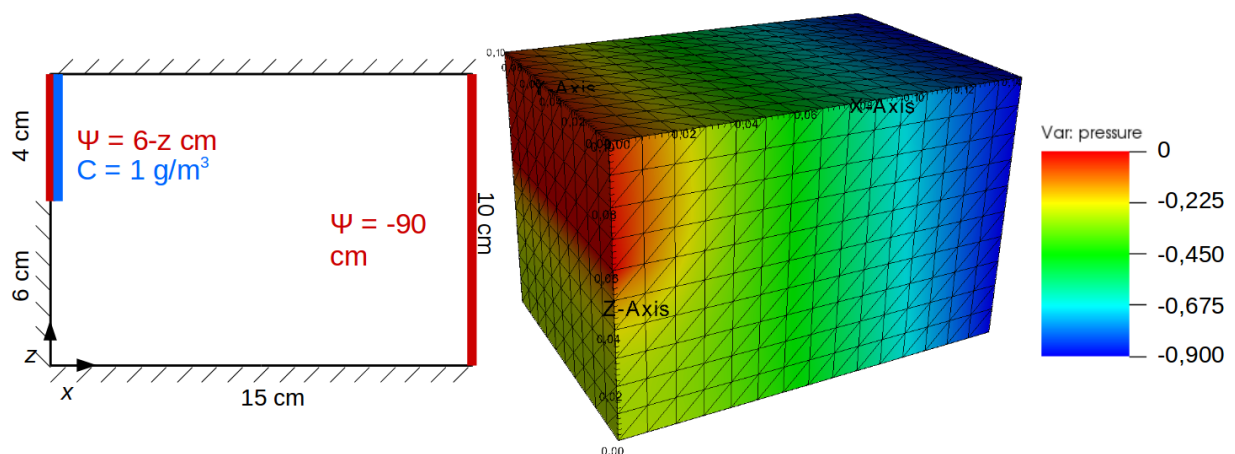


Figure 4.1 – À gauche : les conditions aux limites du cas test de Huyakorn. À droite : répartition de la pression (m) dans le domaine 3D (régime permanent).

Il s'agit d'un test virtuel en régime permanent sur un domaine relativement petit : 10 cm de haut, 15 cm de long et 10 cm de large. La figure 4.1 présente les conditions aux limites du cas test Huyakorn et la pression dans le domaine en régime permanent. La répartition des pressions en régime permanent a été déterminée par une simulation préalable dans les mêmes conditions, mais avec un départ initial du domaine complètement saturé. La conductivité à saturation est de  $1.15 \times 10^{-7}$  m.s<sup>-1</sup>, et les paramètres de van Genuchten  $\theta_s$ ,  $\theta_r$ ,  $n$  et  $\alpha$  sont respectivement 0.45, 0, 1.46 et 0.32. Les variables liées au transport réactif sont présentées dans le tableau 4.2.

La figure 4.2 illustre les résultats du cas test simulé à partir du modèle initial TRAN3D et



Tableau 4.2 – Paramètres liés au transport dans le test de Huyakorn.

Paramètre		Valeur
Diffusion moléculaire ( $m^2 \cdot s^{-1}$ )	$D$	$1.15 \times 10^{-11}$
Dispersion longitudinale ( $m$ )	$\alpha_l$	0.01
Dispersion transversale ( $m$ )	$\alpha_t$	0
Coefficient d'adsorption (-)	$K_d$	0
Coefficient de dégradation ( $j^{-1}$ )	$\lambda$	0.01
Taille d'une maille (m)	$\Delta x$	0.01

du modèle couplé CATHY+TRAN3D. Les champs de vitesse intégrés en conditions initiales au modèle TRAN3D sont issus d'une simulation de CATHY. Dans ces conditions, les deux résultats doivent être exactement égaux. La répartition des concentrations sur une coupe du domaine est montrée à trois pas de temps différents : 1,25 h, 3 h et 12h. Le front de concentration est le même dans les deux séries de résultats, validant le couplage du module TRAN3D avec le modèle CATHY.

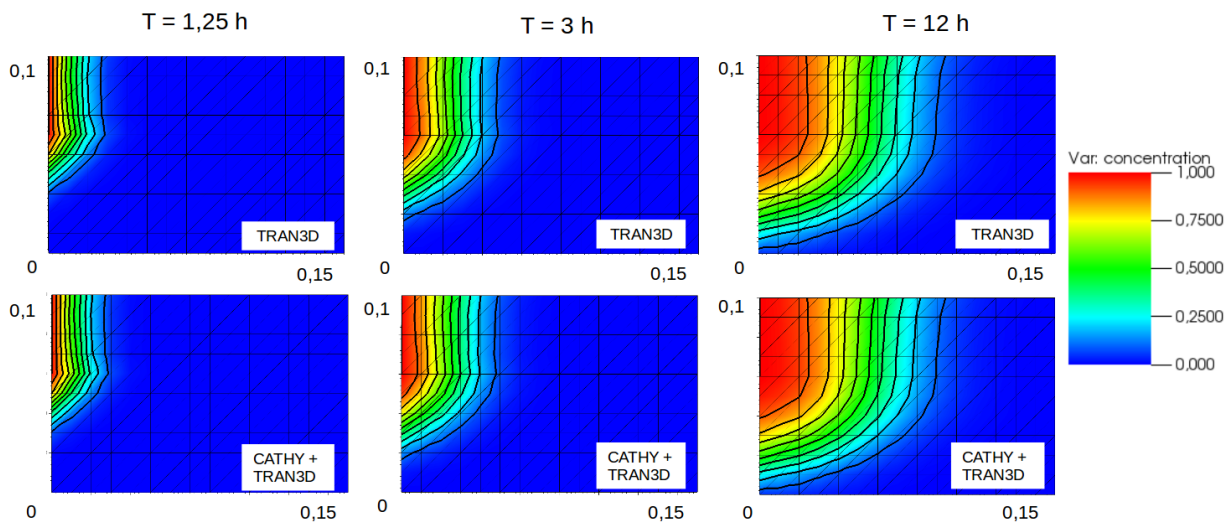


Figure 4.2 – Test Huyakorn : comparaison du front de concentration de TRAN3D seul et de CATHY+TRAN3D.

A partir de ce modèle couplé, la simulation du cas test de Gureghian (1983) en régime transitoire, a été réalisée avec de bons résultats en terme de bilans de masse. Par contre, d'autres essais faisant varier le coefficient de dispersion ont montré une instabilité du code dans les cas de faible valeur. La figure 4.3 illustre ces anomalies. Il s'agit aussi du test Huyakorn, mais dans lequel le paramètre de dispersion longitudinale  $\alpha_l$  a été divisé par deux, passant de 0.01 m à 0.005 m. Des concentrations supérieures à  $1 \text{ g} \cdot \text{m}^{-3}$  apparaissent dans le domaine (zones délimitées par les pointillés).

Le nombre de Peclet [-] est défini de la manière suivante :

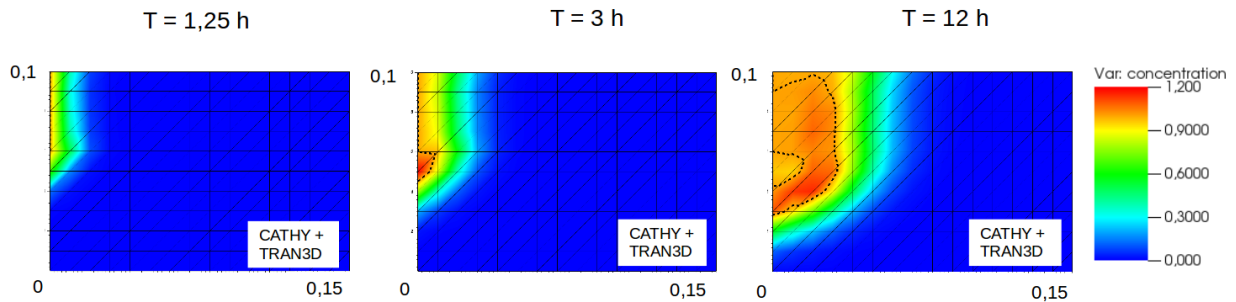


Figure 4.3 – Cas test Huyakorn avec une dispersion latérale divisée par deux par rapport au cas test original ( $\alpha_l = 0.005 \text{ m}$ ) : apparition de concentrations supérieures à  $1 \text{ g.m}^{-3}$  anormales (zones délimitées par les pointillés).

$$Pe = \Delta x \frac{u}{D_e} \quad \text{avec} \quad D_e = \alpha * u + D \quad (4.1)$$

Avec  $\Delta x$  la taille d'un maille [L],  $u$  la vitesse de l'eau [ $\text{LT}^{-1}$ ],  $D_e$  la diffusion effective [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ],  $D$  la diffusion moléculaire [ $\text{L}^2\text{T}^{-1}$ ] et  $\alpha$  de la dispersion [L]. Le nombre de Peclet peut être déterminé selon les axes  $x$  et  $y$  si la vitesse de l'eau et la dispersion ont des valeurs longitudinales et transversales différentes.

Si le nombre de Péclet dépasse 2, la solution peut osciller et la résolution ne converge pas. Dans cet exemple, si on calcule le nombre de Péclet dans la direction longitudinale ( $u_l$  est de l'ordre de  $1 \times 10^{-7} \text{ m.s}^{-1}$ ), on obtient  $Pe = 1$  si  $\alpha_l = 0.01 \text{ m}$  et  $Pe = 2$  si  $\alpha_l = 0.005 \text{ m}$  : la solution oscille et on obtient des concentrations supérieures à  $1 \text{ g.m}^{-3}$ . Pour que la simulation soit correcte, avec ces conditions de diffusion et dispersion, le maillage devrait être raffiné pour que le Péclet baisse.

A ces situations d'oscillations s'ajoute le manque d'efficacité du code en terme de temps de calcul lorsque l'on travaille sur des domaines plus grands, quelques milliers de nœuds par exemple. Pour ces raisons, le modèle CATHY+TRAN3D a été mis de côté et une autre voie de développement a été explorée, consistant à implémenter les processus de réaction dans une version de CATHY incluant le transport non réactif : CATHY-FT (Weill et al., 2011).

#### 4.2.2 CATHY-FT : CATHY avec transport non réactif

CATHY-FT (Weill et al., 2011) modélise de façon couplée surface-subsurface les écoulements et le transport non réactif de soluté. L'équation d'advection-dispersion est résolue en deux temps : l'advection est calculée à partir de la méthode des volumes finis qui assure une conservation de la masse et les processus dispersifs sont basés sur les éléments finis. Une description plus détaillée du modèle est disponible dans le chapitre 3. Comme indiqué dans la section 3.1.5, ce modèle a été testé sur un versant virtuel très simplifié, ainsi que sur une simulation de versant expérimental

plus complexe. Dans le second cas, les résultats ont été confrontés à des données terrain (Scudeler et al., 2016a) et une des conclusions tirée est la suivante : les résultats des simulations sont plus proches des données observées pour des coefficients de diffusion et dispersion très faibles.

Lors des essais préliminaires de cette version sur le test de Huyakorn, un phénomène de diffusion numérique non négligeable a été mis en avant. Dans le code, la séparation des opérateurs de calcul (advection en volumes finis et dispersion en éléments finis) induit un passage à chaque pas de temps des concentrations de solutés aux nœuds à celles aux volumes et inversement. Ces passages sont effectués en partageant la masse de soluté d'un volume/nœud sur les volumes/nœuds adjacents et, bien que la masse soit conservée, ils induisent une diffusion numérique. Sur la figure 4.4, une situation simplifiée est schématisée : sans advection ni diffusion ou dispersion, le passage seul des concentrations des volumes aux nœuds puis des nœuds aux volumes crée de la diffusion artificielle.

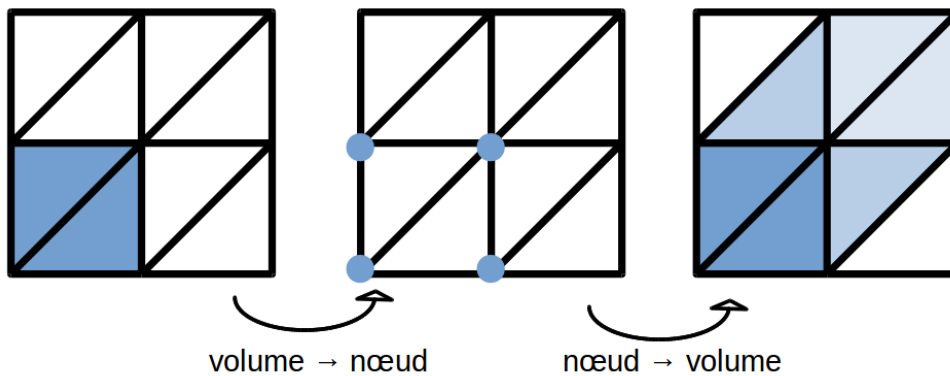


Figure 4.4 – Exemple 2D du phénomène de diffusion numérique dans une situation sans advection ni diffusion ou dispersion. La couleur bleue représente la présence de soluté.

En pratique, les effets de la diffusion numérique sont conséquents. Ils n'ont pas été repérés dans les tests virtuels effectués par Weill et al. (2011) car il utilisait un maillage très fin, et les conclusions de l'étude de Scudeler et al. (2016a) ont mis en avant ce phénomène sans le repérer et l'expliquer jusqu'au bout. La figure 4.5 illustre la situation sur le cas test Huyakorn. À gauche, le transport est simulé en advection pure. Ce processus étant résolu avec la méthode des volumes finis, l'information de concentration est portée sur les volumes des tétraèdres. À noter, tous les tétraèdres en bordure ne sont pas exactement à la concentration limite puisque cette image est sortie à la fin d'un pas de temps, donc après le calcul du transport. À droite de la figure, il s'agit de la même simulation, mais cette fois le coefficient de diffusion a été fixé à  $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ . Physiquement, un tel coefficient ne devrait pas influencer le transport de manière visible. En pratique, un coefficient de diffusion non nul signifie que les calculs des processus diffusifs sont déclenchés dans le code, et donc que les concentrations passent par les procédures volumes  $\longleftrightarrow$  nœuds.

On constate que le passage volumes  $\longleftrightarrow$  nœuds engendre effectivement une diffusion artificielle importante.

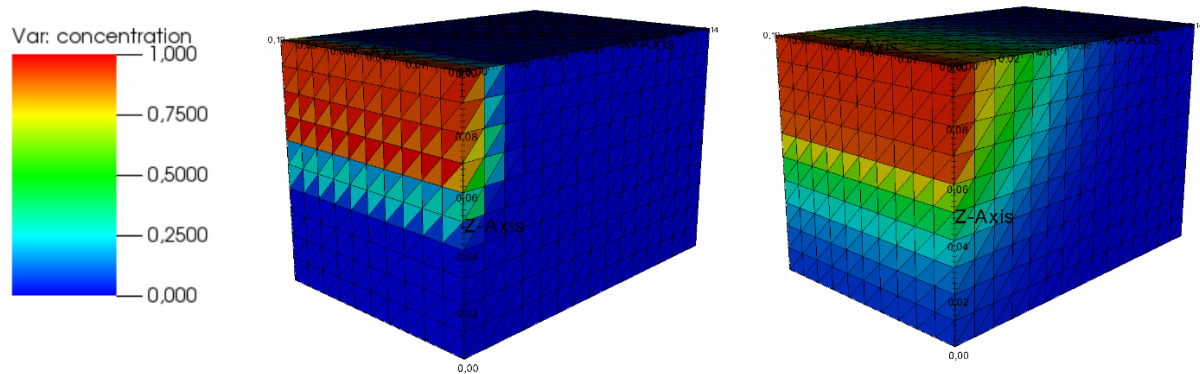


Figure 4.5 – Influence de la diffusion numérique sur le transport de soluté illustré sur le cas test Huyakorn ( $t=1,25$  h). À gauche de l'advection pure et à droite de l'advection et de la diffusion numérique (le coefficient de diffusion est fixé à  $1 \times 10^{-20} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ).

La forme des équations de diffusion et de dispersion ne permet pas une implémentation aisée en volumes finis et surtout leur résolution avec cette méthode serait très coûteuse en temps de calcul. Deux solutions ont été envisagées pour régler le problème de diffusion numérique. La première consiste à améliorer les algorithmes de passage des concentrations volumes  $\longleftrightarrow$  nœuds. En fait, ceux-ci ont déjà été remis en question par certains utilisateurs de CATHY par le passé et c'est également un problème classique dans la modélisation des processus de transport réactif, mais aucune solution alternative satisfaisante n'a été trouvée. La deuxième solution est de coder les processus advectifs et diffusifs avec un système implicite aux éléments finis hybrides mixtes (Bergamaschi and Putti, 1999) et donc de résoudre tous les processus de transport sur les nœuds. Une version de CATHY dont le transport est implémenté avec ce système existe, mais n'est pas exploitable en l'état et n'a pas été menée à son terme puisque cette méthode est particulièrement coûteuse en temps de calcul.

Ainsi, aucune version de CATHY actuelle ne permet de simuler les processus dispersifs et diffusifs sans générer une importante diffusion artificielle. L'erreur engendrée par la diffusion numérique est difficilement quantifiable, elle dépend à la fois du pas de temps utilisé dans la simulation, du maillage et des conditions initiales. Compte tenu de ces informations, la décision a été prise de continuer à explorer le modèle CATHY-FT, mais en négligeant tous les phénomènes dispersifs et diffusifs. Il s'agit d'un choix fort dont les implications seront discutées lors de la confrontation des résultats avec des données. Sachant que la mise de côté de la dispersion et de la diffusion n'est pas envisageable dans la version finale d'un modèle de transfert de soluté, il s'agira à moyen terme de solutionner le problème de la diffusion numérique, soit en changeant la manière dont l'information passe des nœuds aux volumes et des volumes aux nœuds, soit en

modifiant la résolution de l'équation d'advection-dispersion.

### 4.2.3 CATHY-FTR : implémentation des équations de réactions

Les réactions d'adsorption linéaire à l'équilibre et de dégradation du premier ordre ont été implémentées dans le modèle CATHY-FT pour former la version CATHY-FTR :

$$K_d = \frac{C_S}{C_W} \quad \text{avec} \quad K_d = K_{OC} \cdot F_{OC} \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\lambda C \quad (4.3)$$

où  $K_d$  est la constante d'équilibre [ $L^3M^{-1}$ ],  $C_S$  et  $C_W$  sont les concentrations en soluté, respectivement dans le sol [ $MM^{-1}$ ] et dans l'eau [ $ML^{-3}$ ],  $K_{OC}$  est le coefficient d'adsorption [ $L^3M^{-1}$ ],  $F_{OC}$  est la fraction massique de carbone organique dans le sol [ $MM^{-1}$ ], et  $\lambda$  est la constante de dégradation (correspondant à l'inverse du temps de demi-vie) [ $T^{-1}$ ].

Ces équations représentent de façon simplifiée les deux processus réactifs majeurs des solutés dans le sol et présentent en outre l'avantage d'éviter la multiplication des nouveaux paramètres à renseigner dans CATHY : ici seuls  $K_d$  et  $\lambda$  doivent être renseignés. Les équations (4.2 et 4.3) sont implémentées sur les volumes et après l'advection. L'adsorption est implémentée en premier puisqu'on la considère comme instantanée et son calcul prend en compte les concentrations générées par les pas advectifs et le paramètre constant  $K_d$ . La dégradation est calculée ensuite comme terme source à partir de la concentration de soluté dans l'eau après adsorption et du paramètre constant  $\lambda$ .

Les tests de validation de la subsurface de CATHY-FTR sont basés sur une maquette expérimentale développée à Irstea Antony (MASHYNS) et seront décrits dans le chapitre 5.

### 4.2.4 Ajout du module de correction des champs de vitesse

En parallèle des travaux sur le transport réactif dans CATHY, les questions de résolution numérique ont été approfondies dans la thèse de Carlotta Scudeler (2016). Ses travaux ont notamment porté sur un module de reconstruction des champs de vitesse visant à corriger des erreurs de bilan de masse dans le transport. Dans CATHY, les équations de Richards pour l'écoulement en subsurface sont résolues avec la méthode des éléments finis de Galerkin. Cette méthode est à l'origine d'erreurs sur les champs de vitesse qui peuvent poser problème lors de la résolution du transport (Klausen and Russell, 2004; Dawson et al., 2004). Des explications supplémentaires sont disponibles dans le chapitre 2, section 2.2.2.1. Les dérives sont particulièrement visibles dans les milieux hétérogènes, présentant par exemple des zones de conductivité très faible, ou un gra-

dient de vitesse élevé. Un module de post-traitement a donc été implémenté par Scudeler et al. (2016b) pour corriger les champs de vitesse après la résolution des écoulements et avant celle du transport. Il est basé sur la méthode développée par Larson and Niklasson (2004), qui consiste à recalculer, à chaque pas de temps, avant la résolution du transport les flux d'eau traversant les faces des tétraèdres afin de s'assurer de la conservation de la masse pour tous les processus calculés à partir du champ de vitesses. Les performances sur la version subsurface de CATHY-FT en terme de bilan de masse ont été améliorées de manière conséquente (Scudeler et al., 2016b). Cette reconstruction des champs de vitesse a donc été intégrée dans CATHY-FTR dans le cadre de la thèse. Elle induit une légère augmentation du coût de calcul, mais moins importante que si tout le modèle était codé avec la méthode des éléments finis mixtes .

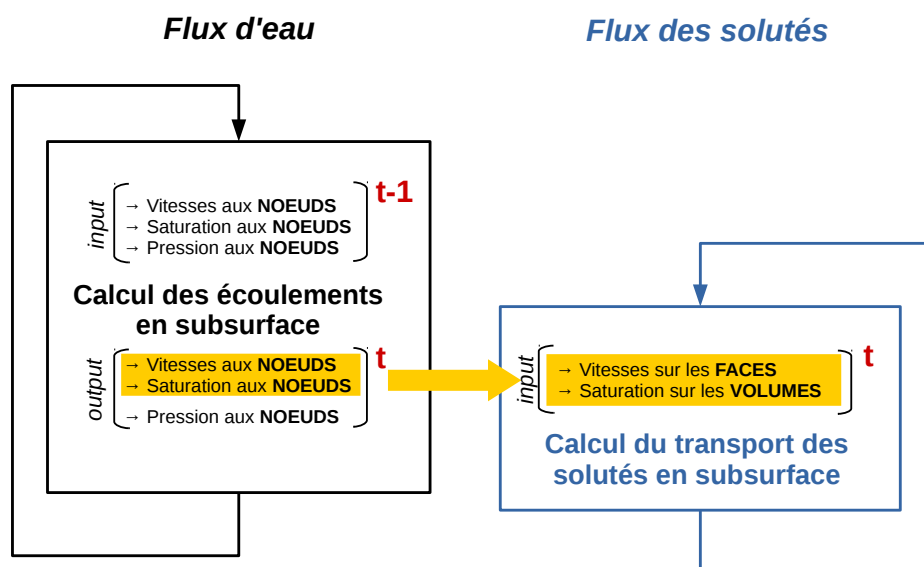


Figure 4.6 – Schéma simplifié mettant en valeur la localisation de l'information des vitesses et de la saturation dans le calcul des flux d'eau et du transport de soluté dans CATHY-Pesticides lors du pas de temps  $t$ .

La figure 4.6 résume sur quelles entités en subsurface sont calculées la pression, la vitesse de l'eau et la saturation utiles à la simulation des écoulements de l'eau et des solutés dans CATHY-Pesticide. Les pressions sont toujours calculées sur les nœuds et les concentrations sont toujours considérées sur les tétraèdres, c'est-à-dire les volumes. La saturation et les vitesses, elles, sont transférées des nœuds aux tétraèdres dans un pas de temps, entre le calcul des écoulements et de l'advection des solutés. Un passage correct des vitesses sur les nœuds aux vitesses sur les faces est assuré par la reconstruction des champs de vitesses. Le passage de l'information de saturation

des nœuds aux tétraèdres, induit de la diffusion numérique. A chaque pas de temps la saturation sur les volumes est utilisée pour calculer l'advection des solutés mais n'est pas utilisée au pas de temps suivant pour le calcul des écoulements d'eau, donc la diffusion induite est très faible et ne se cumule pas dans le temps.

### 4.3 Vers un modèle de transport réactif couplé surface-subsurface : CATHY-Pesticide

La procédure de couplage de CATHY-Pesticide est fondée sur celle de CATHY-FT mais a dû être adaptée à l'absence de diffusion. En effet, dans CATHY-FT les conditions à l'interface de transport sont appliquées sous la forme de conditions de Cauchy (c'est-à-dire comme une combinaison des conditions de Dirichlet et Neuman) et prises en compte dans l'étape de calcul du transport diffusif. Dans la nouvelle version du couplage, les conditions à l'interface sont appliquées en terme de concentration et intégrées au calcul de transport advectif. La possibilité déjà présente dans la version CATHY-FT d'appliquer des conditions aux limites de type Dirichlet sur toutes les faces du domaine a été conservée. De plus, un module de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de subsurface a été implémenté pour assurer la représentation de phénomènes comme la remobilisation des solutés par le ruissellement (voir section 4.3.4).

#### 4.3.1 Algorithme de couplage surface-subsurface pour l'eau et les solutés réactifs

La figure 4.7 décrit les principales sous-routines impliquées dans le transport des solutés réactifs. Les blocs colorés, variables comme sous-routines, concernent les solutés et les blocs gris concernent l'eau : pendant un pas de temps, c'est d'abord la surface qui est gérée par CATHY avec la résolution des écoulements et du transport, puis sont résolus les écoulements de subsurface (avec l'algorithme de switch des conditions à l'interface), le transport en subsurface, et enfin les réactions et le cas échéant, le mélange de la lame ruisselante avec la première couche de sol (encadré violet à gauche).

- En surface (encadrés gris et vert en haut), les écoulements comme le transport sont fondés sur l'équation de l'onde diffusive. Les deux processus sont gérés sur les cellules, c'est-à-dire sur les entités rectangulaires planes définies sur la surface. Dans le reste de la procédure, l'information des pressions et des concentrations en surface est portée par les nœuds ( $P_{\text{surf}_{\text{node}}}$  et  $C_{\text{sol}_{\text{node}}}$ ), le passage des nœuds aux cellules et vice-versa est traité en interne de cette sous-routine (encadré vert, résolution du transport en surface).
- En subsurface, l'équation de Richards est résolue avec la méthode des éléments finis et fournit notamment les pressions sur les nœuds  $P_{\text{sol}_{\text{node}}}$  et un flux d'échange entre la surface et la subsurface  $F_{\text{ech}_{\text{node}}}$  (en  $m^3/s$ ) (encadré gris en haut à droite). La combinaison

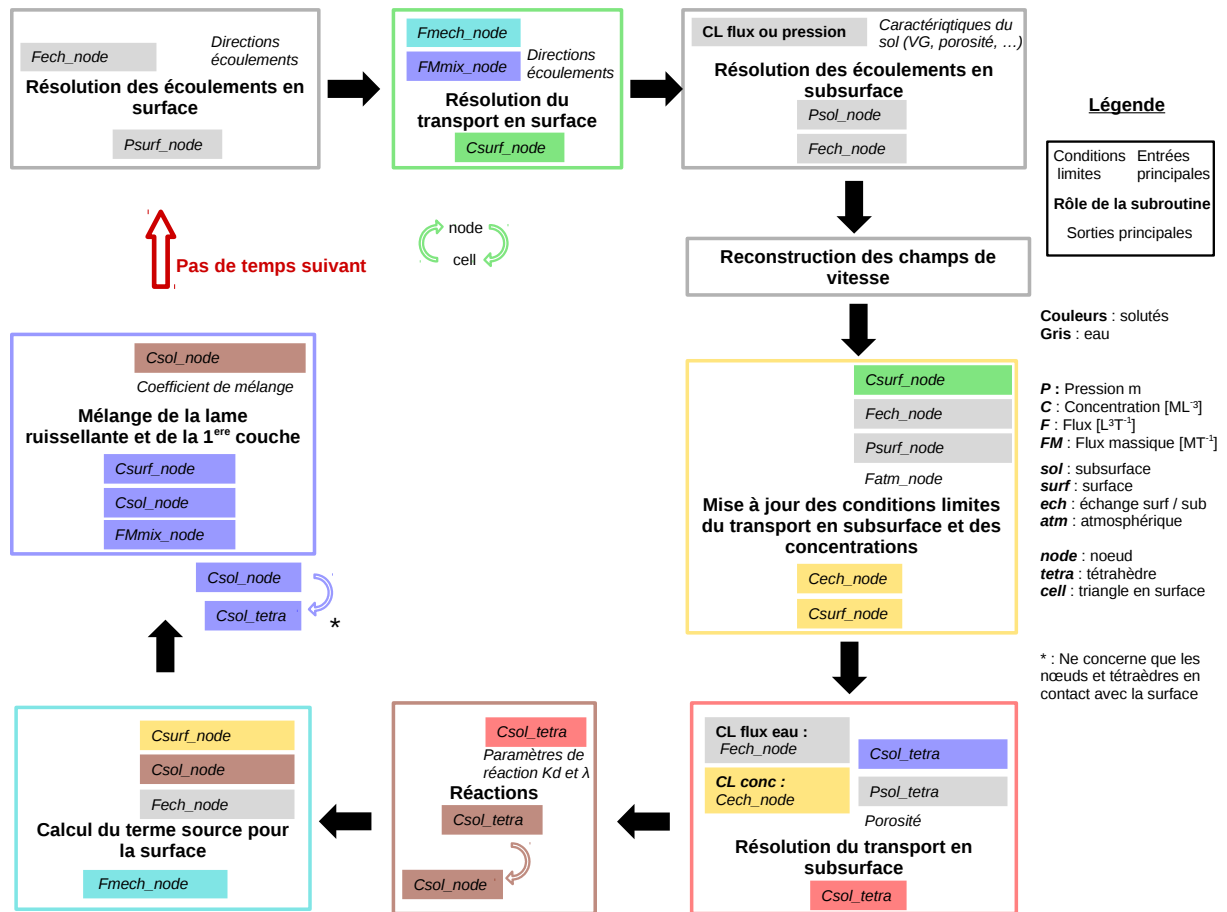


Figure 4.7 – Schéma général de la gestion du transport et du couplage dans CATHY-Pesticide.

de ce flux et des informations de pression et de concentration en surface obtenues précédemment permet de déterminer les conditions à l'interface de concentration  $C_{ech\_node}$  du transport en subsurface, ainsi que la nouvelle concentration en surface (encadré jaune à droite). La définition de ces conditions à l'interface est détaillée dans la section 4.3.2. Le transport advectif est résolu avec la méthode des volumes finis, assurant ainsi la conservation de la masse. L'information de concentration en subsurface est portée par les tétraèdres définis par le maillage (encadré rouge en bas à droite). La procédure aboutit à la mise à jour des concentrations en subsurface sur les tétraèdres  $C_{sol\_tetra}$ . Les réactions sont implémentées juste après le transport (voir détails section 4.2.3) (encadré marron en bas).

- A ce stade, les sous-routines majeures de calcul en surface et en subsurface des écoulements et du transport ont été parcourues. À partir des concentrations en surface et en subsurface ainsi que du flux d'eau échangé, le terme source pour le calcul du transport en surface du pas de temps suivant ( $F_{Mech\_node}$ ) est calculé (voir détail section 4.3.3). Celui-ci est fondé sur des flux advectifs (encadré bleu ciel en bas à gauche).
- Si au moins un nœud de surface est en situation de ponding et que l'option a été activée par



l'utilisateur, le mélange de la lame ruisselante et de la première couche de sol a lieu (encadré violet à gauche). Il s'agit d'égaliser les concentrations dans les deux compartiments en fournissant un terme source supplémentaire pour le transport en surface ( $FM_{mix_{node}}$ ) et en modifiant les concentrations dans la première couche de sol. Cette fois ce terme source n'est pas fondé sur des flux d'eau advectifs. Les détails de cette procédure se trouvent dans la section 4.3.4.

### 4.3.2 Mise à jour des conditions à l'interface du transport en subsurface et des concentrations

	↓ $Fech > 0$	↑ $Fech < 0$	
↓ $P_{surf} > 0$	<p> <math>V_{surf} = P_{surf} * aire</math>  <math>M_{surf} = V_{surf} * C_{surf}</math>  <math>V_{atm} = Fatm * \Delta t</math>  <math>Matm = V_{atm} * Catm</math> </p> <p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = (M_{surf} + Matm) / (V_{surf} + V_{atm})</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = C_{surf}</math></p>	<p> <math>V_{surf} = P_{surf} * aire</math>  <math>M_{surf} = V_{surf} * C_{surf}</math>  <math>V_{atm} = Fatm * \Delta t</math>  <math>Matm = V_{atm} * Catm</math>  <math>V_{ech} = -Fech * \Delta t</math>  <math>Mech = V_{ech} * Csol</math> </p> <p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = (M_{surf} + Matm + Mech) / (V_{surf} + V_{atm} + Vsol)</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = Csol</math></p>	↓ $Fatm > 0$
↑ $P_{surf} > 0$	<p> <math>V_{surf} = P_{surf} * aire</math>  <math>M_{surf} = V_{surf} * C_{surf}</math>  <math>V_{atm} = Fatm * \Delta t</math>  <math>Matm = 0</math> </p> <p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = M_{surf} / (V_{surf} + V_{atm})</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = C_{surf}</math></p>	<p> <math>V_{surf} = P_{surf} * aire</math>  <math>M_{surf} = V_{surf} * C_{surf}</math>  <math>V_{atm} = Fatm * \Delta t</math>  <math>Matm = 0</math>  <math>V_{ech} = -Fech * \Delta t</math>  <math>Mech = V_{ech} * Csol</math> </p> <p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = (M_{surf} + Mech) / (V_{surf} + V_{atm} + Vsol)</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = Csol</math></p>	↑ $Fatm < 0$
↓ $P_{surf} < 0$	<p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = 0</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = Catm</math></p>	<p style="background-color: #e0e0ff; padding: 2px;"><math>C_{surf} = 0</math></p> <p style="background-color: #fff9c4; padding: 2px;"><math>Cech = Csol</math></p>	↓ $Fatm > 0$
	<p>Cas impossible</p>	<p>Cas d'évaporation intense peu probable et non pris en compte.</p>	↑ $Fatm < 0$

Figure 4.8 – Mise à jour des concentrations de surface et calcul des conditions à l'interface entre la surface et la subsurface du transport en subsurface en fonction des variables de pression en surface  $P_{surf}$ , de flux d'échange  $Fech$  et de flux atmosphérique  $Fatm$ .

Cette subroutine intègre en variables d'entrée la concentration de surface, les flux d'eau échangés entre la surface et la subsurface  $Fech_{node}$ , la pression en surface  $P_{surf_{node}}$  et les conditions atmosphériques  $Fatm$ . Elle génère deux variables de sortie distinctes : la concentration de surface mise à jour  $C_{surf_{node}}$  et la concentration de soluté dans l'eau échangée entre la surface et la subsurface  $Cech_{node}$ . Dans ces calculs, les phénomènes de surface sont priorisés par rapport

aux phénomènes d'échange. La figure 4.8 présente le calcul des variables  $C_{surf\_node}$  et  $C_{ech\_node}$  en fonction des variables d'entrée  $P_{surf\_node}$ ,  $F_{ech\_node}$  et  $F_{atm\_node}$ . Pour plus de visibilité, l'information "node" a été enlevée des noms de variables dans cette figure, ainsi  $C_{ech}$  réfère bien à  $C_{ech\_node}$ , etc. Dans tous les cas pour lesquels  $F_{ech\_node} < 0$ , c'est-à-dire dans les cas d'exfiltration, la condition à l'interface du calcul du transport en subsurface correspond à la concentration des nœuds de la première couche de subsurface. Dans le cas opposé où  $F_{ech\_node} > 0$ , la concentration d'échange est déduite d'un bilan dépendant de la pression en surface et des flux atmosphériques. Le cas où il n'y a pas d'eau en surface et où des conditions d'exfiltration et de l'évaporation sont imposées ( $P_{surf\_node} < 0$ ,  $F_{ech\_node} < 0$ ,  $F_{atm\_node} < 0$ ) est physiquement envisageable dans une situation d'évaporation extrême mais peu probable. Le flux d'eau exfiltré peut transporter une concentration non nulle, ce qui n'est pas le cas du flux d'eau qui s'évapore. Tel que le couplage est envisagé dans CATHY, on obtient une impossibilité : la masse exfiltrée disparaîtrait. En effet dans le modèle il ne peut pas y avoir de soluté en surface s'il n'y a pas d'eau. C'est pourquoi ce cas en théorie possible pour l'eau n'est pas implémenté et si de telles conditions arrivent, le code renvoie un message d'erreur.

### 4.3.3 Calcul du terme source pour la surface

Cette subroutine intègre en variable d'entrée les concentrations de surface mises à jour, les concentrations en subsurface et les flux d'échange en eau et renvoie un flux massique d'échange qui servira de terme source au calcul du transport en surface au pas de temps suivant. La figure 4.9 présente les calculs du flux massique en fonction des variables d'entrée. Dans les cas d'infiltration et de pluie ( $F_{ech\_node} > 0$  et  $F_{atm\_node} > 0$ ), une distinction doit être faite en fonction de la pression en surface au pas de temps précédent. On retrouve comme dans le calcul des conditions à l'interface de concentration  $C_{ech\_node}$  le cas peu probable et non considéré d'évaporation et d'exfiltration sans eau sur la surface ( $P_{surf\_node} < 0$ ,  $F_{ech\_node} < 0$  et  $F_{atm\_node} < 0$ ).

### 4.3.4 Mélange de la lame ruisselante et de la première couche de sol

Supprimer la prise en compte de toute diffusion ou dispersion dans la résolution du transport en subsurface est un choix fort mais justifié par des raisons numériques autant qu'expérimentales (voir section 2.2.1.4). En ce qui concerne le couplage entre la surface et la subsurface, l'absence de toute diffusion n'est pas réaliste puisque cela reviendrait à négliger un processus déterminant dans le transfert de solutés : la remobilisation des solutés par le ruissellement. Dans la section 2.2.2.2, trois stratégies de couplages ont été présentées : utilisation d'une couche conceptuelle d'échange, de la continuité des variables de surface et de subsurface, et système de switch des conditions à l'interface selon les cas. Dans CATHY, le couplage principal est assuré par cette


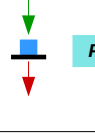
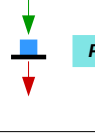








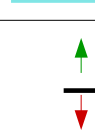



	↓ $F_{ech} > 0$	↑ $F_{ech} < 0$	
 $P_{surf} > 0$	 $F_{Mech} = (F_{atm} * C_{atm}) - F_{ech} * C_{surf}$	 $F_{Mech} = (F_{atm} * C_{atm}) - F_{ech} * C_{sol}$	 $F_{atm} > 0$
	 $F_{Mech} = - F_{ech} * C_{surf}$	 $F_{Mech} = - F_{ech} * C_{sol}$	 $F_{atm} < 0$
 $P_{surf} < 0$	 $F_{Mech} = (F_{atm} * C_{atm}) - F_{ech} * C_{surf}$	 $F_{Mech} = 0$	 $F_{atm} > 0$
	 $F_{Mech} = - F_{ech} * C_{surf}$	Cas d'évaporation intense peu probable et non pris en compte.	 $F_{atm} < 0$
	Situation au pas de temps précédent  $P_{surf} > 0$  $P_{surf} < 0$		

Figure 4.9 – Calcul du flux massique, terme source pour le transport de surface au pas de temps suivant.

dernière technique. Le module de mélange intégré à CATHY que l'on présente ici a pour but de représenter un processus physique précis : la remobilisation des solutés de subsurface, qui peut être dû à du transport diffusif à l'interface, mais également à l'adsorption des solutés en surface, phénomène que l'on ne peut pas représenter dans CATHY à l'heure actuelle. Ainsi, le couplage par switch des conditions à l'interface est appliqué partout sans exception et dans un second temps, le module de mélange est activé. Le couplage dans CATHY reste donc largement physique, et intègre seulement une légère part de conceptuel.

Le module de mélange des solutés entre la lame ruisselante et la première couche de sol est présenté sur la figure 4.10. A la fin d'un pas de temps, pour chaque nœud en ponding, la concentration de la subsurface et de la lame ruisselante est égalisée. La subroutine de mélange produit un terme source pour le transport en surface en fonction de la masse échangée, et la concentration en subsurface est corrigée. L'égalisation instantanée des concentrations est une méthode de mélange basique, ne prenant pas en compte des facteurs qui peuvent influencer la remobilisation comme par exemple la vitesse de ruissellement. Cependant, avec l'implémentation de ce module, tous les éléments sont présents dans le code CATHY pour qu'un futur utilisateur soit facilement

capable de complexifier le mélange et puisse se rapprocher d'une représentation mécaniste des processus physiques.

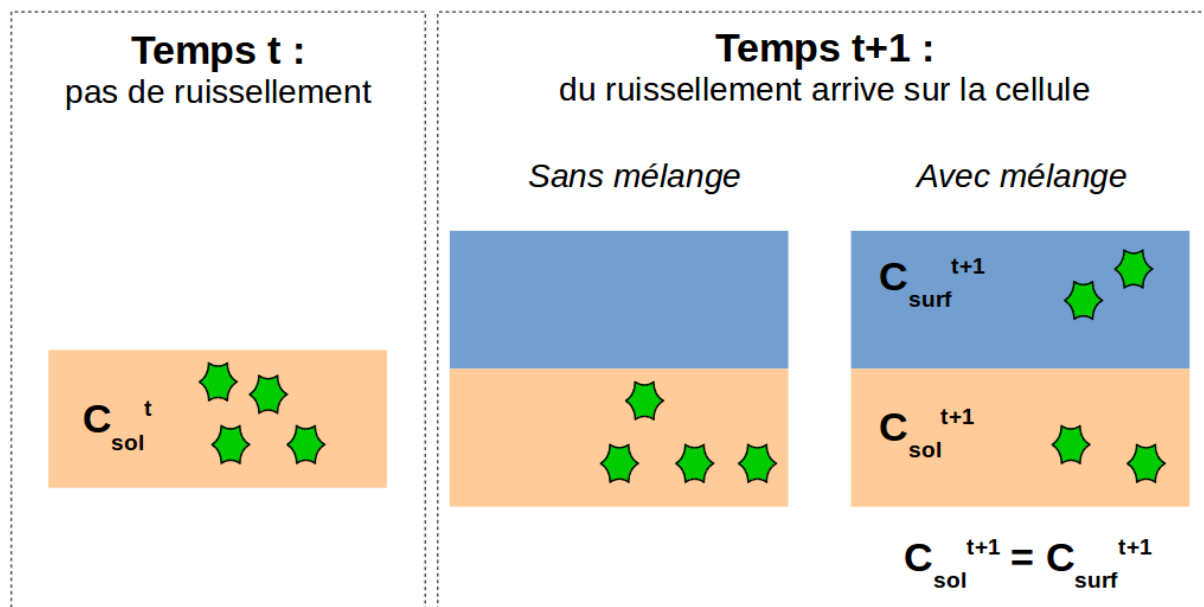


Figure 4.10 – Principe de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol.

L'ajout des processus de mélange dans le code CATHY est complexe, particulièrement sur les deux points suivants :

- Pour comparer et égaliser les concentrations de la lame ruisselante et de la première couche de sol, les informations doivent être portées par la même entité. De même, pour que le terme source calculé  $FM_{mix_{node}}$  soit intégré facilement dans le transport de surface du pas de temps suivant, il est logique qu'il prenne la même forme que le terme source  $FM_{ech_{node}}$  basé sur les flux advectifs, soit un flux massique sur les nœuds. Or on sait que le passage des concentrations des tétraèdres aux nœuds et inversement en subsurface induit de la dispersion numérique. La description de cette problématique et de la solution adoptée est détaillée dans la section 4.3.4.1.
- Le flux massique de mélange est calculé au temps  $t$  sur tous les nœuds en ponding et il est intégré au transport en surface au début du temps  $t + 1$ . Le fait que la situation de ponding / no ponding des cellules puisse changer entre le temps  $t$  et  $t + 1$  entraîne des erreurs qu'il faudra corriger (voir section 4.3.4.2).

#### 4.3.4.1 Intégration des informations du mélange dans les tétraèdres de subsurface

La figure 4.11 schématise sur quelles entités se trouve l'information de concentration en surface et en subsurface autour de la subroutine de mélange. Comme la variable que l'on veut obtenir  $FM_{mix_{node}}$  correspond à un flux massique sur les nœuds, le mélange se fait sur les nœuds. Or

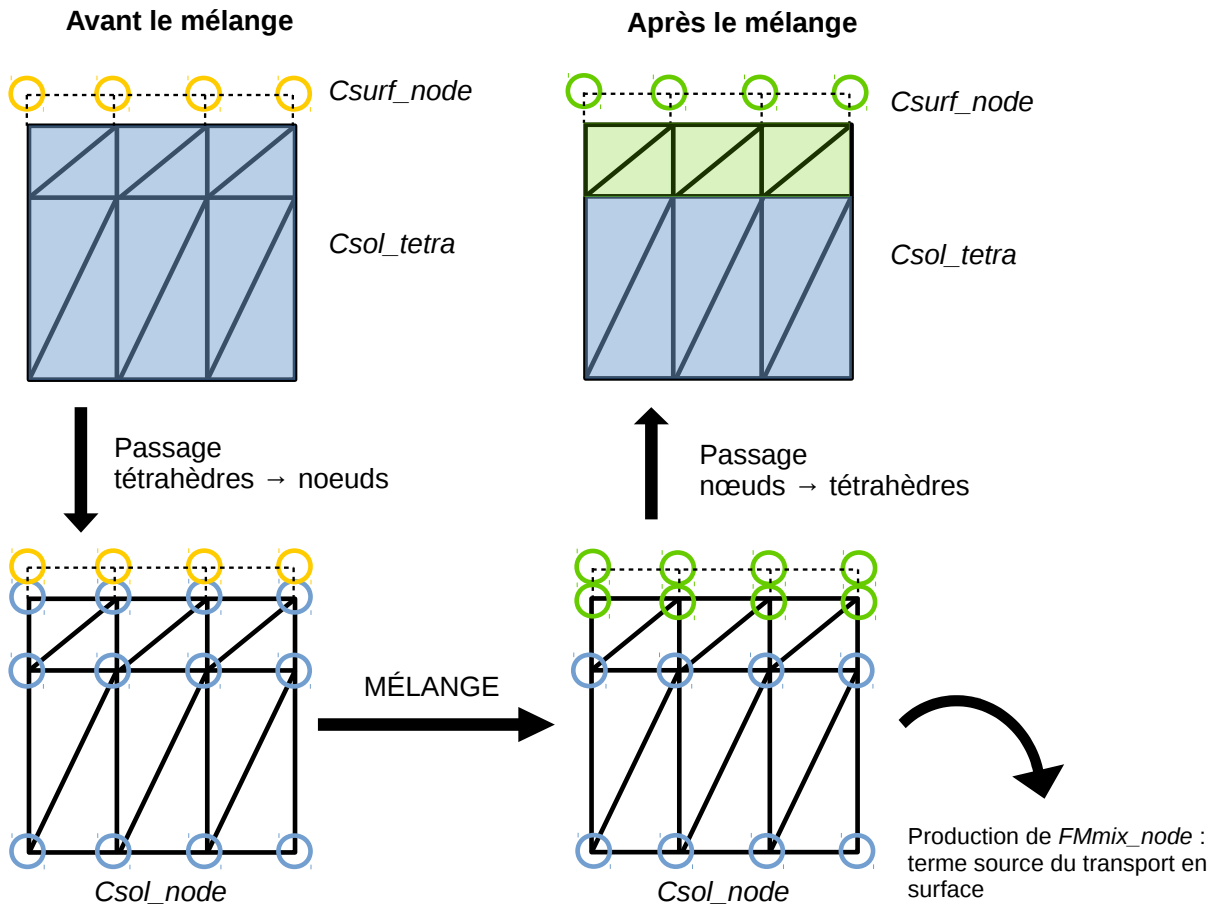
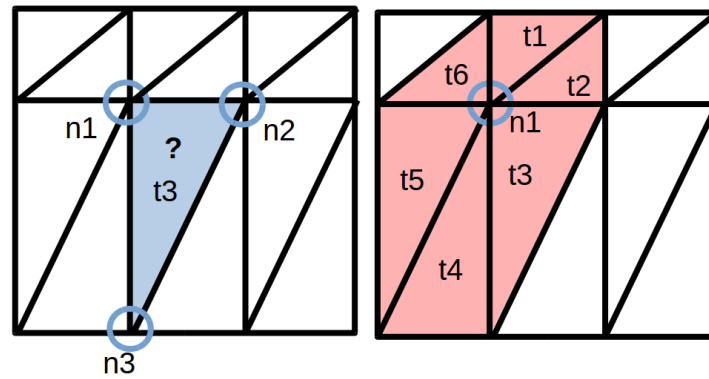


Figure 4.11 – Position de l'information de concentration en marge de la subroutine de mélange sur une coupe verticale d'un maillage simple (deux couches de sol).

la concentration en subsurface se trouve sur les tétraèdres ( $C_{sol\_tetra}$ ). L'enjeu est donc de réussir à passer l'information de concentration des tétraèdres aux nœuds en subsurface, effectuer le mélange, et transmettre les nouvelles concentrations de la première couche de subsurface aux tétraèdres. Et cela en respectant deux impératifs : conservation de la masse et minimisation de la diffusion numérique.

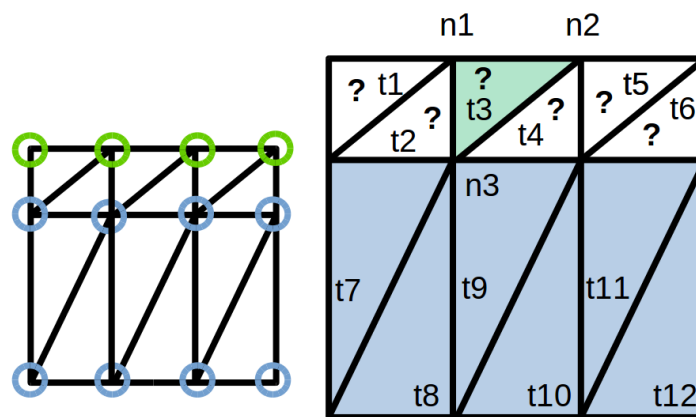
Le passage des tétraèdres aux nœuds avant le mélange est simple : la masse présente dans chaque tétraèdre est divisée en quatre et partagée entre les quatre nœuds qui le composent. Ainsi, la masse de soluté présente sur un nœud correspond à la somme de la contribution de chacun de ses tétraèdres voisins. Le passage des nœuds aux tétraèdres lui, est plus complexe. La figure 4.12 présente la méthode générale de passage des nœuds aux tétraèdres. La masse présente dans un tétraèdre correspond à la somme des contributions massiques de chaque nœud qui le composent ( $CM_{ni}^{tj}$ ). La contribution massique d'un nœud  $n1$  à un tétraèdre  $t3$  dépend du rapport entre le volume d'eau présent dans le tétraèdre  $t3$  et le volume d'eau présent dans tous les tétraèdres liés au nœud  $n1$ . Il est utile de calculer ce rapport et non de diviser directement la masse au nœud  $n1$  par le nombre de tétraèdres voisins dans le cas où la diversité des volumes des tétraèdres est forte



$$M_{t3} = CM_{n1}^{t3} + CM_{n2}^{t3} + CM_{n3}^{t3} \quad (4.4)$$

$$CM_{n1}^{t3} = M_{n1} * \frac{V_{t3}}{V_{t1} + V_{t2} + V_{t3} + V_{t4} + V_{t5} + V_{t6}} \quad (4.5)$$

Figure 4.12 – Méthode générale suivie par l’algorithme de passage des nœuds aux tétraèdres (coupe verticale d’un maillage simple de deux couches de sol).  $M$  est la masse [M],  $CM$  est la contribution massique des nœuds aux tétraèdres [M] et  $V$  est un volume d’eau [ $L^3$ ].



$$M_{t3}(k+1) = M_{t3}(k) + \frac{V_{t1}}{V_{t1} + V_{t2} + V_{t3}} * (M_{n1}(k+1) - M_{n1}(k)) + \frac{V_{t2}}{V_{t3} + V_{t4} + V_{t5}} * (M_{n2}(k+1) - M_{n2}(k)) \quad (4.6)$$

$$M_{t7}(k+1) = M_{t7}(k) \quad (4.7)$$

Figure 4.13 – Méthode spécifique suivie par l’algorithme de passage des nœuds aux tétraèdres lors du mélange (coupe verticale d’un maillage simple de deux couches de sol).  $M$  est la masse [M],  $V$  est un volume d’eau [ $L^3$ ],  $k$  correspond à la situation avant le mélange et  $k+1$  à celle d’après.

autour d’un nœud. Ainsi, la masse présente au nœud  $n1$  sera répartie dans les tétraèdres  $t1$ ,  $t2$ ,  $t3$ ,  $t4$ ,  $t5$  et  $t6$  en fonction de leurs volumes respectifs, et non de façon égalitaire. Cette méthode conserve la masse mais induit une diffusion numérique.

Dans le cas spécifique du mélange (figure 4.13), seules les concentrations des nœuds de la première couche de sol sont modifiées. Pour éviter la diffusion numérique, toutes les concentrations dans les tétraèdres dont les nœuds le composant ne sont pas en surface sont conservées. Pour le reste des tétraèdres, leur concentration sera modifiée en suivant le changement de contribution

des nœuds de surface. Ainsi dans l'exemple de la figure 4.13, la masse au tétraèdre  $t3$  est corrigée en fonction de la différence avant mélange / après mélange des nœuds  $n1$  et  $n2$ .

#### 4.3.4.2 Correction du mélange après le transport en surface

Le terme source de solutés intégré au début d'un pas de temps dans la sous-routine de transport en surface est la somme des flux massiques liés au flux d'eau "réels"  $FMech_{node}$  et le flux massique lié au mélange  $FMix_{node}$ . Ceux-ci sont calculés à la fin du pas de temps précédant. Comme  $FMix_{node}$  ne repose pas sur des flux d'eau et que la situation de ponding d'une cellule peut évoluer d'un pas de temps à l'autre, des erreurs de bilans de masse peuvent être induites. Par exemple sur la figure 4.14, le transport en surface aboutit à deux situations différentes mais toutes deux sources d'erreurs. Dans la situation 1, le calcul des écoulements en surface aboutit à un volume d'eau nul à la surface de la cellule 1. Par contre, après le calcul du transport de solutés en surface, la masse en surface de la cellule 1 est supérieure à 0. Par défaut, la concentration est remise à 0 sur cette cellule et de la masse de soluté disparaît. Dans la situation 2, la cellule est toujours en ponding, mais les flux de solutés sortant de la cellule 2 étaient plus grands que les flux entrant et la masse déjà présente sur la cellule réunis. Dans ce cas, la cellule est en "dette" et si la concentration est amenée par défaut à 0, on augmente artificiellement la masse totale du système.

Pour corriger ces erreurs, un vecteur a été créé, dans lequel sont stockés si besoin sur chaque cellule les surplus ou dettes pendant le transport en surface. Ce vecteur de correction sur les cellules est passé sur les nœuds, puis est appliqué sur la première couche des nœuds de subsurface. L'information est alors passée des nœuds aux tétraèdres en suivant la procédure expliquée dans la section 4.3.4.1. Cette correction permet de garder un bilan de masse cohérent dans tout le système, mais modifie localement les dynamiques de couplage en faisant transiter ponctuellement de la masse de la surface à la subsurface sans processus concret lié.

#### 4.3.5 Amélioration du bilan de masse du couplage

Tout au long de cette thèse et en particulier lors des travaux sur la mise en place du module de mélange, quelques modifications supplémentaires du code ont été effectuées, chacune contribuant à l'amélioration du bilan de masse.

- L'information des termes sources pour le calcul du transport en surface  $FMech_{node}$  et  $FMix_{node}$  passe maintenant d'un pas de temps à l'autre sous forme de masse et non de flux. Elle est convertie au début du pas de temps suivant en flux avec le  $\Delta t$ . C'est une façon de s'assurer que la masse échangée entre la surface et la subsurface sera correcte, même si le  $\Delta t$  change entre deux pas de temps.

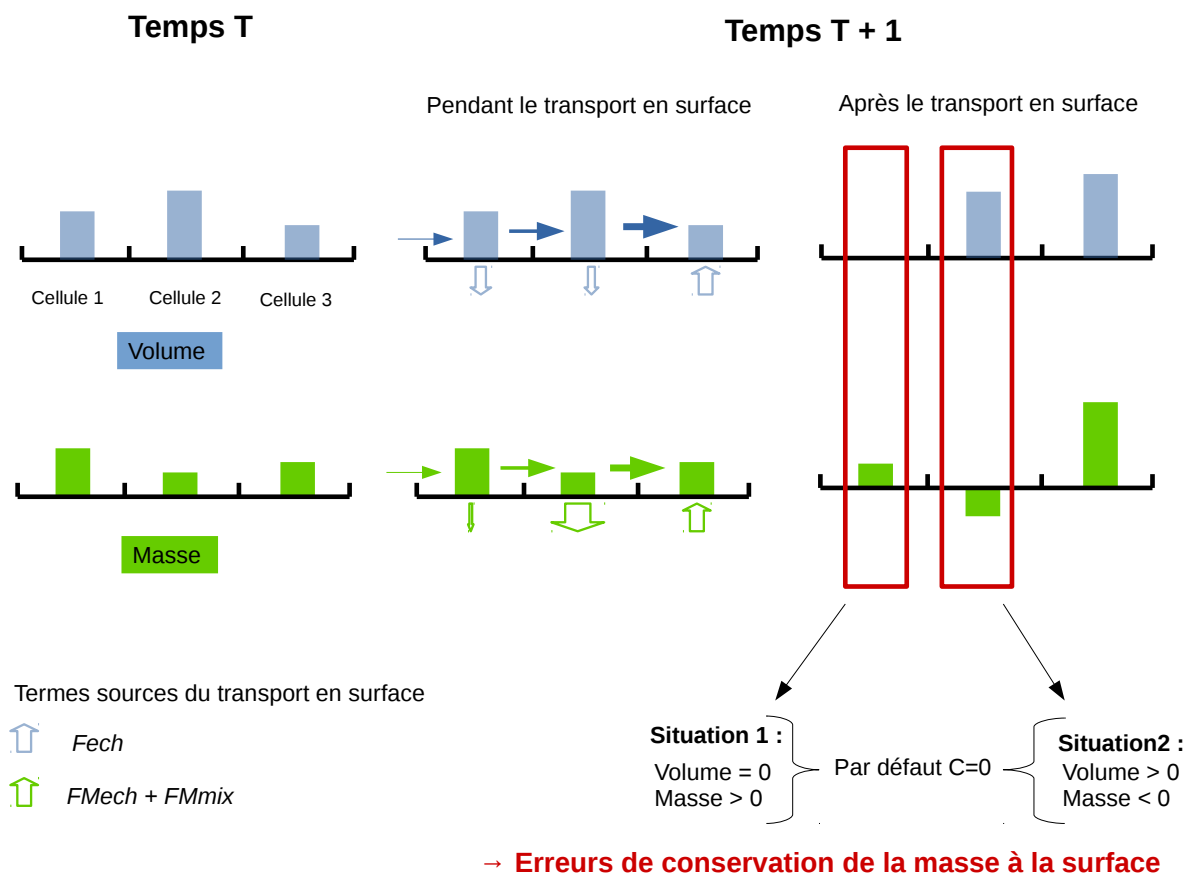


Figure 4.14 – Illustration de deux cas problématiques posés par la mise en place du mélange entre la lame ruisselante et la première couche de subsurface.

- Une autre modification concerne le calcul des écoulements et du transport en surface et le passage de l'information des nœuds aux cellules. Auparavant, la méthode ne distinguait pas les nœuds sur les côtés du domaine possédant une ou deux cellules voisines des nœuds "internes" possédant 4 cellules voisines, induisant une erreur de bilan de masse à chaque pas de temps. Dans la version actuelle, le nombre de cellules voisines d'un nœud est pris en compte et le passage des nœuds aux cellules est conservatif. La même stratégie a été appliquée en subsurface au passage de nœuds aux tétraèdres de la saturation.
- Une troisième correction concerne l'application des conditions à l'interface pour le transport des solutés en subsurface. Dans la version précédente du code, les conditions à l'interface calculées dans la sous-routine concernée (figure 4.7, encadré jaune) étaient appliquées progressivement pendant les pas de temps advectifs consécutifs pour aboutir au dernier pas de temps advectif à la condition à l'interface correcte. Ce choix avait été fait vraisemblablement pour adoucir les changements de conditions à l'interface mais n'était pas conservatif. La suppression de cette option par évolution progressive n'a pas impliqué d'instabilité, par contre le bilan de masse a là aussi été amélioré.



## 4.4 Conclusion sur l'implémentation de CATHY-Pesticide et sur les hypothèses liées

Ce chapitre a présenté toutes les versions de CATHY développées dans cette thèse et qui ont permis d'aboutir à une version surface-subsurface couplée du modèle. Les étapes de révision du couplage et de la mise en place du module de mélange ont constitué un challenge particulier puisqu'il a fallu s'adapter à la structure du code, respecter la physique des processus, garantir la stabilité numérique et assurer la conservation de la masse. Plusieurs hypothèses de simplification ont été posées :

- Le transport est purement advectif en subsurface et tous les processus de transport dispersifs ou diffusifs sont négligés. Cette hypothèse est surtout motivée par l'absence d'autre solution satisfaisante pour supprimer ou limiter fortement la diffusion numérique. Elle se justifie également par les difficultés de caractérisation des paramètres diffusifs (voir section 2.2.1.4).
- Aucune réaction n'est considérée en surface (photolyse, hydrolyse, volatilisation). C'est une hypothèse forte concernant la modélisation du devenir des solutés. Toutefois comme dans cette thèse le but est de valider le transport couplé et les interactions surface-subsurface dans des contextes agro-pédologiques et climatiques contrastés, il paraît prématuré de complexifier la représentation des processus de surface.
- Le module de mélange de la lame ruisselante et de la première couche de sol mène à l'égalisation des concentrations dans les deux compartiments à chaque pas de temps. Dans les faits, ce mélange dépend de plusieurs paramètres (vitesse de l'écoulement, nature et structure du sol , ...). Cette hypothèse a été choisie par défaut d'information supplémentaire précise quant à la valeur du rapport moyen entre les concentrations de surface et du sol lors de la remobilisation des solutés, mais on gardera en mémoire que le mélange n'est en réalité souvent pas total. L'ajout d'un coefficient de mélange paramétrable est tout à fait envisageable dans le futur. De plus, le mélange dépend ici de la hauteur de la première couche numérique. L'influence de ce paramètre sur la variation de variables de sorties sera étudiée dans le chapitre 6.

Ces hypothèses seront discutées lors des validations successives du code dans deux contextes très différents : une application avec des transferts seulement en subsurface sur des données de laboratoire à l'échelle de la maquette dans le chapitre 5 et simulation d'un versant réel avec le modèle couplé surface-subsurface dans le chapitre 6.

## Chapitre 5

# Evaluation du modèle réactif de subsurface CATHY-FTR

Ce chapitre décrit l'évaluation de CATHY-FTR, la version de CATHY développée dans cette thèse et qui permet de simuler les flux d'eau et de solutés réactifs. Le modèle est ici confronté à des données de laboratoire issues de la maquette MASHYNS (section 3.3.1), avec plusieurs objectifs : vérifier la capacité du modèle à reproduire des données expérimentales ; identifier via une analyse de sensibilité les paramètres les plus influents dans ce contexte ; et globalement mieux appréhender le fonctionnement du modèle. Le travail est mené exclusivement avec la partie subsurface du modèle, et basé sur des données d'une expérience à petite échelle sur la maquette MASHYNS. Comme CATHY-FT (Weill et al., 2011) (transport non réactif) n'a été testé que sur des versants virtuels, il constitue malgré tout une étape conséquente de validation. Dans cette version, le module de reconstruction des champs de vitesse (Scudeler et al., 2016b) n'est pas encore intégré. Sa nécessité n'a pas été mise en évidence dans le cadre des simulations dans le contexte particulier de MASHYNS, et ce module ne s'est pas avéré indispensable puisque l'expérience n'induit pas de gradient de vitesse fort dans la maquette. Ce chapitre fait l'objet d'un article soumis en septembre 2017 au journal *Environmental Modelling and Software*.

### 5.1 Méthode d'évaluation des performances du modèle

La validation de la partie subsurface du modèle CATHY-FTR se déroule en trois étapes. Dans un premier temps, les résultats du modèle sont confrontés aux données de laboratoire collectées pendant les suivis de transfert de solutés réactifs dans MASHYNS lors de l'expérimentation SSTM (Subsurface Solute Transfer in MASHYNS) décrite dans la section section 3.3.1.2. Comme expliqué dans la section 2.2.4.2, le critère de validations NSE (coefficient de Nash Sutcliffe) seul ne suffit parfois pas à donner des bonnes évaluations sur la qualité des simulations, et une com-

binaison avec un autre critère, la RMSE (racine des moyennes des erreurs au carré) par exemple, est conseillée. Ainsi pour confronter les résultats de CATHY-FTR en subsurface aux données de l'expérimentation avec MASHYNS, la méthode FITEVAL (Ritter and Munoz-Carpena, 2013) est utilisée. Elle permet d'évaluer les modèles en se basant sur deux facteurs, le NSE et la RMSE, mais aussi en déterminant l'incertitude associée à la combinaison de ces deux critères d'évaluation. L'incertitude de l'évaluation ainsi que les biais éventuels sont obtenus par l'approximation de leur fonctions de probabilité par bootstrapping, donnant à la fois la valeur du critère d'évaluation et les statistiques associées. L'évaluation de qualité de l'adéquation entre les données et les simulations est basée sur le critère de Nash-Sutcliffe : "peu satisfaisant" de 0 à 0.65, "satisfaisant" de 0.65 à 0.80, "bon" de 0.8 à 0.9 et "très bon" à plus 0.9. Les statistiques liées à l'évaluation permettent d'approfondir sa compréhension et son analyse, et ainsi de réduire la subjectivité du modélisateur. Pour cette première étape, le modèle est paramétré avec les mesures disponibles des propriétés hydrodynamiques de la maquette (Paris Anguela, 2004). Le choix des variables de sorties analysées dépend des objectifs de l'étude. Ici, il s'agit d'évaluer la capacité du modèle à reproduire les données observées d'une expérience de transfert d'une masse de soluté à travers un sol. On choisit donc d'évaluer le modèle sur une variable de sortie qui rend compte en globalité du transfert : le cumul de masse à la sortie du système pour un traceur et deux solutés réactifs pour chacune des deux premières phases de l'expérimentation -phase estivale et phase hivernale- et sur deux solutés réactifs de la phase représentant le printemps.

Dans un deuxième temps, une analyse de sensibilité de type Morris est menée sur les deux solutés réactifs de la phase estivale (Clomazone et Imazamox) et les deux solutés réactifs de la phase hivernale (Isoproturon et Mesosulfuron). Elle permet d'étudier les effets de la variation de huit paramètres d'entrée sur des variables de sorties diverses. Comme une analyse de sensibilité a du sens dans un contexte précis et pour des variables de sortie données, ces dernières doivent être définies selon les objectifs de l'étude. A noter, les variables de sorties doivent être sous forme non dynamique, et donc être composé d'une valeur par simulation. Le traitement de chroniques dans une analyse de sensibilité, par exemple via des méthodes de décomposition du signal, est très complexe à implémenter. Ici, on veut mieux comprendre l'influence des paramètres d'entrée sur la dynamique des flux d'eau et sur le transport des solutés. En ce qui concerne les écoulements, les flux en milieu insaturé sont plus complexes à simuler que les flux en zone saturée, il est donc pertinent de s'intéresser à la recharge de la nappe, c'est-à-dire le flux passant de zone insaturée à zone saturée. Pour les solutés, la chronique de la concentration en sortie de drain est une variable de sortie pertinente pour évaluer le transfert dynamique des solutés dans le domaine. Pour compléter, quatre variables intégratives sont prises en compte dans l'analyse de sensibilité : timing

du pic de concentration en sortie, valeur de la concentration au pic, temps de percée (quand la concentration en sortie dépasse 5% du pic) et valeur de la NSE sur le cumul massique en sortie de drain.

Dans une troisième étape, un jeu de paramètres est sélectionné parmi les combinaisons utilisées pour l'analyse de sensibilité en se basant sur la NSE sur le cumul de masse sortant du système. Il est appliqué sur deux autres solutés réactifs et pour une autre phase représentant le printemps. Il s'agit d'une démarche de sélection optimale visant à estimer si un jeu de paramètres efficace dans un certain contexte hydrologique peut l'être dans un autre contexte, raisonnablement différent.

## 5.2 Mise en place de l'expérience SSTM sur le modèle CATHY-FTR

Les propriétés hydrodynamiques du sol de la maquette MASHYNS sont présentées dans la section 3.3.1. Comme le sol de la maquette MASHYNS est considérée comme homogène, ces paramètres sont appliqués sur toutes les couches.

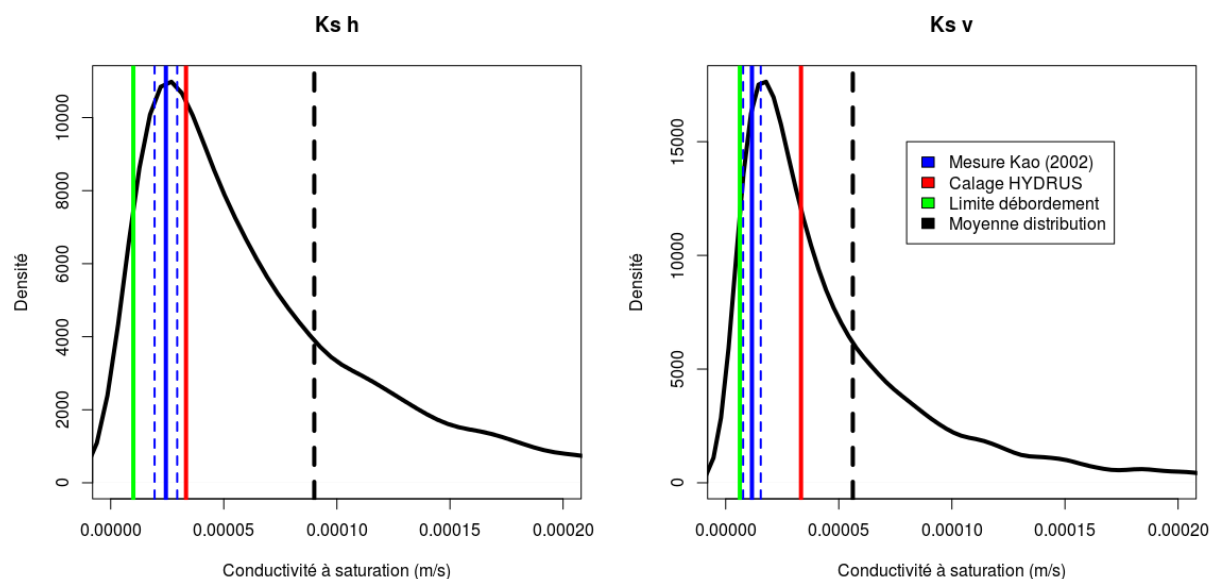


Figure 5.1 – Illustration pour les conductivités à saturation horizontales et verticales de toutes les valeurs à disposition. Les lignes bleues en pointillé représentent l'incertitude des mesures de Kao (2002).

La figure 5.1 illustre la façon dont la valeur de conductivité à saturation a été fixée pour les simulations avec le modèle CATHY. On dispose de plusieurs valeurs de conductivités hydrauliques mesurées sur MASHYNS. Deux séries de mesures détaillées dans le chapitre 3 section 3.3.1 ont permis de déterminer des valeurs de conductivité horizontale et verticale avec une incertitude raisonnable (en bleu sur la figure 5.1). Une troisième valeur de conductivité correspond à un paramètre calé dans des simulations de l'expérimentation SSTM avec le modèle HYDRUS (en

rouge) dans une étude encore non publiée. Enfin, des tests ont été menés avec CATHY pour déterminer quel était le couple de conductivité minimum ( $K_s h, K_s v$ ) pour lequel le sol de la maquette ne débordait pas dans les conditions de l'expérience SSTM (en vert). Pour choisir une valeur de conductivité à saturation commune dans l'application de CATHY à l'expérience SSTM et dans l'analyse de sensibilité associée, la description de la densité de fonction de la conductivité à saturation a été anticipée. La conductivité hydraulique à saturation est représentée classiquement par une distribution lognormale (Coutadeur et al., 2002; Paris Anguela, 2004; Fox et al., 2010; Schwen et al., 2011) et l'écart type est souvent considéré comme égal à la moyenne quand on ne dispose pas d'information suffisante (Muñoz-Carpena et al., 2010). Un couple de valeur ( $K_s h, K_s v$ ) respectant l'anisotropie des valeurs mesurées par Kao (2002) a donc été fixé tel que la distribution recouvre l'ensemble des mesures énoncées ci-dessus. La distribution correspondante est tracée en noir sur la figure 5.1 et la moyenne est en pointillé noir. On retiendra que les valeurs de conductivités choisies (pointillé noir) sont bien au dessus des autres valeurs, mais d'un facteur 5 environ, ce qui reste raisonnable pour une paramètre de conductivité à saturation.

Comme exposé dans la section 3.3.1, les paramètres des courbes de rétention hydrauliques ont été déterminés de façon expérimentale. L'expérience SSTM se découpe en quatre phases différenciées par l'intensité du flux de pluie alimentant la maquette. Les trois premières phases représentent un enchaînement de trois saisons (été, hiver, printemps) et la dernière phase, plus longue, permet de rincer la maquette. Au début des trois premières phases, le mélange de pesticide est lié à l'eau de pluie et appliquée pendant une heure. L'expérience est détaillée dans le chapitre 3, section 3.3.1.2. Les deux solutés choisis par batch possèdent des propriétés physico-chimiques différentes (coefficient d'adsorption et constante de dégradation, voir tableau 5.1). Les valeurs de  $K_d$  correspondent au produit du  $K_{OC}$  issu de la IUPAC (2007) et du taux de matière organique présente dans le sol de MASHYNS ( $F_{OC} = 0.02$ ).

Tableau 5.1 – Constante de demi-vie et coefficient d'adsorption des six solutés étudiés durant les trois différents batchs de l'expérience SSTM. Les valeurs sont issues de la IUPAC (2007), exceptée <sup>(a)</sup> qui est issue de la base de donnée de Cornell University.

	Soluté	Demi-vie DT 50 (d)	Coefficient d'adsorption $K_{OC}$
Batch 1 (été)	Clomazone	89	300
	Imazamox	70	15 <sup>(a)</sup>
Batch 2 (hiver)	Isoproturon	12	122
	Mesosulfuron	45	92
Batch 3 (printemps)	Bentazone	45	55
	Sulcotrione	25	36

La simulation SSTM se compose en quatre phases qui se distinguent par des intensités de pluie différentes. Les trois premières phases sont représentatives d'une année de précipitations

sur un contexte de cultures drainées en France : la phase 1 correspond à des conditions estivales avec 24 mm de pluie en 24h, la phase 2 représente l'hiver, avec 180 mm de pluie en 48 h et la phase 3 correspond au printemps avec 52 mm de pluie en 21 h, enfin la dernière phase, plus longue, fait office de rinçage de la maquette avec 350 mm en 207 h.

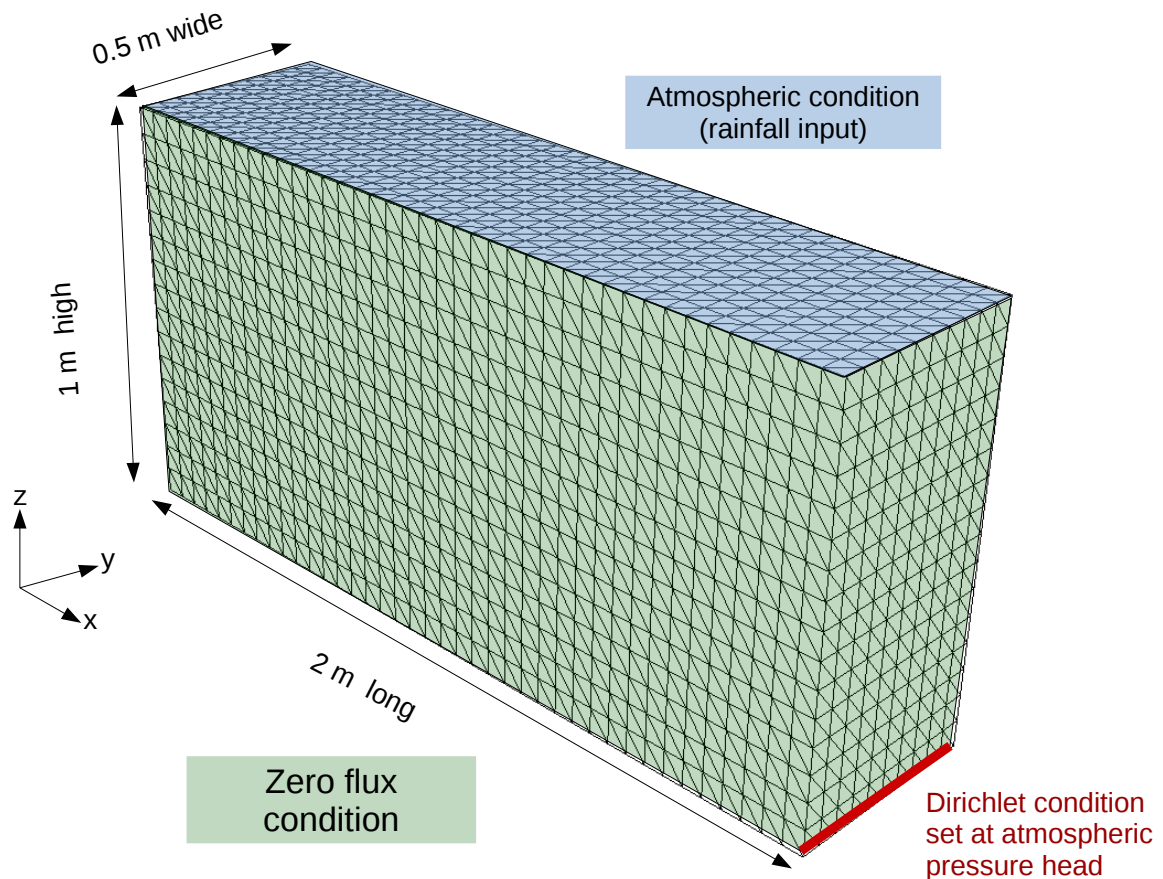


Figure 5.2 – Maillage 3D du domaine avec les conditions aux limites appliquées pour représenter les conditions de l'expérience SSTM (maillage : 5 cm \* 5 cm et 16 couches de sol).

Lors des simulations sur CATHY, une condition à l'interface de type atmosphérique est appliquée sur la surface. Une condition de pression nulle est appliquée sur une rangée de nœuds au coin inférieur du domaine pour représenter le drain à pression atmosphérique (voir figure 5.2). Partout ailleurs, des conditions de flux nul sont appliquées. L'état initial correspond à un régime permanent, les valeurs de pression en entrée ont été obtenues par une simulation de 300 h avec une pluie constante de 1 mm/h, intensité correspondante à la première phase de l'expérimentation SSTM. La concentration initiale dans l'ensemble du domaine est nulle. Le maillage de surface est discrétisé en 10 x 40 cellules uniformes de 5 cm sur 5 cm. Ce maillage est projeté verticalement pour obtenir un domaine 3D de 1 m de profondeur discrétisé en 16 couches uniformes. Au total, le maillage est composé de 7667 nœuds et de 12800 tétraèdres.

### 5.3 Performances initiales du modèle sur les données de MASHYNS

La figure 5.3 (a) présente les performances initiales du modèle sur le flux d'eau en sortie du drain durant l'expérience de traçage. On rappelle que les données disponibles sur l'hydrodynamique de l'expérience sur MASHYNS ne sont que des données de sortie d'eau, on ne dispose pas de données de teneur en eau ou de pression à l'intérieur de la maquette. Les simulations sont assez proches des données observées, sauf à 72 h. A ce moment pendant l'expérimentation, l'alimentation en eau de la pluie a été changée et arrêtée pendant quelques minutes, provoquant une baisse du flux de sortie momentanée que l'on ne retrouve pas dans les simulations (puisque non simulée). On observe globalement beaucoup plus de petites oscillations sur les données liées à l'expérimentation que sur la simulation qui est relativement stable.

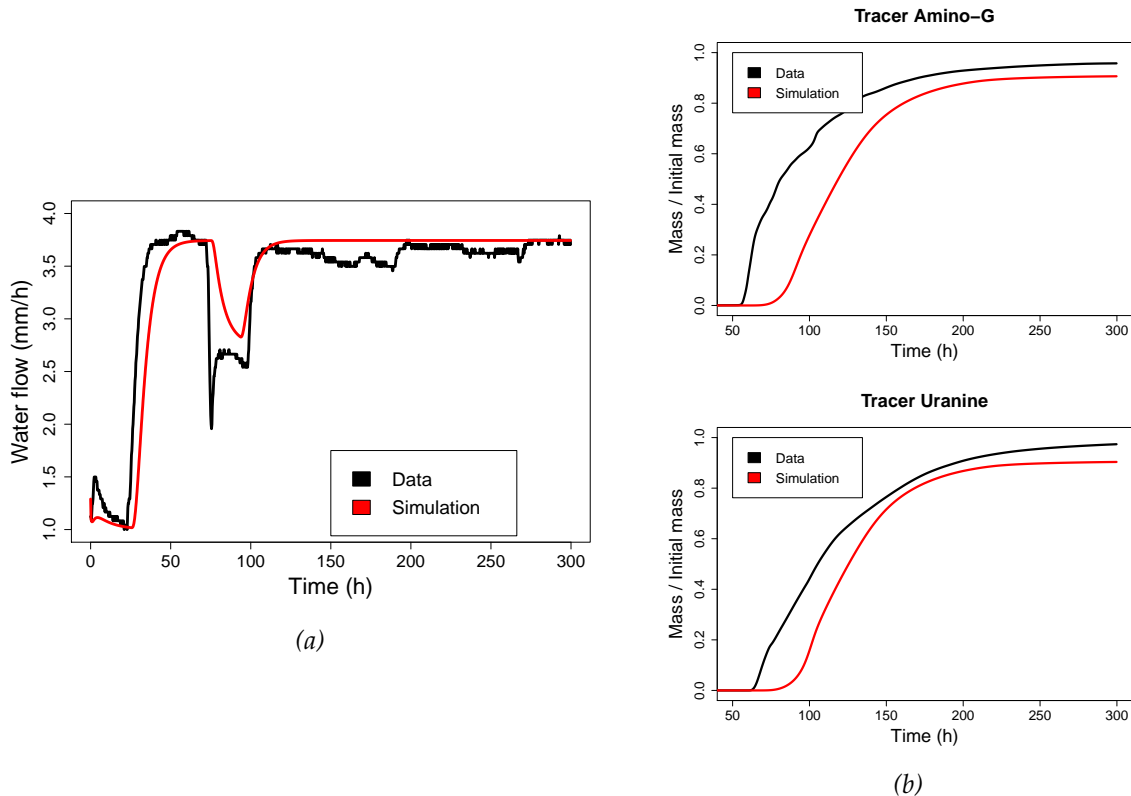


Figure 5.3 – Test et évaluation des flux d'eau et de traceurs non réactifs lors de l'expérience de traçage : (a) flux de sortie d'eau et (b) cumul massique de sortie du traceur Amino-G (haut) et Uranine (bas). L'évaluation doit être lue conjointement avec la colonne de l'intervalle de confiance de NSE pour une interprétation correcte des résultats.

Concernant le transport non réactif, l'évolution au fil du temps du ratio entre le cumul de masse en sortie et la masse initiale totale est montré pour deux traceurs, amino-G et uranine, respectivement appliqués lors des phases estivale et hivernale (figure 5.3b). Les deux traceurs montrent des retards importants par rapport aux données observées : le temps de percée est plus élevé de 40 h dans les simulations. On remarque aussi que les temps de percée, observés

Tableau 5.2 – Performance des flux d'eau et de traceurs non réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets). On rappelle que l'évaluation doit être lue conjointement avec la colonne de l'intervalle de confiance de NSE pour une interprétation correcte des résultats.

	NSE	RMSE [-]	Évaluation
Hydrodynamique	0.795 [0.338-0.954]	0.333 [0.159-0.494]	Acceptable
Amino-G	0.739 [0.131-0.937]	0.188 [0.1074-0.273]	Acceptable
Uranine	0.829 [0.455-0.953]	0.158 [0.092-0.231]	Bon

Tableau 5.3 – Performance des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets).

		NSE	RMSE [-]	Évaluation
Lot1 Été	Clomazone	0.577 [-0.28-0.882]	0.333 [0.136-0.329]	Non satisfaisant
	Imazamox	0.775 [0.552-0.905]	0.107 [0.086-0.125]	Acceptable
Lot 2 Hiver	Mesosulfuron	0.751 [0.539-0.896]	0.144 [0.104-0.177]	Acceptable
	Isoproturon	0.858 [0.608-0.948]	0.102 [0.069-0.141]	Bon
Lot 3 Printemps	Bentazone	0.781 [0.267-0.964]	0.165 [0.078-0.255]	Acceptable
	Sulcotrione	0.795 [0.391-0.957]	0.142 [0.076-0.217]	Bon

comme simulés, sont quasi équivalents pour les deux phases, montrant ainsi que le flux d'eau de la phase estivale ne participe pas beaucoup au transfert des solutés. 300 h après le début de la simulation, la quasi-totalité des traceurs sont sortis du système. Sur ces traceurs, le critère NSE est relativement moyen et évalué comme se situant entre acceptable et bon (voir tableau 5.2).

Si on étudie le transport réactif on constate que mis à part la Clomazone, les simulations du cumul des flux massiques à la sortie du drain produisent des résultats acceptables ou bons vis-à-vis des données observées (figure 5.5 et tableau 5.3). Comme pour les traceurs, on retrouve un retard significatif dans le temps de percée des solutés simulés par rapport aux données, en particulier pour les solutés de la troisième phase (printemps), Bentazone et Sulcotrione. Les données observées du Mesosulfuron ne couvrent pas la totalité de l'expérience. En effet à partir de 140 h, la concentration de sortie du Mesosulfuron est passée sous la limite de quantification, ce qui explique le manque de données expérimentales pour ce soluté.

Tableau 5.4 – Bilan de masse calculé 300 heures après le début de l'expérience pour les six solutés réactifs.

Soluté	Masse initiale (g)	Expérimentation		Simulation	
		Masse (g)	Recouvrement (%)	Masse (g)	Recouvrement (%)
Clomazone	$9.0 \times 10^{-5}$	$8.4 \times 10^{-5}$	93	$8.3 \times 10^{-5}$	92
Imazamox	$1.0 \times 10^{-4}$	$5.7 \times 10^{-5}$	57	$7.0 \times 10^{-5}$	70
Isoproturon	$6.9 \times 10^{-4}$	$4.8 \times 10^{-4}$	69	$3.9 \times 10^{-4}$	57
Mesosulfuron	$7.0 \times 10^{-6}$	$4.6 \times 10^{-6}$	62	$5.9 \times 10^{-6}$	84
Bentazone	$1.42 \times 10^{-3}$	$1.13 \times 10^{-3}$	80	$1.22 \times 10^{-3}$	86
Sulcotrione	$2.3 \times 10^{-4}$	$1.6 \times 10^{-4}$	68	$1.8 \times 10^{-4}$	79

Le tableau 5.4 présente les bilans de masse après 300 h de simulation pour les six solutés, le



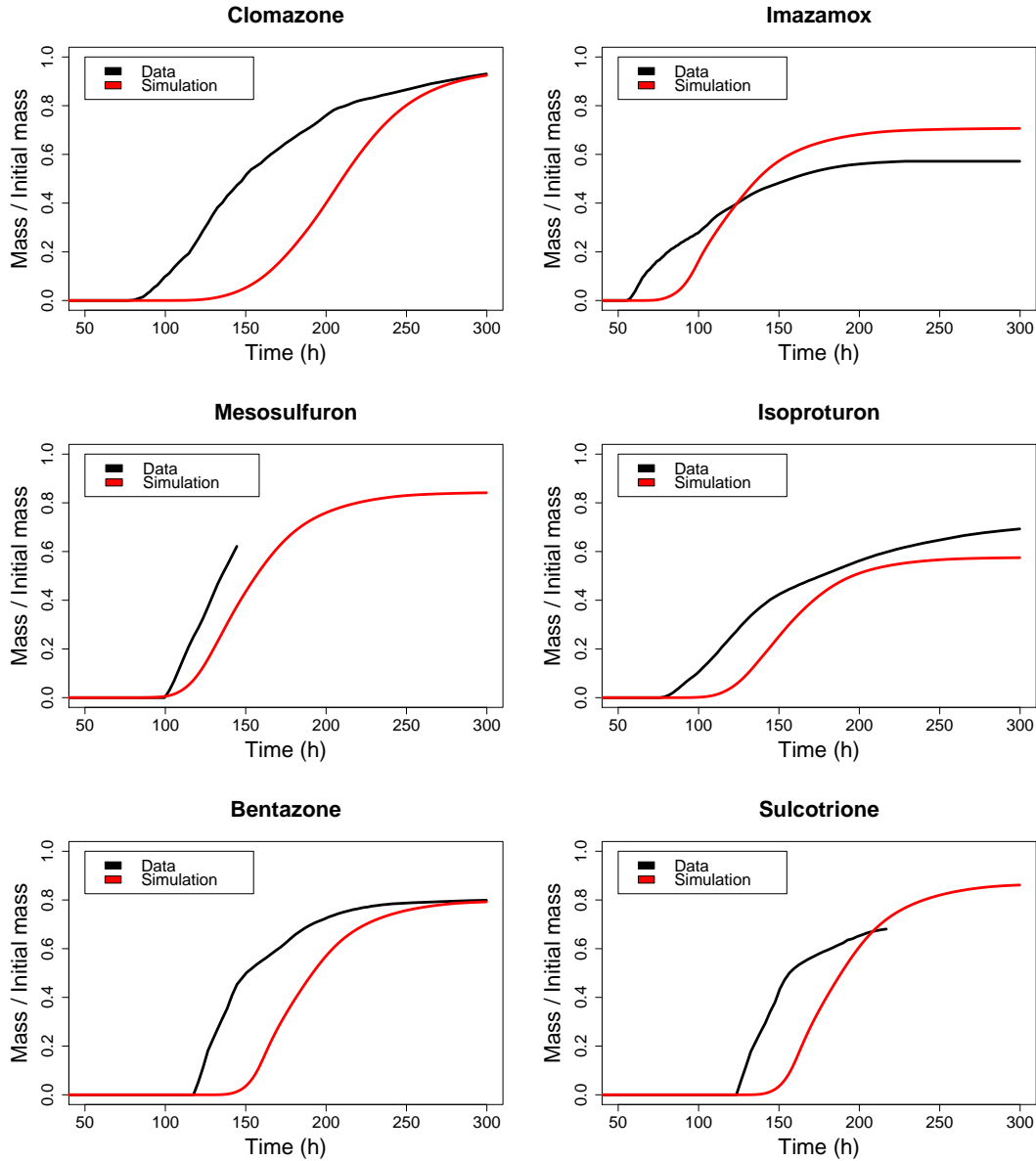


Figure 5.4

Figure 5.5 – Test et évaluation des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage : cumul massique de sortie du clomazone et de l'imazamox (batch 1), du mesosulfuron et de l'isoproturon (batch 2) et du bentazone et du sulcotrione (batch 3).

recouvrement est calculé de la façon suivante :

$$\text{Recouvrement} = \frac{\text{masse entrée} - \text{masse sortie}}{\text{masse entrée}} \quad (5.1)$$

La masse initiale intégrée dans MASHYNS pour chaque soluté pendant les expérimentations est disponible dans les données. Comme l'adsorption implémentée dans le modèle CATHY est totalement réversible, et que la durée de la simulation rend la dégradation négligeable, en théorie quasiment toute la masse initialement intégrée dans le modèle doit se retrouver à la sortie du

drain. Ici les données disponibles s'arrêtent à 300 h, on compare donc les bilans de masse à ce moment. Seuls le Clomazone et le Bentazone montrent moins de 10% de différence de bilan de masse entre les simulations et les données. La mauvaise performance du Mesosulfuron et du Sulcotrione peut être expliquée par le manque de données à partir de 140 h et 220 h respectivement. Pour l'Imazamox, l'isoproturon et le bentazone, les différences de bilans de masse sont significatives et comprises entre 16% et 22%. L'Isoproturon est le seul soluté pour lequel le cumul de masse simulé est plus petit que le cumul de masse observé. Cela peut s'expliquer par le fait que ce soluté est le seul parmi les six dont le temps de demie-vie (12 j) est comparable au temps de l'expérience de traçage (12.5 j). On gardera en tête que l'expérience n'a pas été reproduite et on ne dispose pas d'information suffisante pour estimer l'erreur associée à ces mesures. Les résultats des simulations ont été obtenus ici sans calage des paramètres et on peut se demander dans quelle mesure une paramétrisation différente aurait influencé les résultats. L'analyse de sensibilité menée à partir de l'expérience SSTM permet justement d'avoir une idée de l'influence des paramètres sur les variables de sortie.

## 5.4 Analyse de sensibilité des flux de soluté réactifs dans CATHY-FTR

### 5.4.1 Densités de probabilité des paramètres d'entrée

Les fonctions de densité de probabilité de l'analyse de sensibilité sont basées sur la littérature scientifique, les données disponibles, et l'expertise (Saltelli et al., 2005). Comme le sol est homogène dans MASHYNS, le nombre de paramètres testés est peu élevé. Huit paramètres sont pris en compte dans cette analyse de sensibilité : conductivité à saturation horizontale et verticale ( $K_{sh}$  et  $K_{sv}$ ), paramètres de la courbe de rétention de van Genuchten ( $n$  et  $\alpha$ ), porosité  $\theta_s$ , pluie initiale, constante d'équilibre  $K_d$ , et constante de dégradation  $\lambda$  (inverse du temps de demie-vie). On note que dans cette analyse de sensibilité, seuls les caractéristiques internes à la maquette sont testées, ainsi que la condition initiale d'humidité, via la pluie antécédente. Les erreurs sur les conditions de pluie ne sont pas prises en compte. Tous les paramètres testés, conductivités hydrauliques comprises, varient indépendamment les uns par rapport aux autres dans la méthode Morris. Cette construction de l'échantillon considérant tous les paramètres indépendants n'est pas rigoureuse pour  $n$  et  $\alpha$  qui décrivent les courbes de rétention et ne sont donc pas indépendants. C'est pourquoi toutes les courbes de rétention issues de l'échantillonnage de Morris ont été tracées (voir figure 5.9). On a ainsi vérifié que la combinaison indépendante de  $n$  et  $\alpha$  donnait dans tous les cas des courbes réalistes par rapport au jeu de donnée initial. La variabilité des paramètres est décrite par leur fonction de densité de probabilité, qu'il faut estimer le plus justement possible selon les données disponibles (voir le tableau 5.5). La visualisation de ces fonctions de

densité de probabilité est disponible dans l'annexe A.1, excepté celle des conductivité à saturation puisqu'elle correspond à la figure 5.1.

Tableau 5.5 – Les fonctions de densité de probabilité des paramètres de l'analyse de sensibilité Morris sont décrites par leur moyenne  $\mu$  et leur variance  $\sigma^2$  pour les lois LN (lognormal) et N (normal), et par le minimum et maximum pour la loi U (Uniforme).

Paramètre		Unité	Probabilité	
Conductivité à sat. horizontale	$K_{sh}$	$\text{ms}^{-1}$	LN( $9 \times 10^{-5}$ , $1.39 \times 10^{-8}$ )	
Conductivité à sat. verticale	$K_{sv}$	$\text{ms}^{-1}$	LN( $5.62 \times 10^{-5}$ , $5.43 \times 10^{-9}$ )	
Porosité	$\theta_s$	-	N( $4.7 \times 10^{-1}$ , $2.2 \times 10^{-3}$ )	
Paramètres de Van Genuchten	$n$	-	N(1.8, $3.24 \times 10^{-2}$ )	
	$\alpha$	$\text{cm}^{-1}$	N( $1.2 \times 10^{-2}$ , $1.44 \times 10^{-6}$ )	
Pluie initiale	IC	$\text{ms}^{-1}$	U( $2.7 \times 10^{-7}$ , $2.6 \times 10^{-2}$ )	
Constante de dégradation	$\lambda$	$\text{s}^{-1}$	Clomazone N( $1.30 \times 10^{-7}$ , $6.76 \times 10^{-16}$ )	Imazamox N( $1.65 \times 10^{-7}$ , $1.09 \times 10^{-15}$ )
			Isoproturon N( $9.65 \times 10^{-7}$ , $3.7 \times 10^{-14}$ )	Mesosulfuron N( $2.57 \times 10^{-7}$ , $2.64 \times 10^{-15}$ )
Constante d'équilibre	$K_d$	$\text{Lkg}^{-1}$	Clomazone N(6.0, 3.24)	Imazamox N(0.3, $8.1 \times 10^{-3}$ )
			Isoproturon N(2.44, 0.54)	Mesosulfuron N(1.84, 0.31)

La fonction de probabilité de la conductivité hydraulique à saturation correspond à une loi lognormale avec un écart type égal à la moyenne. La justification de ses paramètres se situe dans la section 5.2. La porosité et les paramètres de van Genuchten suivent une loi normale, avec un écart-type de 10% selon Schwen et al. (2011) et Alletto et al. (2015). L'intensité de pluie qui conditionne la hauteur de nappe initiale n'est pas un paramètre classique dans les analyses de sensibilité, habituellement c'est la hauteur de nappe elle-même qui est un paramètre. Dans cette expérience, la nappe a une forme de nappe drainée, et fixer sa forme et son niveau serait délicat et arbitraire, c'est pour cette raison que le paramètre choisi est la pluie initiale qui conditionne le niveau de nappe. Dans ces travaux elle est représentée par une distribution uniforme avec un coefficient de variation de 100%. En ce qui concerne les solutés réactifs, les constantes d'équilibre et de dégradation suivent une loi normale avec des écart-types de 30% et 20% respectivement (Boivin, 2003; Holvoet et al., 2005); les valeurs des moyennes sont basées sur les données de IUPAC (2007).

## 5.4.2 Résultats de l'analyse de sensibilité de Morris

### 5.4.2.1 Comportement hydrodynamique

La recharge de la nappe [ $\text{L}^3$ ] représente le volume cumulé dans le temps de l'eau qui passe de la zone insaturée à la zone saturée et permet d'examiner en particulier le comportement hydraulique dans la zone insaturée. La sensibilité du comportement hydrodynamique pour cette variable a été évaluée à trois temps donnés différents (figure 5.6), qui correspondent à la fin des

périodes estivale, hivernale et printanière. Pour rappel, sur un graphe de Morris, la moyenne absolue qui correspond aux effets majeurs est définie en abscisse, et l'écart type des effets élémentaires qui représente les effets non linéaires ou les interactions entre les paramètres est défini en ordonnée (voir figure 3.5).

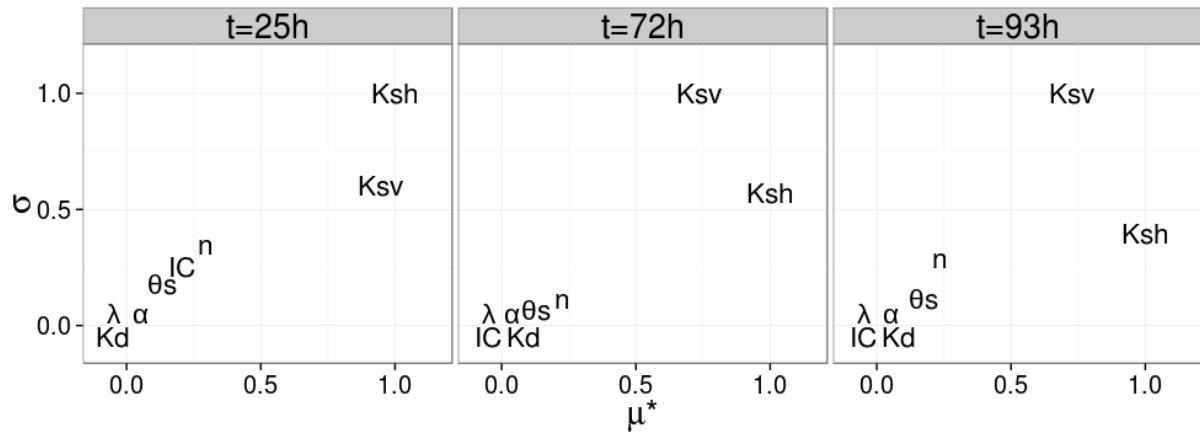


Figure 5.6 – Résultats de l'analyse de sensibilité de Morris sur la recharge de la nappe à trois temps donnés : à la fin de la phase estivale ( $t = 25$  h), à la fin de la phase hivernale ( $t = 72$  h) et à la fin de la phase printanière ( $t = 93$  h).  $\mu^*$  est la moyenne absolue des effets et  $\sigma$  est l'écart-type des effets élémentaires. Les indices ont été normalisés sur les deux axes.

On vérifie que leurs effets élémentaires des paramètres physico chimiques des solutés ( $K_d$  et  $\lambda$ ) sont faibles sur les deux axes  $\sigma$  et  $\mu^*$ , puisqu'ils ne participent pas à la dynamique des écoulements.  $K_{sh}$  et  $K_{sv}$  ont des effet linéaires (hautes valeurs sur l'axe des abscisses) mais aussi des effets non linéaires ou des interactions (hautes valeurs sur l'axe des ordonnées) sur la recharge de la nappe. Dans une moindre mesure,  $\theta_s$  et  $n$  ont aussi des effets linéaires et non linéaires. À 25 h,  $IC$  (l'intensité de la pluie conditionnant la hauteur de nappe initiale) a aussi une influence sur les résultats mais celle-ci s'estompe avec le temps et n'est pas retrouvée à 72 h ni 93 h.  $n$  montre aussi une variabilité selon les temps : il semble avoir plus d'influence sur les résultats quand la nappe est basse que quand la nappe est haute. On remarque que dans le contexte estival ( $t = 25$  h), l'influence de la conductivité hydraulique à saturation horizontale  $K_{sh}$  est plus grande que celle de la verticale  $K_{sv}$ , et le résultat inverse est obtenu dans les deux autres contextes hivernal et printanier, plus humides. Cela peut s'expliquer par le fait que lorsque la nappe est basse, la zone insaturée est plus profonde, et atteint ainsi une profondeur dans laquelle les gradients de vitesse ne sont plus essentiellement verticaux, mais ont une composante horizontale importante. Dans les trois temps, les résultats montrent fortes valeurs en ordonnée des conductivités horizontale et verticale, et comme les autres variables ont des valeurs plus faibles, on peut supposer que les conductivités interagissent entre elles.

### 5.4.2.2 Transport réactif des solutés

Les résultats de l'analyse de sensibilité pour le transport réactif sont présentés sur la figure 5.7 pour le clomazone et l'imazamox (phase estivale) et l'isoproturon et le mesosulfuron (phase hivernale) en considérant quatre variables de sortie : temps de percée, timing du pic de concentration, valeur du pic de concentration et NSE sur le cumul des flux massiques en sortie de drain dans les données observées et dans la simulation.

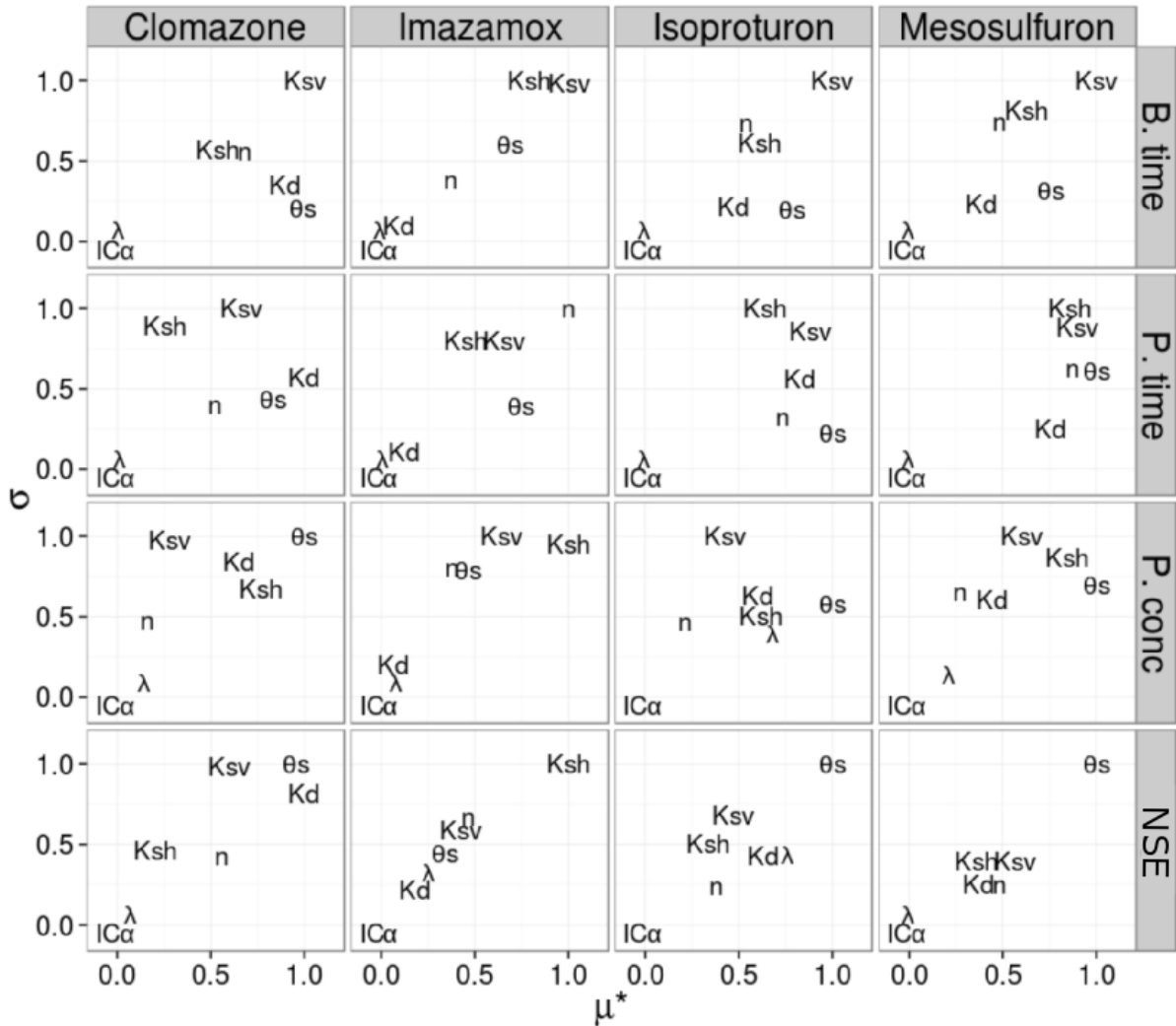


Figure 5.7 – Résultat de l'analyse de sensibilité de type Morris pour le clomazone et l'imazamox (phase estivale), et l'isoproturon et le mesosulfuron (phase hivernale) pour quatre variables de sorties : temps de percée (B. time), timing du pic de concentration (P.time), valeur du pic de concentration (P. conc) et NSE sur le cumul des flux massiques en sortie de drain dans les données observées et dans la simulation.  $\mu^*$  est la moyenne absolue des effets et  $\sigma$  est l'écart-type des effets élémentaires. Les indices ont été normalisés sur les deux axes.

De manière générale d'abord, les conductivités à saturation horizontales et verticales déjà repérées dans les résultats de l'AS sur la recharge de la nappe jouent aussi un rôle important dans le transfert des solutés. Dans une moindre mesure mais de façon nette,  $n$  est influent dans tous

les cas. De même  $\theta_s$  influence les variables de sortie, en particulier la NSE pour le Clomazone, l'Isoproturon et le Mesosulfuron. Quant à  $IC$  et  $\alpha$ , ils ont des effets négligeables pour l'ensemble des solutés et sur l'ensemble des variables de sortie. Comme prévu dans ce contexte d'expérimentation assez courte,  $\lambda$  a un effet linéaire seulement sur l'isoproturon, et son influence reste négligeable pour les autres solutés. Par contre, la constante d'équilibre  $K_d$  se révèle importante, sauf pour l'Imazamox. On ne remarque pas de comportement différent entre les molécules du batch 1 (Clomazone et Imazamox) et du batch 2 (Isoproturon et Mesosulfuron), ce qui confirme le fait que la première phase, représentant la saison estivale, ne participe pas ou peu au transfert comme on l'a vu avec la figure 5.3.

Les résultats de l'analyse de sensibilité de l'Imazamox sont différents de ceux des autres molécules sur plusieurs points. La non dominance de  $\theta_s$  sur la NSE et l'influence du  $K_d$  assez faible qui ont déjà été évoqués. On remarque aussi la dominance nette de  $n$  pour le timing du pic de concentration alors que ce sont les conductivités à saturation qui dominent pour les autres molécules et l'importance globale de  $K_{sh}$  par rapport aux autres molécules. Or la seule différence notable de l'Imazamox par rapport aux autres est son coefficient d'adsorption très faible : une  $K_{oc}$  de 15 contre 300, 122 et 92 pour les trois autres molécules (voir tableau 5.1). Deux hypothèses peuvent expliquer ces différences notables : (i) le  $K_d$  a des interactions particulièrement fortes avec les autres paramètres ou (ii) la caractéristique hydrophile de l'Imazamox induit un transfert plus rapide du soluté qui se déroule de fait dans un contexte hydrodynamique différent. La première hypothèse est invalidée par les résultats de Morris :  $K_d$  a des influences non linéaires non négligeables, mais pas particulièrement fortes. Par contre la seconde hypothèse se justifie bien. En effet on sait que l'imazamox est hydrophile et a tendance à rester en solution plutôt que de s'adsorber aux particules de sol. On a vu également sur la figure 5.5 que la période de sortie de l'Imazamox du domaine était située entre 75 h et 125 h environ, alors que les autres se situent au delà de 125 h (Mesosulfuron, Isoproturon) voire de 150 h (Clomazone). Or entre 75 h et 100 h, la situation hydraulique dans MASHYNS correspond à la saison printanière et n'est pas la même qu'après 100 h. Donc les différences que l'on voit dans les résultats de Morris ne sont sans doute qu'un effet indirect du  $K_d$ , les conditions hydrodynamiques de transfert sont en fait différentes des autres molécules.

### 5.4.3 Amélioration de la paramétrisation de CATHY-FTR

L'indice NSE sur le cumul de masse à la sortie du drain est utilisé comme un indicateur pour trouver la combinaison de paramètres avec le meilleur NSE (figure 5.8).

Si on analyse les cinq meilleures combinaisons en terme de NSE des quatre solutés, on constate qu'une même combinaison (en rouge sur la figure) est commune à l'Imazamox, à l'Isoproturon

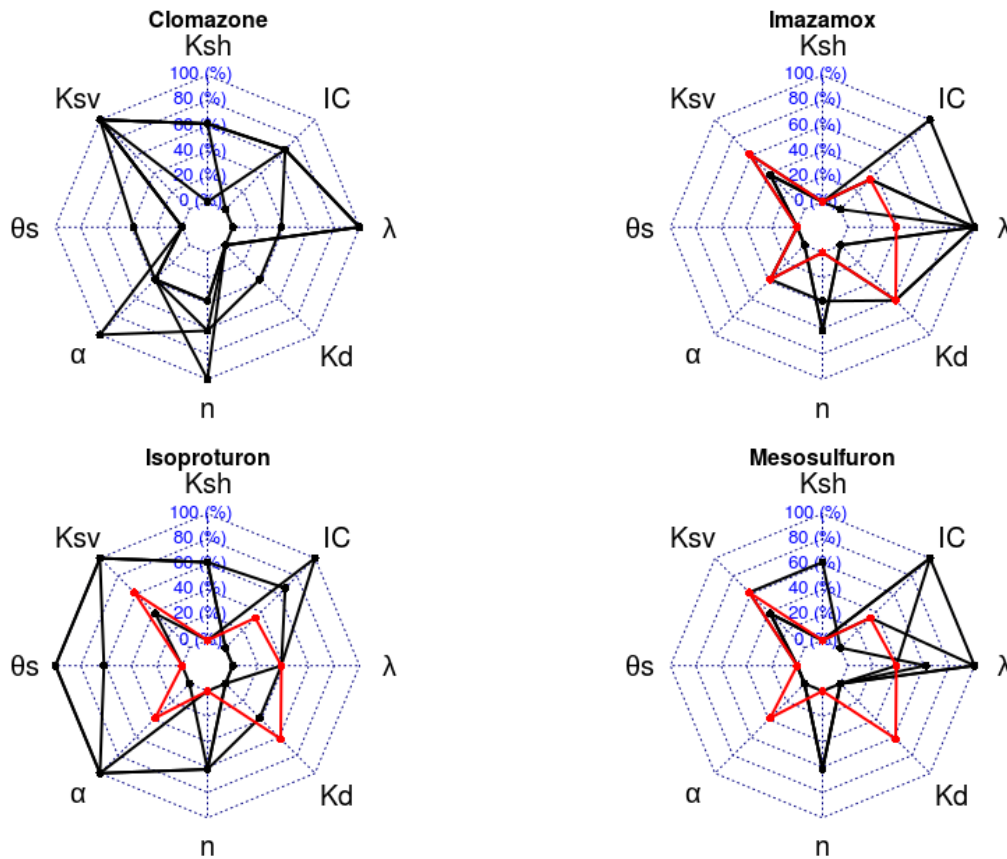


Figure 5.8 – Représentation des cinq jeux de paramètres les plus efficaces sur chaque soluté. Le classement est basé sur la valeur de la NSE sur le cumul de masse à la sortie du drain. Les paramètres sont représentés sur une grille uniforme de 0% à 100%, ces valeurs extrêmes correspondant au minimum et maximum de chaque paramètre dans l'échantillonnage de Morris. En revanche, les conductivités à saturation  $K_{sv}$  et  $K_{sh}$  sont représentées sur une grille logarithmique de leur gamme de variation. Une combinaison commune pour l'Imazamox, l'Isoproturon et le Mesosulfuron est mise en valeur en rouge.

et au Mesosulfuron. Pour la Clomazone, celle-ci est classée 26 sur 90. La combinaison optimale commune, en rouge sur la figure 5.8, est notamment caractérisée par des conductivités à saturation faibles, alors que les combinaisons dont la NSE sont les plus hautes pour le Clomazone sont toutes caractérisées par une conductivité à saturation verticale au maximum de ses valeurs échantillonnées. On a vu également dans la figure 5.5 que la sortie du drain dans la simulation du Clomazone est particulièrement en retard par rapport aux données observées. Il est probable qu'une valeur élevée du  $K_{sv}$ , par son seul effet sur le transfert est plus efficace à améliorer le NSE pour cette molécule qu'une combinaison optimale entre tous les paramètres. De manière générale les "meilleurs" combinaisons diffèrent pour chaque soluté. Cette constatation ne mène pas forcément à conclure sur l'équifinalité de plusieurs jeu de paramètres différents. En effet, ici la sélection est basée sur un critère de correspondance entre les simulations et les observations et les simulations s'approchant le plus des observations ne donnent pas forcément les mêmes résultats. Ainsi, deux simulations jugées performantes sur la NSE peuvent l'être de différente

manière : amélioration du délai de percé, meilleure correspondance sur la fin de la simulation et la masse totale sortante, etc...

Tableau 5.6 – Comparaison des valeurs moyennes des distributions des paramètres et de celles de la combinaison choisie pour le Bentazone (“Benta”) et le Sulcotrione (“Sulco.”).

	Paramètre	Unité	Moyenne	Valeur optimale	Différence	Distribution
	$K_{sh}$	$\text{m.s}^{-1}$	$9.00 \times 10^{-5}$	$1.05 \times 10^{-5}$	-88%	$\text{LN}(9 \times 10^{-5}, 1.39 \times 10^{-8})$
	$K_{sv}$	$\text{m.s}^{-1}$	$5.62 \times 10^{-5}$	$5.02 \times 10^{-5}$	-10%	$\text{LN}(5.62 \times 10^{-5}, 5.43 \times 10^{-9})$
	$\theta_s$	-	$4.7 \times 10^{-1}$	$3.9 \times 10^{-1}$	-17%	$\text{N}(4.7 \times 10^{-1}, 2.2 \times 10^{-3})$
	$n$	-	1.80	1.73	-4%	$\text{N}(1.8, 3.24 \times 10^{-2})$
	$\alpha$	$\text{m.s}^{-1}$	$1.2 \times 10^{-2}$	$1.0 \times 10^{-2}$	-17%	$\text{N}(1.2 \times 10^{-2}, 1.44 \times 10^{-6})$
	$IC$	$\text{cm}^{-1}$	$2.78 \times 10^{-7}$	$2.70 \times 10^{-7}$	-3%	$\text{U}(2.7 \times 10^{-7}, 2.6 \times 10^{-2})$
Benta.	$\lambda$	$\text{s}^{-1}$	$2.57 \times 10^{-7}$	$2.31 \times 10^{-7}$	-10%	$\text{N}(2.57 \times 10^{-7}, 2.64 \times 10^{-15})$
	$K_d$	L/kg	1.05	1.12	+7%	$\text{N}(1.05, 0.1)$
Sulco.	$\lambda$	$\text{s}^{-1}$	$4.57 \times 10^{-7}$	$4.10 \times 10^{-7}$	-10%	$\text{N}(4.57 \times 10^{-7}, 8.35 \times 10^{-15})$
	$K_d$	L/kg	0.68	0.73	+7%	$\text{N}(0.68, 0.04)$

Le tableau 5.6 présente le pourcentage de différence entre les moyennes des paramètres (voir tableau 5.5) et les valeurs de la combinaison optimale. Par rapport à la paramétrisation initiale, la valeur de conductivité à saturation horizontale est bien plus basse que la moyenne des fonctions de probabilités de Morris, avec une baisse de 88% de sa valeur (tableau 5.6). Les valeurs optimales de conductivité à saturation verticale, la porosité,  $\alpha$  et le temps de demi-vie restent assez proches de la moyenne de leur distribution avec des différences comprises entre 10% et 17%. Les paramètres  $n$ ,  $IC$  et  $K_d$  correspondent quasiment à la moyenne des distributions. La variation de  $K_{sh}$  est impressionnante, mais c’est sans doute la valeur de la porosité  $\theta_s$  qui est déterminante, au vu de son influence dominante sur les résultats de NSE révélée sur la figure 5.7. Avec une porosité plus faible, la vitesse de l’eau dans les pores va s’accélérer, et donc les transferts seront enclenchés plus rapidement.

Sur la figure 5.9, toutes les courbes de rétention utilisées dans les simulations sur MASHYNS ont été tracées. Il s’agit en rouge de la courbe de rétention issue des moyennes des distribution de Morris, c’est-à-dire en fait des données dont on dispose sur MASHYNS, en noir des courbes formées par toutes les combinaisons de paramètres utilisées dans l’analyse de sensibilité dont la courbe de la combinaison optimale mise en valeur en bleu. La combinaison optimale est associée à une teneur en eau à saturation plus faible que les mesures, tandis que le reste de la courbe, plus dicté par les autres paramètres de van Genuchten, est assez proche du comportement mesuré.

Ce jeu de paramètres est appliqué à la simulation des deux solutés réactifs de la phase printanière : Bentazone et Sulcotrione. Cette étape s’apparente à une calibration, sans pour autant qu’on puisse lui attribuer ce terme exact, puisque les valeurs de chaque paramètres ont été échantillonnées seulement partiellement selon la méthode de Morris appliquée : seuls quatre niveaux



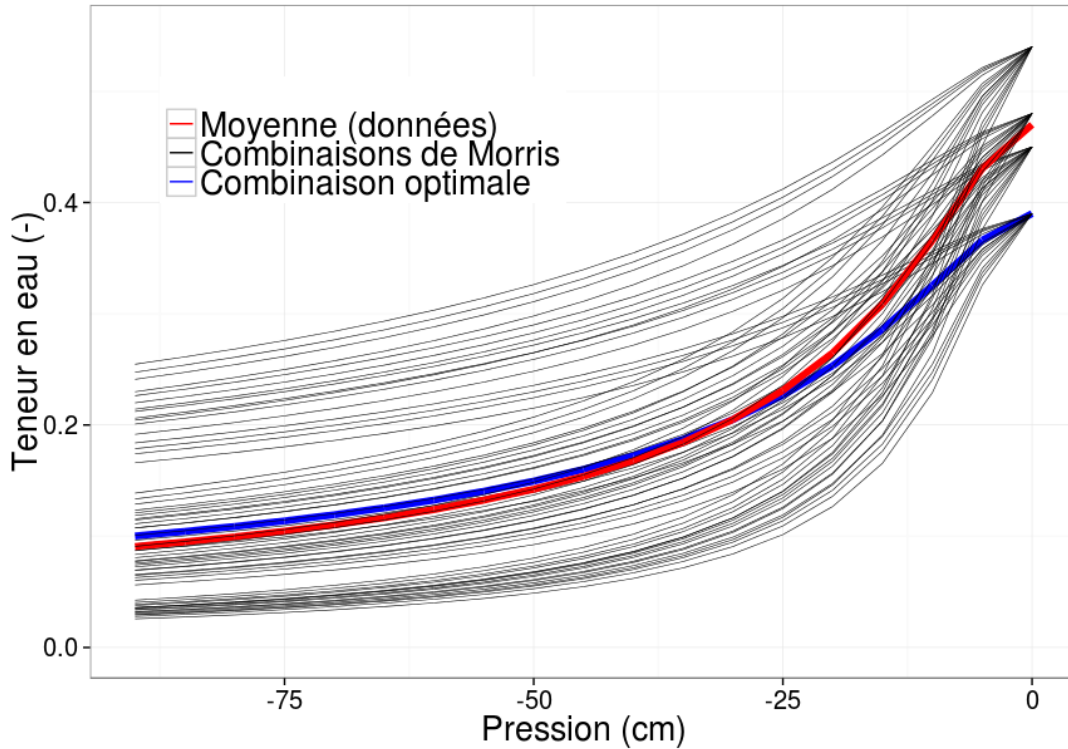
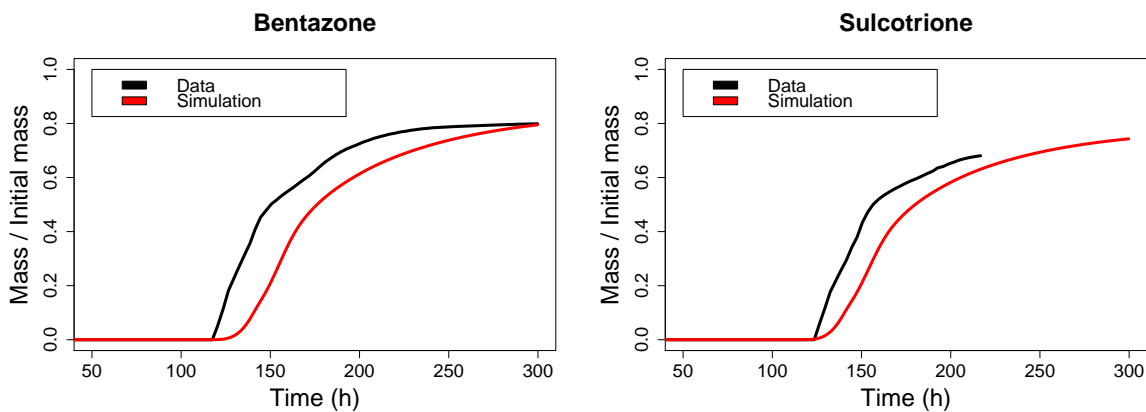


Figure 5.9 – Courbes de rétention correspondant à la moyenne des distributions de Morris (donc issues des données de MASHYNS) en rouge, toutes les combinaisons utilisées dans l’analyse de sensibilité de Morris en noir, et la courbe de rétention de la combinaison optimale en bleu.



(a)

Figure 5.10 – Test et évaluation des flux cumulés de solutés réactifs du batch 3. Les paramètres d’entrée du modèle correspondent au jeu de paramètres sélectionné avec l’analyse de sensibilité Morris.

(correspondant aux quartiles) par paramètres ont été utilisés. Les résultats sont présentés sur la figure 5.10. A noter, l’évaluation de la simulation du Sulcotrione par l’outil FITEVAL a concerné seulement les résultats de 0 h à 210 h, c’est-à-dire tant que des données observées sont disponibles. La correspondance entre les simulations et les données a été grandement améliorée avec la nouvelle paramétrisation (figure 5.5) avec une évaluation “very good”. Le retard du temps de

Tableau 5.7 – Performance des flux de solutés réactifs lors de l'expérience de traçage (intervalle de confiance de 95% entre crochets). Les paramètres d'entrée du modèle correspondent à la combinaison choisie.

	NSE	RMSE	Évaluation
Bentazone	0.904 [0.711-0.977]	0.109 [0.056-0.164]	Very good
Sulcotrione	0.94 [0.824-0.985]	0.076 [0.039-0.118]	Very good

percée n'est quasi plus visible et la différence des bilans de masse à ( $t = 300$  h) est réduite de 8% à 0.5% pour le Bentazone et de 17% à 9% pour la Sulcotrione. Les différences constatées entre les courbes de rétentions peuvent expliquer l'amélioration du temps de percée malgré le fait que les conductivités hydrauliques soient plus basses dans la nouvelle paramétrisation. De manière générale, l'utilisation de ce jeu de paramètre a amélioré significativement les résultats en passant le NSE de 0.781 à 0.904 et la RMSE de 0.165 à 0.109 pour le Bentazone et en passant le NSE de 0.795 à 0.94 et la RMSE de 0.142 à 0.076 pour le Sulcotrione. Les intervalles de confiance construits par bootstrapping se sont également beaucoup réduits, montrant que l'évaluation est robuste.

## 5.5 Conclusion sur l'évaluation de la partie subsurface de CATHY-FTR

Dans ce chapitre, la partie subsurface de CATHY est évaluée en trois étapes. D'abord, le modèle est testé sur sa capacité à reproduire sans calibration des données issues d'une expérience de laboratoire sur trois types de réponses : processus hydrodynamiques, transport de solutés non réactifs, et transport de solutés réactifs. Les résultats ont montré un retard significatif du temps de percée dans les simulations par rapport aux données pour les traceurs et les réactifs. Malgré ce décalage, les évaluations menées grâce à l'outil FITEVAL indiquent un comportement acceptable voire bon, ce qui montre la cohérence de la représentation de la réalité sans calibration du modèle. Toutefois, l'incertitude liée à cette évaluation est grande pour les trois types de réponse (eau, traceurs, réactifs). De plus, quatre bilans de masse des solutés réactifs sur six diffèrent de plus de 10% entre les données et les simulations. Dans un second temps, une analyse de sensibilité de type Morris a été menée sur huit paramètres et quatre solutés sur cette même expérimentation. Des variables de sortie variées ont été prises en compte, et cinq paramètres particulièrement influents ont émergé : les conductivités horizontale et verticale  $K_{sh}$  et  $K_{sv}$ , la porosité  $\theta_s$ , le paramètre de van Genuchten  $n$  et la constante d'équilibre  $K_d$ . Même si seul  $K_d$  s'est montré influent parmi les paramètres physico-chimiques, il est difficile de statuer sur la constante de dégradation  $\lambda$  puisque le contexte de l'expérimentation, assez courte (300 h), n'a pas pu permettre à la dégradation de réellement avoir lieu. L'analyse de sensibilité met en valeur la robustesse du modèle vis-à-vis de la variation de ses paramètres d'entrée dans le cadre d'un échantillon parcourant une gamme

adaptée à cette expérimentation et de taille relativement petite, et souligne des interactions entre les paramètres. La liste des paramètres influents semble logique comparée à celle obtenue sur des analyses de sensibilité de modèles semblables. La troisième étape consiste à choisir la combinaison de paramètres la plus efficace parmi celles utilisées dans l'analyse de sensibilité en se basant sur le critère statistique de la NSE appliqué au cumul massique en sortie de drain. Ce jeu de paramètres est appliqué sur des solutés qui n'avaient pas été considérés dans l'analyse de sensibilité. Les résultats obtenus avec ce nouveau jeu de paramètres sélectionné se rapprochent significativement mieux des données que les résultats initiaux sans calibration : le retard du temps de percée diminue grandement et le bilan de masse est plus proche des données. Les évaluations FITEVAL de ces simulations sont "very good" avec une faible incertitude.

Le modèle CATHY est capable de reproduire des données de laboratoire dans un cadre connu et à petite échelle. Le contexte de MASHYNS est idéal pour des tests avec CATHY puisqu'a priori dans le sol de la maquette il y a peu de dispersion et pas de structure macroporale, deux phénomènes physiques qui ne sont pas représentés dans le modèle. Toutefois, cette étude est un premier pas encourageant vers une validation plus globale du modèle. En particulier, le modèle devra être testé dans un contexte plus représentatif de la problématique des pollutions diffuses. C'est l'objet du prochain chapitre, dans lequel on montre les résultats de l'application du modèle, couplé cette fois, sur des données issues d'un versant réel.

## Chapitre 6

# Evaluation du modèle réactif et couplé CATHY-Pesticide

Ce chapitre a pour objectif d'évaluation CATHY-Pesticide incluant le couplage surface-subsurface dans un contexte de versant viticole. Il s'agit de la version du modèle la plus aboutie présentée dans cette thèse. En plus du transport réactif en subsurface évalué dans le chapitre 5 sur la maquette MASHYNS, cette version intègre le module de correction des champs de vitesse mis en place par Scudeler et al. (2016b). Le bilan de masse du couplage a été en outre amélioré et un module de mélange de la lame ruisselante avec la première couche de subsurface a été ajouté. Ces changements intégrés au code CATHY sont détaillés dans le chapitre 4. L'évaluation du modèle portera sur l'ensemble de ses capacités, mais on cherchera en particulier à appuyer sur des cas avec des interactions surface-subsurface fortes pour tester la pertinence et la robustesse du couplage et du module de mélange.

### 6.1 Méthode d'évaluation des performances du modèle

L'évaluation du modèle couplé s'appuie sur une méthodologie légèrement différente de celle déployée dans l'évaluation de la partie subsurface du modèle au chapitre précédent. Dans un premier temps, le modèle sera appliqué au versant de Saint-Joseph (bassin versant de la Morcille dans le Beaujolais, voir section 3.3.2) et un événement orageux naturel sera simulé. L'objectif n'est pas de reproduire exactement cet événement avec toutes les caractéristiques mais de s'en rapprocher au mieux avec les informations disponibles. La dynamique de transfert de deux solutés est analysée : Diuron et Tebuconazole. Ces solutés, qui ont été appliqués sur la vigne de Saint-Joseph à différentes périodes, possèdent des coefficients d'adsorption très différents. Le cumul des flux en surface lors d'un événement pluvieux sera confrontée aux données expérimentales pour asseoir le caractère réaliste des simulations. Les résultats de simulation sur des variables de

sortie du transport réactif seront alors analysés et discutés, notamment la masse totale quittant le système par l'exutoire, l'évolution des stocks en subsurface dans les différentes zones (vigne et bande enherbée) et les masses transférées en surface par le ruissellement. Dans un second temps, une analyse de sensibilité globale de type Sobol sera menée sur le modèle, là aussi avec les deux solutés Diuron et Tebuconazole. On s'intéressera aux mêmes variables de sortie qu'à l'étape précédente.

La présence de rases typiques du Beaujolais viticole, qui accélèrent le ruissellement avec un sol presque imperméable traversant le versant de Saint-Joseph, qui lui est composé d'un sol perméable et d'une bande enherbée, en fait un environnement très complexe et chargé en interactions et discontinuités difficiles à gérer pour un modèle. Afin de rendre l'analyse de sensibilité faisable en terme de coût de calcul ainsi que de ramener les tests dans un contexte de versant plus classique, le domaine modélisé est simplifié. Les caractéristiques générales du versant sont conservées pour garder au maximum une cohérence avec la réalité (longueur du versant, pente, ...) mais les rases et la demi-buse n'apparaissent plus. Les quinze paramètres d'entrée testés se rapportent notamment aux caractéristiques hydrodynamiques du sol et de la surface, à l'état initial du système, aux propriétés réactives du soluté. C'est la première fois qu'une analyse de sensibilité globale est menée sur le modèle CATHY, et l'on testera plusieurs méthodes et tailles d'échantillonnage pour déterminer les indices de 1er ordre, de deuxième ordre et totaux de chaque paramètre. Cette étape constitue donc une occasion de mener une réflexion non seulement sur les résultats obtenus, mais sur les méthodes utilisées dans un tel contexte.

## 6.2 Simulation du versant de Saint-Joseph avec CATHY-Pesticide

L'étape de comparaison avec les données terrain dont on dispose est ici destinée avant tout à vérifier la cohérence des simulations avec la réalité.

### 6.2.1 Paramétrisation du modèle dans le contexte du versant de St-Joseph

#### 6.2.1.1 Description du domaine 3D modélisé

La figure 6.1 illustre le maillage régulier utilisé pour décrire le domaine et permet de localiser la zone viticole, la bande enherbée, ainsi que les quatre rases transversales et la demi-buse bétonnée qui collectent le ruissellement. On note que deux mètres (donc deux mailles) ont été laissés de part et d'autre du système pour limiter les effets de bord sur les rases et la demi-buse. La largeur des rases et de la gouttière bétonnée est d'environ 1 m : comme dans CATHY le maillage doit être régulier, on impose des mailles de surface de 1 m x 1 m. Le sous-sol granitique se situe à 6 m de profondeur en amont du versant et environ 3 m en aval mais le domaine représenté est uniformément profond de 6m. Pour des simulations de courte durée comme celles qui seront

effectuées sur ce domaine, les processus se jouent surtout en surface et dans le sol proche de la surface, ainsi on considère que cette imprecision dans la forme du domaine en profondeur impacte de façon négligeable les résultats. Le domaine simulé est séparé en 8 couches numériques de hauteur variable, et le nombre total de nœuds atteint donc 61155 (151 x 45 x 9).

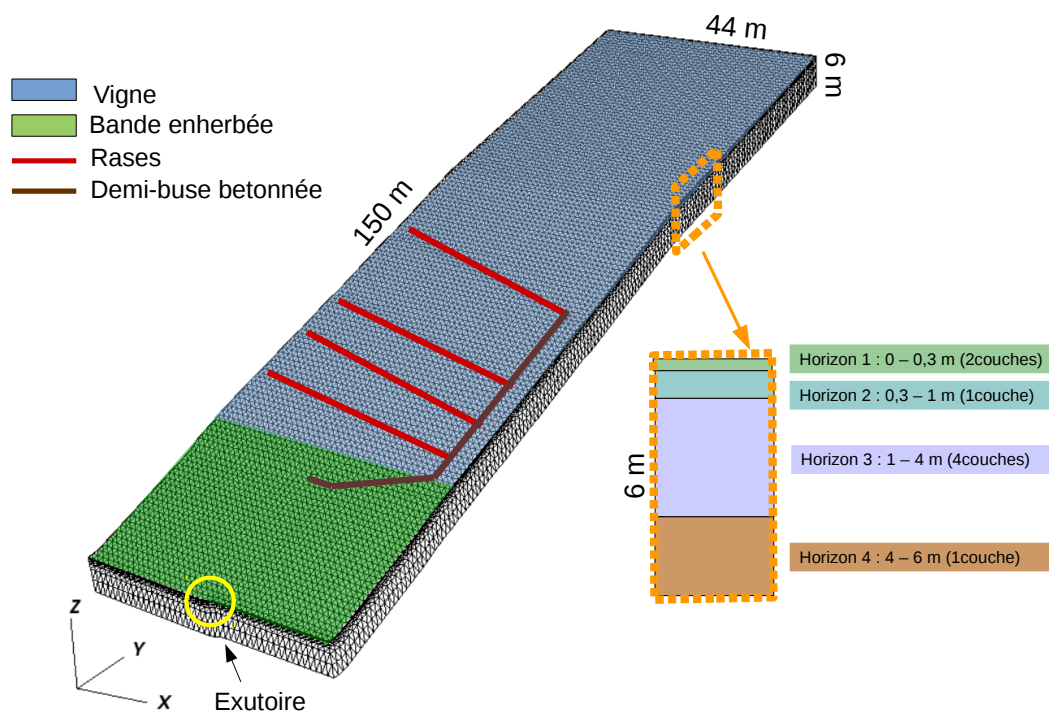


Figure 6.1 – Domaine modélisé dans CATHY avec, pour rappel, la localisation des zones de vigne et de bande enherbée, ainsi que les rases et la demi-buse bétonnée (voir section 3.3.2).

La figure 6.2 montre une photo de vigne sur laquelle une rase se distingue bien. Sur le terrain, le ruissellement qui arrive de l'amont sur une rase est redirigé et la suit jusqu'à son extrémité qui se trouve souvent être un fossé, ou une demi-buse comme sur la photo. Si le débit ruisselant est très fort ou si la rase est abimée, des débordements peuvent avoir lieu. À droite, un schéma montre la manière dont ont été gérées les rases dans le modèle CATHY pour que les ruissellements soient redirigés de la même façon qu'en réalité, sans débordement : à chaque rase, sur une maille de large une rupture de pente assure le changement de direction des flux de surface.

Les caractéristiques du sol de Saint-Joseph sont basées sur les mesures terrain de conductivité à saturation, porosité et courbes de rétention et présentées dans le tableau 6.1. Les caractéristiques hydrodynamiques des rases et la demi buse sont seulement distinctes du reste (vigne ou bande enherbée) sur la première couche numérique (0 – 0.2 m). Elles sont définies par une faible conductivité à saturation ( $1 \times 10^{-7}$  m/s) additionnée à une forte valeur de la porosité rési-

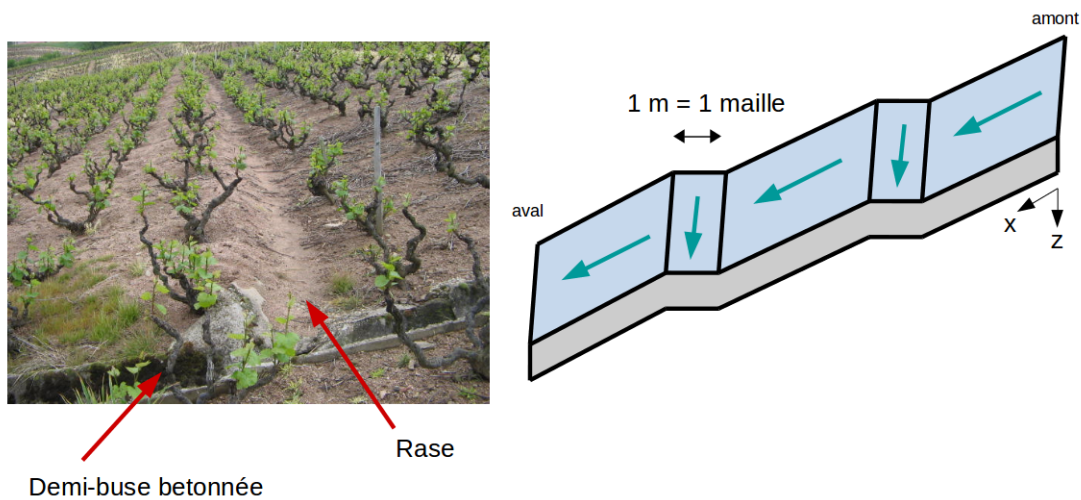


Figure 6.2 – Photo d’une rase et de la demi-buse bétonnée sur le versant de Saint-Joseph et schéma explicatifs de la représentation topographique des rases dans CATHY.

duelle pour la gouttière. En effet, il est assez difficile de paramétrer une zone complètement imperméable comme la demi buse bétonnée dans le modèle. En effet, une conductivité trop faible (inférieure à  $1 \times 10^{-8}$  m/s) et/ou une porosité totale très faible (0.15 contre 0.42 sur le reste du domaine) sur une zone très limitée génère des discontinuités difficiles à gérer pour le modèle et le temps de calcul est décuplé. La solution la plus efficace trouvée est la combinaison d’une conductivité à saturation faible (égale à celle des rases) avec une porosité résiduelle très forte par rapport à la porosité totale (0.30 contre 0.15). Le premier horizon est séparé en deux zones : la vigne et la bande enherbée. Le coefficient de Strickler correspondant à la rugosité de la surface de ruissellement sur tout le domaine a été fixé à 30, ce qui correspond à une surface cultivée en rang. Comme la rugosité de surface n’est pas spatialisable dans CATHY, un ponding minimum, c’est-à-dire la hauteur d’eau minimum présente sur une maille de surface pour que le ruissellement soit déclenché, est fixé à 5 mm sur la bande enherbée. Il s’agit de rendre compte de la présence de végétation qui ralentit la progression du ruissellement. Il y a peu d’information sur l’horizon 4 (4 – 6 m), les caractéristiques hydrodynamiques dans ce domaine sont donc prises égales à celle de l’horizon 3, sauf la conductivité à saturation qui est plus faible. Le temps de simulation considéré (60 minutes) nous permet de négliger l’influence de cet horizon qui participera peu aux écoulements. On remarquera en comparant ces valeurs au tableau 3.3 (chapitre 3) que la conductivité à saturation imposée dans l’horizon 2 de la bande enherbée (la même que celle des horizons 1 et 2 de la vigne) est légèrement plus basse ( $4.0 \times 10^{-5}$  m/s dans les mesures), contre  $3.19 \times 10^{-5}$  m/s dans les simulations de ce chapitre. Elle a en fait été calée pour mieux rendre compte des flux observés : les détails sont disponibles dans la section 6.2.2. Sachant que l’incertitude est de  $1.67 \times 10^{-5}$  m/s pour cette série de mesures, la modification de la conductivité de  $4.0 \times 10^{-5}$  m/s à  $3.19 \times 10^{-5}$  m/s

est très raisonnable. Les coefficients d'adsorption ont été mesurés sur le bassin versant de la Morcille par Randriambololohasinirina (2012), les résultats de l'étude sont résumés dans la section 3.3.2.2.

Tableau 6.1 – Paramétrisation de CATHY appliqué au versant de Saint-Joseph. R : rases, DB : demi-buse, BE : bande enherbée, V : vigne. La couche 1 fait partie du premier horizon, mais sur les rases et la demi-buse, ses caractéristiques hydrodynamiques sont distinctes.

Paramètres	Couche 1 (0 - 0.02 m)		Horizon 1 (0 - 0.3 m)		Horizon 2 (0.3 m - 1 m)	Horizon 3 (1 m - 4 m)	Horizon 4 (4 m - 6 m)
	R	DB	BE	V			
Ponding min (mm)	0		5	0	-	-	-
Coefficient de Strickler	0.30						
Ks (m/s)	$1 \times 10^{-7}$		$1.88 \times 10^{-4}$		$3.19 \times 10^{-5}$	$1.78 \times 10^{-5}$	$5 \times 10^{-6}$
Porosité (-)	0.42		0.55		0.42	0.39	
Van Genuchten	n (-)		1.52	1.46	1.52	1.57	
	$\theta_r$ (-)		0.15   0.30	0.10	0.15		
	$\alpha$ (cm <sup>-1</sup> )		0.10	0.32	0.10	0.07	
Kd Diuron (L/kg)	0		5.1		3.8		
Kd Tebuconazole (L/kg)	0		45.1		32		

### 6.2.1.2 L'événement du 4 août 2004

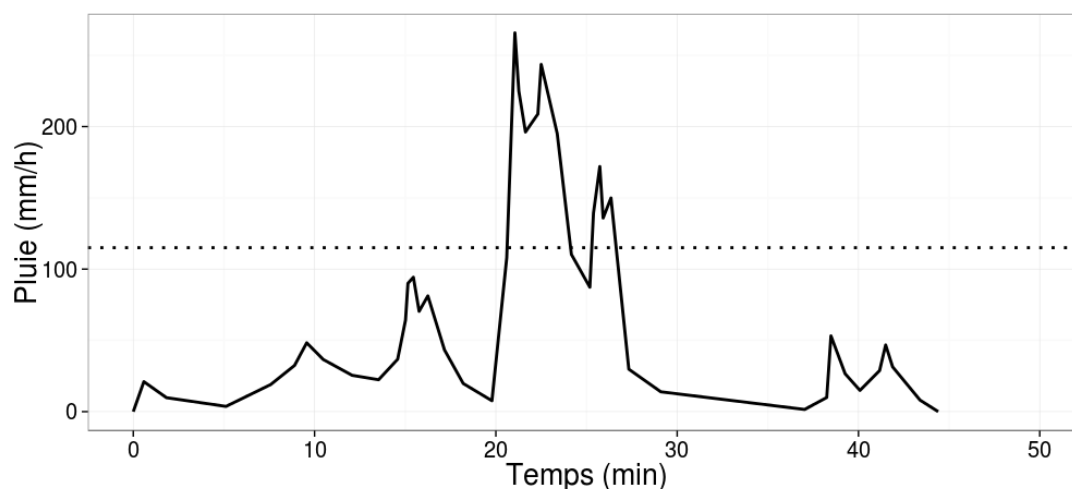


Figure 6.3 – Événement orageux du 4 août 2004. La ligne pointillée correspond à la conductivité à saturation du 1er horizon de la vigne.

Parmi tous les événements monitorés sur le versant de Saint-Joseph, celui du 4 août 2004 a été choisi en premier lieu pour son intensité, illustrée sur la figure 6.3. La conductivité à saturation du premier horizon de la vigne (ligne pointillée) met en lumière la très probable génération de ruissellement lors de l'événement. En effet, un flux d'eau a été mesuré dans les deux gouttières en amont et en aval de la placette instrumentale (voir figure 3.12 pour rappel). De plus l'événement est relativement court, ce qui paraît être un choix judicieux dans la perspective de mener une



analyse de sensibilité de type Sobol, qui nécessite de réaliser un très grand nombre de simulations, compte tenu des temps de calcul. Lors de l'évènement, les flux ont été mesurés dans les gouttières amont et aval de la placette instrumentée (voir figure 3.12). Au total, 31 mm de pluie sont tombés sur le domaine et environ 11 m<sup>3</sup> de ruissellement ont été récupérés sur la vigne par les rases et amenés à la gouttière amont. Les flux mesurés dans la gouttière aval sont beaucoup plus faibles, le sol de la placette a infiltré plus de 90 % des 11 m<sup>3</sup>.

### 6.2.1.3 Conditions aux limites et initiales de la simulation

Les conditions aux limites imposées au versant sont assez simples : un flux nul est imposé sur tous les bords du versant, le seul point de sortie d'eau est l'exutoire de surface en aval du versant. En surface, le forçage atmosphérique correspond à l'évènement pluvieux de 4 août (voir figure 6.3).

Dans cette étude, seuls les résultats des simulations concernant l'hydrologie seront confrontés à des données terrain. Ainsi, les conditions initiales de niveau de nappe doivent correspondre aux conditions observées sur le terrain. On ne dispose pas de données de niveau de nappe datant de 2004. Par contre les données de pluviométrie montrent que le 4 août 2004, la situation hydrologique du versant de Saint-Joseph était plutôt sèche, l'évènement pluvieux précédent remontait au 7-8 juillet 2004. Le niveau de nappe initial choisi pour la simulation se base sur des données de l'année 2012, année durant laquelle les hauteurs de nappe dans différents piézomètres de la bande enherbée ont été relevées avec une haute fréquence. La figure 6.4 montre les hauteurs de nappe dans la bande enherbées issues des relevés piézométriques de 2012 (repères rouges) et l'extrapolation du niveau de nappe vers l'amont (repères gris). Les repères rouges correspondent à la moyenne des niveaux de nappe de l'été 2012.

Les simulations vont permettre d'analyser les réponses du modèle en terme de transfert des solutés, et notamment les interactions surface-subsurface. Comme les résultats des simulations concernant de transfert des solutés ne seront pas comparés à des données terrain, il est possible d'adapter des conditions initiales suivant les objectifs de l'étude, c'est-à-dire ici l'étude des interactions surface-subsurface. A l'état initial, on se place dans un cas qui correspond grossièrement à une situation juste après épandage : la concentration de soluté est nulle dans tout le domaine, sauf dans les 10 premiers centimètres de sol de la vigne (donc pas dans la bande enherbée) où une concentration de 1 g.m<sup>-3</sup> est imposée. Egalement, le sol est saturé en eau dans les dix premiers centimètres de la vigne. La concentration de soluté dans la pluie est nulle. Cette condition initiale est idéale pour l'étude du module de remobilisation des solutés du sol dans la lame ruisselante, des évolutions du stock de soluté en subsurface dans la vigne et la bande enherbée, et des transferts en surface.

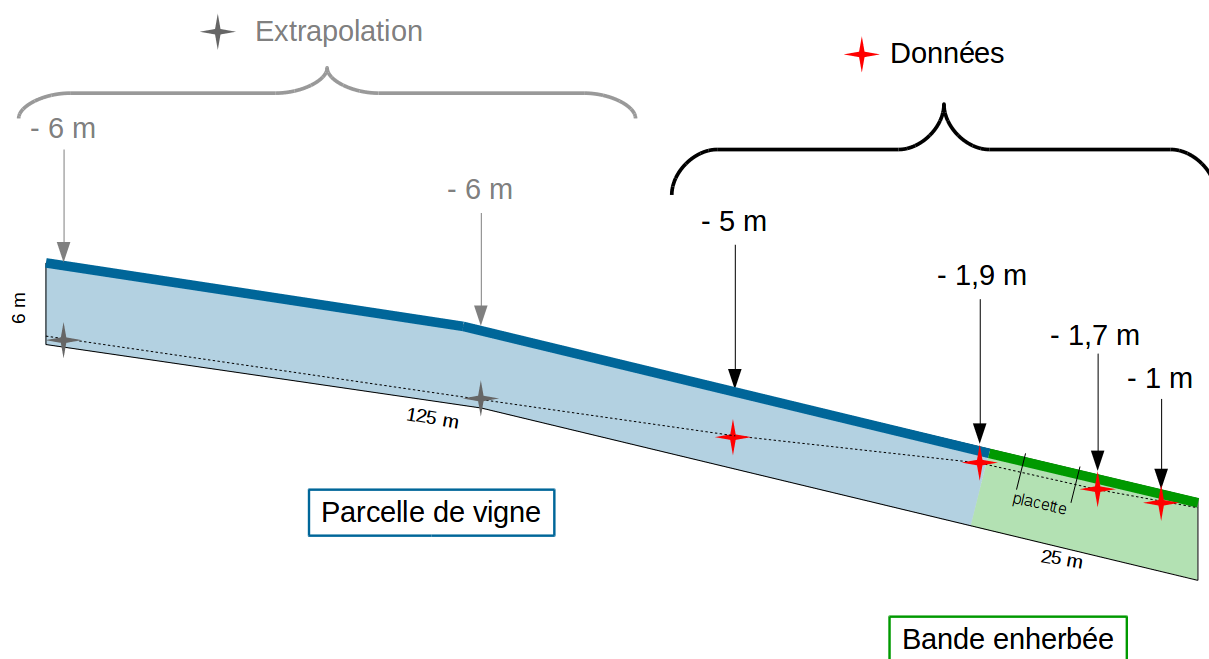


Figure 6.4 – Profil longitudinal du versant de Saint-Joseph mesures hauteurs de nappe relevées dans les piézomètres, et l'extrapolation du niveau de nappe jusqu'à la limite amont du domaine.

### 6.2.2 Cohérence des résultats avec les données terrain

La figure 6.5 montre la comparaison entre le volume cumulé dans les gouttières 1 et 2 pour les données relevées sur le terrain et les simulations. Tous les paramètres hydrodynamiques d'entrée sont issues des mesures terrain, seule la conductivité à saturation correspondant aux horizons 1 et 2 de la vigne et à l'horizon 2 de la bande enherbée a été baissée (de  $4.0 \times 10^{-5}$  m/s selon les mesures terrain, contre  $3.19 \times 10^{-5}$  m/s ici). Avec la valeur initiale ( $4.0 \times 10^{-5}$  m/s), l'écart entre les volumes cumulés dans les gouttières 1 et 2 étaient le même que celui des données observées, c'est-à-dire  $10 \text{ m}^3$  mais par contre comme seulement  $10 \text{ m}^3$  arrivait dans la gouttière 1, très peu de volume était simulé dans la gouttière 2. Le passage à une conductivité à saturation sur la vigne de  $3.19 \times 10^{-5}$  m/s a permis d'obtenir une très bonne correspondance pour le total des volumes passés dans les gouttières 1 et 2 pendant l'événement du 4 août 2004 (voir figure 6.5). La dynamique des flux par contre est très différente : dans la simulation, toute la quantité d'eau passe dans les gouttières en 5 min environ seulement alors qu'elle passe en plus de 30 min selon les données terrain. Ceci s'explique notamment par la surface du domaine qui considérée dans les simulations comme topographiquement homogène : la microtopographie n'est pas représentée, ni les obstacles éventuels au ruissellement (pied de vignes, résidus de paillage, ...). La rugosité prend en compte ces obstacles, mais de manière moyennée sur toute la surface. On ne rend donc pas compte d'éventuelles disparités spatiales entre les temps de parcours. D'autre part, le début du

ruissellement de surface dans la gouttière arrive plus tard dans la simulation que dans la réalité. Cela pourrait s'expliquer par les choix de paramétrisation des zones imperméables (demi-buse et gouttière) liant une faible conductivité à saturation (mais pas représentative d'une zone complètement imperméable) et une porosité résiduelle très forte. Quand la pluie tombe, un certain temps est nécessaire pour que le terrain perde de sa capacité d'infiltration alors que le ruissellement de surface est généré quasiment sans délai dans la réalité. Il existe dans le module de ruissellement de CATHY des options de modélisation qui auraient pu permettre d'affiner la représentation de la réalité du terrain, mais compte tenu des objectifs, cette voie n'a pas été approfondie.

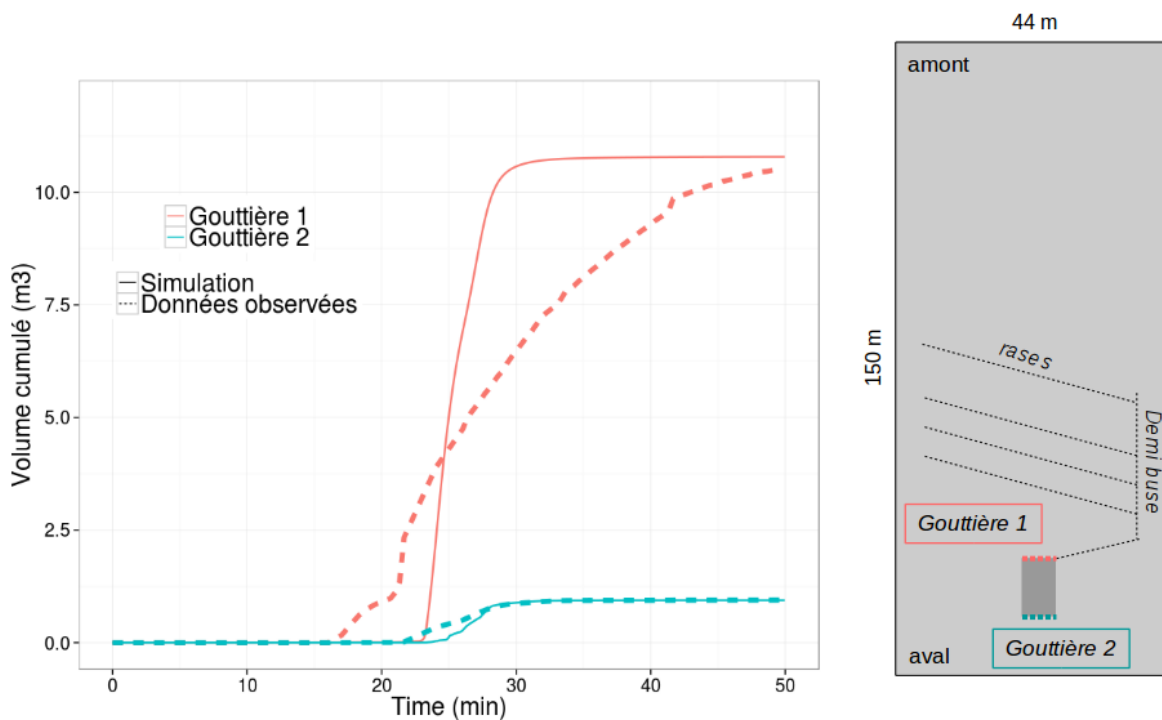


Figure 6.5 – Comparaison du cumul des flux dans les gouttières 1 et 2 entre les données observées et les simulations.

L'outil FITEVAL a été utilisé pour caractériser la confrontation des données aux résultats. Dans la gouttière 1, les résultats ont jugés "non satisfaisants" avec une NSE de 0.6 [-1.007-0.946] et une RMSE de 2132 [1010-3001] reflétant bien la dynamique différente des flux. Par contre pour la gouttière 2, les résultats sont "très bons" avec un NSE de 0.981 [0.917-1] et une RMSE de 48.255 [3.576-85.89]. Cette phase de confrontation aux données, sans être une étape de validation rigoureuse puisqu'elle ne s'appuie que sur une variable de sortie, permet de vérifier la cohérence de la simulation avec le terrain. On ne cherchera pas à calibrer le modèle pour s'approcher des observations compte tenu des simplifications faites sur le domaine qui ne permettront jamais au modèle de prendre en compte la complexité du terrain. Pour autant, cette simulation simplifiée permet déjà de reproduire des processus de façon raisonnable.

### 6.2.3 Analyse du devenir des solutés réactifs

Plusieurs sorties du modèle concernant les solutés sont examinées. Il s'agit de passer en revue des variables de sortie variées pour vérifier de façon qualitative que le modèle représente comme attendu les processus principaux, et également d'approfondir la compréhension du modèle couplé et du module de surface.

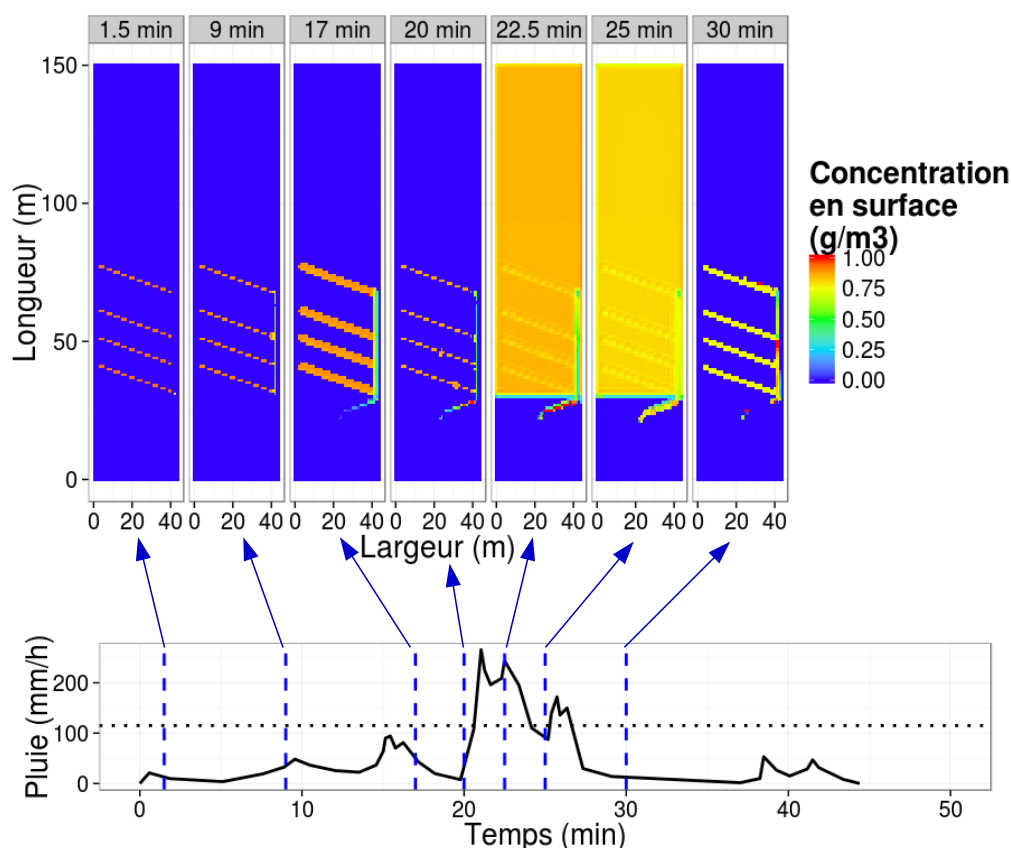


Figure 6.6 – Vue aérienne de la concentration en soluté en Diuron dans le ruissellement de surface à différents temps donnés repérés sur le graphe de l'événement simulé.

La figure 6.6 présente une vue aérienne de la concentration en Diuron dans le ruissellement de surface à différents moments de l'événement du 4 août 2004. Une première observation directe des résultats permet de constater que le module de mélange joue son rôle ici : le ruissellement qui passe sur la vigne (donc sur un sol concentré en soluté) devient lui-même vecteur de transfert et se concentre dans les rases puis la demi-buse. Les chemins d'écoulement, rases et demi buse, sont bien représentés. On rappelle que les solutés sont présents initialement dans les 10 premiers centimètres sur la zone de la vigne (rases et demi-buse comprises). Au début de l'évènement, du ruissellement se forme rapidement sur les rases puisque ce sont des zones particulièrement imperméables et, via le mélange de la première couche de sol et de la lame ruisselante, des so-

lutés passent en surface. C'est pourquoi pour les temps  $t=1.5$  min à  $t=20$  min les rases ressortent en couleur (concentration en surface non nulle) alors que le reste du domaine n'est pas en situation de ruissellement donc reste à la valeur 0. On peut aussi vérifier que quand l'intensité de la pluie est supérieure à la conductivité à saturation de la vigne (à 22.5 min et 25 min, repérés par la ligne en pointillés sur la moitié basse de la figure), du ruissellement est généré sur toute la zone. Ce ruissellement est moins concentré à 25 min qu'à 22.5 min puisqu'une partie des solutés initialement proches de la surface a déjà été transportée vers l'aval.

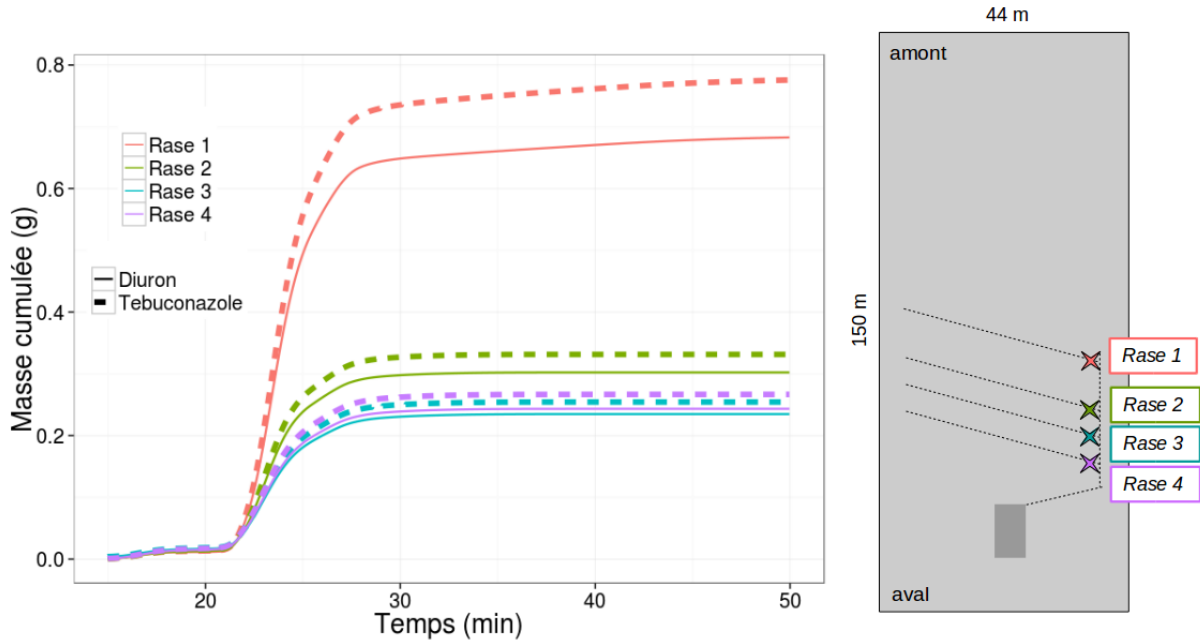


Figure 6.7 – Cumul de la masse de soluté (Diuron et Tebuconazole) mesuré à l'exutoire des quatre rases.

La figure 6.7 représente le cumul de masse qui transite en surface dans les rases en fonction du temps pour les deux solutés étudiés : Diuron et Tebuconazole. Logiquement, les masses cumulées sont en rapport direct avec les surfaces contributives de chaque rase. Le  $Kd$  du Tebuconazole est plus élevé que le Diuron, donc il a plus tendance à s'adsorber aux particules de sol, pourtant la figure 6.7 montre qu'il est d'avantage remobilisé en surface par le module de mélange. En effet, initialement les solutés sont présents à concentration égale dans les 10 premiers centimètres du sol. Durant l'événement pluvieux, de l'eau s'infiltré et emporte une partie des solutés en profondeur. Comme le Diuron est moins adsorbé que le Tebuconazole, une plus grande quantité de soluté reste en solution et est sujet au transfert vertical. Or le module de mélange égalise les concentrations de soluté dans la lame ruisselante et la première couche de sol. Ainsi, comme durant l'événement moins de Tebuconazole a été transporté par l'infiltration de l'eau de pluie dans le sol, une quantité plus importante de Tebuconazole que de Diuron est disponible pour la remobilisation par la lame ruisselante.

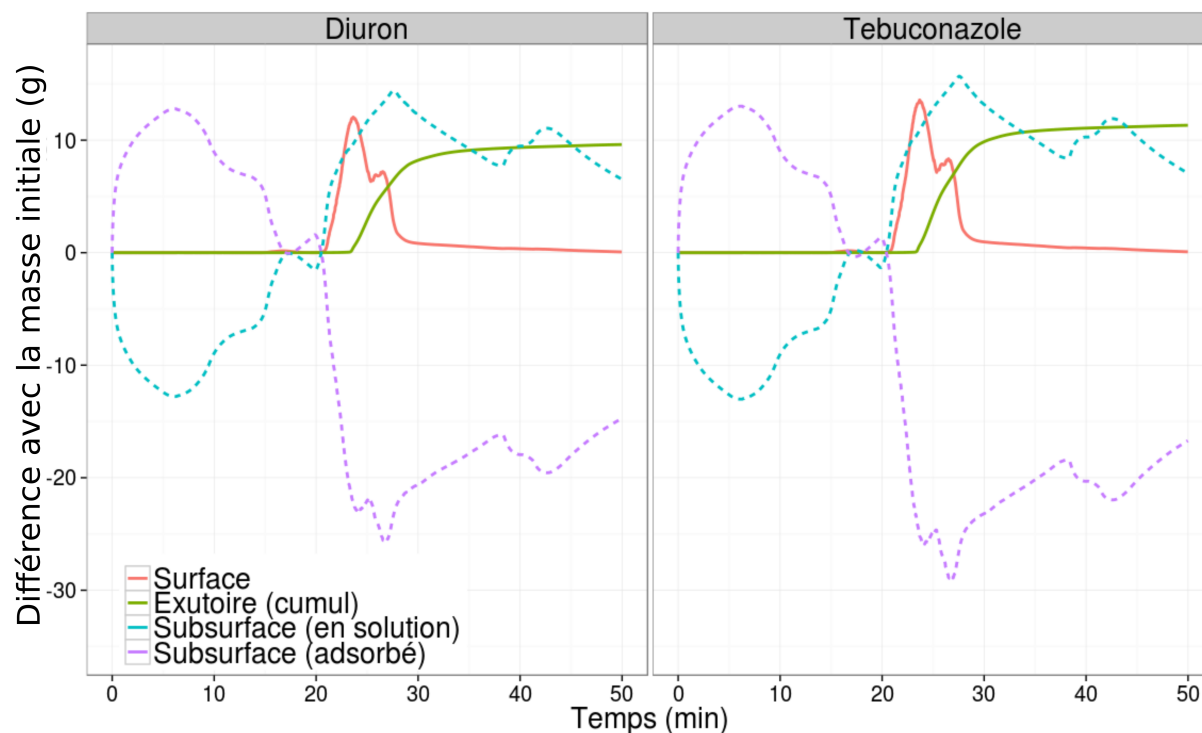


Figure 6.8 – Évolution dans le temps des masses de soluté en surface de l'ensemble du versant (lignes continues) et en subsurface (lignes pointillés), en relatif par rapport à la situation initiale. En rouge : la masse de soluté en surface au cours du temps, en vert, le cumul de masse sortant du domaine par l'exutoire, et bleu et violet la masse (relative à la masse initiale) de soluté en subsurface respectivement en solution ou adsorbés.

La figure 6.8 fournit plusieurs informations en parallèle : les lignes continues concernent la surface, et s'agit en rouge de l'évolution de la masse de solutés présente en surface et en vert le cumul de la masse sortant du domaine par l'exutoire de surface en aval. Les courbes en pointillé correspondent à l'évolution de la part en solution (en bleu) et adsorbée (en violet) de pesticide par rapport à la situation initiale. Le premier constat à faire, et un des plus importants, est que à chaque instant, la somme des masses des solutés en subsurface et en surface, est égale à la masse initiale moins le cumul de masse qui est sortie du système. C'est-à-dire que la masse totale est conservée au cours du temps. En gardant à l'esprit que l'événement est assez intense, génère du ruissellement sur de larges surface et que le domaine contient des zones très hétérogènes en terme de dynamique hydrologique, la conservation du bilan de masse est un signe fort quant à la robustesse du modèle.

Après ce premier constat, on peut s'intéresser aux résultats en eux-mêmes sur la figure 6.8. Une masse significative de soluté est présente en surface pendant les 10 minutes de pluie les plus intenses (courbe rouge), cette information est à recouper avec la vue aérienne des concentrations en surface sur le versant sur la figure 6.6. Ce transfert de surface provoque la sortie du système de 10 g de soluté au total pour le Diuron, ce qui correspond à 0.36 % de la masse initiale. Sachant que

la masse totale de soluté stockée dans la bande enherbée au cours de l'événement est 1 g, on peut faire remarquer que celle-ci n'a pas joué son rôle de rétention. Pourtant, il faut garder à l'esprit que les conditions sont particulières : tout le ruissellement généré sur la parcelle de vigne est redirigé sur la bande enherbée via une gouttière de 4 m de large. Le ruissellement très concentré spatialement, en effet une grande partie du ruissellement généré sur la vigne (44 m x 125 m) est réparti sur la bande enherbée sur seulement 4 m de large. Dans ces conditions, la bande enherbée n'a pas le temps de jouer son rôle. En effet, la durée pendant laquelle la masse sort par l'exutoire est finalement très courte (5 min) mais suffit au transport d'une masse non négligeable de soluté. Les comportements de transport en surface du Diuron et du Tebuconazole sont finalement assez proches, comme on l'a vu sur la figure précédente. Légèrement plus de masse est transportée via le ruissellement pour le tebuconazole ( $K_d$  plus élevé) par remobilisation des solutés du sol dans la lame ruisselante.

En subsurface, la part de soluté adsorbée commence par augmenter rapidement au début de la simulation. Ceci est dû au fait que l'état initial n'est pas à l'équilibre hydrostatique : les 10 premiers centimètres du sol sont saturés en eau, alors que la nappe est par endroit à 6 m de profondeur. Ainsi, de l'eau chargée en solutés se propage vers des zones avec une teneur en eau moins élevée et dont la concentration est nulle en soluté : une part de la charge en pesticide s'adsorbe instantanément aux particules de sol. A partir d'un certain temps, l'eau de pluie qui s'infiltre provoque l'effet inverse : elle fait baisser la concentration de pesticides en solution et donc une part des pesticides adsorbés repasse en solution et équilibre les concentrations selon le  $K_d$ .

A partir de ce type de simulation, il est également possible d'analyser les résultats en terme de concentrations. Dans la simulation, les transferts latéraux de subsurface perdent en concentration à mesure qu'il traversent la bande enherbée (dans laquelle la concentration en Diuron ou Tebuconazole est nulle à l'état initial) : de 1 à 100  $\mu\text{g/L}$  selon la profondeur à la limite vigne-bande enherbée et de 0.1 à 10  $\mu\text{g/L}$  si on se place 10 m plus en aval. De même, les concentrations de ruissellement de surface diminuent avec la distance à la vigne : de 100 à 1000  $\mu\text{g/L}$  à la limite entre la vigne et la bande enherbée et de 10 à 100  $\mu\text{g/L}$  100 m plus en aval (voir figure 6.9). Il s'agit d'une forte diminution, qui est sans doute à relier avec le fonctionnement du module de mélange. En effet le ruissellement chargé de la vigne se propage sur une bande enherbée dépourvue en soluté, et ainsi l'équilibre des concentrations à chaque maille induit par le mélange réduit fortement les concentrations dans la lame ruisselante, en particulier pour la première vague de ruissellement.

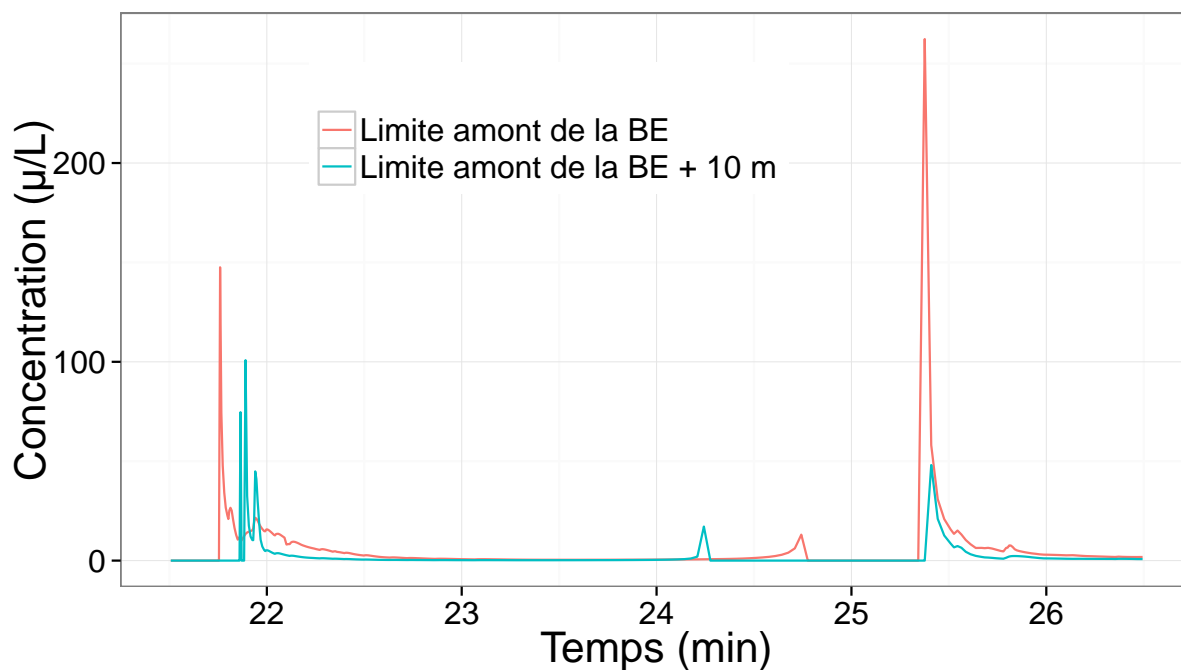


Figure 6.9 – Evolution de la concentration de soluté dans l'eau de ruissellement de surface à la limite vigne-bande enherbée (rouge) et 10 m plus en aval (bleu).

#### 6.2.4 Synthèse de la simulation du versant de Saint-Joseph

Dans cette section, le modèle CATHY couplé a été appliqué au versant de Saint-Joseph. La cohérence des simulations avec la réalité a d'abord été vérifiée en confrontant des données aux résultats de la simulation pour l'hydrologie. Compte tenu de la complexité du domaine, on ne prétend pas reproduire exactement le système avec l'ensemble de ces processus, mais cette étape a permis de vérifier un certain ancrage dans la réalité. Ensuite, des sorties variées du système ont été discutées, en particulier des variables liées au couplage surface-subsurface et au module de mélange entre la première couche de sol et la lame ruisselante. Les résultats n'ont pas été comparés à des données réelles ou aux résultats d'un autre modèle, on ne peut donc pas parler d'évaluation. Toutefois, les résultats montrent des dynamiques logiques et cohérentes entre elles. Le bilan de masse est très bon malgré la complexité des interactions surface-subsurface. L'analyse de sensibilité globale de type Sobol présentée dans la section suivante va permettre de tester le modèle d'une façon différente, plus systématique et quantitative, en permettant d'approfondir l'interprétation des résultats, le comportement du modèle, et de quantifier l'influence des paramètres et leurs interactions sur des variables d'état hydrologiques et de transfert de solutés.



### 6.3 Analyse de sensibilité globale

Une analyse globale de sensibilité fondée sur la décomposition de la variance (type Sobol) demande un nombre important de simulations. La complexité du versant de Saint-Joseph, et notamment la présence de rases et de fossés qui redirigent le ruissellement, rend le temps de simulation non négligeable (temps CPU : 4,4 h). Le but de cette analyse de sensibilité est de mieux comprendre l'importance des différents paramètres et leurs interactions pas forcément dans le contexte très particulier de la Morcille mais dans un contexte s'en approchant. Le domaine du versant a donc été simplifié pour ne plus en représenter exactement le terrain mais rendre le coût de calcul total de l'analyse raisonnable (temps CPU : 6 min environ).

#### 6.3.1 Construction de l'analyse de sensibilité

##### 6.3.1.1 Paramétrisation du modèle pour l'analyse de sensibilité : une simplification du versant de Saint-Joseph.

Le domaine modélisé dans la section précédente a été simplifié en supprimant le système de redirection du ruissellement (rases, demie-buse, gouttière). La taille des cellules en surface était limitée à 1 m x 1 m pour respecter la taille des rases sur le terrain. Comme ces éléments sont supprimés sur le domaine simplifié, la taille des cellules a pu être augmentée à 2 m x 2 m. De plus, l'hétérogénéité spatiale en surface ayant disparu dans la largeur du versant, ses dimensions ont été réduites de 44 m à 20 m. De plus, sur un événement de cette durée, la simulation présentée dans la première partie du chapitre a montré que l'on pouvait négliger le rôle des dernières couches. Ainsi la profondeur a été diminuée de moitié, passant de 6 m à 3 m, découpé en 5 couches numériques. En tout, le domaine simplifié est composé de 5016 nœuds, c'est-à-dire plus de dix fois moins que le domaine complexe utilisé dans la section précédente. La diminution du nombre de nœuds et de l'hétérogénéité (les zones plus imperméables des rases et de la gouttière ne sont plus considérées) ont permis de diviser le temps de calcul de 30 à 40 fois environ par rapport au domaine complexe. Le domaine est découpé en trois zones au sein desquelles des propriétés dynamiques sont considérées comme homogènes (voir figure 6.10). L'évènement représenté, les conditions aux limites et les conditions initiales ont été conservées, c'est-à-dire : flux nul sur toutes les faces du domaine et flux atmosphérique en surface (évènement du 4 août 2004, voir figure 6.3), concentration nulle en soluté sauf dans les 10 premiers centimètres de la vigne. La profondeur de la nappe à l'état initial est la même que pour la simulation précédente, ainsi que la saturation des 10 premiers centimètres de la vigne.

### 6.3.1.2 Variables de sorties analysées

Les variables de sortie sont choisies pour refléter la diversité des processus mis en jeu et sont illustrées sur la figure 6.10. On distingue la zone de la vigne de celle de la bande enherbée, et au sein de la bande enherbée, deux zones ont été définies : la BE 1 de 10 m de large depuis la vigne et la BE2 constituée du reste de la bande enherbée, jusqu'à l'aval. Cette distinction permet d'avoir une idée grossière de la dynamique au sein même de la bande enherbée.

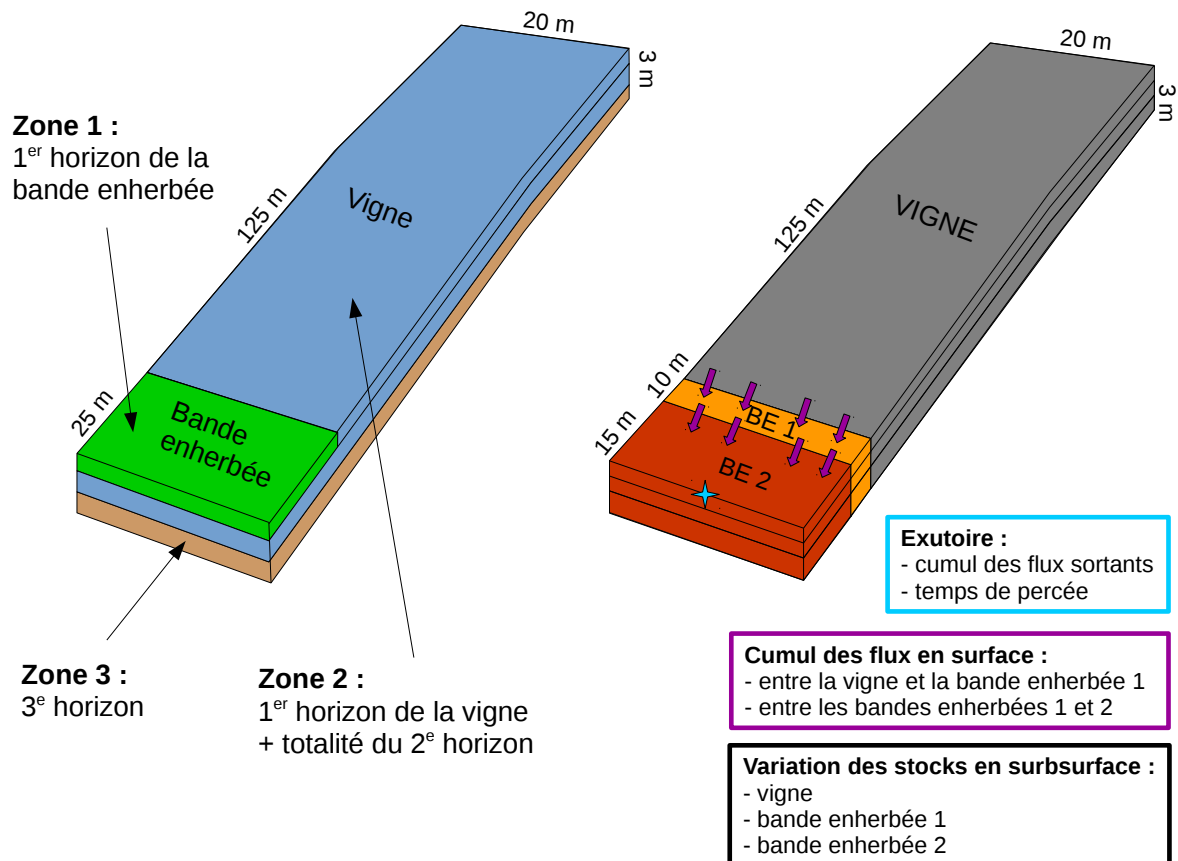


Figure 6.10 – Illustration des trois zones de mêmes propriétés hydrodynamiques (à gauche) et des variables de sortie choisies pour l'analyse de sensibilité. Localisation des 3 zones à distinguer pour les sorties : la vigne, la bande enherbée 1 (BE1) et la bande enherbée 2 (BE2) (à droite).

La majorité des variables de sorties sont sous forme de cumuls, pour intégrer des processus globaux et rendre compte de la dynamique générale du système. On s'intéresse au cumul des transferts en surface et en subsurface entre la vigne et la bande enherbée 1, ainsi qu'entre les bandes enherbées 1 et 2. Le cumul des flux à l'exutoire du système est aussi analysé, ainsi que le temps de percée, défini par le temps auquel 5% des flux cumulés à l'état final (60 min) sont sortis du système. Enfin, l'évolution des stocks en subsurface entre l'état initial et l'état final est aussi prise en compte. Toutes ces variables de sortie sont examinées pour l'eau et pour les solutés. Pour les solutés, l'erreur de bilan est également prise en compte comme variable de sortie.

### 6.3.1.3 Description des différentes méthodes d'échantillonnage utilisées

Plusieurs fonctions et échantillonnages ont été utilisés lors de cette analyse de sensibilité, elles sont décrites dans la section 3.2.2.4. On rappelle que la fonction Sobolmartinez a été choisie pour sa capacité à gérer les simulations menant fréquemment à une "non-valeur" (NaN) qui peuvent advenir dans les modèles environnementaux. La fonction Sobolroalhs a elle été choisie pour compléter l'analyse de sensibilité obtenue avec Sobolmartinez et compte tenu de son très faible coût de calcul. Sobolmartinez (Martinez, 2011) et Sobolroalhs (Tissot and Prieur, 2015) sont disponibles sous R. Leur plus grande différence réside dans les indices qu'elles permettent d'obtenir et leur calcul, et donc dans la façon d'échantillonner : pour une variable de sortie, la méthode de Sobolmartinez permet de calculer les indices de premier ordre ainsi que les indices totaux des paramètres, et la méthode de Sobolroalhs les indices de premier et second ordre mais pas les indices totaux.

Sobolmartinez proposant de calculer les indices totaux, l'échantillonnage qu'il impose est plus conséquent que pour la fonction Sobolroalhs. Pour Sobolmartinez, un paramètre  $N$  doit être fixé, et il est généralement compris entre 500 et 1000 et correspond à la taille des échantillons de base de chaque paramètre (Saltelli et al., 2008) (voir section 3.2.2 pour plus de détails). En pratique, jusqu'à un certain point plus  $N$  est élevé, moins l'incertitude de calcul des indices sera élevé, et il faut donc trouver un équilibre entre le temps de calcul et la précision des résultats. La fonction Sobolroalhs est nettement moins coûteuse en temps de calcul, et permet d'aboutir aux indices de premier et deuxième ordre. Les indices de second ordre seront utilisés quand cela sera nécessaire pour préciser les résultats de la fonction Sobolmartinez dans l'analyse du modèle CATHY, par exemple pour avoir plus de détails sur les interaction des paramètres, et les indices de premier ordre seront comparés à ceux de la fonction Sobolmartinez dans le cadre de la discussion sur les méthodes.

### 6.3.1.4 Densités de probabilité des paramètres d'entrée

Pour mettre en place l'analyse de sensibilité globale sur le modèle CATHY avec solutés réactifs, les densités des fonctions de probabilités des paramètres étudiés dans l'analyse de sensibilité sont basées sur la littérature, les données ou les jugements des experts (Saltelli et al., 2005). Les paramètres qui ont été choisis correspondent aux paramètres hydrodynamiques classiques et repérés comme influents dans l'analyse de sensibilité de type Morris appliqué sur les expérimentations de MASHYNS dans le chapitre 5, et les paramètres principaux liés au couplage surface-subsurface. Les paramètres analysés sont les suivants : la conductivité à saturation ( $K_s$ ), les paramètres de la courbe de rétention ( $\theta_s, \theta_r, n, \alpha$ ), le niveau initial de la nappe ( $GW_i$ ), le coefficient d'adsorption ( $K_d$ ), la rugosité ( $K_{strickler}$ ), le ponding minimum ( $Pond_{min}$ ) et l'épaisseur de la

couche de mélange, c'est-à-dire l'apaisseur de la première couche numérique (*Mix*). A noter que, comme pour l'analyse de sensibilité de type Morris dans le chapitre précédent, les paramètres liés aux conditions aux limites atmosphériques ne sont pas testés (les conditions aux limites sont un flux nul sur toutes les faces autres que la surface). Sur le versant simulé, deux zones sont très distinctes en terme de fonctionnement hydrologique : la vigne et la bande enherbée. Les paramètres  $K_s$ ,  $\theta_s$ ,  $n$ ,  $\alpha$ , et  $K_d$  sont donc définis sur ces deux zones, ce qui amène le nombre total de paramètres à 15. La zone 1 correspond au premier horizon de la bande enherbée et la zone 2 au premier horizon de la vigne et à la totalité du deuxième horizon. Tous ces paramètres varient indépendamment les uns des autres dans la méthode Sobol et sont décrits chacun par une densité de probabilité (voir tableau 6.2). Comme dans l'analyse de sensibilité sur la simulation des expérimentations de MASHYNS basée sur la méthode de Morris, l'indépendance de certains paramètres entre eux est une simplification discutable. Le fait de les supposer non corrélés peut engendrer une surestimation ou une sous-estimation de l'incertitude et de la sensibilité des paramètres. Une partie des courbes de rétention sélectionnées au hasard dans l'échantillon (5% environ) ont été tracées et sont réalistes par rapport au jeu de données initial. Toutefois, il s'agit d'un choix pratique qui pourrait être amélioré avec l'utilisation de méthodes d'échantillonnage par groupe qui permettent de rendre compte de la corrélation entre deux paramètres (Jacques et al., 2006; Xu and Gertner, 2008).

Tableau 6.2 – Densités de probabilité des paramètres sélectionnés pour l'analyse de sensibilité. <sup>a</sup> : la zone 1 correspond au premier horizon de la bande enherbée et la zone 2 au premier horizon de la vigne et à la totalité du deuxième horizon (voir figure 6.10). Les fonctions sont décrites par leur moyenne  $\mu$  et leur variance  $\sigma^2$  pour les lois LN (lognormale) et N (normale), par le minimum, le centre et le maximum pour la loi T (Triangulaire) et par le minimum et le maximum pour la loi U (Uniforme).

Paramètre		Unité	Fonction de distribution	
			Zone 1 <sup>a</sup>	Zone 2 <sup>a</sup>
Conductivité à saturation	$K_s$	$m.s^{-1}$	LN ( -8.817 , 0.69 )	LN ( -10.591 , 0.69 )
Courbe de rétention	$\theta_s$	(-)	N( $5.4 \times 10^{-1}$ , $2.9 \times 10^{-3}$ )	N( $4.2 \times 10^{-1}$ , $1.8 \times 10^{-3}$ )
	$\theta_r$	(-)	N( $1.5 \times 10^{-1}$ , $1.4 \times 10^{-3}$ )	
	$n$	(-)	N( $1.46$ , $2.1 \times 10^{-2}$ )	N( $1.52$ , $2.3 \times 10^{-2}$ )
	$\alpha$	$cm^{-1}$	N( $3.2 \times 10^{-2}$ , $9.2 \times 10^{-5}$ )	N( $1.0 \times 10^{-1}$ , $9.0 \times 10^{-4}$ )
Niveau de nappe initial	$GW_i$	$m$	T ( -0.24 , 0.24 , 0 )	
Adsorption Diuron Tebuconazole	$K_d$	$L.kg^{-1}$	T ( 3.9 , 5.1 , 6.3 )	T ( 1.0 , 2.43 , 3.8 )
			T ( 23 , 45.1 , 68 )	T ( 20.7 , 32 , 43.3 )
Rugosité	$K_{strickler}$	$m^{1/3}.s^{-1}$	T ( 20 ; 40 ; 30 )	
Ponding minimum	$Pond_{min}$	$m$	U ( $2.5 \times 10^{-3}$ ; $7.5 \times 10^{-3}$ )	
Couche de mélange	$Mix$	$m$	U ( $5.0 \times 10^{-4}$ ; $1.5 \times 10^{-3}$ )	

La conductivité à saturation est classiquement représentée par une distribution lognormale (Coutadeur et al., 2002; Fox et al., 2010; Schwen et al., 2011). De nombreuses mesures sont dis-

ponibles sur le versant, respectivement 17 et 8 mesures pour les zones 1 et 2. La moyenne et l'écart-type de la densité de probabilité de  $K_s$  sont basés sur ces mesures. La porosité et les paramètres de van Genuchten pour la courbe de rétention suivent une distribution normale (Schwen et al., 2011; Alletto et al., 2015; Dairon, 2017). La densité de la fonction de probabilité de la porosité est également basée sur des données terrain, respectivement deux et cinq mesures pour les zones 1 et 2. L'écart type est proche de celui reporté dans la littérature (Meyer et al., 1997; Baroni and Tarantola, 2014). La moyenne et l'écart-type de la porosité résiduelle  $\theta_r$  ont été choisies à partir des analyses des données du versant issues de deux études (Lacas et al., 2005; Van den Bogaert, 2011). L'écart-type relatif de  $\alpha$  et  $n$  est de respectivement 30% et 10% selon la littérature (Carsel and Parrish, 1988; Schwen et al., 2011; Alletto et al., 2015). Plusieurs piézomètres ont suivi la dynamique de la nappe pendant une dizaine d'années. En particulier pour l'année 2012 le suivi est continu est très dense (un relevé toutes les 30 minutes). Les données montrent que la fonction de distribution qui représente le mieux les différentes hauteurs de nappe est la fonction triangulaire avec une variation de  $\pm 24$  cm par rapport à la moyenne (voir figure 6.4). Cette variation sera appliquée au profil de profondeur de nappe utilisée dans la section précédente (voir figure 6.4). Les coefficients d'adsorption  $K_d$  pour les deux solutés testés Diuron et Tebuconazole ont été mesurées dans le bassin versant de la Morcille à des profondeurs de sol variées (Randriambolohasinirina, 2012). Les résultats indiquent que la fonction de probabilité de type triangulaire est adaptée. Comme il y a peu d'information dans la littérature en ce qui concerne le coefficient de Strickler, la loi de distribution triangulaire a été choisie. Les limites ont été fixées grâce aux tables du rapport de Arcement and Schneider (1989). Un paramètre de ponding minimum avant le déclenchement du ruissellement est rarement considéré dans les analyses de sensibilité. Dans cette étude, il est appliqué seulement sur la bande enherbée. En effet, il s'agit de compléter le rôle de la rugosité de surface que l'on a pas spatialisé dans CATHY, contrairement au ponding minimum. Il n'est utilisé que dans la zone 1 (premier horizon de la bande enherbée). Les observations terrain ont permis de décider d'imposer une distribution uniforme de 2.5 mm à 7.5 mm. Selon Gao et al. (2004); Walter et al. (2007), la hauteur de la couche de mélange est de l'ordre de 1 cm. La rareté de ce paramètre dans les analyses de sensibilité nous a amené à choisir une densité de probabilité uniforme.

L'ensemble des graphiques des densités de probabilité des paramètres d'entrée est disponible dans l'annexe B.1.

### 6.3.2 Résultats de l'analyse d'incertitude et de sensibilité

Le tableau 6.3 résume le paramétrage des différentes analyses de sensibilité réalisées. Le nombre de paramètres à tester étant assez grand, et le temps de simulation non négligeable, il a été décidé

de choisir  $M = 500$ , pour un nombre total de simulations de 8500 par solutés (Diuron et Tebuconazole). Les erreurs sur les indices de premier ordre et totaux estimées par rééchantillonnage étaient très élevées, c'est pourquoi une deuxième analyse de sensibilité a été lancée, avec  $M = 1000$ , et un nombre total de 17000 simulations par soluté. Deux autres analyses de sensibilité ont été menées en complément, en suivant la méthode de Sobolroahls : seulement 1922 simulations par solutés pour les indices de premier ordre, et 1922 autres par soluté pour les indices de deuxième ordre. Dans la première partie de cette section (paragraphe 6.3.2.1 et 6.3.2.2), les résultats présentés proviennent en majorité de l'analyse avec la méthode de Sobolmartinez et avec  $M = 1000$ , mais seront complètes dans certains cas par des informations sur les indices de deuxième ordre (fonction sobolroahls). Dans la dernière partie de la section (paragraphe 6.3.2.3), une discussion sera menée sur les différentes méthodes et leur pertinence pour le contexte de ces simulations en particulier.

Tableau 6.3 – Description des différentes analyses menées dans ce chapitre, avec les nombres de simulations correspondants et leur utilité dans l'analyse des résultats.

Fonction	Indices	Paramètre M	Nb de simulations	Présentation des résultats
Martinez	1er ordre et totaux	500	8500	Discussion sur les fonctions (6.3.2.3)
		1000	17000	Analyse du modèle (6.3.2.1 et 6.3.2.2)
Roahls	1er ordre	31	1922	Discussion sur les fonctions (6.3.2.3)
	2e ordre	31	1922	Analyse du modèle (6.3.2.1 et 6.3.2.2)

Par soucis de clareté, les résultats présentés dans cette section ne concernent pas l'ensemble des sorties, et les résultats manquants se trouvent dans les annexes : annexe B.2 pour les incertitudes et annexe B.3. pour les indices de premier ordre et indices totaux.

### 6.3.2.1 Analyse d'incertitude de CATHY-Pesticide

Lors d'une analyse de sensibilité global, avant de décrire les influences de chaque paramètre ou leurs interactions sur une variable de sortie, on peut étudier l'incertitude sur les différences réponses du modèle liée à la variabilité de ses paramètres d'entrée en traçant leurs densités de probabilité. On se base ici sur le très grand nombre de simulations effectué avec l'échantillonnage Sobolmartinez.

La figure 6.11 illustre les analyses d'incertitude de la variable de sortie suivante : différence des volumes d'eau en subsurface entre la situation initiale et la situation finale dans les trois zones considérées. Dans cette sortie, c'est surtout l'infiltration de la pluie qui est le processus déterminant. On remarque en premier lieu que les moyennes des variables sont différentes, et certainement en rapport avec la surface de la zone exposée à la pluie. Par exemple, une majorité des simulations donnent une variation du stock autour de  $75 \text{ m}^3$  sur la vigne (surface de  $2500 \text{ m}^2$ ) contre  $7 \text{ m}^3$  sur la bande enherbée 1 (surface de  $200 \text{ m}^2$ ) et  $13 \text{ m}^3$  sur la bande enherbée 2 (sur-

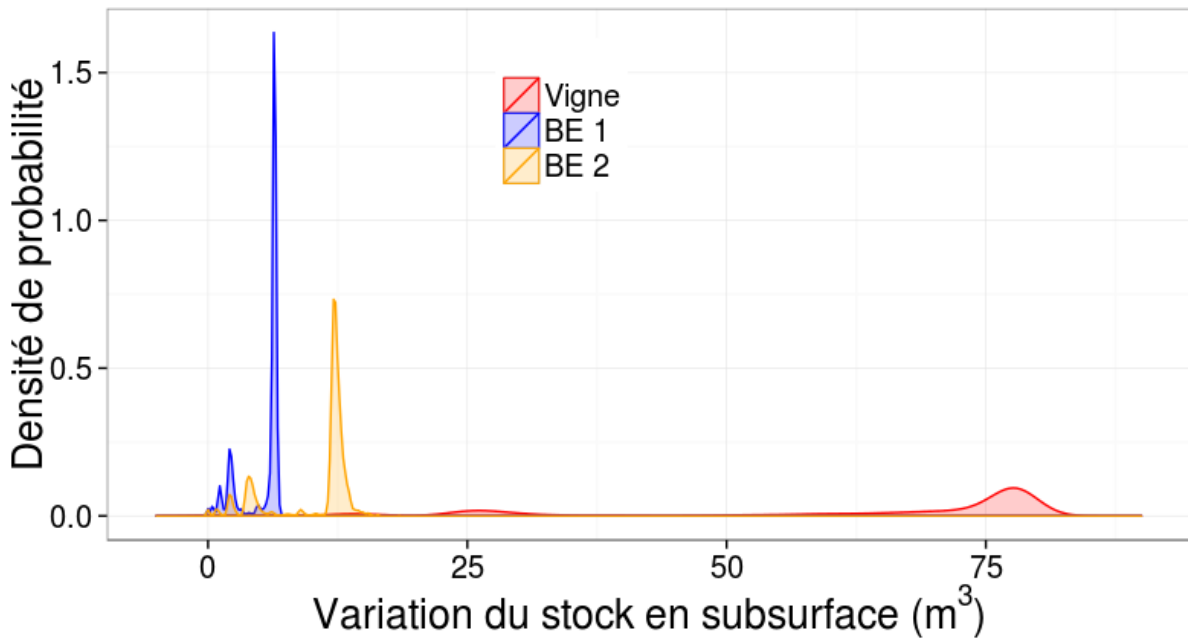


Figure 6.11 – Densité de probabilité de la différence de volume d'eau ( $m^3$ ) en subsurface entre l'état final et l'état initial dans les trois zones (vigne, bande enherbée 1 et bande enherbée 2).

face de  $300 m^2$ ). On remarque également que les trois densités de probabilités sont bi-modales. Une hypothèse pour expliquer cette bi-modalité se trouve peut être dans le profil d'intensité de pluie. En effet sur la figure 6.3 on voit que l'intensité de la pluie est supérieure à la conductivité à saturation du premier horizon de la vigne (ligne pointillée) entre les temps 20 min et 28 min environ. Mais dans certains jeux de paramètres, la conductivité de la vigne est plus faible, et parfois inférieure à l'intensité de la pluie autour d'autres pics de précipitation, par exemple autour du temps 15 min. La forme complexe de l'événement pluvieux et ces phénomènes de seuil pourraient expliquer une densité de probabilité bi-modale de la sortie.

Si on s'intéresse à la même variable de sortie, mais pour les solutés, c'est-à-dire la différence de masse entre l'état initial et l'état final dans les zones de la vigne et de la bande enherbée 1 (voir figure 6.12), la situation est complètement différente. En effet, sur cette variable de sortie la pluie n'aura que peu d'effet puisque celle-ci a une concentration nulle en pesticide. On observera par contre le résultat des transferts combinés de surface et de subsurface. On rappelle qu'à l'état initial, la totalité des solutés se trouve localisée dans la zone de la vigne. Sur la figure sont présentes deux versions de la même information : en haut les densités de probabilité ne sont pas tronquées, et en bas elles ont été tronquées pour rendre mieux compte de leur forme. On notera que la distribution des valeurs a une forme bien particulière : une écrasante majorité des valeurs de cette variable de sortie sont rassemblées dans un intervalle très réduit par rapport à la varia-

bilité totale. Par exemple pour la zone de la vigne et le Tebuconazole, 99,5% des valeurs de sortie se trouvent entre -0.1 g et 0 g mais la variabilité totale des sorties est entre -25 g et 40 g.

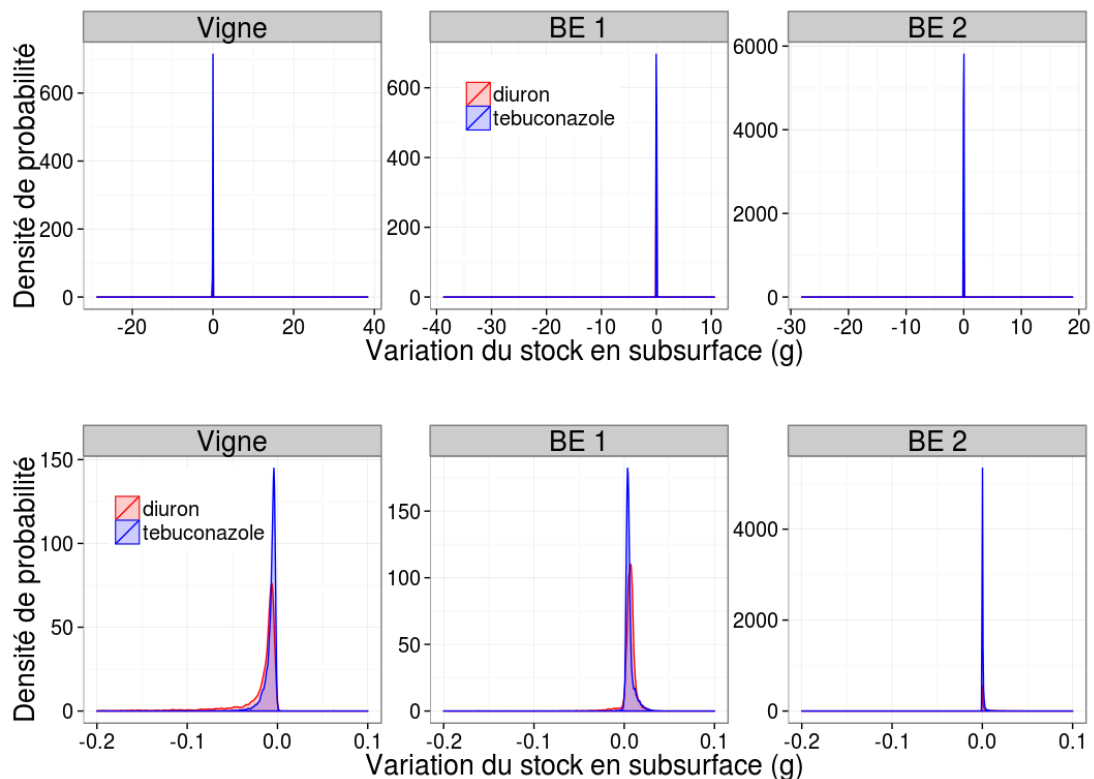


Figure 6.12 – Densité de probabilité de la différence de masse de pesticide en subsurface entre l'état final et l'état initial dans les trois zones (vigne, bande enherbée 1 et bande enherbée 2). En haut : la densité non tronquée et en bas : la densité tronquée pour plus de lisibilité.

Au sujet des résultats eux-mêmes, on note que la majorité des valeurs de la variation des stocks est assez faible : en moyenne 0.01 g a transité entre les zones. Les graphes correspondants à la vigne et à la bande enherbée 1 sont quasi symétriques : la masse de soluté qui a quitté la zone de la vigne s'est retrouvée dans la bande enherbée 1 en totalité. Et en effet, pour la bande enherbée 2, très peu de pesticide a été stocké pendant l'événement. Une tendance dans le comportement des deux pesticides se distingue et confirme ce que l'on sait sur leur capacité à s'adsorber aux particules de sol. Le Diuron, dont le  $K_d$  est moins fort que celui du Tebuconazole, est transporté en quantité légèrement supérieure. A noter, les graphes présentés ont été rognés sur l'axe des abscisses, et la distribution, bien que très majoritairement rassemblée autour des valeurs visibles ici, s'étire énormément du fait de quelques valeurs extrêmes. La question des valeurs extrêmes sera discutée plus en avant dans les prochains paragraphes.

La figure 6.13 (a) présente les erreurs de bilan de masse en pourcentages pour l'eau et les deux solutés. Pour l'eau, les bilans de masse sont très bons, tous compris entre -0.5 % et 1.5%. On remarque que la densité de probabilité n'est pas symétrique autour de 0, et que les erreurs



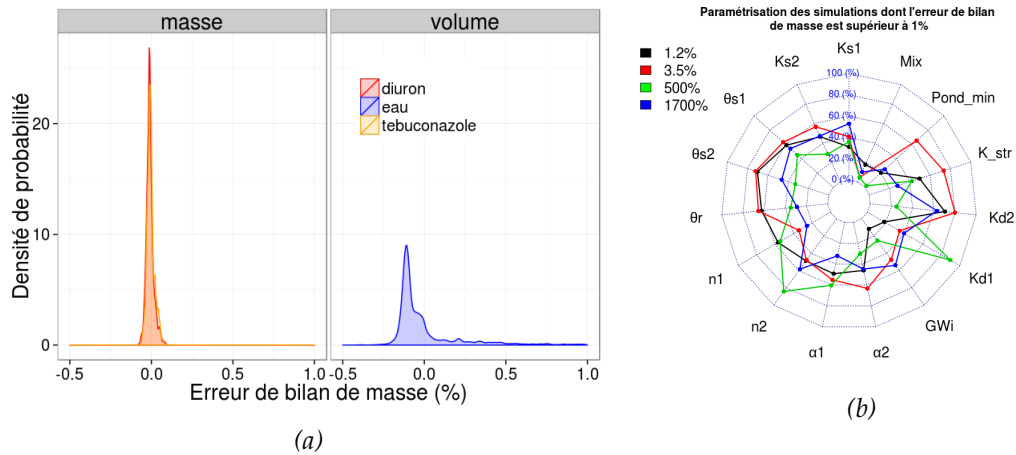


Figure 6.13 – La conservation de la masse : (a) densité de probabilité des erreurs de bilan de masse pour l'eau et les deux solutés Diuron et Tebuconazole (les courbes concernant le Diuron et le Tebuconazole sont difficilement différenciables car quasi superposées) et (b) détail de la paramétrisation des quatre simulations qui ont abouti à une erreur de bilan de masse supérieure à 1% pour les deux solutés. Les conductivités à saturation sont représentées sur une échelle logarithmique.

concernent en majorité de la disparition de volume. Pour les solutés, la conservation de la masse est également très bonne et la masse totale dans le domaine change de moins de 0.1% par rapport à la masse théorique au cours de la simulation pour la plupart des cas. On ne remarque pas de différence notable entre le Diuron et le Tebuconazole sur cette variable de sortie. Parmi les 17 000 simulations, seulement quatre présentent une erreur de bilan de masse de plus de 1% pour le Diuron et pour le Tebuconazole. Il s'agit des quatre même combinaisons pour les deux solutés et deux d'entre elles sont caractérisées par une erreur de bilan de masse de plus de 100%. Le détail de la paramétrisation de ces quatre simulations est montré sur la figure 6.13 (b). Le seul pattern commun à ces quatre simulations semble être une couche de mélange très fine. Cette observation est cependant difficile à exploiter, vu le nombre de simulations partageant cette la même épaisseur de couche de mélange, et dont le bilan de masse est correct. De manière générale, ces résultats sur les erreurs de bilan de masse mettent en avant la stabilité du modèle et le produit des efforts d'amélioration de la conservation de la masse dans le couplage.

L'étude des densité de probabilité des variables de sortie peut permettre de commencer à étudier certains comportements globaux du modèle et de vérifier l'ordre de grandeur de certaines sorties comme le bilan de masse. Mais le rôle de chacun des paramètres dans la variance des variables de sorties ne peut être examiné qu'en menant la méthode de Sobol à bien, c'est-à-dire en calculant les indices de premier voire deuxième ordre et les indices totaux.

### 6.3.2.2 Analyse de sensibilité des variables de sortie hydrodynamiques et de transport de soluté

L'analyse de sensibilité de Sobol est menée à la fois sur les paramètres hydrodynamiques et sur les paramètres liés à la chimie des solutés. Au delà du bénéfice direct sur le temps de calcul qu'apporte l'analyse de sensibilité unique par rapport à l'analyse séparée eau / chimie, l'analyse globale permet de détecter les éventuelles interactions des paramètres hydrodynamiques et chimiques sur les résultats de transfert. Plus simplement, l'analyse globale permet de vérifier que la variation des paramètres chimiques n'influence pas les sorties purement hydrodynamiques.

#### a) Extraction des simulations donnant lieu à des résultats extrêmes

La méthode Sobolmartinez a d'abord été menée avec une taille d'échantillonnage correspondant à  $N=500$  (donc 8500 simulations pour chacun des deux solutés). Vu les incertitudes des indices des ordres totaux, un échantillonnage plus large a été défini :  $N=1000$  donc 17000 simulations par soluté. Là aussi, les résultats bruts montraient de fortes valeurs et de grandes incertitudes sur les indices totaux, et comme la taille de l'échantillon n'était plus à incriminer, nous avons cherché plus loin et découvert que la présence ou non de quelques valeurs extrêmes dans les variables de sorties influençait de façon non négligeable les indices, en particulier les indices totaux ainsi que leur intervalles de confiance. Ainsi, pour chaque sortie, les simulations extrêmes ont été extraites telles que aucune incertitude sur les indices totaux ne dépasse 0.5. Globalement, on peut classer les simulations extraites en deux groupes : les simulations donnant des résultats non physiques, et les simulations certes extrêmes, mais dont les résultats sont acceptables physiquement. Il est fortement probable qu'en menant une autre analyse de sensibilité de Sobol avec par exemple  $N=2000$  au lieu de  $N=1000$ , les incertitudes sur les indices totaux seraient stabilisées sans avoir à extraire les simulations extrêmes mais qui restent dans les possibles des réalités physiques. L'analyse avec  $N=2000$  n'a pas été réalisée puisque que trop coûteuse en temps de calcul. Finalement, dans cette section les résultats de l'analyse de sensibilité avec  $N=1000$  sont présentés après extraction certaines simulations (voir figure 6.14).

La liste finale des simulations extraites est l'union des troncatures de chaque sortie et comporte 57 simulations, soit 0.33 % des 17000 simulations. Sachant que pour chaque sortie, jusqu'à une trentaine de simulations devaient être extraites, on remarque que les listes se superposent en grande partie et la majorité des simulations extraites posent problème pour plusieurs variables de sorties. Les quatre simulations représentées lors de l'analyse de l'erreur de bilan de masse se trouvent parmi les 57 simulations extraites.

Les détails des 57 simulations tronquées se trouvent sur la figure 6.14. Les combinaisons de paramètres sont assez diverses, et ne correspondent pas à une valeur extrême d'un paramètre

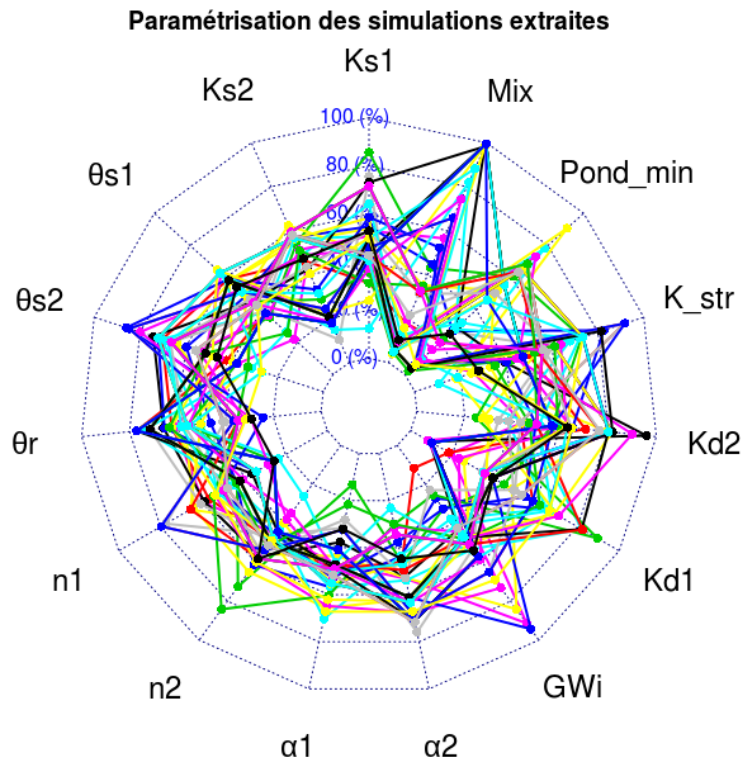


Figure 6.14 – Détail des combinaisons de paramètres correspondant aux simulations extrêmes extraites (57 sur 17 000 soit 0.33 %) pour stabiliser l’incertitude sur les indices totaux à une valeur inférieure à 0.5. Les conductivités à saturation sont représentées sur une échelle logarithmique.

influent. Par exemple, et contrairement à la figure 6.13 (b), les épaisseurs de couche de mélange sont distribuées sur tout l’échantillon (loi uniforme  $[5.0 \times 10^{-4}; 1.5 \times 10^{-3}]$ ). On remarque cependant que aucune simulation tronquée n’a une valeur de conductivité à saturation de la zone 2 forte. Si on peut avancer qu’une conductivité à saturation élevée sur la zone de la vigne ne génère pas de valeurs extrêmes dans les variables de sorties étudiées, il n’y pas assez d’information pour affirmer la réciproque sur les conductivités à saturation faibles. Enfin, on constate que les quatre simulations menant aux bilans de masse incorrects appartiennent à cet ensemble.

Dans toute cette section, les résultats d’indice de premier ordre ou totaux sont présentés avec l’extraction des simulations donnant des résultats extrêmes. C’est-à-dire que l’on remplace les résultats des 57 simulations extraites par des NA (Not Assigned). Cela confirme l’utilité de choisir la méthode Sobolmartinez capable de gérer des NA.

#### b) Sensibilité des variables de sortie hydrodynamiques

La figure 6.15 présente les indices de Sobol de 1er ordre et totaux et leurs incertitudes associées pour quatre variables de sortie concernant exclusivement l’eau : cumul du volume sortant à l’exutoire, temps de percée de l’eau à l’exutoire, évolution du volume sous la vigne entre l’état initial et l’état final, et cumul du volume ayant passé la limite entre la vigne et la bande enherbée

1 en surface. Avant d'analyser les résultats des paramètres hydrodynamiques, il est nécessaire de discuter des indices de sensibilité des paramètres de transport ( $K_{d1}$ ,  $K_{d2}$ ), certes faibles mais non nuls. En pratique, l'ensemble des simulations qui ne diffèrent que sur les paramètres de transport donnent exactement les mêmes résultats sur les variables de sorties analysées. Cependant, l'extraction de certaines simulations impose un NA sur ses résultats et apporte une variabilité artificielle sur les ensembles de résultats qui ne diffèrent que sur les paramètres liés au transport. Avec cette variabilité introduite artificiellement, les indices de sensibilité de  $K_{d1}$ ,  $K_{d2}$  et leur indice de confiance restent toutefois sous la barre de négligeabilité de 0.05.

Si on analyse les indices de sensibilité des paramètres hydrodynamiques, on constate tout d'abord d'importantes interactions entre les paramètres sur l'ensemble des variables de sortie. Deux paramètres de van Genuchten du premier horizon de la vigne ressortent comme principalement influents :  $K_{s2}$  la conductivité hydraulique et  $n_2$  le paramètre de van Genuchten tandis que les autres paramètres ont de faibles indices de premier ordre. Le cumul du volume sortant à l'exutoire et le cumul des flux en surface entre la vigne et BE1 sont influencés au premier ordre principalement par  $K_{s2}$ , les autres indices du premier ordre étant inférieurs à 0.05, on peut les considérer comme négligeables. De même, le temps de percée à l'exutoire est principalement influencé au premier ordre par  $n_2$ . Quant à l'évolution du volume d'eau en subsurface sous la vigne, le paramètre  $n_2$  domine au premier ordre, mais l'influence des paramètres  $K_{s1}$ ,  $K_{s2}$ ,  $\alpha_1$  et  $\alpha_2$  a un rôle non négligeable.

Pour chacune des quatre variables de sortie, la somme des indices de premier ordre est comprise entre 0.55 et 0.65, et montre que le modèle n'est pas du tout additif. Ce constat est en accord avec le fait que les interactions totales sont importantes. Pourtant, cette non additivité pourrait aussi être due à un choix trop restreint des paramètres d'entrée. En effet il est possible que le paramètre permettant d'expliquer la variance de cette sortie n'ait pas été étudié. Le paramètre *Mix* est un paramètre lié au transport de contaminant, mais pas exclusivement puisque c'est une propriété du maillage. Il n'est donc pas inquiétant qu'il puisse interagir avec d'autres paramètres et influencer la variabilité des sorties liées à l'eau. D'une manière générale, on constate une incertitude raisonnable sur les indices et de très fortes interactions entre les paramètres. Cependant, la variable de sortie de variation du volume d'eau sous la vigne présente des effets totaux particulièrement importants et uniformes pour tous les paramètres (sauf les paramètres de réaction et le ponding minimum). On s'intéresse donc aux indices de deuxième ordre de cette variable pour clarifier les interactions entre les paramètres.

L'analyse des indices de deuxième ordre peut permettre de préciser les résultats. Les résultats du deuxième ordre sont issus de la méthode Sobolroalhs présentée dans le chapitre 3 (section

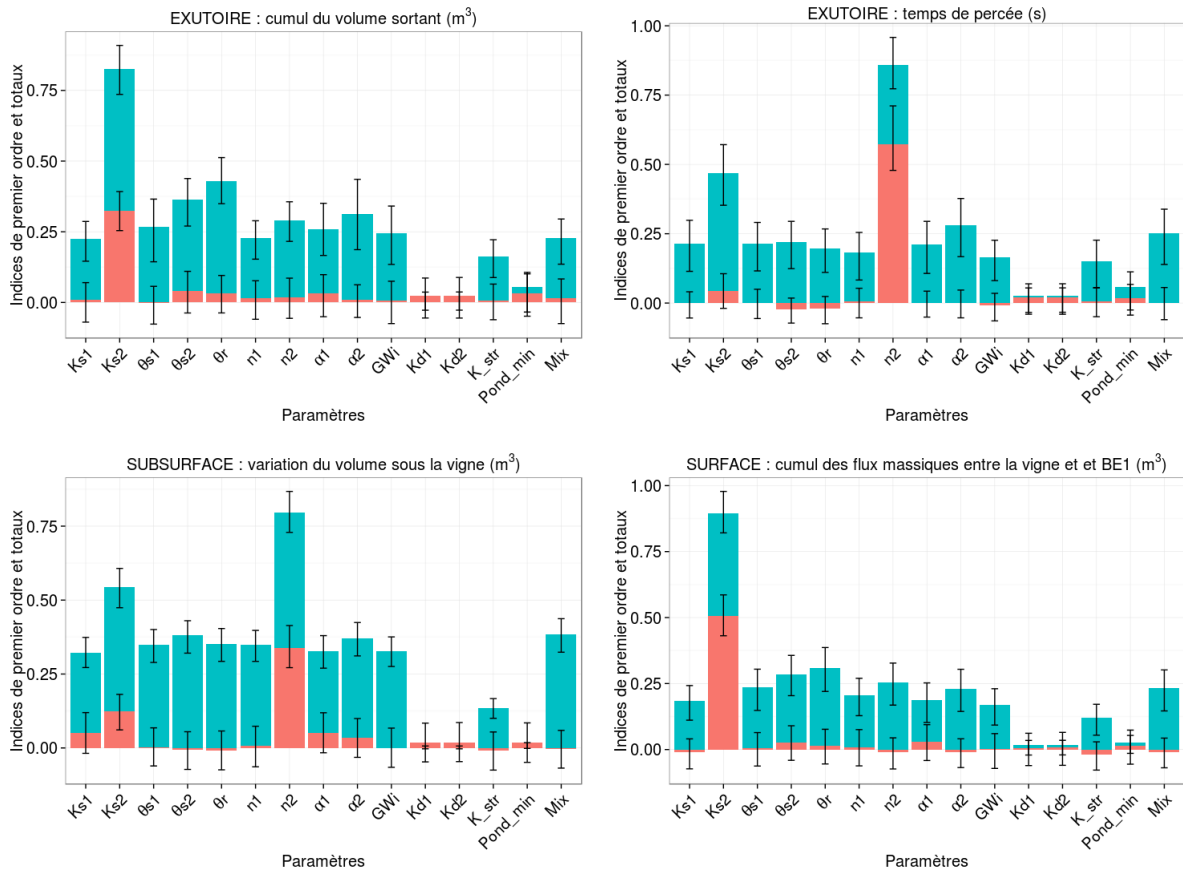


Figure 6.15 – Indices de Sobol de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de quatre variables de sorties qui concernent exclusivement l'eau. Le bleu qui est visible correspond donc aux interactions. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. Les paramètres "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les paramètres "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon.

3.2.2.2) (Tissot and Prieur, 2015). La figure 6.16 présente les effets de l'interaction des paramètres deux à deux sur la variable de sortie. A noter, aucun des résultats n'est considéré comme extrême comparés à ceux extraits pour les indices de premier ordre et indices totaux de la méthode Sobolmartinez. La figure 6.16 confirme les effets importants de  $K_{s2}$  et surtout de  $n_2$  qui interagissent deux à deux et avec l'ensemble des autres paramètres. Dans une moindre mesure, les paramètres  $Pondh_{min}$  et  $K_{str}$  interagissent deux à deux ainsi que  $Pondh_{min}$  et  $\alpha_1$ .  $Pondh_{min}$  et  $K_{str}$  concernent tous les deux le ruissellement de surface, il est cohérent qu'ils puissent interagir.  $Pondh_{min}$  et  $\alpha_1$  sont des paramètres de surface et subsurface respectivement, on peut imaginer qu'il interagissent via les échanges surface-subsurface. Les autres paramètres ne montrent pas d'interaction notable entre eux. On remarque que pour le paramètre  $n_2$ , si on rassemble les indices de premier et deuxième ordre, c'est à dire 0.33 (voir figure 6.15) et 0.4 environ (voir figure 6.16), on obtient quasiment la valeur de l'indice total, qui est de 0.79. Cela signifierait que pour cette variable de sortie, le paramètre est surtout soumis à des interactions au premier et second

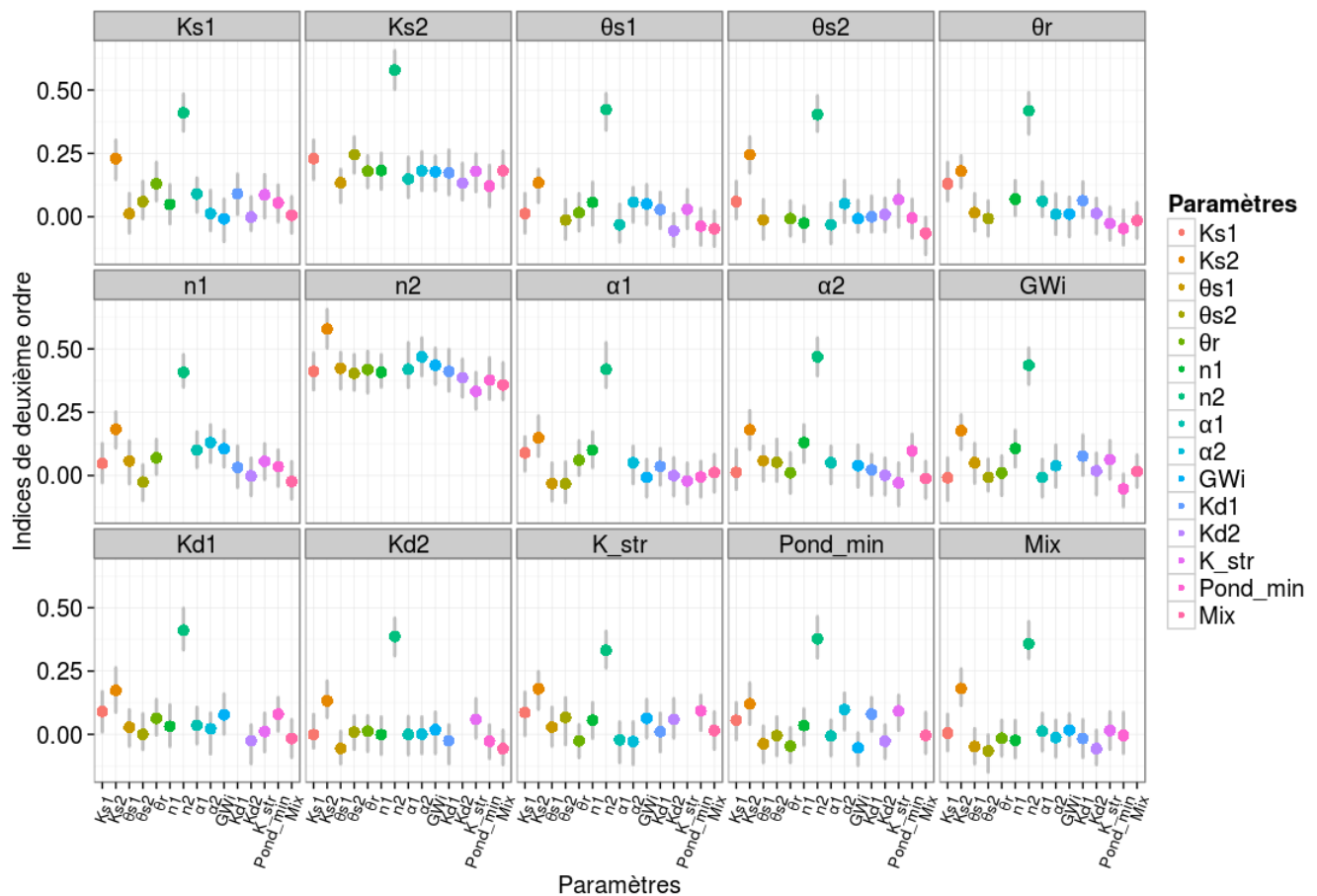


Figure 6.16 – Indices de deuxième ordre pour la variable de sortie d'évolution du volume d'eau sous la vigne entre l'état initial et l'état final. Les lignes grises représentent les barres d'erreur (intervalle de confiance de 95%).

ordre, et peu d'interaction d'ordres supérieurs.  $n_2$  est un paramètre de van Genuchten qui est particulièrement influent sur les courbes de rétention à des pressions proches de 0. Dans le contexte du versant et pendant un évènement pluvieux, les premiers horizons du sol sont non saturés, mais très humides, avec une pression proche de 0, les conditions sont donc réunies pour que  $n_2$  soit influent.

### c) Sensibilité des variables de sortie liées au transport

La figure 6.17 montre les indices de premier ordre et indices totaux pour quatre variables de sortie qui concernent le transport de soluté : erreur de bilan de masse, temps de percée à l'exutoire, évolution de la masse de soluté sous la bande enherbée 1 et cumul des flux massiques entre la vigne et la bande enherbée 1. Les indices sont illustrés seulement pour le Tebuconazole, car les résultats du Diuron sont très proches.

Les indices de premier ordre et indices totaux pour quatre variables de sortie sont présentés sur la figure 6.17 : erreur de bilan de masse, temps de percée, évolution de la masse en subsurface

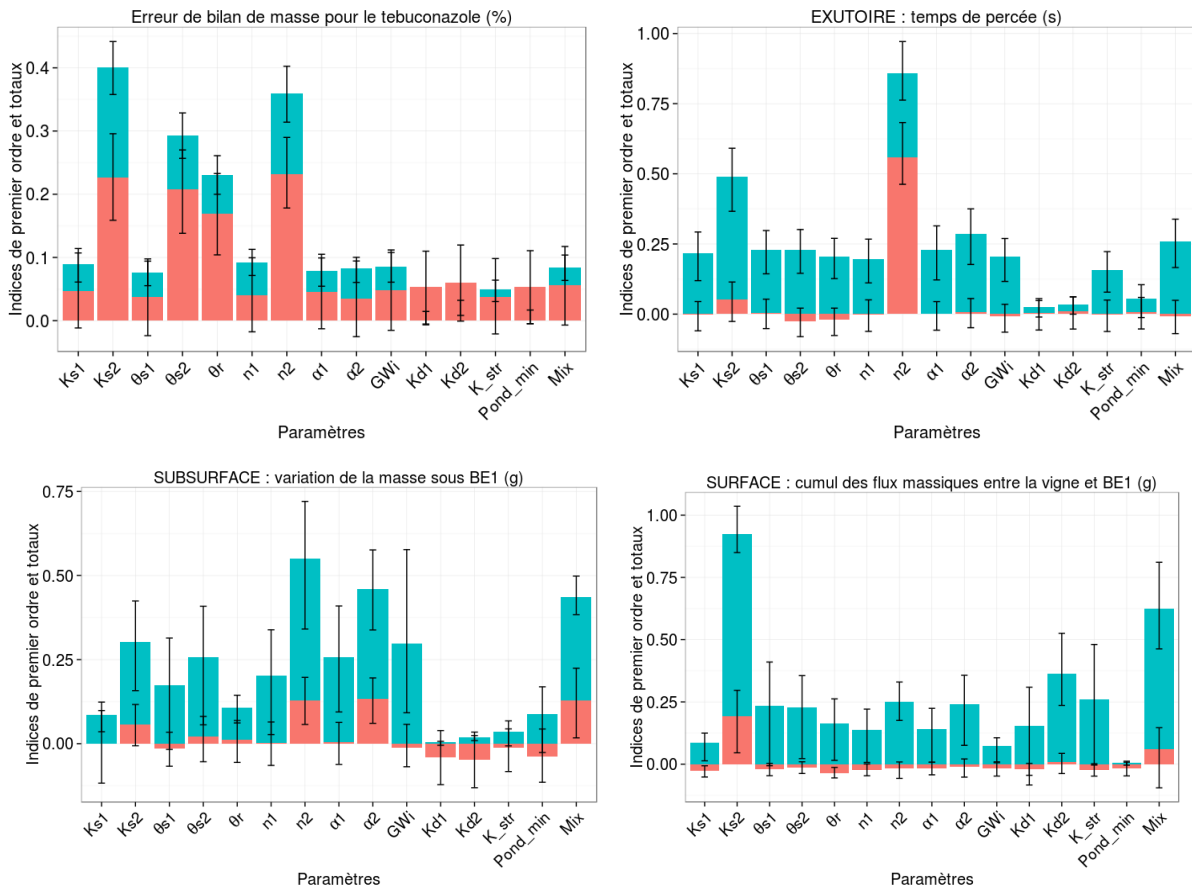


Figure 6.17 – Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent le transport du Tebuconazole. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%. Les suffixes "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les suffixes "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon.

sous la bande enherbée 1, et cumul des transferts massiques en surface entre la vigne et la bande enherbée. Tous les paramètres testés semblent influencer le bilan de masse au 1er ordre, avec une dominance des propriétés hydrodynamiques de la zone 2 (premier horizon de la vigne et totalité du deuxième horizon) :  $K_{s2}$ ,  $\theta_{s2}$ ,  $\theta_r$  et  $n_2$ . Sur l'ensemble des quatre variables de sortie, les indices totaux sont forts pour les paramètres dont les indices de premier ordre sont forts. Par contre,  $K_{d1}$ ,  $K_{d2}$  et le ponding minimum ne semblent pas interagir avec les autres paramètres. Ils présentent cependant des intervalles de confiance larges et sont à interpréter avec prudence. Logiquement, les résultats pour le temps de percée du soluté est très proches de ceux du temps de percée de l'eau avec  $n_2$  dominant, expliquant 50 % de la variance. Les résultats de l'évolution du stock en subsurface et les flux de surface entre la vigne et la bande enherbée montrent que l'épaisseur de la couche de mélange a une influence non négligeable. Pour ces deux sorties particulièrement, mais aussi pour le temps de percée, la somme des indices de premier ordre est largement inférieure à 1, confirmant l'importance des interactions dans le modèle. Pour l'erreur de bilan de masse par contre, la somme des indices de premier ordre est supérieure à 1. En théorie cette somme

ne peut pas dépasser 1, il est possible d'expliquer au moins en partie cette anomalie avec les incertitudes associées aux indices. La tendance montre tout de même que les interactions sont moins fortes pour le bilan de masse que pour les autres variables de sortie. Les conclusions tirées sur les indices de premier ordre et indices totaux sont toutefois à analyser avec prudence compte tenu des incertitudes assez grandes sur les indices, malgré la taille de l'échantillonnage ( $N=1000$ ), et de la sensibilité des résultats à la prise en compte ou non des simulations donnant des valeurs extrêmes. Ce dernier point sera discuté dans la section suivante.

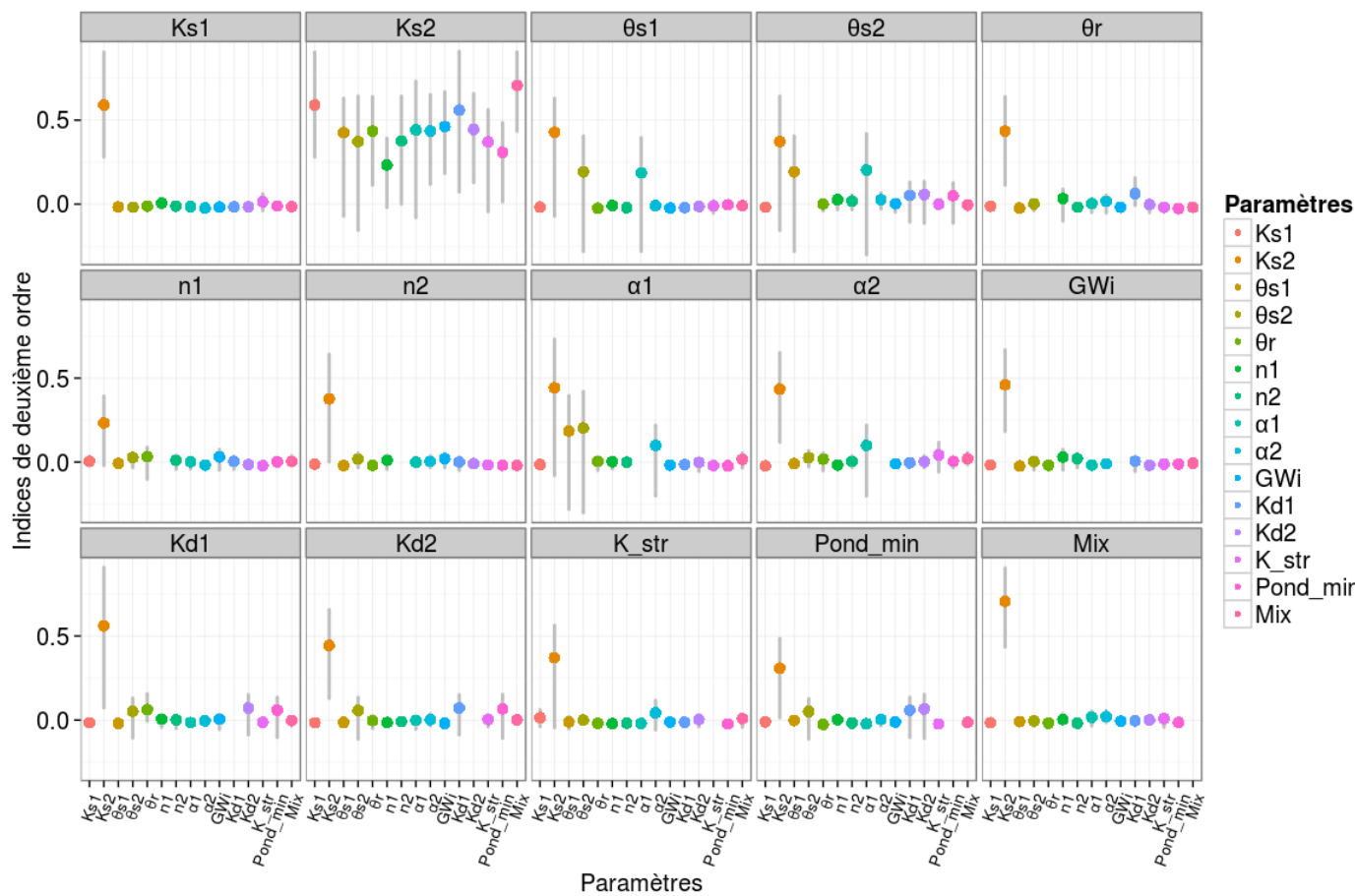


Figure 6.18 – Indices de deuxième ordre pour la variable de sortie du cumul des flux massiques en surface entre la vigne et BE1. Les lignes grises représentent les intervalles de confiance à 95% associées aux indices.

Comme pour les variables liées à l'eau, les interactions sont très importantes et on peut s'intéresser aux indices de deuxième ordre pour approfondir l'analyse de sensibilité des sorties. La figure 6.18 représente les indices de deuxième ordre des paramètres sur le cumul massique des transferts de surface entre la vigne et la bande enherbée. Contrairement à la figure 6.16, ici une des simulations donne un résultat considéré comme extrême, semblable aux résultats des simulations extraites pour l'analyse de sensibilité de Sobolmartinez. Cette simulation a été extraite dans les résultats de la figure 6.18. Comme sur la figure 6.17, on observe ici une influence nette



du  $K_{s2}$ , qui interagit deux à deux avec tous les autres paramètres. On peut également observer les interactions non négligeables entre  $\theta_{s1}$ ,  $\theta_{s2}$  et  $\alpha_1$ . Toutefois pour tous indices que l'on considère non négligeables ici, les intervalles de confiance à 95 % sont particulièrement larges.

#### d) Conclusions sur l'analyse des indices de premier, deuxième ordre et indices totaux sur les variables de sorties hydrodynamiques et liées au transfert

Les variables de sorties analysées concernent surtout la dynamique de déplacement des volumes d'eau et de solutés en surface, en subsurface et jusqu'à l'exutoire. Pour les variables de sortie concernant l'eau comme pour les variables concernant les solutés, les deux paramètres les plus influents semblent être la conductivité à saturation et le paramètre de van Genuchten  $n$  de la zone 2, c'est-à-dire du premier horizon de la vigne et de la totalité du second horizon. Excepté pour le bilan de masse, la somme des indices de premier ordre pour chaque variable de sortie est loin d'être égale à 1 et les indices totaux sont globalement élevés et répartis entre tous les paramètres liés à l'eau. Tout ceci met en lumière la complexité du fonctionnement d'un versant en terme de transfert, reflétée par la complexité d'un modèle couplé surface-subsurface. Pour les solutés, l'interprétation de certains résultats est toutefois sujette à discussion puisqu'elle s'est révélée particulièrement sensible à la prise en compte ou non des valeurs extrêmes, qui ne correspondent toutefois pas à des valeurs de paramètres extrêmes. On tentera dans le prochain paragraphe d'approfondir cette question et de comparer les différentes méthodes utilisées dans ce chapitre.

#### 6.3.2.3 Réflexion sur les différentes méthodes d'analyse

##### a) Discussion sur la prise en compte des simulations extrêmes

Lors du traitement des résultats de l'analyse de sensibilité de Sobol, le constat a été fait que l'influence de la prise en compte ou non des valeurs extrêmes sur le calcul des indices est non négligeable. La figure 6.19 illustre un exemple qui permet d'approfondir cette question.

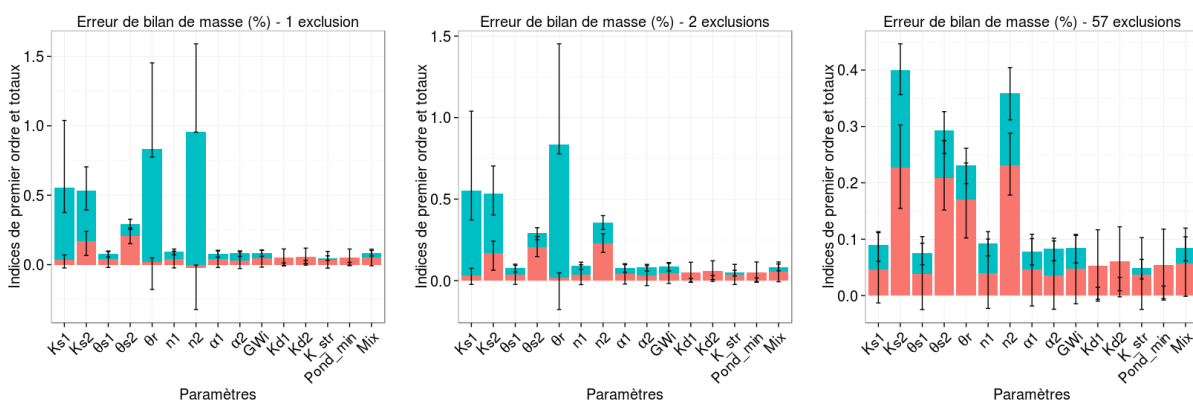


Figure 6.19 – Comparaison des indices de premier ordre et indices totaux pour le bilan de masse des solutés (Tebuconazole) selon le seuil choisi pour exclure les valeurs extrêmes.

Sur la figure 6.19, les indices totaux et de premier ordre de l'erreur de bilan de masse sont calculés à partir de trois échantillons différents : dans le premier une valeur extrême a été extraite (erreur de bilan de masse supérieure à 1000%), dans le deuxième deux valeurs extrêmes ont été extraites (erreur de bilan de masse supérieure à 100%) et dans le troisième 57 simulations ont été extraites (voir section 6.3.2.2 (a)). Les indices sont tous quasi équivalents dans les deux premiers graphes sauf pour le paramètre  $n_2$  pour lequel la situation change profondément. En effet, les deux indices Sobol de premier ordre et totaux passent respectivement de -0.023 à 0.22 et de 0.95 à 0.35 en extrayant une simulation de plus. L'incertitude des résultats pour  $n_2$  diminue également très fortement. On peut observer que les indices de premier ordre et indices totaux pour la troncature à 1000% des paramètres  $K_{s1}$  et  $\theta_r$  sont semblables à ceux de  $n_2$  : indice total très élevé, proche de 1 avec une incertitude forte. On constate sur les résultats avec l'extraction de 57 simulations qu'aucun indice total n'a une incertitude supérieure à 0.1. L'extraction des simulations extrêmes permet donc de stabiliser les résultats et de réduire fortement leur intervalle de confiance.

Le fonctionnement du modèle est complexe, et la forme des distributions de sortie particulière (une distribution très reserrée et quelques valeurs extrêmes très éloignées de cet intervalle) a mis en valeur la difficulté de gérer les analyses de sensibilité dans ce contexte. Toutefois, la quantité nécessaire de simulations extraites pour faire descendre l'incertitude sur les indices à moins de 0.5, donc à stabiliser les résultats, est très faible par rapport à l'ensemble des simulations (0.33 %). Une analyse plus systématique en amont avec ré-échantillonnage des paramètres d'entrée selon la qualité des indices serait idéale mais imposerait un coût de calcul très important puisque l'analyse présentée ici (3 semaines sur un cluster de calcul d'une centaine de nœuds) serait multipliée par deux voire trois selon les besoins de rééchantillonnage.

#### **b) Comparaison des indices de premier ordre pour les fonctions Martinez et Roalhs**

Les indices de premier ordre ont été calculés dans trois cas différents : Sobolmartinez avec un échantillon de taille moyenne  $N = 500$  et un échantillon de grande taille  $N = 1000$  et Sobolroalhs. La figure 6.20 illustre pour deux sorties, une concernant l'eau et une autre concernant les solutés, un comparatif des résultats obtenus. Pour la méthode Sobolmartinez ( $N=1000$ ), l'extraction des 57 simulations est prise en compte. Pour que la comparaison soit pertinente, on extrait les simulations issues des méthodes Sobolmartinez ( $N=500$ ) et Sobolroalhs qui donnent des résultats extrêmes semblables aux simulations extraites dans Sobolmartinez ( $N=1000$ ). Pour le cumul du volume sortant, aucun résultat n'appartient à cette catégorie. Par contre pour le bilan de masse, on applique un NaN pour 18 simulations de Sobolmartinez ( $N=500$ ) et 3 simulations de Sobolroalhs.

Pour les indices non négligeables, c'est-à-dire supérieurs à 0.05, les trois méthodes donnent

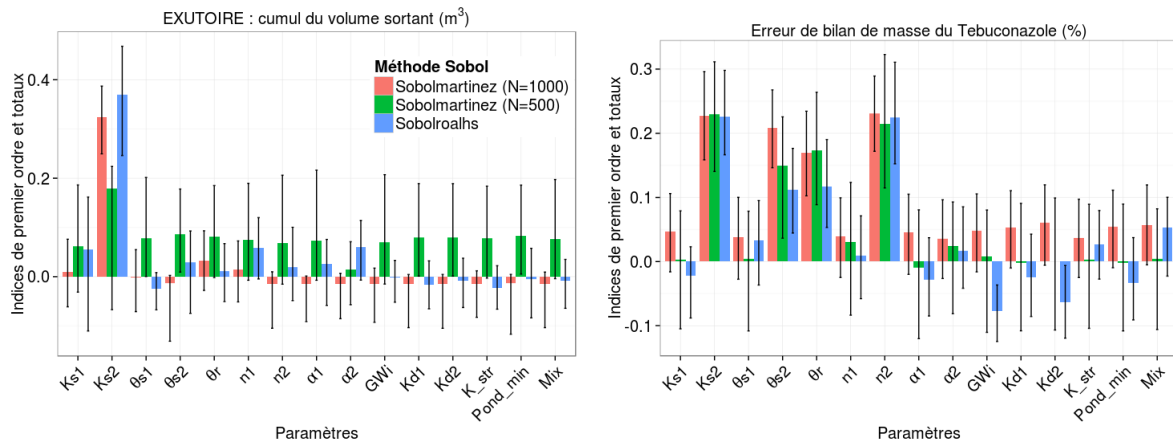


Figure 6.20 – Comparaison des indices de premier ordre pour le cumul du volume d'eau à l'exutoire ( $m^3$ ) et l'erreur de bilan de masse du Tebuconazole (%) pour les trois calculs : fonction Martinez  $N = 1000$ , fonction Martinez  $N = 500$ , et fonction Roalhs. Les résultats de Sobolmartinez avec  $N=1000$  sont présentés en prenant en compte l'extraction des 57 simulations (voir section 6.3.2.2 (a)).

des résultats cohérents, malgré le fait que, par exemple pour le bilan de masse, la hiérarchie des paramètres les plus influents ne soit pas identique. Une affirmation à prendre avec précaution au vu de la marge d'incertitude des indices avec les trois méthodes, en particulier avec la méthode Sobolmartinez ( $N=500$ ). Pour le cumul du volume à l'exutoire, la méthode Sobolmartinez ( $N=500$ ) n'est pas cohérente avec les autres méthodes pour les indices de faible valeur et ceux-ci montrent une incertitude très élevée. On note globalement que l'incertitude de Martinez  $N = 500$  est plus importante que l'incertitude  $N = 1000$ , ce qui est logique considérant la valeur du paramètre d'échantillonnage  $N$ . L'augmentation de la taille de l'échantillon ( $N=500$  à  $N=1000$ ) permet effectivement de diminuer l'incertitude sur les indices mais pas toujours suffisamment tout de même. Pour les indices de premier ordre, la méthode Sobolroalhs présente un avantage incontestable en terme de coût de calcul et la précision de ses résultats n'a rien à envier à la méthode Sobolmartinez.

## 6.4 Conclusion sur l'évaluation de CATHY-Pesticide

Dans ce chapitre, la version CATHY-Pesticide a été testée à l'échelle du versant sur des données représentatives d'un site expérimental. Cette version correspond à un modèle couplé surface-subsurface en flux d'eau et de solutés, et comporte un module de mélange entre la lame ruisselante et la première couche de sol. La présence de rases et d'une demi-buse qui redirigent le ruissellement sur le versant de Saint-Joseph en font un environnement complexe avec de fortes interactions entre la surface et la subsurface. L'ancrage dans la réalité de l'application du modèle sur le versant a été vérifié par comparaison de flux de ruissellement observés et simulés. Puis, des variables de sortie concernant en particulier les solutés et le couplage ont été analysés.

Les résultats montrent une bonne cohérence avec notre connaissance du terrain, et le bilan de masse, malgré la complexité élevée du site en terme de transferts, est très bon. Dans un second temps, une analyse de sensibilité de type Sobol a été menée sur une version simplifiée du versant. Plusieurs fonctions d'échantillonnage et de calcul des indices ont été utilisées, permettant de préciser les résultats, mais aussi de mener une première réflexion autour de leurs différences. D'abord, les bonnes performances du modèle en terme de conservation de la masse ont été vérifiées, avec plus de 99.97% des simulations qui débouchent sur une erreur de bilan de masse de moins de 1%. L'analyse d'incertitude a montré que la variabilité des paramètres d'entrée génère une incertitude raisonnable. De manière générale, ce sont les paramètres hydrodynamiques  $K_s$  et  $n$  de la vigne qui influencent le plus les transferts d'eau. Ces résultats sont cohérents avec les conclusions de l'analyse de sensibilité de type Morris dans le chapitre précédent pour un autre contexte. Par contre, la porosité est moins influente dans le contexte du versant que dans celui de MASHYNS. Pour les transferts de solutés, les conclusions sont plus délicates à affirmer, au vu de la sensibilité des indices à la prise en compte ou non des valeurs extrêmes. Le modèle s'est avéré non additif et soumis fortement aux interactions entre tous les paramètres testés, à l'exception des paramètres réactifs et du ponding minimum. La comparaison des indices de premier ordre issus de trois échantillonnages différents montre une cohérence des tendances assez forte pour les indices non négligeables, c'est-à-dire supérieurs à 0.05. Ceci ouvre des possibilités, par exemple une analyse de sensibilité plus large en prenant en compte plus de paramètres serait envisageable en terme de temps de calcul avec la méthode de solbolroalhs qui aboutit à des indices de premier ordre et de second ordre de bonne qualité. Elle permettrait également d'augmenter fortement l'échantillonnage à moindre coût dans le cas où les indices de confiance sont trop larges. Par contre, solbolroalhs ne permet pas de déterminer les indices totaux. Enfin, il est important de rappeler que les résultats de l'analyse de sensibilité globale sont à interpréter dans ce cadre de simulation, c'est-à-dire avec ces caractéristiques de terrain et cet événement de pluie.

Pour conclure, les résultats du modèle couplé CATHY-Pesticide se sont révélés cohérents avec nos connaissances du fonctionnement du versant de Saint-Joseph. Le module de mélange assure sa fonction correctement et la conservation de la masse est assurée même dans un contexte d'interactions surface-subsurface très complexe. L'analyse de sensibilité a révélé un modèle fortement soumis aux interactions, mais robuste en terme de conservation de la masse et d'incertitude des sorties. Les différentes fonctions d'échantillonnage et de calcul des indices ont donné des résultats cohérents, pour les indices de premier ordre, malgré tout les résultats semblent très sensibles au fait d'intégrer ou non les simulations donnant des valeurs extrêmes. En outre, il serait intéressant de prolonger une des simulations dans le temps pour capter l'ensemble des transferts qui

suivent l'évènement pluvieux.

## Chapitre 7

# Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre de conclusion, on commencera par rappeler les objectifs de la thèse, et détailler dans quelle mesure les résultats répondent à ces objectifs. Dans un deuxième temps, une discussion critique sur l'utilisation des modèles à base physique sera menée et ouvrira sur les perspectives possibles des travaux.

### 7.1 Rappel des objectifs et de la démarche

Le changement en profondeur des pratiques agricoles est un processus lent. Dans l'attente d'une diminution globale de l'utilisation des pesticides, la volonté de protéger les zones aquatiques en limitant les transferts de pesticides depuis les zones agricoles s'est développée. Pour mieux agir sur les voies de transfert, il est nécessaire d'approfondir les connaissances des processus en jeu et de leurs interactions éventuelles. L'échelle du versant est particulièrement appropriée à ce type d'étude. En effet les voies de transfert principales sont représentées, et interagissent de manière plus simple qu'à l'échelle de bassin versant. Néanmoins, sur les versants, les conditions limites aval ne sont pas faciles à définir à l'inverse des conditions amont et latérales (flux nul) car mal connues par rapport au bassin versant, où une mesure des flux et concentration en surface à l'exutoire est relativement aisée. En effet, les flux sortant d'un versant sont difficiles à isoler sur le terrain. Les modèles mécanistes sont un moyen efficace de représenter des processus physiques à condition de bien les paramétrer. Pourtant, il existe actuellement très peu de modèles à base physique capables de lier une représentation complexe des processus réactifs et de transfert à une modélisation intégrée des écoulements en plusieurs dimensions et notamment couplée entre la surface et la subsurface.

Le but général de la thèse était d'intégrer des processus de transfert de solutés réactifs dans un modèle hydrologique couplé surface-subsurface : le modèle CATHY. Il existait déjà une version de transport non réactif de ce modèle : CATHY-FT (Weill et al., 2011), mais elle avait été peu

testée en particulier pour les interactions surface-subsurface. Les objectifs de la thèse étaient de deux ordres. Le premier objectif était la simulation des transferts à l'échelle de la parcelle et du versant, et en particulier les interactions entre les processus et le couplage surface-subsurface qu'il s'agisse de l'eau ou des solutés réactifs. Comme il s'agissait dans cette thèse de développer un modèle relativement complexe en terme de non-linéarités et d'interactions, le second objectif était d'approfondir la connaissance du modèle en lui-même et la façon dont il représente la dynamique et les ordres de grandeur des différents processus, par exemple mieux comprendre comment la variation des paramètres influence les résultats.

La démarche du travail de thèse consiste à implémenter sur la version CATHY-FT, qui simule les écoulements et le transport de solutés non réactifs, des processus réactifs et leur couplage surface-subsurface et de le valider dans différents contextes. A chaque étape de validation, la complexité des processus implémentés dans le modèle augmente, et impacte donc sur la façon de les valider :

- L'implémentation des processus d'adsorption linéaire et de dégradation du premier ordre dans CATHY-FT est validée sur des données issues d'expérimentations en laboratoire à une échelle relativement petite (maquette de 2 m de long, 0.5 m de large et 1 m de profondeur). On évalue le modèle sur les données expérimentales sur plusieurs molécules, et une analyse de sensibilité de type Morris est menée. Celle-ci permet de repérer les paramètres les plus influents sur certaines variables de sortie du modèle et d'aboutir à un calage succinct pour d'autres molécules. Ce travail concerne uniquement la partie subsurface de CATHY compte tenu des spécificités de l'expérimentation.
- Un module de mélange entre la lame ruisselante et de la première couche de sol est ajouté au modèle afin de prendre en compte la remobilisation des solutés par le ruissellement, et le couplage surface-subsurface est adapté et amélioré pour mieux respecter le bilan de masse. CATHY-Pesticide est alors évalué sur des données issues d'un site expérimental réel situé dans le Beaujolais. Cette fois, le modèle est appliqué à l'échelle du versant pour vérifier sa cohérence avec le comportement physique connu du versant réel, et fait intervenir les écoulements de surface et de subsurface. Une analyse de d'incertitude et sensibilité globale (Sobol) sont menés afin d'une part d'étudier comment l'incertitude liée aux paramètres d'entrée se propage sur les variables de sorties, et d'autre part de déterminer quantitativement de quelle manière chaque paramètre testé influence les variables de sorties en interaction avec les autres paramètres.

## 7.2 Principaux résultats

### 7.2.1 Développement d'un modèle spatialisé de transfert de soluté réactif

#### 7.2.1.1 Retour sur les hypothèses de modélisation

Les conclusions que l'on peut tirer des résultats de simulation de transfert de solutés n'ont de sens qu'à la lumière des processus pris en compte ou non par le modèle et des hypothèses de modélisation. Ainsi on rappelle que CATHY-Pesticide ne prend pas en compte certains processus qui peuvent s'avérer non négligeables dans un contexte de transport de pesticides à l'échelle du versant, notamment les écoulements préférentiels et le transfert sédimentaire. De plus, pendant le travail d'implémentation des processus de transport réactif dans la thèse, des hypothèses ont été adoptées : (i) les processus réactifs n'ont été implémentés qu'en subsurface pour éviter de complexifier de manière prématurée la représentation des processus et pour faciliter l'évaluation du modèle, et (ii) les phénomènes diffusifs et dispersifs ont été négligés puisque les choix de résolution numérique de l'équation d'advection-dispersion entraînaient de la diffusion numérique importante.

Dans le contexte des applications du modèle sur les données de laboratoire (maquette MA-SHYNS), la non représentation des processus de transfert préférentiel et les hypothèses sur la dispersion et les réactions de surface ne sont pas un élément déterminant, puisque (i) les expérimentations sont construites de telle façon que seuls les processus de subsurface interviennent et (ii) le sol de la maquette a été homogénéisé méthodiquement pour limiter au maximum l'apparition de structures et il est donc légitime de considérer donc que le transfert préférentiel et la dispersion y sont limités.

Dans le contexte du versant réel de Saint-Joseph par contre, la non prise en compte d'un certain nombre de processus pose question. Des transferts préférentiels sont sûrement présents dans le premier horizon de la bande enherbée à cause de la présence massive de racines et d'une activité biologique forte. Sur la vigne et dans les horizons plus profonds c'est éventuellement le cas aussi avec d'autres voies préférentielles. En effet, la conductivité à saturation et la porosité de cette zone ont été mesurés à plusieurs endroits avec un certain nombre de répétitions, et leurs valeurs se révèlent élevées. Il est très difficile de caractériser sur le terrain de manière précise les structures de transfert préférentiel, mais dans son étude Peyrard (2016) a montré qu'à l'échelle du versant et dans un contexte similaire, la représentation du transfert préférentiel dans la modélisation des flux était nécessaire. On fait cependant ici l'hypothèse que la paramétrisation d'un premier horizon particulièrement perméable, sur la base de données observées, permet de simuler les structures locales de transfert préférentiel.



D'autre part, on peut considérer les réactions de dégradation en surface négligeables dans le contexte de la simulation. C'est une hypothèse qui paraît viable pour des simulations événementielles. L'adsorption en surface n'est pas modélisée explicitement dans CATHY-Pesticide. Elle l'est de façon indirecte par le module de mélange. En effet, le mélange permet de remobiliser dans le ruissellement des solutés de la subsurface et rend compte des échanges diffusifs entre les deux compartiments, mais également d'une certaine façon un processus de remise en solution des solutés adsorbés à la surface. Pour des simulations plus longues, cette hypothèse peut être discutable.

Ainsi, dans le contexte du versant de Saint-Joseph, parmi les principaux processus de transfert non représentés dans CATHY, seuls les processus dispersifs et le transport sédimentaire ne sont pas du tout pris en compte dans le modèle. Ce dernier peut être particulièrement important sur des terrains à risques et pentus comme celui du versant de Saint-Joseph. Pour toutes ces raisons, et en particulier pour la non-représentation des matières en suspensions, on gardera en tête que les transferts dans le modèle sont estimés de façon incomplète dans ce contexte.

La prise en compte ou non d'un certain nombre de processus dans un modèle n'est pas une limitation en soi. On peut par exemple par observation émettre des hypothèses sur les voies de transfert et leur importance relative sur un terrain, et vérifier ces hypothèses en s'appuyant sur un modèle qui prend en compte ou non ces processus. La confrontation à des données permet d'avoir une idée des conséquences de la non représentation de ces processus et doit mener *in fine* à une meilleure compréhension du fonctionnement des voies de transfert sur le terrain. Malheureusement, ce genre de confrontation pour une simulation événementielle est très compliqué, puisqu'il nécessite notamment que les conditions initiales en terme de solutés soient connues. Quoiqu'il en soit, ce raisonnement sur les hypothèses n'est valable que sur un modèle validé et robuste, d'où l'importance de comprendre en profondeur comment fonctionnent les modèles que l'on utilise.

#### 7.2.1.2 Développements numériques

Les développements numériques concernent trois aspects de la modélisation du transport de contaminants : les réactions de subsurface, le module de mélange de la lame ruisselante avec la première couche de sol, et l'amélioration des performances de conservation du bilan de masse dans le couplage surface-subsurface. L'adsorption linéaire et la dégradation de premier ordre ont été implémentées dans le modèle CATHY. Il s'agit de réactions simples, mais classiquement utilisées et qui reflètent correctement les processus majoritaires. Pendant un pas de temps, les réactions sont calculées juste après le transfert advectif et sur les tétraèdres formés par le maillage. Le module de mélange permet d'égaliser les concentrations de l'eau en surface et de la première

couche numérique de sol sur chaque maille de surface sur laquelle il y a du ruissellement. Le mélange se déroule à la fin d'un pas de temps, et est complémentaire du couplage dû aux flux advectifs. Le couplage surface-subsurface a été adapté par rapport à sa version précédente et ne repose plus que sur des conditions advectives et non diffusives. De plus, certains algorithmes de passage de l'information des noeuds aux cellules de surface et vice-versa ont été affinés et respectent maintenant le principe de conservation de la masse.

### 7.2.1.3 Application dans différents contextes de transport de solutés

Lors de l'application du modèle sur les données de laboratoire de MASHYNS, le drainage simulé des solutés hors du système était au premier abord amorcé moins rapidement que dans la réalité. La modification des conductivités à saturation et surtout de la porosité a permis de réduire fortement le retard, et de reproduire de façon très satisfaisante les observations. On peut interpréter la baisse de la porosité comme une manière d'accélérer les flux d'eau et de solutés. On peut même aller plus loin et considérer que c'est une façon indirecte de modéliser des flux mobiles et immobiles, mais sans la partie immobile. Or on sait que des essais ont été menés à Irstea Antony pour modéliser ces mêmes expériences avec le modèle HYDRUS et qu'il a fallu avoir recours au concept d'eau mobile eau immobile pour obtenir des résultats satisfaisants. Sans avoir comparé explicitement les performances des deux modèles sur les expérimentations de MASHYNS, on montre une cohérence de HYDRUS et CATHY dans les efforts de paramétrisation qu'ils nécessitent pour se rapprocher des données observées : respectivement le concept d'eau mobile eau immobile et l'accélération des flux d'eau par la diminution de la porosité.

Lors de l'application de CATHY-Pesticide sur les données du versant de Saint-Joseph, l'objectif n'était pas de reproduire un événement précis pour comparer les résultats aux observations, mais plutôt de s'ancrer dans un contexte réaliste illustrant la complexité du terrain et d'analyser les réponses du modèle en terme de transfert. La genèse de ruissellement concentré dans les rases et la demi-buse bétonnée, liée à l'intensité de l'événement simulé qui est de type orageux, provoque l'apparition pendant quelques minutes d'un ruissellement de surface sur la bande enherbée et qui atteint l'exutoire. La rétention de pesticides dans la bande enherbée dans ce contexte est très faible. On peut suivre les parts de pesticides adsorbées et en solution en subsurface en fonction de l'infiltration de la pluie et de mouvement des pesticides en subsurface depuis des zones à forte concentration vers des zones à faible concentration. Par contre, si on simule le même événement sans prendre en compte la concentration du ruissellement par les rases et la demi-buse, les transferts sont plutôt faibles. Ils sont en grande partie portés par le ruissellement de surface via leur remobilisation mais il ne s'agit pas de ruissellement de forme concentrée, et ainsi l'infiltration est dominante. Ceci semble réaliste compte tenu des connaissances du fonctionnement du

site qui est particulièrement perméable. Il serait toutefois plus facile d'évaluer la cohérence des résultats avec le terrain sur une simulation plus longue.

## 7.2.2 Evaluation du modèle

### 7.2.2.1 Retour sur les méthodes d'évaluation

L'évaluation du modèle suit un protocole très complet sur plusieurs aspects :

- Le modèle a été appliqué sur deux jeux de données différents en terme de provenance (laboratoire / terrain) et d'échelle (maquette / versant).
- Les résultats du modèle ont été comparés à un jeu de données dynamique complet (chronique du cumul de différents solutés drainés dans MASHYNS) en combinant plusieurs critères.
- La robustesse du modèle en terme de bilan de masse a été vérifiée dans un contexte complexe (terrain composé d'une forte hétérogénéité, événement de pluie intense) et sur des milliers de simulations explorant un domaine de variabilité large.
- Des analyses d'incertitude et de sensibilité ont été menées avec des méthodes différentes dans deux contextes contrastés (subsurface et conditions contrôlées versus interactions surface-subsurface et conditions de terrain), mais en partie sur les mêmes types de paramètres d'entrée et sur le même type de sorties.
- Tout au long de la thèse, on s'est appliqué à déterminer les incertitudes liées à l'évaluation du modèle, via des techniques de bootstrapping dans l'outil FITEVAL et sur les indices de sensibilité.

L'évaluation a mis en avant la capacité du modèle à reproduire des situations complexes ainsi que sa complexité, reflétée par les interactions entre les paramètres étudiés et l'importance majeure de certains paramètres sur les flux d'eau et de solutés que l'on détaillera dans le paragraphe suivant.

Pourtant, il faut garder à l'esprit les limites de cette évaluation. Les analyses de sensibilité ne sont valables que dans le contexte précis dans lequel elles ont été menées. La comparaison des indices de premier ordre pour trois échantillonnages de Sobol distincts est plutôt rassurante quant à la validité des résultats des indices premier ordre. Cependant, on a vu dans la dernière partie du chapitre 6 la difficulté d'obtenir des indices totaux fiables. Cela est sans doute lié à la complexité du modèle, et à la forme des densités des variables de sorties étudiées (une extrême majorité des résultats raisonnablement rassemblés et quelques valeurs extrêmes très éloignées), que les paramètres sélectionnés pour l'analyse de sensibilité globale ne suffisent pas à expliquer.

### 7.2.2.2 Résultats de l'évaluation du modèle

Une partie des travaux sur le code du modèle CATHY avait pour but l'amélioration de la conservation de la masse dans le modèle, en particulier lors du couplage surface-subsurface. Le calcul des bilans de masse dans un contexte d'interactions surface-subsurface et hétérogénéités très fortes sur le versant de Saint-Joseph, avec les rases et la demi-buse, a permis de vérifier la robustesse du modèle à ce niveau. D'autre part, dans un contexte certes plus simple (sans les rases) avec des quantités transférées moins élevées, mais sur des milliers de répétitions de simulations avec des paramètres d'entrée variés, le modèle s'avère tout aussi robuste et dans 99,97 % des cas l'erreur de bilan de masse est inférieure à 1 %.

Les analyses de sensibilité permettent de mettre en avant l'influence des paramètres d'entrée sur des variables de sortie. Dans un premier temps, sur la maquette MASHYNS, les cumuls de flux de recharge de la nappe, le timing du pic de concentration en sortie, la valeur de la concentration au pic, le temps de percée (quand la concentration en sortie dépasse 5% du pic) et valeur de la NSE sur le cumul massique en sortie de drain ont été étudiés avec une méthode qualitative (Morris). Sur le versant réel, la masse et le volume total quittant le système par l'exutoire, l'évolution des stocks massiques et volumiques en subsurface dans les différentes zones (vigne et bande enherbée) et les masses et volumes transférées en surface par le ruissellement ont été étudiés avec une méthode quantitative (Sobol). Dans les deux analyses de sensibilité menées, les conductivités à saturation et le paramètre  $n$  de la courbe de rétention hydrique lié à la distribution de la taille des pores se sont révélés importants pour les écoulements d'eau et le transfert des solutés. Le coefficient d'adsorption est finalement peu influent, par exemple sur l'évolution des stocks en subsurface et le temps de percée à l'exutoire du versant de Saint-Joseph. L'analyse de sensibilité globale (Sobol) révèle que toutes les variables de sorties étudiées sont fortement dépendantes des interactions entre les paramètres. On sait que les processus réels interagissent fortement, il est raisonnable qu'il en soit de même pour leurs représentations numériques. Cela pourrait aussi signifier que d'autres paramètres que ceux testés influencent les résultats, c'est-à-dire que la variance de certaines variables de sortie ne peut être expliquée par les paramètres étudiés et leurs interactions. C'est envisageable, puisque CATHY est un modèle complexe et seulement une quinzaine de paramètres a été testée par analyse de sensibilité sur la trentaine que le modèle intègre (sans compter les paramètres supplémentaires dûs à l'hétérogénéité). En particulier, il serait intéressant de tester les paramètres liés aux conditions limites, notamment atmosphériques et l'influence du maillage. Une autre perspective concernant l'analyse de sensibilité serait d'affiner la distribution des paramètres, notamment en prenant en compte leurs corrélations éventuelles. Comme une analyse de sensibilité est valable avant tout dans le contexte dans laquelle elle a été effectuée, on

peut aussi envisager que les interactions seraient différentes sur les résultats de simulations plus longues.

L'analyse de sensibilité de Sobol permet d'étudier l'incertitude des variables de sorties liées à l'incertitude résultant des paramètres d'entrée en analysant la distribution des densités de probabilités des résultats. Pour l'évolution des stocks d'eau en subsurface, un fonctionnement bimodal a été repéré. L'hypothèse la plus probable qui pourrait l'expliquer est la bi(voire tri)modalité de la pluie qui serait convertie en ruissellement ou non selon les valeurs de conductivité à saturation. Pour les variables concernant les solutés (principalement l'évolution du stock en subsurface dans les différentes zones et les transferts de surface) l'analyse de l'incertitude a mis en avant un profil de distribution particulier : une très grande majorité des sorties rassemblées dans un intervalle raisonnable et quelques valeurs extrêmes très éloignées de cet intervalle. Ceci suggère que certaines combinaisons de paramètres provoquent des sorties irraisonnables du modèle. On peut cependant noter que celles-ci concernent un très petit pourcentage par rapport à la totalité des simulations (0.3 %).

## 7.3 Discussion sur la modélisation à base physique et perspectives

### 7.3.1 Les modèles à base physique : quelles difficultés ?

L'ensemble de la thèse porte sur l'adaptation d'un modèle à base physique pour décrire les écoulements et les transferts. Ce type de modèle est effectivement pertinent à utiliser dans ce contexte, notamment en ce qui concerne sa capacité à simuler les processus de façon physique et la possibilité de rendre compte de l'hétérogénéité du terrain avec des paramètres distribués. Néanmoins, on s'est confronté durant le travail de thèse à des défis inhérents à ce type de modèle et qui prennent une importance particulière pour le modèle CATHY-Pesticide :

- La modélisation précise des processus, malgré toute la complexité avec laquelle ils sont implémentés dans le modèle, dépend de la qualité des paramètres d'entrée du modèle. De plus, plus le nombre de processus pris en compte dans un modèle à base physique est important, plus le nombre de paramètres à intégrer est élevé et les interactions entre les paramètres augmentent. C'est pour cette raison que les analyses d'incertitude et de sensibilité sont primordiales.
- La complexité des modèles à base physique entraîne souvent un coût de calcul élevé. Dans le cas de CATHY par exemple, si son potentiel de modèle spatialisé est exploité, c'est-à-dire si le domaine représenté présente des hétérogénéités, il se peut que les temps de calculs augmentent fortement. Dans certains cas, le temps de simulation est plus important que le temps réel (par exemple pour simuler 24h l'ordinateur a besoin de 36 h). Ceci incite à

développer des plateformes de calcul qui puissent mettre à disposition une puissance de calcul adéquate.

- En liaison avec le point précédent, le maillage spatial ou temporel des domaines simulés peut être déterminant, et même soumis à des impératifs de convergence (par exemple avec le nombre de CFL). Dans le cas de CATHY, cette question prend une importance particulière, puisque le maillage est régulier. Ainsi, toutes les mailles doivent être aussi petites que la plus petite résolution souhaitée sur le domaine.
- Le choix des méthodes de résolution numérique des processus est déterminant et peut influencer fortement les futurs développements des outils. L'exemple pour CATHY de la diffusion numérique due à l'échange de l'information de concentration entre les nœuds et les tétraèdres est frappant.
- Dans le cadre des simulations événementielles, le choix des conditions initiales de l'eau et des solutés influence fortement les résultats. Malgré des coûts de calculs souvent dissuasifs, la simulation en continu, par exemple une saison entière, serait un bon moyen de s'affranchir des conditions initiales, et de valider les résultats sur des données terrain de solutés, sous réserve d'avoir à disposition des observations en continues. Le passage de l'échelle du versant au bassin versant dans ce cas faciliterai l'obtention de ces données.

Malgré la précision avec laquelle en théorie les processus sont représentés dans les modèles à base physique, il est essentiel d'une part de rester lucide quant à la précision et la pertinence des résultats obtenus, et d'autre part d'estimer correctement les besoins et les objectifs avant d'utiliser ce genre de modèle.

### 7.3.2 Quel avenir pour les multiples versions de CATHY et pour CATHY-Pesticide ?

Le modèle CATHY est un modèle de recherche, c'est-à-dire entre autres qu'il ne possède pas d'interface graphique pour le remplissage des paramètres d'entrée ni pour le postprocessing des résultats. Ainsi sa prise en main par de nouveaux utilisateurs prend un certain temps. Sa qualité de modèle open source par contre est très avantageuse. Elle permet d'éviter l'effet "boîte noire" et ainsi chaque utilisateur peut, selon ses connaissances, vérifier de quelle façon les processus sont implémentés. Il s'agit pour cette raison d'un très bon outil pédagogique de recherche. Mais c'est également ce qui rend son avenir incertain. En effet, avec le temps, plusieurs versions différentes de CATHY ont été développées dans les laboratoires différents et leur unification est loin d'être évidente. CATHY-Pesticide présente l'avantage de réunir les travaux ayant abouti à plusieurs versions de CATHY, notamment le transfert non réactif avec couplage et la reconstruction des champs de vitesse. C'est une bonne occasion de travailler à partir de maintenant avec une version commune du modèle. La mise en place d'un outil de développement participatif adapté, comme

une forge par exemple, simplifierait les travaux sur cette version commune.

Le grand avantage de CATHY sur les autres modèles à disposition est sa gestion du couplage surface-subsurface. Les améliorations du modèle les plus directement envisageables sont celles évoquées durant la thèse : implémentation du transport avec la méthode des éléments finis mixtes pour être capable de simuler des processus dispersifs en plus du transport advectif, ajout du transport sédimentaire, implémentation de transferts préférentiels en subsurface, ... Pourtant, il semble que si l'on réfléchit à plus long terme, il apparaît que la limitation la plus importante soit l'obligation de régularité du maillage. En effet si l'on envisage de changer d'échelle et de modéliser le transfert des solutés à l'échelle de bassin versant, il sera indispensable de limiter le temps de calcul tout en gardant la précision des simulations sur les zones complexes. Des travaux en cours sur CATHY vont actuellement dans ce sens.

### 7.3.3 Perspectives

Pour aller plus loin dans ces travaux, quelques pistes sont envisageables. Une idée réalisable à court terme serait de simuler un événement de quelques jours sur le versant de Saint-Joseph pour pouvoir analyser des transferts sur un épisode événementiel complet et ainsi juger notamment des cumuls de flux modélisés, de la dynamique de la nappe, ou des interactions à plus long terme entre les processus. Il serait pertinent de tester par la même occasion le fonctionnement de conditions limites plus complexes, comme les surfaces de suintement par exemple. Déjà implémentées dans le code, elles n'ont pas encore été utilisées dans la cadre du transport de soluté. Plus coûteux en temps de calcul, une analyse de type Sobol serait difficilement envisageable sur ce type de simulation. Par contre, une analyse de sensibilité de type Morris serait réalisable et l'occasion en plus de prendre en compte plus de paramètres pour tester l'hypothèse selon laquelle d'autres paramètres que ceux déjà testés seraient influents. Dans la situation actuelle, et essentiellement pour des raisons de coût de calcul, il est prématuré d'envisager des simulations continues avec CATHY-Pesticide.

On a vu qu'il est parfois difficile de trouver une base de données de terrain assez complète pour confronter raisonnablement les simulations aux observations à l'échelle du versant pour une simulation événementielle. Dans ce cas, on peut également comparer deux modèles entre eux. A l'image des travaux d'intercomparaison des modèles hydrologies intégrés de Maxwell et al. (2014) et Kollet et al. (2017), la confrontation de CATHY avec d'autres modèles serait instructive. Pourtant, comme peu de modèles intègrent du transport de solutés réactifs couplés surface-subsurface, une telle intercomparaison est prématurée actuellement. De manière générale, l'ensemble des tests de CATHY-Pesticide sur d'autres contextes seraient les bienvenus et apporteraient chacun des informations supplémentaires sur la façon dont le modèle fonctionne

et sur les processus enjeu.

On pourrait aussi envisager non pas une utilisation globale sur de plus grandes échelles, mais au contraire se servir de CATHY à petite échelle pour guider les efforts de simplifications des modèles conceptuels. En effet, les échanges entre des modèles mécanistes complexes et des modèles plus simplifiés, semblent utiles pour avancer vers une modélisation respectant les processus principaux à l'échelle du bassin.

Dans une volonté de mieux représenter le devenir des pesticides, la simulation des transferts de plusieurs pesticides simultanément, des effets de cocktail et du devenir de leurs métabolites ne devra pas être négligée. Pourtant, la représentation de ces phénomènes est complexe, et nécessiterait la prise en compte de davantage de paramètres d'entrée, c'est pourquoi une vraie réflexion doit être menée autour des futurs processus de réaction à intégrer dans CATHY-Pesticide.

Finalement, CATHY-Pesticide est un modèle robuste qui permet de simuler le devenir des pesticides réactifs de façon couplée surface-subsurface et à l'échelle du versant. Ses futurs développements peuvent prendre des formes variées : amélioration des coûts de calcul avec la mise en place un maillage non régulier, précision de la représentation des processus chimiques, passage à l'échelle du bassin versant, ... autant de choix qui seront déterminants dans l'usage que CATHY-Pesticide aura dans le futur.





# Bibliographie

- Abbott, M., Bathurst, J., Cunge, J., O'Connell, P., and Rasmussen, J. (1986). An introduction to the european hydrological system — Systeme Hydrologique Europeen, "SHE", 2 : Structure of a physically-based, distributed modelling system. *Journal of Hydrology*, 87(1-2) :61 – 77.
- Abdul, A. and Gillham, R. (1989). Field studies of the effects of the capillary fringe on streamflow generation. *Journal of Hydrology*, 112(1) :1-18.
- Aden, K. and Diekkrüger, B. (2000). Modeling pesticide dynamics of four different sites using the model system {SIMULAT}. *Agricultural Water Management*, 44(1-3) :337-355.
- Ahuja, L. (1990). Modeling soluble chemical transfer to runoff with rainfall impact as a diffusion process. *Soil Science Society of America Journal*, 54(2) :312-321.
- Ahuja, L., Rojas, K., and Hanson, J. (2000). *Root zone water quality model : modelling management effects on water quality and crop production*. Water Resources Publication.
- Alletto, L., Pot, V., Giuliano, S., Costes, M., Perdrieux, F., and Justes, E. (2015). Temporal variation in soil physical properties improves the water dynamics modeling in a conventionally-tilled soil. *Geoderma*, 243-244 :18-28.
- AquantyInc. (2013). *HydroGeoSphere User Manual*. Waterloo, Ontario, Canada., HGS 2013 edition.
- Arbogast, T., Dawson, C. N., Keenan, P. T., Wheeler, M. F., and Yotov, I. (1998). Enhanced cell-centered finite differences for elliptic equations on general geometry. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 19(2) :404-425.
- Arcement, G. J. and Schneider, V. R. (1989). Guide for selecting manning's roughness coefficients for natural channels and flood plains.
- Armstrong, A., Matthews, A., Portwood, A., Leeds-Harrison, P., and Jarvis, N. (2000). Crack-np : a pesticide leaching model for cracking clay soils. *Agricultural Water Management*, 44(1-3) :183-199.

- Arora, K., Mickelson, S. K., Baker, J. L., Tierney, D. P., and Peters, C. J. (1996). Herbicide retention by vegetative buffer strips from runoff under natural rainfall. *Transactions of the ASAE*, 39(6) :2155–2162.
- Aubertot, J., Barbier, J., Carpentier, A., Gril, J., Guichard, L., Lucas, P., Savary, S., Savini, I., and Voltz, M. (2005). Pesticides, agriculture et environnement : réduire l'utilisation des pesticides et limiter leurs impacts environnementaux. synthèse du rapport d'expertise, Expertise scientifique collective.
- Baroni, G. and Tarantola, S. (2014). A general probabilistic framework for uncertainty and global sensitivity analysis of deterministic models : A hydrological case study. *Environmental Modelling and Software*, 51 :26–34.
- Bear, J. (1972). *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier Science, New York.
- Bedos, C., Cellier, P., Calvet, R., Barriuso, E., and Gabrielle, B. (2002). Mass transfer of pesticides into the atmosphere by volatilization from soils and plants : overview. *Agronomie*, 22(1) :21–33.
- Bergamaschi, L. and Putti, M. (1999). Mixed finite elements and newton-type linearizations for the solution of Richards' equation. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 45(8) :1025–1046.
- Bertolazzi, E. and Manzini, G. (2005). A second-order maximum principle preserving finite volume method for steady convection-diffusion problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 43(5) :2172–2199.
- Betson, R. P. and Marius, J. B. (1969). Source areas of storm runoff. *Water Resources Research*, 5(3) :574–582.
- Beven, K. (1989). Changing ideas in hydrology ? the case of physically-based models. *Journal of Hydrology*, 105(1) :157 – 172.
- Beven, K. and Germann, P. (2013). Macropores and water flow in soils revisited. *Water Resources Research*, 49(6) :3071–3092.
- Beven, K. J., Wood, E. F., and Sivapalan, M. (1988). On hydrological heterogeneity : Catchment morphology and catchment response. *Journal of Hydrology*, 100(1–3) :353 – 375.
- Boesten, J. and Van der Pas, L. (1988). Modeling adsorption/desorption kinetics of pesticides in a soil suspension. *Soil Science*, 146(4) :221–231.

- Boivin, A. (2003). *Disponibilité spatio-temporelle et transfert des pesticides dans le sol*. PhD thesis, Vandoeuvre-les-Nancy, INPL.
- Brezzi, F. and Fortin, M. (1991). *Mixed and Hybrid Finite Element Methods, no. 15 in Springer Series in Computational Mathematics*. Springer Verlag, New York.
- Brunner, P., Doherty, J., and Simmons, C. T. (2012). Uncertainty assessment and implications for data acquisition in support of integrated hydrologic models. *Water Resources Research*, 48(7).
- Brunner, P. and Simmons, C. T. (2012). Hydrogeosphere : a fully integrated, physically based hydrological model. *Groundwater*, 50(2) :170–176.
- Butts, M. B., Payne, J. T., Kristensen, M., and Madsen, H. (2004). An evaluation of the impact of model structure on hydrological modelling uncertainty for streamflow simulation. *Journal of Hydrology*, 298(1) :242–266.
- Campolongo, F., Cariboni, J., and Saltelli, A. (2007). An effective screening design for sensitivity analysis of large models. *Environmental Modelling & Software*, 22(10) :1509–1518.
- Camporese, M., Paniconi, C., Putti, M., and Orlandini, S. (2010). Surface-subsurface flow modeling with path-based runoff routing, boundary condition-based coupling, and assimilation of multisource observation data. *Water Resources Research*, 46(2) :W02512.
- Cardenas, M. B. and Zlotnik, V. A. (2003). Three-dimensional model of modern channel bend deposits. *Water Resources Research*, 39(6). 1141.
- Carluer, N., Lauvernet, C., Noll, D., and Munoz-Carpena, R. (2017). Defining context-specific scenarios to design vegetated buffer zones that limit pesticide transfer via surface runoff. *Science of The Total Environment*, 575(Supplement C) :701–712.
- Carsel, R. F. and Parrish, R. S. (1988). Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. *Water Resources Research*, 24(5) :755–769.
- Catalogne C., L. H. G. (2016). *Guide d'aide à l'implantation des zones tampons pour l'atténuation des transferts de contaminants d'origine agricole*. Rapport Irstea-ONEMA élaboré dans le cadre du Groupe Technique Zones Tampons.
- Ceddia, M. B., Vieira, S. R., Villela, A. L. O., Mota, L. d. S., Anjos, L. H. C. d., and Carvalho, D. F. d. (2009). Topography and spatial variability of soil physical properties. *Scientia Agricola*, 66 :338 – 352.

- Cheviron, B. and Coquet, Y. (2009). Sensitivity analysis of transient-MIM HYDRUS-1D : case study related to pesticide fate in soils. *Vadose Zone Journal*, 8(4) :1064–1079.
- Coquet, Y. (2003). Variation of pesticide sorption isotherm in soil at the catchment scale. *Pest Management Science*, 59(1) :69–78.
- Coquet, Y. and Barriuso, E. (2002). Spatial variability of pesticide adsorption within the topsoil of a small agricultural catchment. *Agronomie*, 22(4) :389–398.
- Coquet, Y., Coutadeur, C., Labat, C., Vachier, P., van Genuchten, M., Roger-Estrade, J., and Simunek, J. (2005). Water and solute transport in a cultivated silt loam soil– 1. field observations. *Vadose Zone Journal*, 4(3) :573–586.
- Corey, A. T. (1977). *Mechanics of Heterogeneous Fluids in Porous Media*. Water Resources Publications.
- Coutadeur, C., Coquet, Y., and Roger-Estrade, J. (2002). Variation of hydraulic conductivity in a tilled soil. *European Journal of Soil Science*, 53(4) :619–628.
- Cunge, J. A., Holly, F. M., and Verwey, A. (1980). Practical aspects of computational river hydraulics.
- Dagès, C., Paniconi, C., and Sulis, M. (2012). Analysis of coupling errors in a physically-based integrated surface water–groundwater model. *Advances in Water Resources*, 49 :86–96.
- Dairon, R. (2017). *Détermination et amélioration des formalismes de modélisation du transfert des pesticides dans des contextes agro-pedo-climatiques variés*. PhD thesis, Université Claude Bernard, Lyon 1.
- Dawson, C. (2008). A continuous/discontinuous galerkin framework for modeling coupled subsurface and surface water flow. *Computational Geosciences*, 12(4) :451–472.
- Dawson, C., Sun, S., and Wheeler, M. F. (2004). Compatible algorithms for coupled flow and transport. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 193(23–26) :2565–2580.
- Delfs, J.-O., Blumensaat, F., Wang, W., Krebs, P., and Kolditz, O. (2012). Coupling hydrogeological with surface runoff model in a poltva case study in western ukraine. *Environmental Earth Sciences*, 65(5) :1439–1457.
- Diersch, H. (1998). Feflow reference manual : Interactive, graphics-based finite-element simulation system for modeling groundwater flow, contaminant mass and heat transport processes. Berlin : WASY Institute for Water Resources Planning and Systems Research Ltd.

- Djabelkhir, K. (2015). *Développement d'une modélisation du devenir de pesticides à l'échelle d'un versant au sein d'une plateforme hydrologique, prise en compte de la macroporosité*. PhD thesis, Grenoble Alpes.
- Dosskey, M. G. (2001). Toward quantifying water pollution abatement in response to installing buffers on crop land. *Environmental Management*, 28(5) :577–598.
- Dunne, T. and Black, R. D. (1970). An experimental investigation of runoff production in permeable soils. *Water Resources Research*, 6(2) :478–490.
- Dusek, J., Dohnal, M., Snehota, M., Sobotkova, M., Ray, C., and Vogel, T. (2015). Transport of bromide and pesticides through an undisturbed soil column : A modeling study with global optimization analysis. *Journal of Contaminant Hydrology*, 175 176(0) :1 16.
- Edwards, M. G., Lazarov, R. D., and Yotov, I. (2002). Introduction special issue on locally conservative numerical methods for flow in porous media. *Computational Geosciences*, 6(3) :225–225.
- Ehret, U. and Zehe, E. (2011). Series distance-an intuitive metric to quantify hydrograph similarity in terms of occurrence, amplitude and timing of hydrological events. *Hydrology and Earth System Sciences*, 15(3) :877.
- Endrizzi, S., Gruber, S., Dall'Amico, M., and Rigon, R. (2014). Geotop 2.0 : simulating the combined energy and water balance at and below the land surface accounting for soil freezing, snow cover and terrain effects. *Geoscientific Model Development*, 7(6) :2831–2857.
- Faivre, R., Iooss, B., Mahévas, S., Makowski, D., and Monod, H. (2013). *Analyse de sensibilité et exploration de modèles : application aux sciences de la nature et de l'environnement*. Editions Quae.
- Farthing, M. W., Kees, C. E., and Miller, C. T. (2002). Mixed finite element methods and higher-order temporal approximations. *Advances in Water Resources*, 25(1) :85–101.
- Fiorentini, M., Orlandini, S., and Paniconi, C. (2015). Control of coupling mass balance error in a process-based numerical model of surface-subsurface flow interaction. *Water Resources Research*, 51(7) :5698–5716.
- Fox, G. A., Muñoz-Carpena, R., and Sabbagh, G. J. (2010). Influence of flow concentration on parameter importance and prediction uncertainty of pesticide trapping by vegetative filter strips. *Journal of Hydrology*, 384(1–2) :164–173.
- Frank, M. P., Graebing, P., and Chib, J. S. (2002). Effect of soil moisture and sample depth on pesticide photolysis. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 50(9) :2607–2614.

- Fread, D. (1993). Flow routing in handbook of hydrology. McGraw-Hill Inc., New York, USA.
- Freundlich, H. (1907). Über die adsorption in lösungen. *Zeitschrift für physikalische Chemie*, 57(1) :385–470.
- Gambolati, G., Pini, G., Putti, M., and Paniconi, C. (1994). Finite element modeling of the transport of reactive contaminants in variably saturated soils with lea and non-lea sorption. *Environmental modeling Volume 2 : computer methods and software for simulating environmental pollution and its adverse effects.*, Computational Mechanics Publications :173–212.
- Gao, B., Walter, M., Steenhuis, T., Parlange, J.-Y., Richards, B., Hogarth, W., and Rose, C. (2005). Investigating raindrop effects on transport of sediment and non-sorbed chemicals from soil to surface runoff. *Journal of Hydrology*, 308(1) :313–320.
- Gao, B., Walter, M. T., Steenhuis, T. S., Hogarth, W. L., and Parlange, J.-Y. (2004). Rainfall induced chemical transport from soil to runoff : theory and experiments. *Journal of Hydrology*, 295(1-4) :291–304.
- Gatel, L., Lauvernet, C., Carluer, N., and Paniconi, C. (2016). Effect of surface and subsurface heterogeneity on the hydrological response of a grassed buffer zone. *Journal of Hydrology*, 542 :637–647.
- Gaudet, J., Jegat, H., Vachaud, G., and Wierenga, P. (1977). Solute transfer, with exchange between mobile and stagnant water, through unsaturated sand. *Soil Science Society of America Journal*, 41(4) :665–671.
- Gelhar, L. W., Welty, C., and Rehfeldt, K. R. (1992). A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. *Water Resources Research*, 28(7) :1955–1974.
- Gerke, H. H. and van Genuchten, M. T. (1993). A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media. *Water Resources Research*, 29(2) :305–319.
- Gerke, H. H. and van Genuchten, M. T. (1996). Macroscopic representation of structural geometry for simulating water and solute movement in dual-porosity media. *Advances in Water Resources*, 19(6) :343–357.
- Goltz, M. N. and Roberts, P. V. (1986). Interpreting organic solute transport data from a field experiment using physical nonequilibrium models. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1(1–2) :77–93.

- Guay, C., Nastev, M., Paniconi, C., and Sulis, M. (2013). Comparison of two modeling approaches for groundwater–surface water interactions. *Hydrological Processes*, 27(16) :2258–2270.
- Gupta, H. V. and Kling, H. (2011). On typical range, sensitivity, and normalization of Mean Squared Error and Nash-Sutcliffe efficiency type metrics. *Water Resources Research*, 47(10).
- Gupta, H. V., Kling, H., Yilmaz, K. K., and Martinez, G. F. (2009). Decomposition of the mean squared error and {NSE} performance criteria : Implications for improving hydrological modelling. *Journal of Hydrology*, 377(1-2) :80–91.
- Gureghian, A. B. (1983). *TRIPM: Two-dimensional Finite-element Model for the Simultaneous Transport of Water and Reacting Solutes Through Saturated and Unsaturated Porous Media : Technical Report*. Battelle Memorial Institute, Office of Nuclear Waste Isolation.
- Gärdenäs, A. I., Šimůnek, J., Jarvis, N., and van Genuchten, M. (2006). Two-dimensional modelling of preferential water flow and pesticide transport from a tile-drained field. *Journal of Hydrology*, 329(3) :647–660.
- Hardie, M. A., Doyle, R. B., Cotching, W. E., and Lisson, S. (2012). Subsurface lateral flow in texture-contrast (duplex) soils and catchments with shallow bedrock. *Applied and Environmental Soil Science*, page 10.
- Herman, J., Kollat, J., Reed, P., and Wagener, T. (2013). Method of Morris effectively reduces the computational demands of global sensitivity analysis for distributed watershed models. *Hydrology and Earth System Sciences*, 17(7) :2893–2903.
- Holvoet, K., van Griensven, A., Seuntjens, P., and Vanrolleghem, P. (2005). Sensitivity analysis for hydrology and pesticide supply towards the river in SWAT. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 30 :518–526.
- Horton, R. E. (1933). The role of infiltration in the hydrologic cycle. *Eos, Transactions American Geophysical Union*, 14(1) :446–460.
- Hussein, J., Yu, B., Ghadiri, H., and Rose, C. (2007). Prediction of surface flow hydrology and sediment retention upslope of a vetiver buffer strip. *Journal of Hydrology*, 338(3) :261–272.
- Huyakorn, P. S., Mercer, J. W., and Ward, D. S. (1985). Finite element matrix and mass balance computational schemes for transport in variably saturated porous media. *Water Resources Research*, 21(3) :346–358.



- Huyakorn, P. S., Springer, E. P., Guvanasen, V., and Wadsworth, T. D. (1986). A three-dimensional finite-element model for simulating water flow in variably saturated porous media. *Water Resources Research*, 22(13) :1790–1808.
- IUPAC (2007). The PPDB : Pesticide Properties Database. International Union of Pure and Applied Chemistry, 584 University of Hertfordshire, UK.
- Ivanov, V. Y., Vivoni, E. R., Bras, R. L., and Entekhabi, D. (2004). Catchment hydrologic response with a fully distributed triangulated irregular network model. *Water Resources Research*, 40(11). W11102.
- Jacques, J., Lavergne, C., and Devictor, N. (2006). Sensitivity analysis in presence of model uncertainty and correlated inputs. *Reliability Engineering and System Safety*, 91(10) :1126–1134. The Fourth International Conference on Sensitivity Analysis of Model Output (SAMO 2004).
- Jain, S. K. and Sudheer, K. (2008). Fitting of hydrologic models : a close look at the Nash-Sutcliffe index. *Journal of Hydrologic Engineering*, 13(10) :981–986.
- Jansen, M. J. (1999). Analysis of variance designs for model output. *Computer Physics Communications*, 117(1) :35–43.
- Jarvis, N. J. (2007). A review of non-equilibrium water flow and solute transport in soil macropores : principles, controlling factors and consequences for water quality. *European Journal of Soil Science*, 58(3) :523–546.
- Javaux, M. and Vanclooster, M. (2004a). In situ long-term chloride transport through a layered, nonsaturated subsoil. 1. data set, interpolation methodology, and results. *Vadose Zone Journal*, 3(4) :1322–1330.
- Javaux, M. and Vanclooster, M. (2004b). In situ long-term chloride transport through a layered, nonsaturated subsoil. 2. effect of layering on solute transport processes. *Vadose Zone Journal*, 3(4) :1331–1339.
- Kampf, S. K. and Burges, S. J. (2007). Parameter estimation for a physics-based distributed hydrologic model using measured outflow fluxes and internal moisture states. *Water Resources Research*, 43(12).
- Kao, C. (2002). *Fonctionnement hydraulique des nappes superficielles de fonds de vallées en interaction avec le réseau hydrographique*. PhD thesis, ENGREF (AgroParisTech).

- Kees, C., Akkerman, I., Farthing, M., and Bazilevs, Y. (2011). A conservative level set method suitable for variable-order approximations and unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, 230(12) :4536–4558.
- Klausen, R. A. and Russell, T. (2004). Relationships among some locally conservative discretization methods which handle discontinuous coefficients. *Computational Geosciences*, 8(4) :341–377.
- Klute, A. and Dirksen, C. (1986). Hydraulic conductivity and diffusivity : laboratory methods. *Methods of soil analysis : part 1—physical and mineralogical methods*, (methodsofsoilan1) :687–734.
- Koehne, J. M., Kohne, S., and Simunek, J. (2009). A review of model applications for structured soils : b) pesticide transport. *Journal of Contaminant Hydrology*, 104(1 4) :36–60. Preferential Flow.
- Kollet, S., Sulis, M., Maxwell, R. M., Paniconi, C., Putti, M., Bertoldi, G., Coon, E. T., Cordano, E., Endrizzi, S., Kikinon, E., Mouche, E., Mügler, C., Park, Y.-J., Refsgaard, J. C., Stisen, S., and Sudicky, E. (2017). The integrated hydrologic model intercomparison project, IH-MIP2 : A second set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. *Water Resources Research*, 53(1) :867–890.
- Kollet, S. J. and 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(7) :945–958.
- Kollet, S. J. and 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(1) :96–114.
- Krause, P., Boyle, D. P., and Bäse, F. (2005). Comparison of different efficiency criteria for hydrological model assessment. *Advances in Geosciences*, 5 :89–97.
- Kutílek, M. and Nielsen, D. R. (1994). *Soil hydrology : textbook for students of soil science, agriculture, forestry, geoecology, hydrology, geomorphology and other related disciplines*. Catena Verlag.
- Lacas, J.-G. (2005). *Processus de dissipation des produits phytosanitaires dans les zones tampons enherbées : étude expérimentale et modélisation en vue de limiter la contamination des eaux de surface*. PhD thesis, Montpellier 2.
- Lacas, J.-G., Carluher, N., and Voltz, M. (2012). Efficiency of a grass buffer strip for limiting diuron losses from an uphill vineyard towards surface and subsurface waters. *Pedosphere*, 22(4) :580–592.

- Lacas, J.-G., Voltz, M., Gouy, V., Carluer, N., and Gril, J.-J. (2005). Using grassed strips to limit pesticide transfer to surface water : a review. *Agronomy for Sustainable Development*, 25(2) :253–266.
- Langmuir, I. (1918). The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum. *Journal of the American Chemical Society*, 40(9) :1361–1403.
- Larsbo, M. and Jarvis, N. (2003). *MACRO 5.0 : a model of water flow and solute transport in macroporous soil : technical description*. Department of Soil Sciences, Swedish University of Agricultural Sciences Uppsala.
- Larsbo, M. and Jarvis, N. (2005). Simulating solute transport in a structured field soil. *Journal of environmental quality*, 34(2) :621–634.
- Larson, M. G. and Niklasson, A. (2004). A conservative flux for the continuous Galerkin method based on discontinuous enrichment. *Calcolo*, 41(2) :65–76.
- Lauvernet, C. and Muñoz Carpena, R. (2017). Shallow water table effects on water, sediment and pesticide transport in vegetative filter strips : Part b. model coupling, application, factor importance and uncertainty. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 2017 :1–31.
- Le Potier, C. (2005). Schéma volumes finis monotone pour des opérateurs de diffusion fortement anisotropes sur des maillages de triangles non structurés. *Comptes Rendus Mathématique*, 341(12) :787–792.
- Lenhart, T., Eckhardt, K., Fohrer, N., and Frede, H.-G. (2002). Comparison of two different approaches of sensitivity analysis. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 27(9–10) :645–654.
- Malone, R. W., Ahuja, L. R., Ma, L., Don Wauchope, R., Ma, Q., and Rojas, K. W. (2004). Application of the root zone water quality model (rzwqm) to pesticide fate and transport : an overview. *Pest Management Science*, 60(3) :205–221.
- Martinez, J. (2011). Analyse de sensibilité globale par décomposition de la variance. *Presentation in "Journée des GdR Ondes & Mascot*, (13).
- Maxwell, R. M., Putti, M., Meyerhoff, S., Delfs, J.-O., Ferguson, I. M., Ivanov, V., Kim, J., Kolditz, O., Kollet, S. J., Kumar, M., Lopez, S., Niu, J., Paniconi, C., Park, Y.-J., Phanikumar, M. S., Shen, C., Sudicky, E. A., and Sulis, M. (2014). Surface-subsurface model intercomparison : A first set of benchmark results to diagnose integrated hydrology and feedbacks. *Water Resources Research*, 50(2) :1531–1549.

- Mazzia, A., Bergamaschi, L., Dawson, C., and Putti, M. (2002). Godunov mixed methods on triangular grids for advection–dispersion equations. *Computational Geosciences*, 6(2) :123–139.
- Mazzia, A., Bergamaschi, L., and Putti, M. (2000). A time-splitting technique for the advection–dispersion equation in groundwater. *Journal of Computational Physics*, 157(1) :181–198.
- Mazzia, A., Bergamaschi, L., and Putti, M. (2001). On the reliability of numerical solutions of brine transport in groundwater : Analysis of infiltration from a salt lake. *Transport in Porous Media*, 43(1) :65–86.
- Mazzia, A., Manzini, G., and Putti, M. (2011). Bad behavior of Godunov mixed methods for strongly anisotropic advection–dispersion equations. *Journal of Computational Physics*, 230(23) :8410–8426.
- Mazzia, A. and Putti, M. (2005). High order Godunov mixed methods on tetrahedral meshes for density driven flow simulations in porous media. *Journal of Computational Physics*, 208(1) :154–174.
- McCuen, R. H., Knight, Z., and Cutter, A. G. (2006). Evaluation of the Nash-Sutcliffe efficiency index. *Journal of Hydrologic Engineering*, 11(6) :597–602.
- Meyer, P., Rockhold, M., and Gee, G. (1997). Uncertainty analyses of infiltration and subsurface flow and transport for sdmp sites. Technical report, Nuclear Regulatory Commission, Washington, DC (United States). Div. of Regulatory Applications ; Pacific Northwest National Lab., Richland, WA (United States).
- Mohanty, B. P., Ankeny, M. D., Horton, R., and Kanwar, R. S. (1994). Spatial analysis of hydraulic conductivity measured using disc infiltrometers. *Water Resources Research*, 30(9) :2489–2498.
- Morris, M. D. (1991). Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics*, 33(2) :161–174.
- Mualem, Y. (1976). A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research*, 12(3) :513–522.
- Muleta, M. K. and Nicklow, J. W. (2005). Sensitivity and uncertainty analysis coupled with automatic calibration for a distributed watershed model. *Journal of Hydrology*, 306(1–4) :127–145.
- Mulla, D. and McBratney, A. (2010). Soil spatial variability. *Soil physics companion*, page 343.

- Muma, M., Gumiere, S., and Rousseau, A. (2011). Sensitivity analysis of the cathy distributed hydrological model to soil hydrodynamic properties of a tile-drained agricultural micro-watershed. *Hydrological Sciences Journal*, 1 :07.
- Muñoz-Carpena, R., Fox, G. A., and Sabbagh, G. J. (2010). Parameter importance and uncertainty in predicting runoff pesticide reduction with filter strips. *Journal of Environmental Quality*, 39(2) :630–641.
- Muñoz-Carpena, R., Lauvernet, C., and Carlier, N. (2017). Shallow water table effects on water, sediment and pesticide transport in vegetative filter strips : Part a. non-uniform infiltration and soil water redistribution. *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 2017 :1–32.
- Muñoz-Carpena, R., Parsons, J. E., and Gilliam, J. W. (1999). Modeling hydrology and sediment transport in vegetative filter strips. *Journal of Hydrology*, 214(1-4) :111–129.
- Musy, A. and Soutter, M. (1991). *Physique du sol*, volume 6. PPUR presses polytechniques.
- Nash, J. and Sutcliffe, J. (1970). River flow forecasting through conceptual models part i — a discussion of principles. *Journal of Hydrology*, 10(3) :282–290.
- Nicholls, P. and Hall, D. (1995). Use of the pesticide leaching model (PLM) to simulate pesticide movement through macroporous soils.
- Orlandini, S., Moretti, G., Franchini, M., Aldighieri, B., and Testa, B. (2003). Path-based methods for the determination of nondispersive drainage directions in grid-based digital elevation models. *Water Resources Research*, 39(6). 1144.
- Orlandini, S. and Rosso, R. (1996). Diffusion wave modeling of distributed catchment dynamics. *Journal of Hydrologic Engineering*, 1(3) :103–113.
- Painter, S. L., Coon, E. T., Atchley, A. L., Berndt, M., Garimella, R., Moulton, J. D., Svyatskiy, D., and Wilson, C. J. (2016). Integrated surface/subsurface permafrost thermal hydrology : Model formulation and proof-of-concept simulations. *Water Resources Research*, 52(8) :6062–6077.
- Panday, S. and Huyakorn, P. S. (2004). A fully coupled physically-based spatially-distributed model for evaluating surface/subsurface flow. *Advances in Water Resources*, 27(4) :361–382.
- Pangle, L. A., DeLong, S. B., Abramson, N., Adams, J., Barron-Gafford, G. A., Breshears, D. D., Brooks, P. D., Chorover, J., Dietrich, W. E., Dontsova, K., et al. (2015). The landscape evolution observatory : A large-scale controllable infrastructure to study coupled earth-surface processes. *Geomorphology*, 244 :190–203.

- Paniconi, C., Marrocu, M., Putti, M., and Verbunt, M. (2003). Newtonian nudging for a Richards equation-based distributed hydrological model. *Advances in Water Resources*, 26(2) :161–178.
- Paniconi, C. and Putti, M. (1994). A comparison of Picard and Newton iteration in the numerical solution of multidimensional variably saturated flow problems. *Water Resources Research*, 30(12) :3357–3374.
- Paris Anguela, T. (2001). Détermination expérimentale des propriétés hydrodynamiques au voisinage de la saturation : Incidence sur le fonctionnement hydrique d'un sol à nappe superficielle. *DEA Hydrologie, Hydrogéologie, Géostatistique et Géochimie*, 57pp.
- Paris Anguela, T. (2004). *Etude du transfert d'eau et de solutés dans un sol à nappe superficielle drainée artificiellement*. PhD thesis, ENGREF (AgroParisTech).
- Pasetto, D., Camporese, M., and Putti, M. (2012). Ensemble Kalman filter versus particle filter for a physically-based coupled surface–subsurface model. *Advances in Water Resources*, 47 :1–13.
- Peel, M. C., Finlayson, B. L., and McMahon, T. A. (2007). Updated world map of the Köppen-Geiger climate classification. *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 11(5) :1633–1644.
- Persicani, D. (1996). Pesticide leaching into field soils : sensitivity analysis of four mathematical models. *Ecological Modelling*, 84(1) :265 – 280.
- Peyrard, X. (2016). *Transfert de produits phytosanitaires par les écoulements latéraux en proche surface dans le Beaujolais de coteaux : suivi sur parcelle exploitée, expérimentation de traçage in situ et modélisation*. PhD thesis, Lyon.
- Poletika, N., Coody, P., Fox, G., Sabbagh, G., Dolder, S., and White, J. (2009). Chlorpyrifos and atrazine removal from runoff by vegetated filter strips : Experiments and predictive modeling. *Journal of Environmental Quality*, 38(3) :1042–1052.
- Povich, T. J., Dawson, C. N., Farthing, M. W., and Kees, C. E. (2013). Finite element methods for variable density flow and solute transport. *Computational Geosciences*, 17(3) :529–549.
- Qu, Y. and Duffy, C. J. (2007). A semidiscrete finite volume formulation for multiprocess watershed simulation. *Water Resources Research*, 43(8). W08419.
- Randriambololohasinirina, P. (2012). *Pesticide dissipation properties in soils of a wine-growing watershed*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie (Paris 6) ; Institut des Sciences et Industries du Vivant et de l'Environnement.

- Rawls, W. J., Brakensiek, D., and Saxton, K. (1982). Estimation of soil water properties. *Transactions of the ASAE*, 25(5) :1316–1320.
- Renard, P. and de Marsily, G. (1997). Calculating equivalent permeability : a review. *Advances in Water Resources*, 20(5) :253–278.
- Reynolds, W. and Elrick, D. (1991). Determination of hydraulic conductivity using a tension infiltrometer. *Soil Science Society of America Journal*, 55(3) :633–639.
- Rigon, R., Bertoldi, G., and Over, T. M. (2006). Geotop : A distributed hydrological model with coupled water and energy budgets. *Journal of Hydrometeorology*, 7(3) :371–388.
- Ritter, A. and Munoz-Carpena, R. (2013). Performance evaluation of hydrological models : Statistical significance for reducing subjectivity in goodness-of-fit assessments. *Journal of Hydrology*, 480 :33–45.
- Rubio, A., Zalts, A., and Hasi, C. E. (2008). Numerical solution of the advection-reaction-diffusion equation at different scales. *Environmental Modelling & Software*, 23(1) :90–95.
- Rüdel, H. (1997). Volatilisation of pesticides from soil and plant surfaces. *Chemosphere*, 35(1) :143–152.
- Saint-Venant, A. B. (1871). Théorie du mouvement non permanent des eaux, avec application aux crues des rivières et à l'introduction des marées dans leurs lits. *Comptes Rendus des séances de l'Académie des Sciences*, 73 :237–240.
- Saltelli, A., Annoni, P., Azzini, I., Campolongo, F., Ratto, M., and Tarantola, S. (2010). Variance based sensitivity analysis of model output. design and estimator for the total sensitivity index. *Computer Physics Communications*, 181(2) :259–270.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., and Tarantola, S. (2008). *Global Sensitivity Analysis : The Primer*. John Wiley & Sons.
- Saltelli, A., Ratto, M., Tarantola, S., and Campolongo, F. (2005). Sensitivity analysis for chemical models. *Chemical Reviews*, 105(7) :2811–2828. PMID : 16011325.
- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., and Ratto, M. (2004). *Sensitivity Analysis in Practice : a guide to assessing scientific models*. John Wiley & Sons.
- Schaefli, B. and Gupta, H. V. (2007). Do Nash values have value? *Hydrological Processes*, 21(15) :2075–2080.

- Schroeder, P. R., Dozier, T. S., Zappi, P. A., McEnroe, B. M., Sjostrom, J. W., Peyton, R. L., et al. (1994). The hydrologic evaluation of landfill performance (HELP) model : engineering documentation for version 3. *Environmental Protection Agency, United States*.
- Schwen, A., Bodner, G., Scholl, P., Buchan, G. D., and Loiskandl, W. (2011). Temporal dynamics of soil hydraulic properties and the water-conducting porosity under different tillage. *Soil and Tillage Research*, 113(2) :89–98.
- Scudeler, C., Pangle, L., Pasetto, D., Niu, G.-Y., Volkmann, T., Paniconi, C., Putti, M., and Troch, P. (2016a). Multiresponse modeling of variably saturated flow and isotope tracer transport for a hillslope experiment at the Landscape Evolution Observatory. *Hydrology and Earth System Sciences*, 20(10) :4061–4078.
- Scudeler, C., Putti, M., and Paniconi, C. (2016b). Mass-conservative reconstruction of Galerkin velocity fields for transport simulations. *Advances in Water Resources*, 94 :470–485.
- Sebben, M. L., Werner, A. D., Liggett, J. E., Partington, D., and Simmons, C. T. (2013). On the testing of fully integrated surface–subsurface hydrological models. *Hydrological Processes*, 27(8) :1276–1285.
- Shen, C. and 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(12) :1524–1541.
- Simunek, J., van Genuchten, M. T., and Sejna, M. (2005). The hydrus-1d software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media. *University of California-Riverside Research Reports*, 3 :1–240.
- Simunek, J., van Genuchten, M. T., and Sejna, M. (2008). Development and applications of the hydrus and stanmod software packages and related codes. *Vadose Zone Journal*, 7(2) :587–600.
- Smith, K. A. and Mullins, C. (1991). Soil analysis : Physical Methods. *Wageningen agricultural University, Wageningen, the Netherlands*, 873 :7.
- Sobol, I. M. (1993). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiments*, 1(4) :407–414.
- Sobol, I. M., Tarantola, S., Gatelli, D., Kucherenko, S., and Mauntz, W. (2007). Estimating the approximation error when fixing unessential factors in global sensitivity analysis. *Reliability Engineering and System Safety*, 92(7) :957–960.



- SOeS (2016). Les pesticides dans les cours d'eau français en 2014. Technical report.
- Sulis, M., Meyerhoff, S. B., Paniconi, C., Maxwell, R. M., Putti, M., and Kollet, S. J. (2010). A comparison of two physics-based numerical models for simulating surface water-groundwater interactions. *Advances in Water Resources*, 33(4) :456–467.
- Sulis, M., Paniconi, C., Rivard, C., Harvey, R., and 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. *Water Resources Research*, 47(1).
- Taylor, A. and Spencer, W. (1990). Volatilization and vapor transport processes. *Pesticides in the Soil Environment : Processes, Impacts and Modeling*, pages 213–269.
- Tissot, J.-Y. and Prieur, C. (2015). A randomized orthogonal array-based procedure for the estimation of first- and second-order sobol' indices. *Journal of Statistical Computation and Simulation*, 85(7) :1358–1381.
- Trudel, M., Leconte, R., and Paniconi, C. (2014). Analysis of the hydrological response of a distributed physically-based model using post-assimilation (EnKF) diagnostics of streamflow and in situ soil moisture observations. *Journal of Hydrology*, 514 :192–201.
- Van den Bogaert, R. (2011). Typologie des sols du bassin versant de la morcille, caractérisation de leurs propriétés hydrauliques et test de fonctions de pédotransfert. Master's thesis, Université Pierre et Marie Curie & AgroParisTech.
- van Genuchten, M. T. (1980). A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5) :892–898.
- Van Wesenbeeck, I. and Kachanoski, R. (1994). Effect of variable horizon thickness on solute transport. *Soil Science Society of America Journal*, 58(5) :1307–1316.
- Vanderborght, J. and Vereecken, H. (2007). Review of dispersivities for transport modeling in soils. *Vadose Zone Journal*, 6(1) :29–52.
- VanderKwaak, J., Sudicky, E., et al. (2000). Application of a physically-based numerical model of surface and subsurface water flow and solute transport. *IAHS PUBLICATION*, pages 515–523.
- VanderKwaak, J. E. and Loague, K. (2001). Hydrologic-response simulations for the r-5 catchment with a comprehensive physics-based model. *Water Resources Research*, 37(4) :999–1013.
- Vellidis, G., Lowrance, R., Gay, P., and Wauchope, R. (2002). Herbicide transport in a restored riparian forest buffer system. *Transactions of the ASAE*, 45(1) :89.

- Vogel, T. and Cislerova, M. (1988). On the reliability of unsaturated hydraulic conductivity calculated from the moisture retention curve. *Transport in porous media*, 3(1) :1–15.
- Vogel, T., van Genuchten, M. T., and Cislerova, M. (2000). Effect of the shape of the soil hydraulic functions near saturation on variably-saturated flow predictions. *Advances in Water Resources*, 24(2) :133–144.
- Walker, A. (1974). A simulation model for prediction of herbicide persistence. *Journal of Environmental Quality*, 3(4) :396–401.
- Wallach, R., Grigorin, G., and Rivlin, J. (2001). A comprehensive mathematical model for transport of soil-dissolved chemicals by overland flow. *Journal of Hydrology*, 247(1) :85–99.
- Wallach, R. and Shabtai, R. (1993). Surface runoff contamination by chemicals initially incorporated below the soil surface. *Water Resources Research*, 29(3) :697–704.
- Walter, M. T., Gao, B., and Parlange, J.-Y. (2007). Modeling soil solute release into runoff with infiltration. *Journal of Hydrology*, 347(3) :430–437.
- Wauchope, R. D., Rojas, K. W., Ahuja, L. R., Ma, Q., Malone, R. W., and Ma, L. (2004). Documenting the pesticide processes module of the ARS RZWQM agroecosystem model. *Pest Management Science*, 60(3) :222–239.
- Wauchope, R. D., Yeh, S., Linders, J. B., Kloskowski, R., Tanaka, K., Rubin, B., Katayama, A., Koerdel, W., Gerstl, Z., Lane, M., and Unsworth, J. B. (2002). Pesticide soil sorption parameters : theory, measurement, uses, limitations and reliability. *Pest Management Science*, 58(5) :419–445.
- Weill, S., Mazzia, A., Putti, M., and Paniconi, C. (2011). Coupling water flow and solute transport into a physically-based surface–subsurface hydrological model. *Advances in Water Resources*, 34(1) :128 – 136.
- Wind, G. (1966). Capillary conductivity data estimated by a simple method. Technical report, International Association of Scientific Hydrology.
- Wooding, R. (1965). A hydraulic model for the catchment-stream problem. *Journal of Hydrology*, 3(3) :254–267.
- Xu, C. and Gertner, G. Z. (2008). Uncertainty and sensitivity analysis for models with correlated parameters. *Reliability Engineering and System Safety*, 93(10) :1563–1573.
- Yang, J. (2011). Convergence and uncertainty analyses in monte-carlo based sensitivity analysis. *Environmental Modelling and Software*, 26(4) :444–457.

- Yeh, G.-T. (2000). Numerical methods for advection-dominant transport. In *Computational Sub-surface Hydrology*, pages 93–198. Springer.
- Zhang, X., Norton, L., Lei, T., and Nearing, M. (1999). Coupling mixing zone concept with convection-diffusion equation to predict chemical transfer to surface runoff. *Transactions of the ASAE*, 42(4) :987.
- Zhang, X. C., Norton, D., and Nearing, M. A. (1997). Chemical transfer from soil solution to surface runoff. *Water Resources Research*, 33(4) :809–815.
- Zhou, J., Cheng, G., Li, X., Hu, B. X., and Wang, G. (2012). Numerical modeling of wheat irrigation using coupled hydrus and wofost models. *Soil Science Society of America Journal*, 76(2) :648–662.

AnnexeAnnexe



## Annexe A

# Documents complémentaires sur l'analyse de sensibilité de Morris

### A.1 Densités de probabilité des paramètres d'entrée

Cette annexe propose la visualisation des densités de probabilités des paramètres testés dans l'analyse de sensibilité de Morris (chapitre 5). Les densités sont tracées en échantillonnant 1000 valeurs sur chaque fonction de probabilité. Pour chaque fonction de probabilité, les paramètres sont rappelés sous le graphe : moyenne et variance pour la loi normale et lognormale et minimum et maximum pour la loi uniforme.

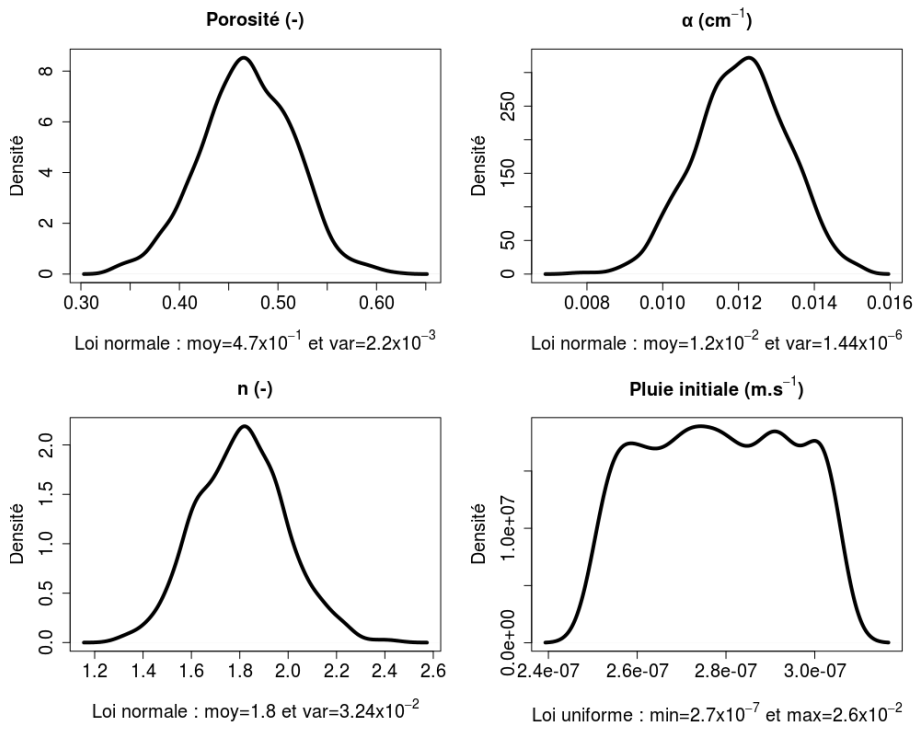


Figure A.1 – Densité des fonctions de probabilité des paramètres de van Genuchten : porosité,  $\alpha$ , n et pluie initiale.

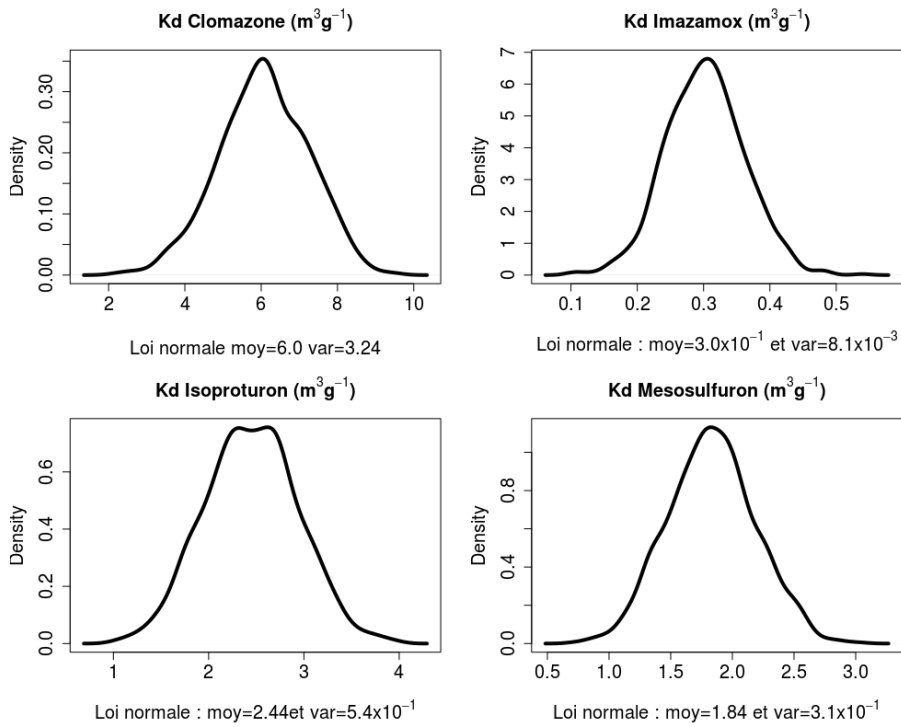


Figure A.2 – Densité des fonctions de probabilité du coefficient d'adsorption pour les quatre solutés étudiés.

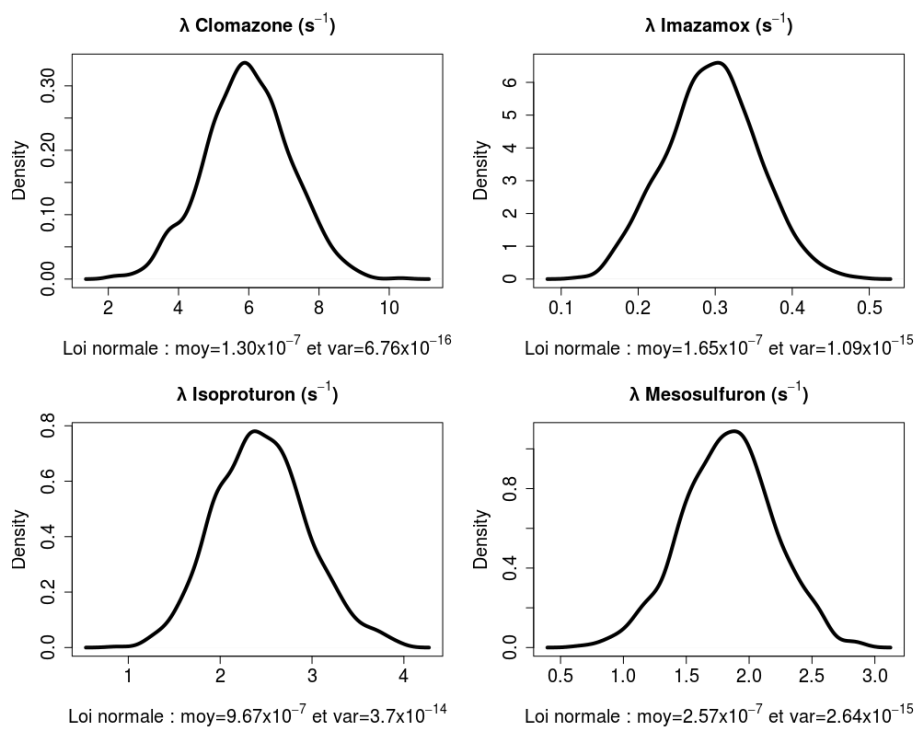


Figure A.3 – Densité des fonctions de probabilité de la constante d'équilibre pour les quatre solutés étudiés.





## Annexe B

# Documents complémentaires sur l'analyse de sensibilité de Sobol

Cette annexe propose la visualisation des densités de probabilités des paramètres testés dans l'analyse de sensibilité de Sobol (chapitre 6). Comme l'annexe précédente, les densités sont tracées en échantillonnant 1000 valeurs sur chaque fonction de probabilité. Pour chaque fonction de probabilité, les paramètres sont rappelés sous le graphe : moyenne et variance pour la loi normale et lognormale et minimum et maximum pour la loi uniforme et la loi triangulaire (toujours centrée dans les exemples). Les paramètres "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les paramètres "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon.

### B.1 Densités de probabilité des paramètres d'entrée

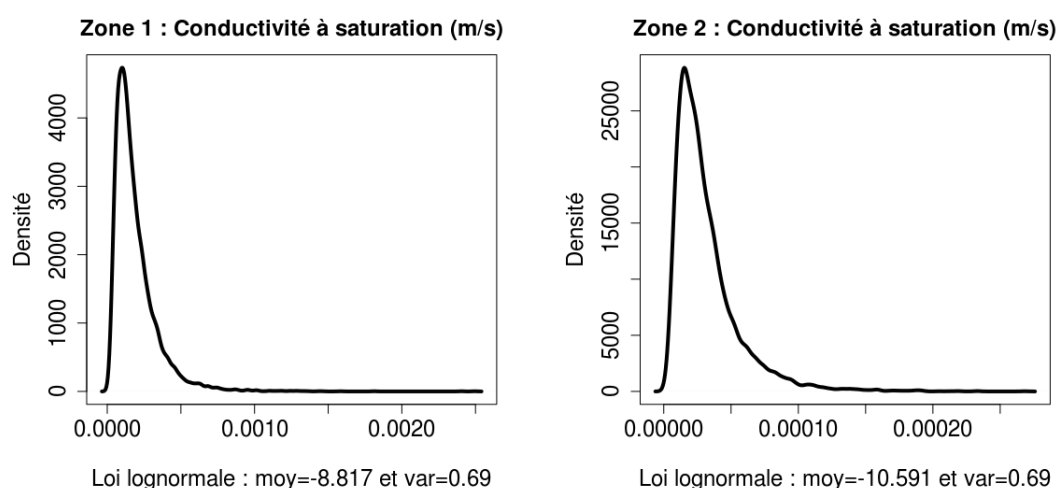


Figure B.1 – Densité des fonctions de probabilité des conductivités à saturation.

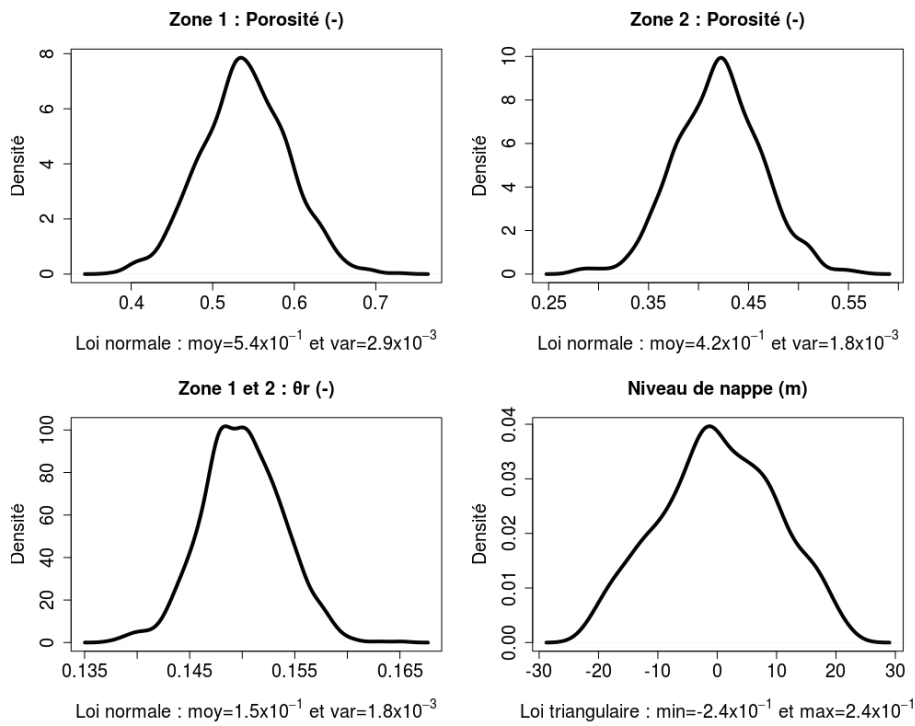


Figure B.2 – Densité des fonctions de probabilité de la porosité et du niveau de nappe par rapport au niveau moyen.

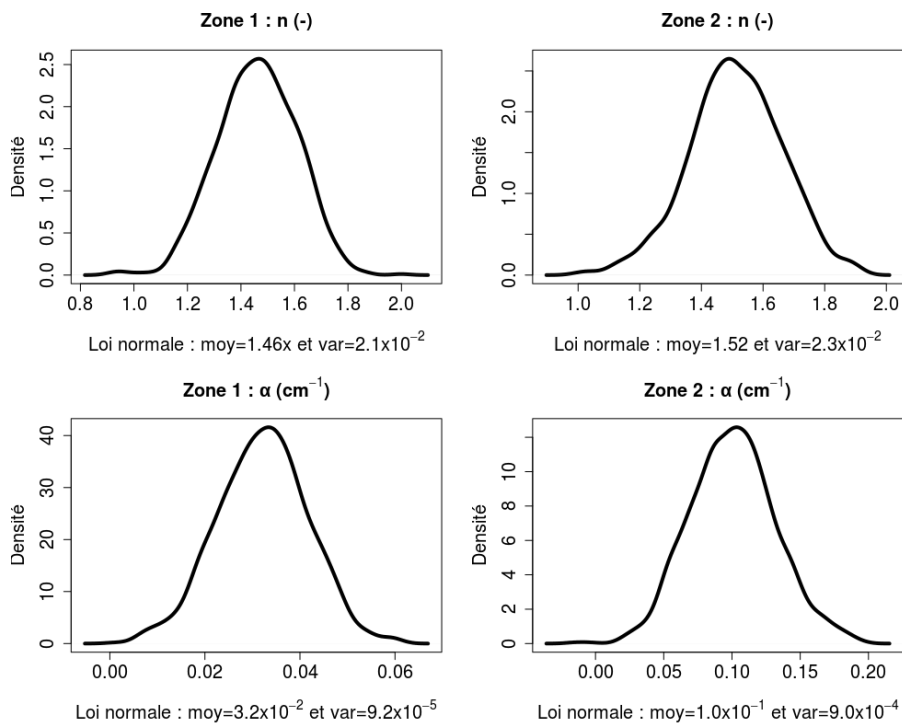


Figure B.3 – Densité des fonctions de probabilité des paramètres de van Genuchten  $n$  et  $\alpha$ .

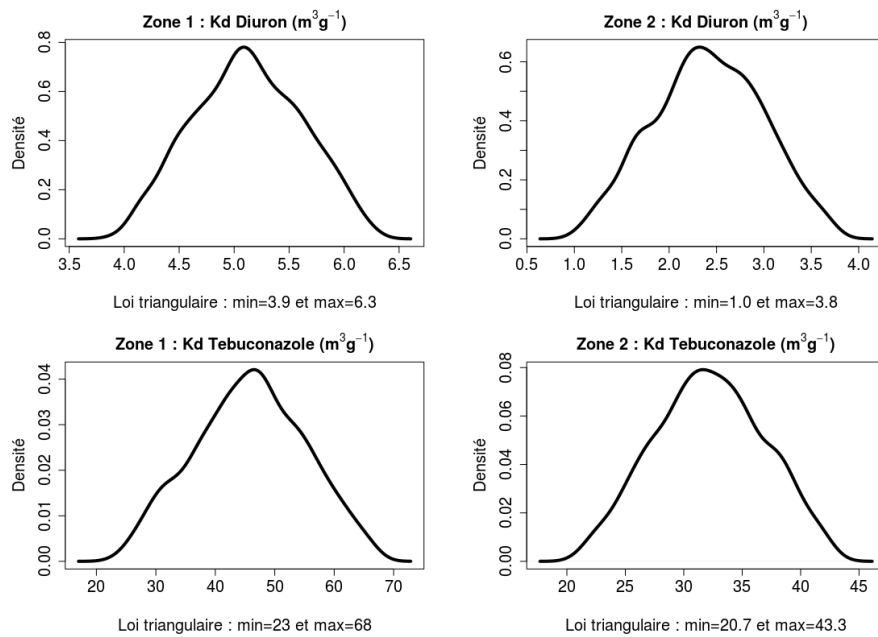


Figure B.4 – Densité des fonctions de probabilité des paramètres du coefficient d'adsorption des deux solutés étudiés.

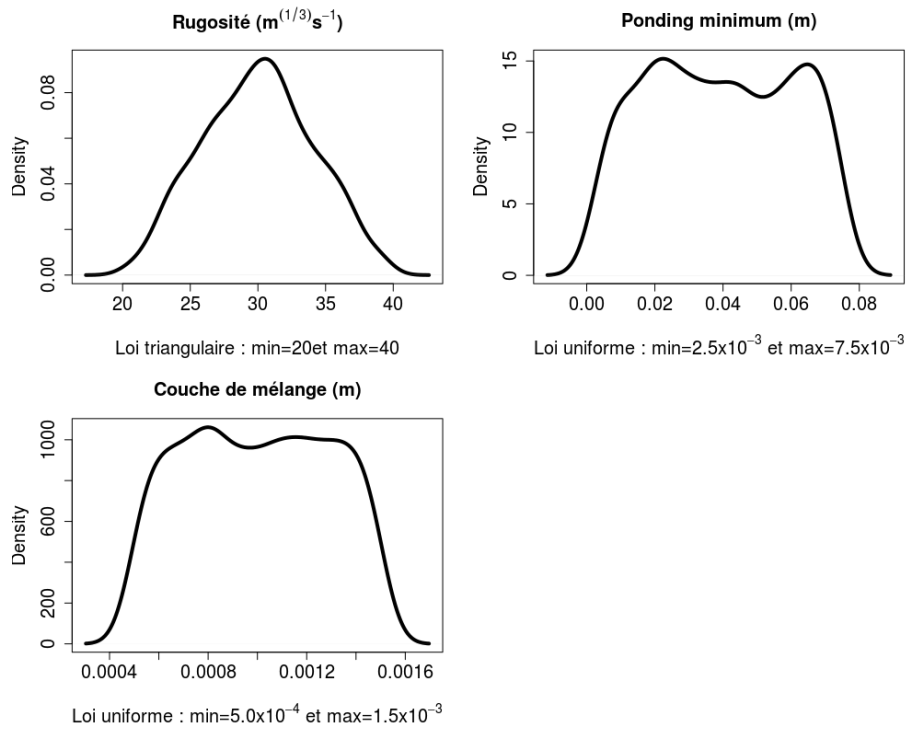


Figure B.5 – Densité des fonctions de probabilité des paramètres du coefficient de rugosité, du ponding minimum et de la hauteur de la couche de mélange.

## B.2 Analyse d'incertitude de Sobol

Cette section concerne les densités de probabilité des sorties étudiées dans l'analyse de sensibilité de Sobol (chapitre 6), c'est-à-dire la représentation de l'effet de l'incertitude des données sur les résultats. Les incertitudes qui ne sont pas présentées dans la section 6.3.2.1 sont tracées ci-dessous.

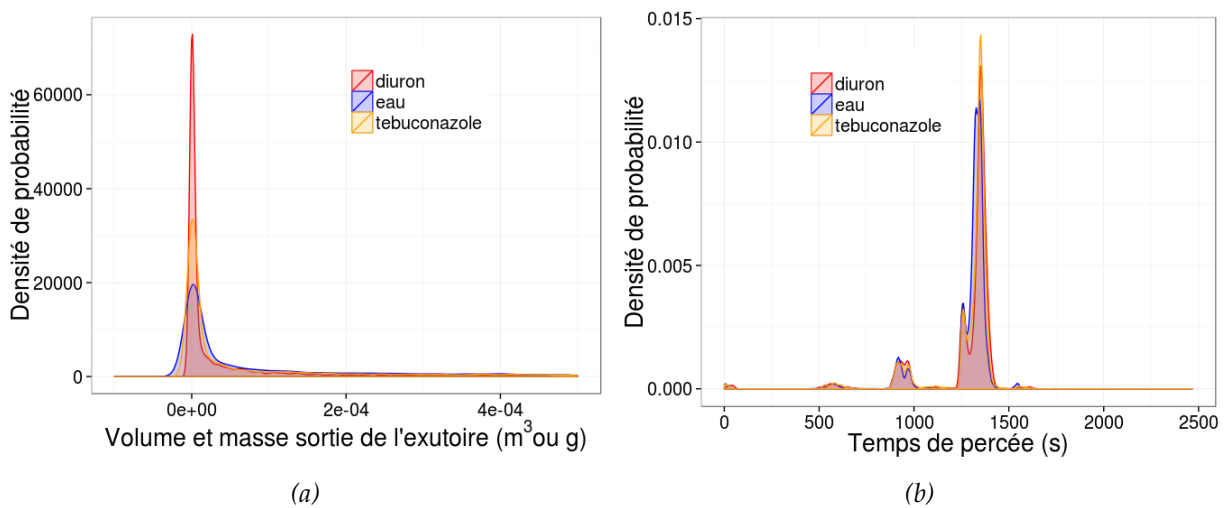


Figure B.6 – Densité de probabilité des sorties concernant l'exutoire pour l'eau (volume) et les solutés diuron et tebuconazole (masse) : (a) cumul du volume ou de la masse sortant et (b) temps de percée.

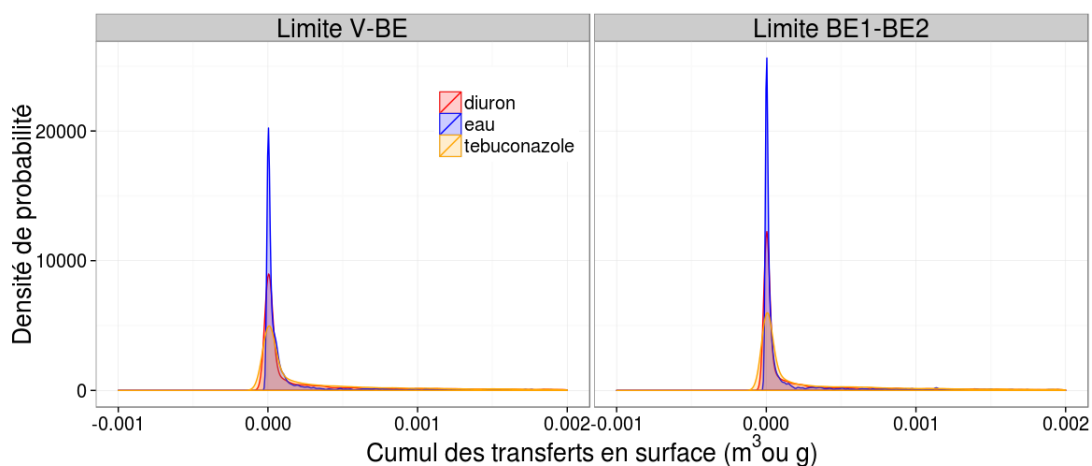


Figure B.7 – Densité de probabilité des sorties concernant les transferts en surface pour l'eau (volume) et les solutés diuron et tebuconazole (masse). V-BE : vigne - bande enherbée et BE1 - BE2 : bande enherbée 1 - bande enherbée 2.

### B.3 Indices de premier ordre et totaux de l'analyse de sensibilité de Sobol

Les figures de cette section correspondent aux indices de premier ordre et totaux des sorties qui n'ont pas été montrées dans le chapitre 6. Les résultats pour le transport des solutés (figure B.9) sont basés sur les résultats des 17000 simulations tronquées de 57 simulations extrêmes (voir l'explication section 6.3.2.2). Pour rappel, Les paramètres "1" se réfèrent au premier horizon de la bande enherbée et les paramètres "2" au premier horizon de la vigne et totalité du second horizon.

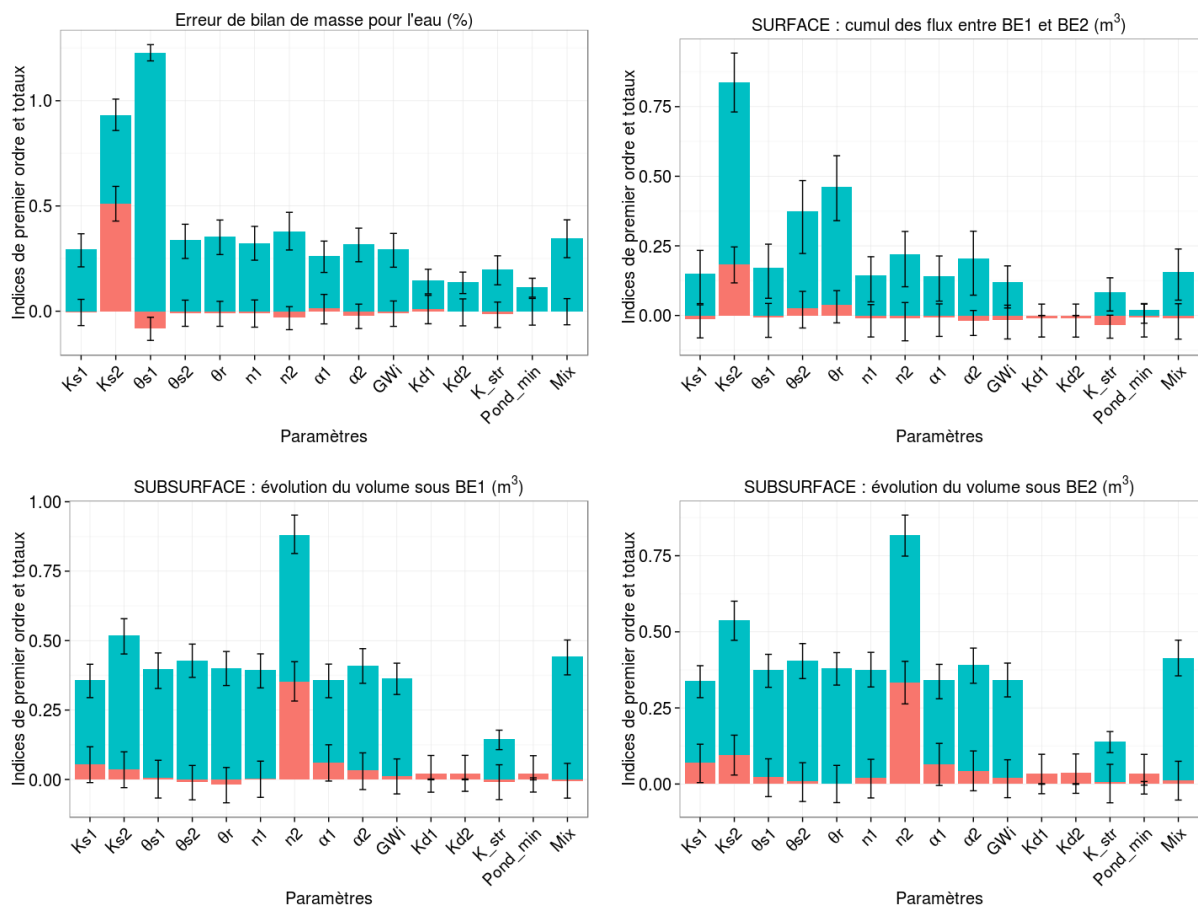


Figure B.8 – Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent exclusivement l'eau. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%.

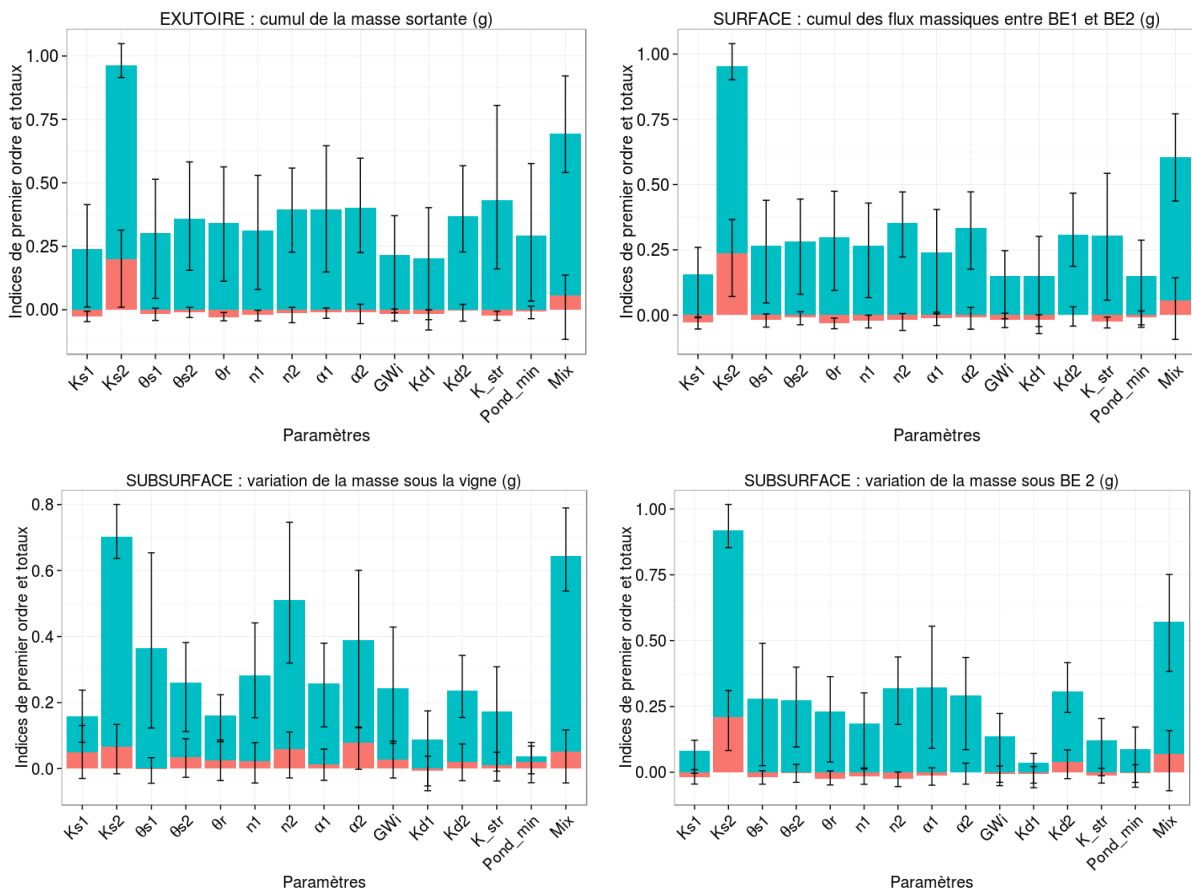


Figure B.9 – Indices de premier ordre (rose) et totaux (bleu) de deux variables de sorties qui concernent le transport du tebuconazole. Les barres d'erreur en noir correspondent à un intervalle de confiance de 95%.

## Annexe C

# Temps CPU des principales simulations présentées dans la thèse

Tableau C.1 – Temps CPU (s) des trois principaux groupes de simulations présentées dans la thèse.

Simulation			Temps CPU (s)		
	Tétraèdres	Durée simulée	surface	subsurface	total
MASHYNS (5.2)	12800	300 h	-	498.1	498.1
Saint-Joseph complexe (6.2.1.1)	316800	60 min	438	15480	15918
Saint-Joseph simple (6.3.1.1)	22500	60 min	0.79	64.2	65





## Abstract

Pesticide use on agricultural surfaces leads to widespread surface and subsurface water contamination in France. In absence of a sustained decrease in pesticide use that would necessitate deep changes in agricultural practices, it is of crucial importance to limit transfers from agricultural fields to rivers. In order to constrain those transfers, a deeper knowledge of governing processes and their potential interactions (surface/subsurface, water/solutes, etc.) is necessary, and full advantage must be taken of field observations and physically-based modelling.

The aim of the PhD research described in this thesis is the development of a spatialised reactive transfer model at the hillslope scale. To this end, reactive processes are implemented in the hydrological physically-based model CATHY (CATchment HYdrology) that simulates surface-subsurface coupled water flow and advective solute transport in three dimensions and in variably saturated conditions. Linear adsorption and first-order decay are implemented in the subsurface component. A mixing module is developed as well, in order to simulate solute mobilisation from soil to surface runoff. The water flow surface-subsurface coupling procedure is very accurate in CATHY, and the transport coupling procedure, based on the same strategy, has been improved in order to respect mass conservation.

The model is first evaluated using a dataset from a small-scale subsurface laboratory experiment. Several pesticide batches have been injected at the surface under three successive hydraulic regimes, approximately representing an annual cycle. Simulation results are compared to mass flux evolution in time. A Morris sensitivity analysis is conducted on the breakthrough timing and on the Nash-Sutcliffe coefficient computed for cumulative observed and simulated mass at the outlet. Based on an evaluation combining several criteria, we show that the model adequately reproduces observations without calibration, with significant amelioration after a slight calibration. Horizontal and vertical saturated conductivities, porosity, and the  $n$  parameter of the soil moisture retention curves significantly influence hydrodynamics and solute transport. As a second step, the model is evaluated on data from a vineyard field hillslope (Beaujolais, France) for an intense rain event that induced significant surface-subsurface interactions. Several global sensitivity analyses are conducted with various sampling strategies and Sobol index computations. The analyses highlight the dominant role of the same parameters as in the Morris method analysis for the subsurface experiment. Interactions between parameters highly influence the variability of hydrodynamic and solute transfer outputs. Mass conservation is accurate on large samples despite the complexity of the processes involved.

The CATHY-Pesticide model is evaluated at several scales, first in a subsurface context and then with surface-subsurface coupling, and using various assessment methods. It can be considered as a reliable tool for a fine process representation, and it can be used for example in the validation of more conceptual models. CATHY-Pesticide correctly reproduced observed data, but there are nonetheless several areas requiring further study, for example : extending the sensitive analyses to other contexts (climate and land use changes, etc.), larger time scale simulations, and representation of complementary processes such as sediment transport.

**Keywords :** contaminant transfer, physically-based modelling, surface-subsurface coupling, sensitivity analysis.

## Résumé

L'utilisation de pesticides sur les surfaces agricoles conduit à une contamination généralisée des eaux de surface et de subsurface en France. En complément d'une évolution durable des pratiques agricoles allant vers une utilisation raisonnée des pesticides à large échelle, il est crucial de chercher à limiter des transferts de polluant des zones agricoles aux zones aquatiques. Pour mieux agir sur les voies de transfert dans un bassin versant, il est nécessaire d'approfondir les connaissances des processus en jeu et de leurs interactions éventuelles (surface/subsurface, eau/soluté, etc.) en tirant au mieux partie des observations du terrain et de la modélisation à base physique.

L'objectif de cette thèse est le développement d'un modèle spatialisé de transfert de solutés réactifs à l'échelle du versant. Pour cela, on a intégré les processus réactifs dans le modèle hydrologique à base physique CATHY (CATchment HYdrology), qui représente en 3 dimensions les écoulements de l'eau de façon couplée surface-subsurface et le transport advectif dans des situations variablement saturées. En subsurface, les processus d'adsorption linéaire et de dégradation du premier ordre ont été implémentés. Un module de mélange des solutés entre la lame ruisselante et la première couche de sol a également été développé, afin de simuler la remobilisation des solutés de la subsurface dans le ruissellement. Le couplage surface-subsurface des écoulements est particulièrement efficace dans CATHY, et le couplage du transport de soluté adoptant la même stratégie a été amélioré pour mieux respecter la conservation de la masse dans CATHY-Pesticide.

Le modèle est en premier lieu testé sur des données issues d'expérimentations de transfert de subsurface sur une maquette de laboratoire à petite échelle dans laquelle ont été injectés des lots de pesticides sous trois régimes de pluie successifs représentant approximativement un cycle annuel. Les résultats sont confrontés aux chroniques de flux massiques observées et une analyse de sensibilité de type Morris est menée sur le temps de percée et le coefficient de Nash-Sutcliffe calculé sur les chroniques observées et simulées du cumul de masse en sortie. A partir d'une évaluation combinant différents critères, on montre que le modèle reproduit de façon acceptable les observations sans calage, et satisfaisante après une légère calibration. Les conductivités à saturation horizontale et verticale, la porosité et le paramètre  $n$  de la courbe de rétention influencent de façon non négligeable l'hydrodynamique et le transfert de solutés. Dans un second temps, le modèle est évalué sur les données issues d'un versant viticole du Beaujolais dans un contexte orageux subissant de fortes interactions surface-subsurface. Plusieurs analyses de sensibilité globales sont menées avec différentes stratégies d'échantillonnage et de calcul des indices de Sobol. Les analyses mettent en valeur les mêmes paramètres influents que la méthode de Morris pour la subsurface. Les interactions entre les paramètres influencent fortement la variabilité des sorties hydrodynamiques et de transfert. La conservation de la masse est très correctement assurée sur de larges échantillons malgré la complexité de la simulation.

CATHY-Pesticide a été évalué à plusieurs échelles, en subsurface seule puis en surface-subsurface couplées, par différentes méthodes, et peut être considéré comme un outils solide de représentation fine des processus, notamment pour valider des outils plus conceptuels. S'il a reproduit de façon satisfaisante les données expérimentales, de nombreuses perspectives sont encore envisageable : approfondissement de l'analyse de sensibilité dans d'autres contextes (climat, occupation du paysage, etc.), simulation des transferts sur une échelle de temps plus longue, représentation de davantage de processus tel que le transport sédimentaire.

**Mots clés :** Transfert de contaminant, modélisation à base physique, couplage surface-subsurface, analyse de sensibilité.