



HAL
open science

Contribution à la modélisation du transfert des nitrates au travers de la zone non saturée à l'échelle régionale : application au bassin de la Seine

Élodie Philippe

► **To cite this version:**

Élodie Philippe. Contribution à la modélisation du transfert des nitrates au travers de la zone non saturée à l'échelle régionale : application au bassin de la Seine. Hydrologie. École Nationale Supérieure des Mines de Paris, 2011. Français. NNT : 2011ENMP0023 . pastel-00622536

HAL Id: pastel-00622536

<https://pastel.hal.science/pastel-00622536>

Submitted on 12 Sep 2011

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

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

École doctorale n°398 :
Géosciences et Ressources Naturelles

Doctorat ParisTech

T H È S E

pour obtenir le grade de docteur délivré par

l'École nationale supérieure des mines de Paris

Spécialité « Hydrologie et Hydrogéologie Quantitatives »

présentée et soutenue publiquement par

Élodie PHILIPPE

le 14 juin 2011

**Contribution à la modélisation du transfert des nitrates
au travers de la zone non saturée à l'échelle régionale :
application au bassin de la Seine**

Directeur de thèse : **Emmanuel LEDOUX**
Co-encadrement de la thèse : **Florence HABETS**

Jury

Mme. Christelle MARLIN, Professeur, Université d'Orsay
M. Emmanuel GILLE, Maître de conférences, HDR, Université Paul Verlaine Metz
M. Patrick LACHASSAGNE, Docteur, HDR, Danone Eaux France
Mme. Florence HABETS, Chargée de recherche CNRS, HDR, UPMC/MINES ParisTech
M. Emmanuel LEDOUX, Directeur de recherche, MINES ParisTech
M. Christian LEDUC, Directeur de recherche, IRD Montpellier

Présidente
Rapporteur
Rapporteur
Examinatrice
Examineur
Examineur

**T
H
È
S
E**

Remerciements

La thèse présentée dans ce manuscrit a été réalisée dans l'équipe Systèmes Hydrologiques et Réservoirs du centre de Géosciences de l'Ecole des Mines de Paris, sous la direction de Florence Habets et d'Emmanuel Ledoux. Je tiens à les remercier chaleureusement pour leur grande disponibilité, leurs conseils et l'intérêt constant qu'ils ont porté à ce travail durant tout mon parcours. Leurs encouragements et leurs motivations durant les périodes de doutes ont grandement contribué à l'achèvement de cette étude, et je les en remercie.

Je tiens également à remercier les membres de mon jury de thèse. Je remercie ainsi Christelle Marlin qui a accepté de le présider. J'adresse également mes remerciements à Emmanuel Gilles et à Patrick Lachassagne qui ont accepté d'être rapporteurs, ainsi qu'à Christian Leduc. Leurs questions et leurs corrections ont permis de considérablement enrichir ce manuscrit.

J'adresse également mes remerciements à Bruno Mary de l'INRA Laon pour la discussion enrichissante que nous avons eue à Turin et pour m'avoir fourni par la suite ses données sur lesquelles repose grandement cette étude.

Je garde de très bons souvenirs de cette période passée à Fontainebleau à SHR et je remercie tous les membres de cette équipe. Je remercie notamment Patrick Goblet, le directeur de cette équipe, pour m'y avoir accueillie et pour sa grande disponibilité à répondre à toutes mes questions.

J'adresse également mes remerciements à Pascal Viennot qui m'a beaucoup aidée dans la préparation de ma soutenance.

Je suis également très reconnaissante envers Dominique Vassiliadis dont la gentillesse et l'efficacité à résoudre les contraintes administratives ont beaucoup facilité ma vie en tant que doctorante.

Mes pensées vont bien évidemment également vers mes collègues de bureau et les autres thésards que j'ai côtoyés au cours de ces trois ans et demi à SHR. Je remercie ainsi Charlotte, Firas, Céline, Sandra, Léna, Kayad, Wilfried, Lauriane, Sarah et Ghassan. Je tiens également à exprimer ma sympathie à Jorge et Edwige avec qui j'ai vécu l'aventure ABCTEM, ainsi qu'à Béatrice et Louise pour nos séances de 'remotivation'.

Je remercie aussi le réseau R2DS Ile de France, le Programme de Recherche PIREN Seine et l'UMR Sisyphe pour leur soutien financier.

Pour terminer, je remercie affectueusement ma famille et mes amis pour leurs encouragements continus durant ces trois ans et demi.

Et bien sûr, j'ai une pensée toute particulière pour Charles dont la présence et le soutien de tous les instants m'accompagnent au quotidien.

Résumé

Les contaminations en nitrates observées depuis les années 1950 dans les hydrosystèmes constituent un enjeu environnemental important. Pour respecter les normes de qualité fixées (Directive Cadre sur l'Eau), une bonne connaissance de leur dynamique est donc nécessaire et passe par un travail de modélisation.

Nous nous focalisons ici sur la modélisation des transferts à travers la zone non saturée située entre le sol et la nappe. Ce milieu peut en effet générer des délais importants entre une contamination en surface et un impact sur la qualité des ressources en eau souterraines. Nous avons donc en premier lieu étudié précisément ces transferts via des tests effectués avec un modèle numérique à bases physiques. Nous avons également évalué avec ces tests l'impact du battement de nappe sur ces transferts.

Dans le modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée, l'approche utilisée pour simuler ces transferts est volontairement simplifiée pour limiter les temps de calcul et le nombre de paramètres requis. Nous proposons alors une évaluation et une amélioration de cette approche. Nous obtenons ainsi une dynamique de transfert des solutés se comparant mieux à ce qui est observé sur le terrain.

Une application du modèle à l'échelle régionale, sur le bassin de la Seine, a permis également de mettre en exergue les problèmes posés par l'initialisation des teneurs en nitrates dans le milieu souterrain avant les débuts de l'agriculture intensive. Nous proposons donc une méthode permettant de restituer l'évolution de la médiane des teneurs souterraines en nitrates dans les trois principaux aquifères de ce bassin (Oligocène, Eocène, Craie).

Mots-clés : Zone non saturée, contamination azotée, nitrates, modèle conceptuel, modèle à bases physiques, évaluation numérique

Abstract

Nitrate contaminations observed since the 1950s in hydrosystems are an important environmental issue. To meet the quality standards (Water Framework Directive), an understanding of their dynamics is thus necessary and requires modelling work.

We focus on transfer modelling through the unsaturated zone between the soil and groundwater. This medium can indeed generate significant delays between surface contamination and impact on the quality of groundwater resources. We therefore firstly studied precisely these transfers through sensitivity analyses with a physically-based model. We have also assessed the impact of water table fluctuations on these transfers within this model.

In the integrated model of hydrosystems Eau-dyssée, the approach used to simulate these transfers is deliberately simplified to reduce computation time and the number of required parameters. We propose an evaluation and an improvement of this approach that permitted us to obtain a better solute transfer dynamics compared to field observations.

An application of the model at the regional scale of the Seine basin, has also highlight the problems with the initialization of groundwater nitrate concentrations before the beginnings of intensive agriculture. We therefore developed a method to obtain the evolution of the median groundwater nitrate concentrations in the three main aquifers of this basin (Oligocene, Eocene, Chalk).

Key-words : Unsaturated zone, nitrogen contamination, nitrate, conceptual model, physically-based model, computational assessment

Table des matières

Introduction	3
1 La problématique des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes	7
1.1 Mise en évidence d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes	7
1.2 Les conséquences d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes	12
1.2.1 Les conséquences environnementales	12
1.2.2 Les conséquences sur la santé humaine	14
1.3 La législation en vigueur	15
1.4 Les sources des contaminations en nitrates	16
1.4.1 Les sources urbaines	16
1.4.2 Les sources agricoles	18
1.5 Le transfert des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes	22
1.5.1 Le cycle de l'azote	22
1.5.2 Les transferts de nitrates dans un hydrosystème	23
1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées	26
1.6.1 Les données agricoles	26
1.6.2 Le transfert des nitrates dans le sol	27
1.6.3 Le transfert des solutés à travers la zone non saturée	28
1.6.4 La dynamique de transfert des solutés dans la zone saturée	29
1.6.5 La dénitrification	30
1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation	31
1.7.1 La classification des modèles	32
1.7.1.1 Les modèles déterministes	32

1.7.1.2	Les modèles stochastiques	33
1.7.2	La modélisation des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes	34
1.7.2.1	La modélisation des transferts de nitrates	34
1.7.2.2	La modélisation des transferts d'eau	36
1.7.2.3	Les couplages	37
1.7.3	Utilisation de ces modèles pour tester des scénarios et entreprendre des actions compensatoires	38
2	La modélisation de la contamination en nitrates des hydrosystèmes : nos outils disponibles	43
2.1	La modélisation des transferts d'eau et de masses dans les aquifères : NEWSAM	44
2.1.1	Les transferts d'eau	44
2.1.2	Les transferts de solutés	46
2.2	La modélisation des transferts d'eau dans un hydrosystème : MODCOU	47
2.2.1	Les transferts d'eau conjoints en rivières et souterrains : MODCOU	48
2.2.2	Le bilan hydrique : MODSUR	50
2.2.3	Les transferts d'eau à travers la zone non saturée : <i>NONSAT</i>	52
2.3	La modélisation de la contamination en nitrates dans un hydrosystème avec STICS- MODCOU-NEWSAM	54
2.4	Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM	56
2.4.1	Evaluation des transferts d'eau	57
2.4.2	Evaluation des transferts de nitrates	58
2.5	Un outil intégré des hydrosystème en développement : Eau-dyssée	64
3	Les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée : observations et expérimentations numériques	71
3.1	Etat des connaissances sur la zone non saturée	72
3.1.1	Les données observées	72
3.1.1.1	Description de la zone non saturée	72
3.1.1.2	Les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée	72
3.1.2	La modélisation des transferts à travers la zone non saturée	75
3.1.2.1	La modélisation conceptuelle	75
3.1.2.2	La modélisation à bases physiques	76

3.2	Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec <i>METIS</i>	79
3.2.1	Validation de <i>METIS</i>	80
3.2.1.1	Site d’Haussimont	85
3.2.1.2	Site de Thibie	87
3.2.2	Résultats des expérimentations numériques	88
3.2.2.1	La dynamique des transferts d’eau et de solutés à travers la zone non saturée	89
3.2.2.2	Influence du battement de nappe sur les transferts à travers la zone non saturée	96
4	Amélioration de la simulation des transferts à travers la zone non saturée dans le modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée	109
4.1	Description du modèle conceptuel <i>NONSAT_{SW}</i>	110
4.2	Evaluation du modèle conceptuel de zone non saturée <i>NONSAT_{SW}</i>	119
4.2.1	La méthodologie de comparaison	119
4.2.2	Résultats des tests de comparaison	122
4.3	Amélioration de <i>NONSAT_{SW}</i>	127
4.3.1	Introduction d’un profil de saturation	127
4.3.2	Evolution de la vitesse de percolation dans la zone non saturée	131
4.4	Evaluation du modèle <i>NONSAT_{VG}</i>	137
4.4.1	Evaluation au niveau de la parcelle expérimentale	137
4.4.1.1	Méthodologie	137
4.4.1.2	Site d’Haussimont	138
4.4.1.3	Site de Thibie	140
4.4.1.4	Tests additionnels	141
4.4.2	Evaluation de <i>NONSAT_{VG}</i> à l’échelle du bassin de la Seine	144
4.4.2.1	La simulation des variations de niveaux piézométriques	144
4.4.2.2	La simulation des transferts de polluants à travers la zone non saturée	146
4.4.2.3	Les transferts de polluants dans la nappe	150
	Conclusions et Perspectives	167

A	Description des sites expérimentaux	171
A.1	Généralités	171
A.1.1	Le climat	171
A.1.2	La géologie	172
A.2	Propriétés physico-chimiques de la Craie	172
A.2.1	Composition chimique et minéralogique	172
A.2.2	Propriétés physiques (Durand, 1979)	172
A.3	Les transferts à travers la zone non saturée crayeuse	173
A.3.1	Description des zones non saturées	173
A.3.2	La dynamique des transferts à travers la zone non saturée	173
A.3.3	Le dispositif expérimental	174
B	Article publié dans le cadre de la thèse	177
	Bibliographie	207

Table des figures

1.1	Évolution entre 1975 et 1999 de la concentration en nitrates observée dans un piézomètre sur le bassin versant de Lynden North (Etat de Washington, Etats-Unis), d'après Almasri et Kaluarachchi (2004). MCL=Maximum Contaminant Level (Concentration Maximale Autorisée en nitrates)	8
1.2	Concentration en nitrates dans la rivière Stour à Langham, Royaume-Uni, d'après Croll et Hayes (1988)	9
1.3	Evolution dans le temps des concentrations en nitrates dans un aquifère triasique, Royaume-Uni, d'après Croll et Hayes (1988)	9
1.4	Evolution des concentrations en nitrates dans l'aquifère de la Craie à Barrow, Royaume-Uni, d'après Beeson et Cook (2004)	9
1.5	Évolution des concentrations en nitrates dans l'eau des granites de Lizio (56), d'après Landreau et Roux (1984)	10
1.6	Evolution des concentrations en nitrates dans la rivière le Blavet (56), d'après Guillaud et Bouriel (2007)	10
1.7	Évolution des concentrations en nitrates dans le calcaire de Champigny à Bailly-Carrois (77) entre 1967 et 1983, d'après Landreau et Roux (1984)	10
1.8	Evolution de la concentration mesurée dans les captages de la Traconne (Viennot, 2008)	11
1.9	Evolution de la concentration en nitrates dans la Seine à Ivry entre 1951 et 1998, d'après Billen <i>et al.</i> (2001)	11
1.10	Dépôt d'algues vertes sur l'estran, bretagne-environnement.org	13
1.11	Bloom algal de dinoflagellate <i>Lingulodinium polyedrum</i> le long de la côte de La Jolla, San Diego County. Photo : Kai SchumannDépôt. http://oceanservice.noaa.gov/hazards/hab/	13

TABLE DES FIGURES

1.12	Représentation schématique de la circulation des eaux en zone urbaine sous des conditions d'infiltration nulle, d'après Bernhardt <i>et al.</i> (2008)	16
1.13	Représentation schématique de la circulation des eaux en zone urbaine sous des conditions orageuses, d'après Bernhardt <i>et al.</i> (2008)	17
1.14	Evolution des quantités de fertilisants consommés et des rendements associés en Chine entre 1949 et 1997, d'après Zhu et Chen (2002)	19
1.15	Evolution des quantités de fertilisants appliqués aux Etats-Unis entre 1960 et 2008, sources : USDA http://www.ers.usda.gov/Data/FertilizerUse/	19
1.16	Evolution de la consommation des fertilisant par l'agriculture française (source UNIFA : http://www.unifa.fr/)	20
1.17	Evolution de la production totale en céréales en France entre 1989 et 2007, en milliers de tonnes (source AGRESTE : http://www.agreste.agriculture.gouv.fr)	20
1.18	Surplus d'azote estimés sur le bassin de la Seine-Normandie en 2004, d'après AESN (2007)	21
1.19	Relation entre les quantités moyennes annuelles d'azote sous forme nitrates épandues sur les terres agricoles et la concentration moyenne souterraine en nitrates pour plusieurs bassins versants à Whatcom County dans l'Etat de Washington, Etats-Unis (Almasri et Kaluarachchi, 2004)	21
1.20	Cycle de l'azote dans un système de production agricole (source INRA : http://www.inra.fr/)	22
1.21	Représentation simplifiée des transferts d'azote dans un hydrosystème (en rouge) et localisation des processus de dénitrification (en vert)	24
1.22	Illustration de la variation des grandes dominantes agricoles sur le bassin de la Seine entre les années 1970 et 1988, d'après les Recensements Généraux de l'Agriculture (Viennot, 2008)	28
1.23	Concentration en azote sous forme nitrates en fonction de la profondeur d'échantillonnage dans un aquifère de l'Etat de Washington, d'après Almasri et Kaluarachchi (2004)	30
2.1	Principe du maillage multicouche adopté dans NEWSAM	44
2.2	Structure du modèle hydrogéologique MODCOU (Ledoux, 1980)	48
2.3	Les trois types de connexions nappe-rivière gérés par MODCOU	49
2.4	Principe du bilan hydrique effectué dans MODSUR	50
2.5	Représentation schématique de la cascade de Nash dans une zone non saturée	53

2.6	Représentation du couplage entre le modèle agronomique STICS, le modèle hydrogéologique MODCOU et le modèle hydrogéologique NEWSAM, d'après Gomez (2002)	55
2.7	Vue tridimensionnelle des trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine (d'après Viennot (2008))	57
2.8	Comparaison entre des cotes piézométriques observées sur le bassin de la Seine et simulées par STICS-MODCOU-NEWSAM entre 1984 et 2005 (Viavattene, 2006)	58
2.9	Répartition géographique des captages de la bases de données ONQES sur les aquifères de la Craie, de l'Eocène et de l'Oligocène (d'après Viavattene (2006))	59
2.10	Evolution de la médiane des concentrations observée (section de droite) dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine (Oligocène en bleu, Eocène en vert et Craie en rouge) et simulée par STICS-MODCOU-NEWSAM (Viennot, 2008)	60
2.11	Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de l'Oligocène (Viennot, 2008)	61
2.12	Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de l'Eocène (Viennot, 2008)	62
2.13	Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de la Craie (Viennot, 2008)	63
2.14	Comparaison entre MODCOU et MODCOU dans Eau-dyssée (Habets <i>et al.</i> , 2010)	65
3.1	Evolution de la perméabilité relative (à gauche) et de la succion (à droite) en fonction de la saturation en eau du milieu, pour différentes valeurs de paramètres	79
3.2	Localisation géographique des sites de suivis des concentrations en nitrates dans la zone non saturée crayeuse à Haussimont et Thibie, France (en rouge). En noir est représentée la délimitation du bassin de la Seine.	81
3.3	Représentation des profils de concentrations en nitrates observés à Haussimont de 1982 à 2003 entre 1 et 20 m de profondeur.	82
3.4	Représentation des profils de concentrations en nitrates observés à Thibie de 1990 à 2008 entre la surface et 6 m de profondeur.	82
3.5	Evolution des quantités totales de nitrates accumulées entre 1 et 20 m de profondeur dans la ZNS crayeuse d'Haussimont entre 1982 et 2004	86
3.6	Propagation au cours du temps d'un pic de solutés dans une zone non saturée de 20 m de profondeur sur le site d'Haussimont entre 1982 et 2000 (en noir), et simulée par METIS (en rouge).	87

3.7	Propagation au cours du temps d'un pic de solutés dans une zone non saturée de 20 m de profondeur sur le site de Thibie entre 1990 et 2003 (en noir), et simulée par METIS (en rouge).	88
3.8	Représentation schématique des conditions numériques et aux limites imposées pour comprendre la dynamique des transferts à travers la ZNS dans METIS en considérant un niveau de la nappe constant.	91
3.9	Evolution de la saturation dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite) à l'équilibre hydrostatique pour différentes profondeurs de la nappe WT (m).	92
3.10	Evolution de la saturation dans la zone non saturée de type limon initialisée à l'équilibre hydrostatique d'après les paramètres définis par Carsel et Parrish (1988) avec un niveau de la nappe à 20 m de profondeur. La colonne tend vers un profil à l'équilibre dynamique correspondant à une infiltration constante de 0,52 mm.jour ⁻¹ , à différentes dates t en jours.	92
3.11	Evolution de la saturation dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite) à l'équilibre hydrostatique et à l'équilibre de flux non nul pour différentes valeurs de conductivités hydrauliques à saturation K_s	93
3.12	Evolution des saturations et des transferts de solutés dans la zone non saturée de type limon d'après les paramètres définis par Carsel et Parrish (1988) avec un niveau de la nappe à 20 m de profondeur, à différents dates t en jours.	94
3.13	Evolution de la profondeur d'un pic de solutés dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite), selon deux valeurs de conductivité hydraulique à saturation K_s et pour des niveaux piézométriques à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur. La ligne pointillée représente les temps de transfert des solutés lorsque l'on considère une vitesse de transfert constante dans la zone non saturée avec un niveau piézométrique à 20 m de profondeur.	95
3.14	Représentation schématique des conditions initiales et aux limites imposées pour mesurer l'influence du battement de nappe sur les transferts d'eau.	99
3.15	Coefficient de répartition $Coe_{f_{repart}}$ des volumes d'eau entre la zone non saturée et la zone saturée au bout de 1 jour de simulation dans le cas d'une montée (lignes continues) ou d'une descente de nappe (lignes pointillées) dans un milieu type limon (gauche) ou craie (droite).	100
3.16	Représentation schématique des conditions initiales et aux limites imposées pour mesurer l'influence du battement de nappe sur les transferts de solutés.	102

3.17 Temps de transfert du pic de solutés de la surface vers la nappe pour différentes épaisseurs de zones non saturées de type limon (gauche) et craie (droite) et 2 valeurs de conductivité hydraulique à saturation K_s . L'abscisse des segments verticaux représente ce même temps de transfert pour une variation annuelle périodique de la nappe d'amplitude égale à l'ordonnée correspondant à la longueur du segment. 103

3.18 Evolution de la saturation le long d'une zone non saturée de type limon avec un $K_s = 2,89.10^{-6}m.s^{-1}$, pour un niveau de la nappe constant à 15 m de profondeur (noir) et un niveau de la nappe fluctuant annuellement à $\pm 3m$ autour de ce niveau moyen (rouge) à des dates aléatoires. 104

3.19 A gauche, évolution de la côte piézométrique à Bussy-le-Château entre 1970 et 1991 (ADES) et à droite, tendance à long-terme au piézomètre de Montereau-sur-le-Jard (données Ministère de l'Ecologie-BRGM) 105

4.1 Représentation schématique des transferts de solutés conservatifs dans la cascade de Nash 110

4.2 Circulation de l'eau à travers des zones non saturées obtenue avec $NONSAT_{SW}$ pour des colonnes de surface unité. L'infiltration est constante et égale à $1,7 mm.jour^{-1}$ (ligne noire continue horizontale). Nous considérons un V_{min} de $0,2 m^3.m^{-2}$ et un nombre maximal de strates par réservoir de 50. Sur la Figure a, le temps de percolation τ varie de 2 à 10 jours pour une zone non saturée de 4 réservoirs. Sur la Figure b, l'épaisseur des zones non saturées varie de 2 à 10 réservoirs N pour un temps de percolation τ de 5 jours. 114

4.3 Circulation de l'eau à travers trois colonnes non saturées simulées par $NONSAT_{SW}$ en considérant une infiltration constante de $1,7 mm.jour^{-1}$ (ligne noire continue horizontale). Chaque colonne est caractérisée par un certain nombre de réservoirs N et un certain temps de percolation τ 115

4.4 Circulation des solutés à travers des zones non saturées obtenue avec $NONSAT_{SW}$ pour des colonnes de surface unité. L'infiltration est constante et égale à $1,7 mm.jour^{-1}$. Le flux massique entrant est également constant et égal à $0,051 g.m^{-2}.jour^{-1}$ (ligne noire continue). Nous considérons un V_{min} de $0,2 m^3.m^{-2}$ et un nombre maximal de strates par réservoir de 50. Sur la Figure a, le temps de percolation τ varie de 2 à 10 jours pour une zone non saturée de 4 réservoirs. Sur la Figure b, l'épaisseur des zones non saturées varie de 2 à 10 réservoirs pour un temps de percolation τ de 5 jours. . . 116

4.5 Circulation des solutés à travers la zone non saturée obtenue avec *NONSAT_{SW}* pour 4 colonnes de 4 réservoirs, avec un τ de 5 jours, un nombre maximal de strates par réservoir de 50 et un V_{min} variant de 0,02 à 0,08 $m^3.m^{-2}$. L'infiltration est constante et égale à 1,7 $mm.jour^{-1}$. Le flux massique entrant est également constant et égal à 0,051 $g.m^{-2}.jour^{-1}$ (ligne noire continue). 117

4.6 Evolution des quantités en sortie d'une zone non saturée de 5 réservoirs, avec un $V_{min} = 0,04m^3.m^{-2}$, un $\tau = 5 jours$, une infiltration de 1,70 $mm.jour^{-1}$, et un nombre maximal de strates par réservoirs variant de 10 à 50. 118

4.7 Transfert des solutés dans *METIS* (rouge) et *NONSAT_{SW}* (noir-triangle) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans des zones non saturées de type limon et craie (Gomez, 2002) 123

4.8 Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique (lignes pointillées) dans *METIS* (lignes rouges) et dans *NONSAT_{SW}* (lignes noires) pour les zones non saturées de type limon et craie. 125

4.9 Volume vidangé de la colonne dans *NONSAT_{SW}*(noir-triangle) et *METIS* (rouge) pour des zones non saturées de type craie et limon. 126

4.10 Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique de flux non nul (lignes pointillées) dans *METIS* (lignes rouges), dans *NONSAT_{SW}* (ligne noires-triangles) et dans *NONSAT_{SWmodif}* (lignes vertes-ronds) pour les zones non saturées limon et craie. 129

4.11 Transfert des solutés dans *NONSAT_{SW}* (noir-triangle), *METIS* (rouge) et *NONSAT_{SW}* modifié (vert-rond) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans les zones non saturées de type craie et limon définies par Gomez (2002) 130

4.12 Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique de flux de non nul (lignes pointillées) dans *METIS* (lignes rouges), dans *NONSAT_{SW}* (ligne noires-triangles), dans *NONSAT_{SWmodif}* (lignes vertes-ronds) et dans *NONSAT_{VG}* (orange) pour les zones non saturées limon et craie. 132

4.13 Volume percolant de la colonne dans *NONSAT_{SW}* (noir-triangles), *NONSAT_{VG}* (orange-tiret) et *METIS* (rouge) dans des zones non saturées de type limon et craie. 133

4.14 Transfert des solutés dans *METIS* (rouge), *NONSAT_{SW}* (noir-triangle), *NONSAT_{SWmodif}* (vert-rond) et *NONSAT_{VG}* (orange pointillé) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans des zones non saturées de type limon et craie. 134

4.15 Temps de transfert des solutés à chaque section de 5 m et pour différentes profondeurs de nappe (WT) en m, simulé par METIS (rouge), NONSAT_{VG}(orange) et NONSAT_{SW} (noir) dans une zone non saturée de type limon (gauche) et de type craie (droite) 135

4.16 Transfert des solutés observé sur le site d’Haussimont (courbe noire avec des triangles) et simulé par METIS (rouge), NONSAT_{VG} (orange continu avec le V_{min} à l’équilibre hydrostatique et pointillé avec le V_{min} à l’équilibre dynamique) et NONSAT_{SW} (vert) entre 1982 et 2003. 139

4.17 Transfert des solutés observé sur le site de Thibie (courbe noire avec des triangles) et simulé par METIS (rouge), NONSAT_{VG} (orange continu avec le V_{min} à l’équilibre hydrostatique et pointillé avec le V_{min} à l’équilibre dynamique), et NONSAT_{SW} (vert) entre 1982 et 2003. 141

4.18 Erreur de simulation du pic de nitrates dans NONSAT_{SW}, NONSAT_{VG} et METIS de 1982 à 2000 à Haussimont et Thibie, calculée selon l’Equation 4.7 dans une ZNS crayeuse, avec les paramètres définis par Brouyère *et al.* (2004). QI_{norm} est obtenu avec l’infiltration de MODCOU, $QI_{1.25}$ avec une infiltration 25 % plus importante, $QI_{0.75}$ avec une infiltration 25 % moins importante. Clay correspond à la série réalisée avec les paramètres de l’argile (Tableau 4.2). Avec l’infiltration de MODCOU, les points $V_{min}x$ sont obtenus avec un volume minimal dans les réservoirs égal à x ($m^3.m^{-2}$) et les points τx sont obtenus avec un temps de percolation $\tau=x$ jours. . . . 142

4.19 Coupe générale transversale du bassin de Paris (Gomez, 2002). 144

4.20 Evolution de la profondeur de la nappe à Mainvilliers observée entre 1981 et 2004 et simulée par NONSAT_{SW} et NONSAT_{VG}. 145

4.21 RMSE en fonction du biais calculé par NONSAT_{SW} et NONSAT_{VG} pour 32 piézomètres sur le bassin de la Seine entre 1981 et 2004. 145

4.22 Infiltration moyenne annuelle calculée sur la période 1971-2006 sur le bassin de la Seine avec le module MODCOU 147

4.23 Distribution et moyenne (rouge) de l’infiltration moyenne annuelle calculée sur la période 1971-2006 sur le bassin de la Seine avec le module MODCOU 148

4.24 Vitesse de transfert des solutés à travers une ZNS de type limon et craie en fonction de l’infiltration moyenne annuelle. 148

4.25 Répartition des surfaces du bassin de la Seine selon le temps requis en années pour une sortie de nitrates de la ZNS. Les lignes pointillées marquent le temps nécessaire pour que 50 % des ZNS du bassin de la Seine aient transmis les nitrates à la nappe. Cette répartition ne prend pas en compte la partie Est du bassin.	149
4.26 Temps en années requis pour une sortie de 50% des nitrates injectés en entrée de la ZNS avec $NONSAT_{SW}$	150
4.27 Temps en années requis pour une sortie de 50% des nitrates injectés en entrée de la ZNS avec $NONSAT_{VG}$	150
4.28 Concentration sous-racinaire moyenne sur la période 1971-1979 sur le bassin de la Seine calculée avec l'outil STICS-MODCOU.	151
4.29 Evolution de la médiane des concentrations en nitrates observées (traits épais) et simulée (traits fins) avec les modèles de transfert à travers la ZNS $NONSAT_{SW}$ à gauche et $NONSAT_{VG}$ à droite, entre 1971 et 2004. L'initialisation consiste à répéter pendant 35 ans le forçage d'eau et de nitrates moyen entre 1971 et 1979. La droite pointillée sépare la phase d'initialisation, caractérisée par des flux d'eau et de nitrates constants dans le temps mais variant dans l'espace, et la phase avec une variation à la fois temporelle et spatiale des flux d'eau et de nitrates.	152
4.30 Evolution de la médiane des concentrations en nitrates dans les nappes de l'Oligocène (noir), de l'Eocène (rouge) et de la Craie (vert) en considérant une concentration en nitrates sous-racinaire dans les mailles de surface alimentant respectivement l'Oligocène, l'Eocène et la Craie de 25 mg.L^{-1} , 21 mg.L^{-1} et 23 mg.L^{-1} . La concentration sous-racinaire est pondérée par la surface agricole dans chaque maille.	155
4.31 Détermination du flux de nitrates sous-racinaire entre 1935 et 1970 à partir d'une droite linéaire.	156
4.32 Evolution de la médiane des concentrations en nitrates observée (section épaisse) et simulée avec les modèles de transferts à travers la ZNS $NONSAT_{VG}$, entre 1935 et 2004.	156
4.33 Concentration observée en 2000 dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine, d'après la base de données ADES.	158
4.34 Ecart entre les concentrations simulées par $NONSAT_{SW}$ et observées en 2000.	159
4.35 Ecart entre les concentrations simulées par $NONSAT_{VG}$ et observées en 2000.	159
4.36 Score calculé pour l'année 2000 avec Eau-dyssée.	160

4.37 Evolution au cours du temps des concentrations en nitrates observées sur le terrain (points) et modélisées en considérant pour simuler les transferts à travers la zone non saturée $NONSAT_{SW}$ (noir) ou $NONSAT_{VG}$ (orange). Codes bss : 00743X0085 (a), 02932X0009 (b), 02567X0019 (c), 02582X0012 (d), 04021X0034 (e) 161

4.38 Evolution de la médiane des concentrations dans la nappe de l'Oligocène pour deux scénarios agricoles ('laisser faire (LF)' et 'arrêt des intrants en surface (AIS)') et en considérant un arrêt total des intrants transférés de la zone non saturée vers la nappe (AIN) avec $NONSAT_{SW}$ (noir) et $NONSAT_{VG}$ (orange) 162

TABLE DES FIGURES

Liste des tableaux

3.1	Valeurs moyennes des paramètres de capacité de rétention et de conductivité hydraulique selon Brouyère (2006) pour la matrice crayeuse. θ_r et θ_s sont les teneurs en eau minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$).	84
3.2	Conditions expérimentales dans METIS des tests de traçage sur Haussimont et Thibie	85
3.3	Valeurs moyennes des paramètres selon Carsel et Parrish (1988) pour 12 groupes texturaux de sols. θ_r et θ_s sont la teneur en eau minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$)	89
3.4	Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS sur les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée	90
3.5	Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS pour étudier les transferts d'eau dans la zone non saturée en considérant une fluctuation du niveau de la nappe	98
3.6	Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS sur les transferts de solutés en considérant une fluctuation du niveau de la nappe	101
4.1	Conditions expérimentales des tests effectués avec $NONSAT_{SW}$ sur les transferts d'eau et de solutés	113

- 4.2 Valeurs moyennes des paramètres de capacité de rétention et de conductivité hydraulique selon Carsel et Parrish (1988) pour 12 groupes texturaux de sols et selon Brouyère (2006) pour la matrice crayeuse. θ_r et θ_s sont la teneur en eau volumique minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$). Dans la dernière colonne est faite la correspondance avec les catégories de zones non saturées définies par Gomez (2002) sur le bassin de la Seine. 121
- 4.3 Paramètres utilisés dans *NONSAT_{SW}* et *METIS* pour les tests de comparaison. N est le nombre de réservoirs, τ et le temps de percolation (jours), *thick* est l'épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m^3.m^{-2}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté ($10^{-2}m$) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$). 122
- 4.4 Paramètres utilisés dans *NONSAT_{SW}*, *NONSAT_{SWmodif}* et *METIS* pour les tests de comparaison. N est le nombre de réservoirs, τ le coefficient de vidange (jours), *thick* est l'épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m.m^{-1}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté ($10^{-2} m$) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$). 128
- 4.5 Vitesse de transfert moyenne des nitrates à travers la ZNS ($m.an^{-1}$) obtenue avec *NONSAT_{SW}*, *NONSAT_{VG}* et *METIS* pour atteindre une profondeur de la ZNS donnée *section* (m), en considérant une profondeur de la nappe WT (m) pour les cas simples. 136
- 4.6 Paramètres utilisés dans *NONSAT_{SW}*, *NONSAT_{VG}* et *METIS* pour les tests de comparaison sur les sites d'Haussimont et Thibie. N est le nombre de réservoirs, τ le coefficient de vidange (jours), *thick* est l'épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m^{-3}.m^{-2}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté ($10^{-2} m$) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$). 138

LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES TABLEAUX

Introduction

Depuis la fin des années 1950 environ, des contaminations diffuses en nitrates d'origine agricole ont été mises en évidence dans des hydrosystèmes de par le monde. Les teneurs en nitrates dans les eaux souterraines et de surface ne cessent en effet d'augmenter de manière quasi-linéaire depuis cette période. Or ces contaminations dans les bassins versants posent des problèmes environnementaux (développement de blooms algaux) et humains (les concentrations peuvent être supérieures au seuil de potabilité fixé à 50 mg.L^{-1}). Des législations ont donc été mises en place pour limiter ces contaminations et enrayer leur prolifération. Ainsi la Directive Cadre sur l'Eau (2000) impose à tous les pays membres de l'Union Européenne d'atteindre un bon état écologique de leurs eaux d'ici 2015.

Pour respecter ces objectifs imposés, la compréhension de l'évolution dans le temps et dans l'espace de ces contaminations est nécessaire. Des travaux de modélisation ont donc été effectués pour appréhender ces dynamiques et tester l'impact d'éventuelles mesures compensatoires.

Un tel travail de modélisation a été effectué dans le cadre du programme PIREN Seine, le Programme Interdisciplinaire de Recherche sur l'ENVironnement de la Seine. Ce projet vise à développer, à partir de mesures de terrain et de travaux de modélisation, une vision d'ensemble du fonctionnement du système formé par le réseau hydrographique de la Seine, son bassin versant et la société humaine qui l'investit. Au sein de ce programme se côtoient ainsi l'Agence de l'Eau Seine-Normandie, des utilisateurs des ressources en eau comme les producteurs d'eau potable et des scientifiques.

C'est dans ce cadre qu'a été mise au point la chaîne de modélisation STICS-MODCOU-NEWSAM qui simule l'impact des contaminations diffuses azotées d'origine agricole sur la qualité des ressources souterraines dans le bassin de la Seine. Cet outil restitue correctement l'évolution de la médiane des concentrations en nitrates dans les principaux aquifères de ce bassin. Cependant, localement, des écarts importants entre concentrations en nitrates observées et simulées sont mises en évidence. Pour tenter d'améliorer la qualité de modélisation des concentrations en nappe dans cette chaîne de modélisation, des modifications y ont été et sont encore apportées pour prendre en compte des

phénomènes qui étaient jusque-là ignorés, ou négligés, et susceptibles d'influencer la dynamique de contamination souterraine en nitrates. Ces modifications s'effectuent dans le cadre du développement de l'outil intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée qui vise à coupler des modèles existants pour tester divers scénarios : climatiques, agricoles, économiques... Ce travail de thèse s'inscrit dans la mise en place de cet outil intégré des hydrosystèmes. Nous nous sommes en effet intéressés ici à la modélisation des transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée et à leur impact sur la dynamique des contaminations souterraines en nitrates. En effet, tout d'abord, de par les faibles vitesses de transfert qui règnent dans ce milieu, des délais très importants entre une contamination en surface et son impact sur les ressources souterraines sont mis en évidence. Puis la zone non saturée à sa base peut être sujette à un lessivage des solutés lors de variations du niveau de la nappe. Ce milieu influence donc de manière significative la dynamique d'une contamination azotée dans un bassin versant et ne doit pas être négligé dans des travaux de modélisation.

Nous présentons donc dans une première partie un état des lieux des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes, avec une description de leurs causes, leurs impacts et leurs dynamiques.

Dans une seconde partie, nous présentons tout d'abord une description et une évaluation de la chaîne de modélisation STICS-MODCOU-NEWSAM. Puis nous décrivons le modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée en cours de développement.

Nous focalisons notre troisième partie sur une description de la zone non saturée. Un état des lieux de données observées, ainsi que des résultats de tests de sensibilité effectués avec le modèle à bases physiques *METIS* pour mieux comprendre la dynamique des transferts à travers ce milieu, notamment en considérant un battement de la nappe, constituent ce chapitre.

Enfin, dans une quatrième partie et en nous inspirant des résultats obtenus dans la troisième partie, nous procédons à une évaluation et à une amélioration du modèle de transfert à travers la zone non saturée disponible dans Eau-dyssée.

LISTE DES TABLEAUX

LISTE DES TABLEAUX

Chapitre 1

La problématique des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

Depuis le début des années 50, des concentrations en nitrates de plus en plus élevées ont été mises en évidence dans des eaux de surface et souterraines. Ce chapitre a pour objectif d'expliquer les causes et les impacts de ces contaminations, de comprendre leur dynamique dans un hydrosystème et de présenter les actions et les outils qui ont été mis en place pour appréhender et contrecarrer ces contaminations.

1.1 Mise en évidence d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

Selon le Comité National Français des Sciences Hydrologiques (CNFSH), un hydrosystème est "une portion de l'espace où, dans les trois dimensions, sont superposés les milieux de l'atmosphère, de la surface du sol et du sous-sol, à travers lesquels les flux hydriques sont soumis à des modes particuliers de circulation. L'hydrosystème est le siège de transformations car, en toutes ses phases, le cycle de l'eau a d'étroits rapports avec d'autres cycles physiques, géochimiques et biologiques de l'environnement terrestre." Dans notre étude, nous appliquons cette notion d'hydrosystème en surface à un bassin versant, qui est un territoire délimité par des lignes de crêtes et dont les eaux alimentent un exutoire commun. A cela s'ajoute une composante souterraine : l'hydrosystème inclut en effet l'aquifère alimenté par le bassin versant en question, aquifère dont la surface est définie par les limites géologiques.

1.1 Mise en évidence d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

Dans de nombreux bassins versants à travers le monde, une augmentation des concentrations en nitrates a été mise en évidence, augmentation qui s'est amorcée il y a plusieurs dizaines d'années. Nous répertorions ci-dessous quelques exemples d'évolution de ces concentrations de par le monde pour mesurer l'ampleur de ce phénomène.

Ainsi, Almasri et Kaluarachchi (2004) observent une augmentation par 2 des concentrations en nitrates dans un aquifère de type alluvio-sableux aux États-Unis entre 1975 et 2000 (Figure 1.1).

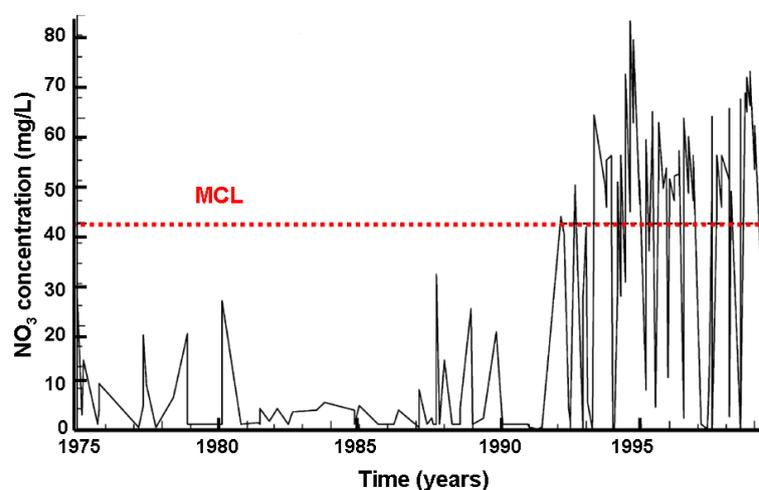


FIGURE 1.1: Évolution entre 1975 et 1999 de la concentration en nitrates observée dans un piézomètre sur le bassin versant de Lynden North (Etat de Washington, Etats-Unis), d'après Almasri et Kaluarachchi (2004). MCL=Maximum Contaminant Level (Concentration Maximale Autorisée en nitrates)

Au Royaume-Uni, Croll et Hayes (1988) ont également mis en évidence un doublement des teneurs en nitrates dans la rivière Stour entre 1937 et 1983 (Figure 1.2) et une augmentation d'environ 50% de ces teneurs dans un aquifère sableux entre 1955 et 1983 (Figure 1.3). Beeson et Cook (2004) ont de même étudié cette contamination dans un aquifère crayeux du Royaume-Uni entre 1981 et 2003 et ont mis en évidence une augmentation de 30% des concentrations en nitrates (Figure 1.4).

1.1 Mise en évidence d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

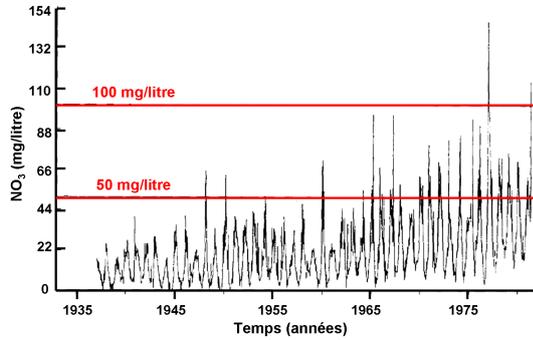


FIGURE 1.2: Concentration en nitrates dans la rivière Stour à Langham, Royaume-Uni, d'après Croll et Hayes (1988)

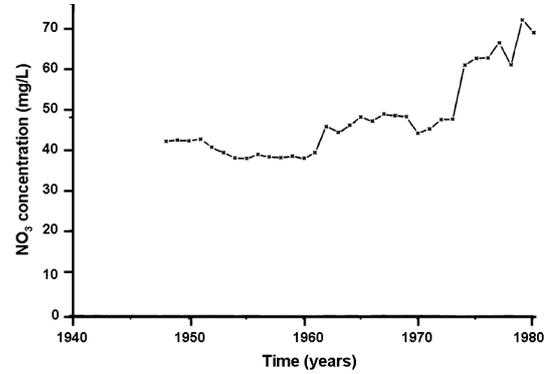


FIGURE 1.3: Evolution dans le temps des concentrations en nitrates dans un aquifère triasique, Royaume-Uni, d'après Croll et Hayes (1988)

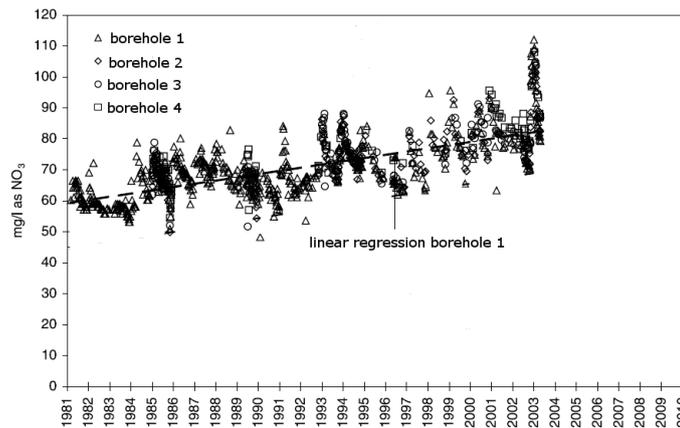


FIGURE 1.4: Evolution des concentrations en nitrates dans l'aquifère de la Craie à Barrow, Royaume-Uni, d'après Beeson et Cook (2004)

Cette contamination azotée a également été mise en évidence en France. Landreau et Roux (1984) ont répertorié cette contamination sur plusieurs hydrosystèmes de l'hexagone. Les Figures 1.5 et 1.6 illustrent ainsi en Bretagne un triplement et un doublement des concentrations en nitrates dans respectivement un aquifère granitique et une rivière.

1.1 Mise en évidence d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

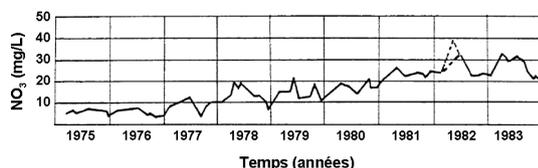


FIGURE 1.5: Évolution des concentrations en nitrates dans l'eau des granites de Lizio (56), d'après Landreau et Roux (1984)

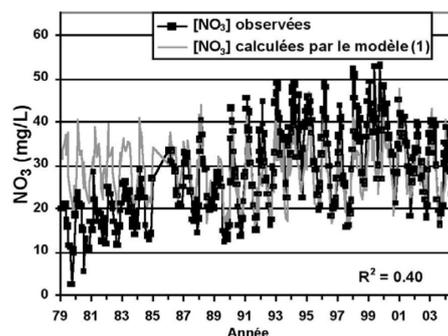


FIGURE 1.6: Evolution des concentrations en nitrates dans la rivière le Blavet (56), d'après Guillaud et Bouriel (2007)

Le bassin de la Seine est également touché par cette contamination en nitrates (Billen *et al.*, 2001, Viennot *et al.*, 2006, Viennot, 2008). En Seine-et-Marne, à Bailly-Carrois, les concentrations souterraines en nitrates ont triplé entre 1967 et 1983 (Figure 1.7).

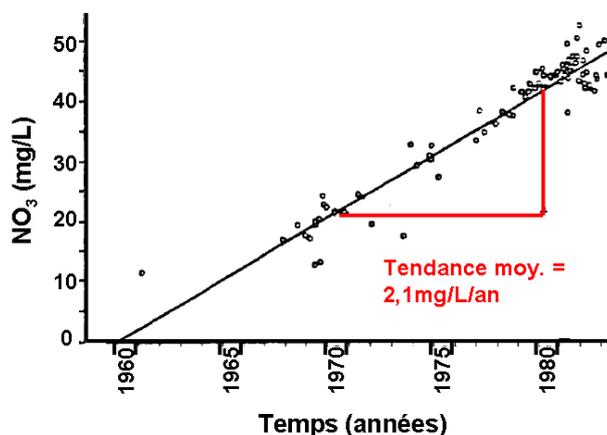


FIGURE 1.7: Évolution des concentrations en nitrates dans le calcaire de Champigny à Bailly-Carrois (77) entre 1967 et 1983, d'après Landreau et Roux (1984)

Les captages de la Traconne, dans les calcaires de Brie, illustrent également bien cette contamination sur le bassin de la Seine (Figure 1.8). Les concentrations en nitrates y ont en effet quadruplé entre 1950 et 1990.

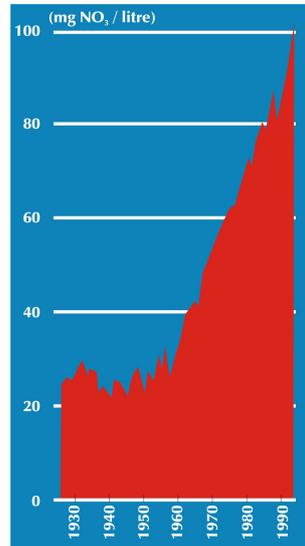


FIGURE 1.8: Evolution de la concentration mesurée dans les captages de la Traconne (Viennot, 2008)

La Seine, qui draine ce bassin versant, est également caractérisée par une augmentation par 3 de ses teneurs en nitrates (Figure 1.9).

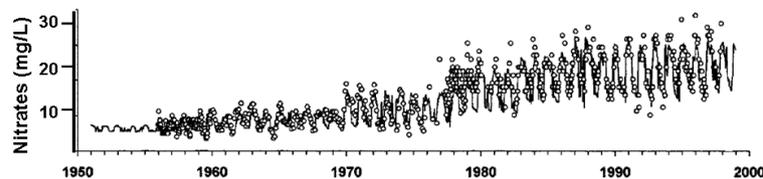


FIGURE 1.9: Evolution de la concentration en nitrates dans la Seine à Ivry entre 1951 et 1998, d'après Billen *et al.* (2001)

A partir de cette liste non exhaustive de données de contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes, plusieurs constats peuvent être faits.

Tout d'abord ces contaminations en nitrates sont un phénomène mondial. Nous avons illustré ici des contaminations en Amérique du Nord et en Europe, mais des études ont mis en évidence ce phénomène en Amérique du Sud (Costa *et al.*, 2002), en Asie (Zhu et Chen, 2002)...

Puis ces contaminations en nitrates touchent aussi bien les eaux de surface (Figures 1.2, 1.6 et 1.9) que les eaux souterraines (Figures 1.1, 1.3, 1.4, 1.5 et 1.8), à des degrés divers cependant pour ces dernières car fonction de leur profondeur. On peut également signaler que tous les types d'aquifères

1.2 Les conséquences d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

sont touchés : alluvial (Figure 1.1), sableux (Figure 1.3), crayeux (Figure 1.4)...

Enfin deux phases peuvent être distinguées à partir de ces données de concentrations en nitrates dans les eaux de surface et souterraines :

- une première phase avec des concentrations en nitrates stables au cours du temps et que l'on assimile à la concentration de fond du système étudié. La durée de cette phase est variable d'un hydrosystème à l'autre puisqu'elle se prolonge jusqu'au début des années 60 dans nos exemples au Royaume-Uni et en France (Figures 1.2 et 1.3), et jusqu'au début des années 90 dans notre exemple aux Etats-Unis (Figure 1.1). Cette valeur de fond est très variable d'un hydrosystème à l'autre. Ainsi, cette teneur en nitrates est d'environ 10 mg.L^{-1} (soit 2 mg.L^{-1} d'azote) aux Etats-Unis dans un aquifère de l'Etat de Washington, d'environ 15 mg.L^{-1} dans la Seine, et d'environ 25 mg.L^{-1} dans les eaux souterraines du bassin de la Seine aux captages de la Traconne.
- une deuxième phase avec des valeurs de concentrations maximales annuelles qui augmentent au cours du temps. Cette augmentation semble remarquablement continue et linéaire dans le temps lorsque l'on fait abstraction des variations saisonnières des concentrations en nitrates dans les eaux (Figures 1.1, 1.4 et 1.8).

1.2 Les conséquences d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

Dans la section 1.1, nous avons rendu compte d'une contamination en nitrates qui s'intensifie depuis plusieurs dizaine d'années sur tous les continents.

Ces contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes ont des conséquences négatives sur l'environnement et sur la santé des populations.

1.2.1 Les conséquences environnementales

L'eutrophisation correspond à un apport en excès des substances nitrates et phosphates qui peut entraîner une prolifération des végétaux aquatiques, et notamment du phytoplancton qui est l'ensemble des organismes végétaux en suspension dans l'eau. Des proliférations de ces derniers, notamment des algues, ont été et sont encore mises en évidence un peu partout dans le monde dans des eaux de surface et sur les zones littorales : en France (Aminot *et al.*, 1998), aux Etats-Unis dans la baie de Floride (Boyer *et al.*, 2006), au Japon (Nagasoe *et al.*, 2010), dans la mer d'Oman sur la côte indienne (Padmakumar *et al.*, 2010), en Allemagne sur les côtes de la mer du Nord (Rahmel

1.2 Les conséquences d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

et al., 1995), en Australie (Donnelly *et al.*, 1997)...

Ce phénomène, appelé efflorescence alguale, est un processus saisonnier naturel mais qui s'intensifie depuis quelques années.

Des illustrations de ces efflorescences sont présentées sur les Figures 1.10 et 1.11.



FIGURE 1.10: Dépôt d'algues vertes sur l'estran, bretagne-environnement.org



FIGURE 1.11: Bloom algal de dinoflagellate *Lingulodinium polyedrum* le long de la côte de La Jolla, San Diego County. Photo : Kai Schumann-Dépôt. [http ://oceanservice.noaa.gov/hazards/hab/](http://oceanservice.noaa.gov/hazards/hab/)

L'augmentation des concentrations en nitrates observée depuis quelques dizaines d'années dans les eaux des hydrosystèmes stimule la croissance alguale. Ainsi, en printemps-été, c'est-à-dire lorsque les conditions de température et de luminosité sont clémentes, des blooms alguaux, de la couleur des pigments des cellules phytoplanctoniques, peuvent apparaître dans des eaux de surface et sur les littoraux. Cette croissance alguale se limite aux couches d'eau superficielles.

Ces blooms représentent deux dangers. Tout d'abord, certaines espèces d'algues libèrent des substances toxiques, les phycotoxines. Belin et Raffin (1998) en distinguent deux types :

- les phycotoxines directement libérées dans l'eau et donc toxiques pour toutes les espèces du milieu, qu'elles soient végétales ou animales
- les phycotoxines qui s'accumulent dans les organismes se nourrissant de phytoplancton. Ces organismes animaux ne sont pas affectés mais deviennent toxiques pour qui les consomme.

Puis, le deuxième danger apparaît lors de la phase de décomposition de ces algues en excès. En effet, dans les eaux douces notamment, cette dégradation végétale augmente la charge naturelle de l'écosystème en matières organiques biodégradables qui se dépose dans les profondeurs. Les bacté-

1.2 Les conséquences d'une contamination en nitrates dans les hydrosystèmes

ries qui s'en nourrissent consomment alors davantage d'oxygène. Lorsque les teneurs de cet élément deviennent très faible, le milieu devient anoxique et les organismes vivant dans cette eau peuvent mourir d'asphyxie.

Ces blooms algaux peuvent également avoir des impacts économiques importants sur les secteurs de la pêche, du tourisme et de la santé. Les efflorescences algales toxiques peuvent tout d'abord générer des interdictions de pêche ponctuelles et des problèmes de santé pour les populations locales. Puis, la présence de ces efflorescences peut entraver les activités touristiques aquatiques. Enfin, lors des phases de décomposition de ces algues, des gaz toxiques peuvent être émis et menacer la santé des populations à proximité.

Un rapport de NCCOS (2005) chiffre ces conséquences économiques à 82 millions de dollars par an aux Etats-Unis, tandis qu'en Australie, un coût de 9,4 millions de dollars en 1991-1992 a été estimé pour ces nuisances engendrées par les blooms algaux.

1.2.2 Les conséquences sur la santé humaine

Les fortes teneurs en nitrates dans les eaux peuvent avoir des conséquences néfastes sur la santé humaine. En effet, le risque réside dans la capacité de l'organisme à transformer les nitrates en nitrites. Ces nitrites réduisent la capacité du sang à transporter l'oxygène en transformant l'hémoglobine en méthémoglobine (site www.eaubretagne.fr). Ce risque est très faible chez l'adulte mais non négligeable chez les nourrissons. Ces derniers, à moins de 4 mois, ont en effet :

- une faible acidité gastrique permettant la prolifération de bactéries capables de réduire les nitrates en nitrites
- et une moindre présence d'une enzyme régénérant l'hémoglobine à partir de la méthémoglobine.

Une consommation d'eau avec une concentration trop élevée en nitrates peut alors être à l'origine de cyanoses chez les nourrissons et de cancers de l'estomac et de l'intestin chez l'adulte (Croll et Hayes, 1988).

Pour limiter et endiguer ces conséquences néfastes sur l'environnement et sur la santé humaine, des législations ont été mises en place et sont présentées dans la section suivante.

1.3 La législation en vigueur

Pour élaborer les normes destinées à garantir la salubrité de l'eau de boisson, les pays développés et en développement se sont basés sur la première et la deuxième éditions des Directives de qualité pour l'eau de boisson de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS). Cette organisation préconise ainsi pour les nitrates une concentration maximale de 50 mg.L^{-1} dans les eaux de consommation. Un travail de synthèse et de mise à jour de ces Directives a été amorcé en 2000 pour aboutir à une troisième édition reprenant cette concentration limite à 50 mg.L^{-1} de nitrate NO_3 (ou 10 mg.L^{-1} d'azote nitrique N) (OMS, 2004).

Ainsi, aux Etats-Unis, la norme de potabilité concernant les nitrates est fixé à 10 mg.L^{-1} de N nitrique (USEPA, 2009). Une réglementation a également été mise en place en Europe pour endiguer la prolifération des nitrates dans les eaux de l'Union Européenne. En 1991, la Directive Nitrates (91/676/EEC,OJEC) fixe les limites de concentrations des nitrates dans les cours d'eau, les eaux souterraines et dans les eaux distribuées à $50 \text{ mg.L}^{-1}\text{NO}_3$. Ce seuil de potabilité et de qualité des milieux aquatiques est défini pour des raisons sanitaires et dans l'objectif d'un bon état écologique des milieux aquatiques. Une valeur guide de $25 \text{ mg.L}^{-1}\text{NO}_3$ est de plus recommandée afin de réduire les nitrates vers un taux acceptable pour le milieu. Cette Directive requiert que tous les états membres identifient les eaux souterraines qui contiennent ou pourraient contenir plus de 50 mg.L^{-1} de nitrates si des mesures préventives ne sont pas prises.

En 2000, la Directive Cadre sur l'Eau (2000/60/CE) reprend les principes de la Directive Nitrates et impose aux états membres de l'Union Européenne d'atteindre un bon état écologique de leurs eaux de surface et souterraines d'ici à 2015. Cette politique environnementale constitue un véritable enjeu pour l'Europe car Nixon *et al.* (2003) montrent qu'en 2003, 20 % des eaux de l'Union Européenne ont des concentrations en nitrates supérieures à la concentration limite. 40 % seraient supérieures à la valeur de référence de $25 \text{ mg.L}^{-1}\text{NO}_3$.

Pour atteindre en France ces objectifs fixés par cette Directive Cadre Européenne, une nouvelle loi sur l'eau a été adoptée en 2006. Cette loi se dote d'outils (institutionnels, agricoles, plans d'actions etc.) pour reconquérir les milieux aquatiques et mieux gérer la qualité et la quantité de la ressource en eau.

Pour atteindre les normes imposées par ces législations, une identification des sources et des processus de transfert de ces contaminations est donc nécessaire.

1.4 Les sources des contaminations en nitrates

1.4.1 Les sources urbaines

Les eaux situées dans une zone urbaine sont caractérisées par des teneurs élevées en nitrates. Une schématisation des processus se déroulant dans un environnement urbanisé nous permet de mieux comprendre les raisons de cette contamination (Figures 1.12 et 1.13, d'après Bernhardt *et al.* (2008)).

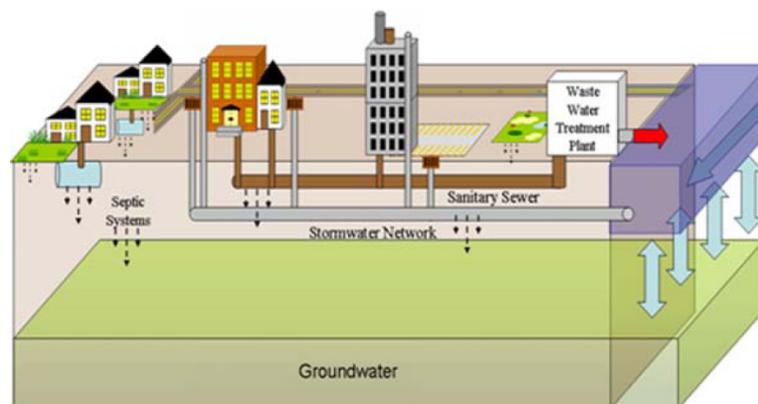


FIGURE 1.12: Représentation schématique de la circulation des eaux en zone urbaine sous des conditions d'infiltration nulle, d'après Bernhardt *et al.* (2008)

La Figure 1.12 illustre la circulation des eaux dans un système urbain sous des conditions de précipitation nulle. Les petites zones urbaines avec des habitations isolées ont en général un système d'assainissement autonome qui peut faire l'objet de fuites d'eaux usées. Les grandes agglomérations disposent d'un système d'assainissement collectif qui transfère les eaux usées vers une station d'épuration. Les eaux épurées, mais contenant une charge non négligeable en nitrates, sont rejetées dans l'environnement, le plus souvent dans une rivière. Des fuites peuvent également intervenir au cours du transfert des eaux usées dans le réseau.

Des lixiviations de nitrates, c'est-à-dire des transferts de ces solutés vers la profondeur, se produisent également sur des sites industriels, sur des zones de décharge et dans les jardins et parcs de villes. Donc l'ensemble de ces fuites et de ces rejets constitue une source de contamination en nitrates pouvant atteindre les nappes et les rivières.

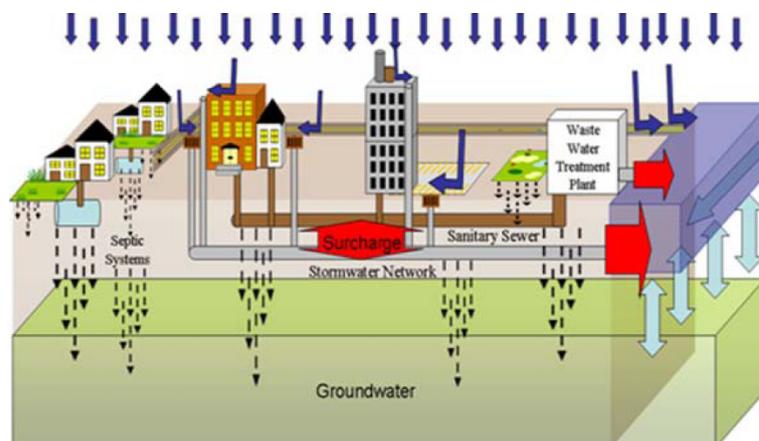


FIGURE 1.13: Représentation schématique de la circulation des eaux en zone urbaine sous des conditions orageuses, d'après Bernhardt *et al.* (2008)

La Figure 1.13 représente la circulation des eaux dans un système urbain sous des conditions d'infiltration importante. En général, les égouts dans les grandes agglomérations sont de type unitaire, c'est-à-dire qu'ils collectent à la fois les eaux usées domestiques et les eaux pluviales (Billen *et al.*, 2009). Avec cette charge d'eau en entrée, les fuites d'eaux usées des fosses septiques et des réseaux d'assainissement collectifs sont plus importantes que sous condition d'infiltration nulle. Les lixiviations des zones de décharge et des jardins sont également plus prononcées lors des orages. Mais le plus gros problème provient du fait que cet afflux de volumes d'eau supplémentaires ne peut pas toujours être géré correctement par les stations d'épuration. Parfois, lorsque les volumes sont trop importants, un rejet sans traitement dans l'environnement est effectué. Cette difficulté dans la gestion de la "surcharge d'activité" dans les stations d'épuration persiste également dans les zones récemment urbanisées disposant d'un système d'assainissement séparatif (Billen *et al.*, 2009).

L'ensemble de ces phénomènes explique donc le fait qu'on observe dans les zones urbaines des contaminations en nitrates. Ainsi, en Allemagne, Eiswirth et Hötzl (1999) signalent qu'environ 100 millions de m^3 d'eaux usées seraient transférés dans les sols et les nappes par des défaillances du réseau chaque année. Une étude comparative a également été réalisée par Wakida et Lerner (2005) et démontre que la part des différentes sources de contamination en nitrates en zone urbaine est très variable. Ainsi, à Long Island, dans l'Etat de New York, les contaminations urbaines en nitrates sont essentiellement dues à l'utilisation de fertilisants en zones urbaines.

En revanche, Lerner *et al.* (1999) montrent qu'à Nottingham au Royaume-Uni, les quantités de

nitrates rejetées dans l'environnement proviennent pour 13 % des eaux usées, pour 36 % des fuites de réseau et pour 50 % des lixiviations par les jardins, les parcs et les zones industrielles.

Cette source urbaine de contamination constitue un enjeu écologique important. En effet, ces deux derniers siècles, la part de la population urbaine dans la population mondiale est passée de 5 à 50 % (McMichael, 2000). Les relargages nitriques urbains ont donc augmenté au cours du temps. La mise en place de réseaux d'évacuation, de collecte et d'assainissement des eaux usées à partir de la deuxième moitié du 19^{ème} siècle a cependant permis de contrecarrer cette contamination. On peut pourtant signaler que face à ce phénomène, des inégalités entre régions riches et pauvres sont mises en évidence.

Dans les pays développés, des progrès techniques importants ont permis et permettent encore d'améliorer l'efficacité de l'assainissement des eaux usées : filtration, minéralisation de la matière organique, désinfection par UltraViolet... En revanche dans des zones moins riches, lorsque des stations d'épuration existent, des dysfonctionnements de celles-ci sont plus fréquents. Ainsi Igbiosa et Okoh (2009) ont mis en évidence une inefficacité ponctuelle d'un centre de traitement des eaux usées dans une zone rurale en Afrique du Sud, inefficacité qui génère des pollutions en nitrates dans les eaux utilisées par les communautés dans la vie quotidienne.

1.4.2 Les sources agricoles

Au début des années 50, le secteur agricole a connu un bouleversement sans précédent. En effet, pour subvenir aux besoins d'une population de plus en plus importante, l'agriculture traditionnelle est devenue une agriculture intensive.

Ainsi, le recours de manière systématique aux fertilisants d'origine minérale à partir de cette période a permis d'augmenter les rendements de manière considérable. La Figure 1.14 présente l'évolution des quantités de fertilisants consommés et les rendements associés entre 1949 et 1997 en Chine. A partir de 1965, la consommation de fertilisants azotés augmente de manière presque linéaire et s'accompagne d'une augmentation similaire des rendements.

1.4 Les sources des contaminations en nitrates

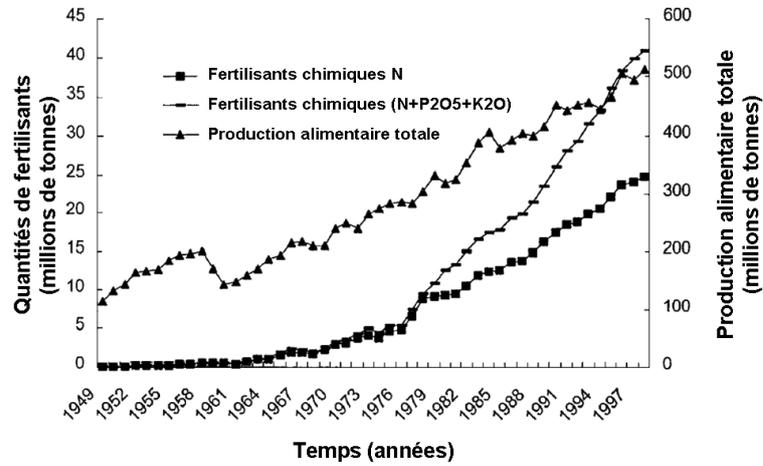


FIGURE 1.14: Evolution des quantités de fertilisants consommés et des rendements associés en Chine entre 1949 et 1997, d'après Zhu et Chen (2002)

Une augmentation de la consommation de fertilisants azotés entre 1960 et 2010 a également été mise en évidence aux Etats-Unis (Figure 1.15). En revanche, on observe également un ralentissement de cette consommation depuis 1985.

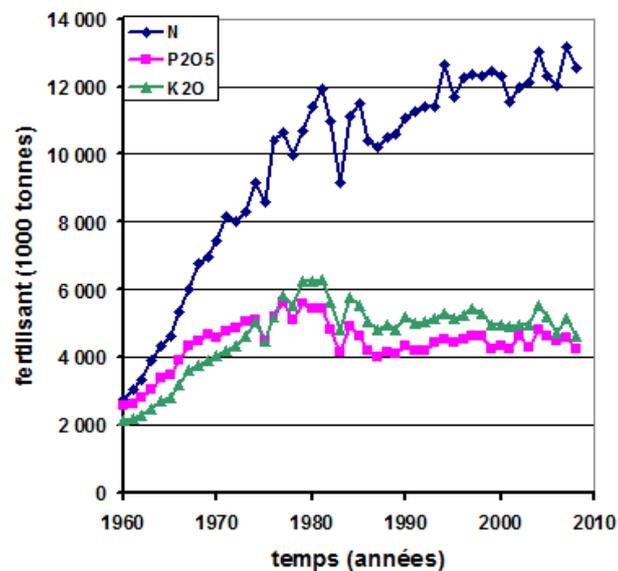


FIGURE 1.15: Evolution des quantités de fertilisants appliqués aux Etats-Unis entre 1960 et 2008, sources : USDA <http://www.ers.usda.gov/Data/FertilizerUse/>

1.4 Les sources des contaminations en nitrates

En Europe, une évolution similaire à celle des Etats-Unis de la consommation de fertilisants azotés est mise en évidence (Figure 1.16). Avant 1955, environ 200000 tonnes d'azote étaient épanchées chaque année sur les terres agricoles françaises sous forme de matière organique. La mise sur le marché de fertilisants azotés a généré une augmentation quasi linéaire des quantités d'azote épanchées en France à partir de 1955. Un ralentissement des quantités consommées en azote est toutefois observable à la fin des années 80. La production totale en céréales continue cependant d'augmenter à cette période (Figure 1.17).

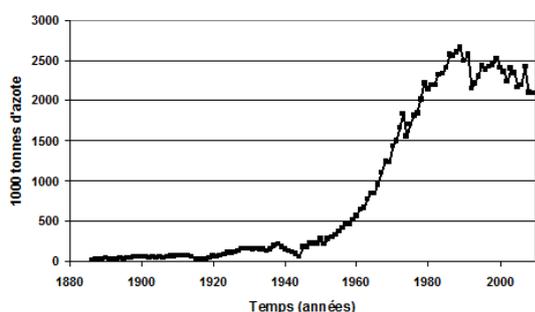


FIGURE 1.16: Evolution de la consommation des fertilisants par l'agriculture française (source UNIFA : <http://www.unifa.fr/>)

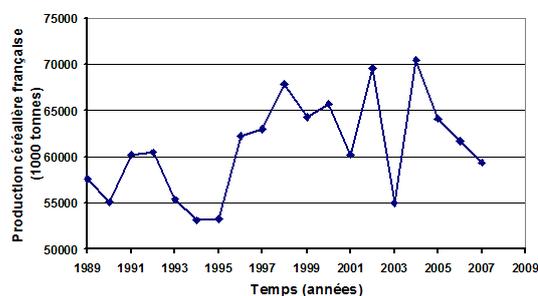


FIGURE 1.17: Evolution de la production totale en céréales en France entre 1989 et 2007, en milliers de tonnes (source AGRESTE : <http://www.agreste.agriculture.gouv.fr/>)

Cette fertilisation est malheureusement trop souvent exécutée de manière irraisonnée. Des quantités d'azote bien supérieures aux besoins des plantes ont ainsi été épanchées sur les cultures, modifiant de manière significative le fonctionnement de ces écosystèmes. Une cartographie des surplus azotés estimés "à dire d'experts" sur le bassin Seine-Normandie par calcul de bilans d'azote a été réalisée par l'AESN (Figure 1.18). On constate qu'une grande partie de ce bassin présente des surplus d'azote compris entre 25 et 100 $kg \cdot ha^{-1} \cdot an^{-1}$ avec des maxima en Beauce et à l'Est du bassin. Ces surplus contaminent alors les eaux de l'hydrosystème.

Plusieurs études ont mis en évidence explicitement un lien entre la charge en azote et la contamination en nitrate des eaux (Costa *et al.*, 2002, Foster, 2000). Almasri et Kaluarachchi (2004) par exemple déterminent une relation linéaire positive entre les quantités moyennes d'azote épanchées chaque année sur les champs et la contamination en nitrates dans les eaux souterraines dans l'Etat de Washington (Figure 1.19).

1.4 Les sources des contaminations en nitrates

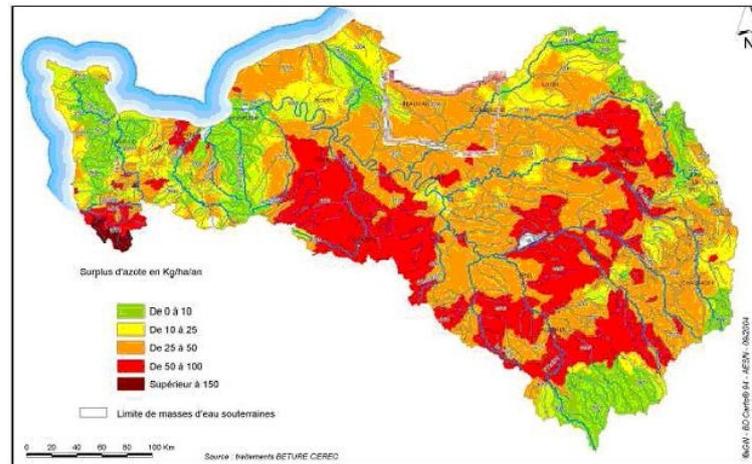


FIGURE 1.18: Surplus d'azote estimés sur le bassin de la Seine-Normandie en 2004, d'après AESN (2007)

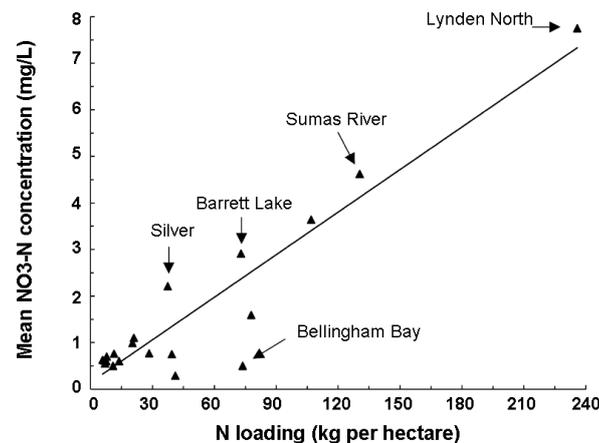


FIGURE 1.19: Relation entre les quantités moyennes annuelles d'azote sous forme nitrates épandues sur les terres agricoles et la concentration moyenne souterraine en nitrates pour plusieurs bassins versants à Whatcom County dans l'Etat de Washington, Etats-Unis (Almasri et Kaluarachchi, 2004)

Les épandages massifs d'azote minéral dans les activités agricoles ont donc généré une contamination diffuse en nitrates dans les hydrosystèmes depuis les années 50.

1.5 Le transfert des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

1.5.1 Le cycle de l'azote

La Figure 1.20 représente le cycle de l'azote dans un système de production agricole.

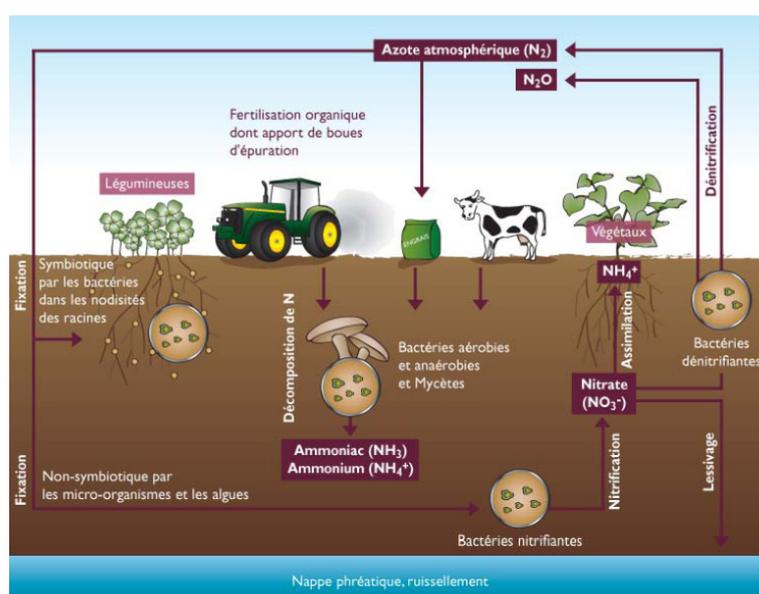
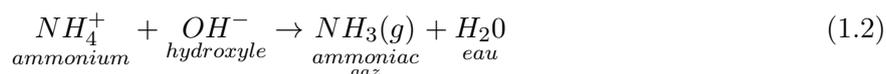
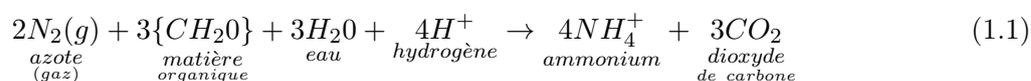


FIGURE 1.20: Cycle de l'azote dans un système de production agricole (source INRA : <http://www.inra.fr/>)

Le cycle de l'azote débute par une transformation biologique de l'azote atmosphérique en une forme azotée assimilable par les plantes, l'azote ammoniacal (ammoniac NH_3 et ammonium NH_4^+). Cette étape, appelée fixation, est assurée par des bactéries présentes dans le sol :

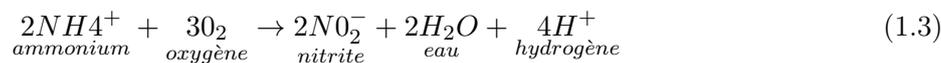


Des ions ammonium NH_4^+ peuvent aussi être produits via la décomposition d'organismes morts par des bactéries saprophytes.

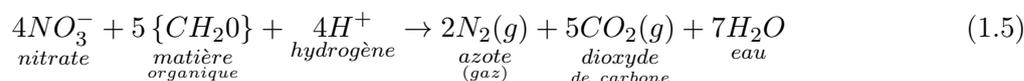
Dans des sols oxygénés, des bactéries nitrifiantes assurent le processus de nitrification qui consiste

1.5 Le transfert des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

à transformer les produits de la fixation (NH_4^+ et NH_3) en nitrite (nitritation) puis en nitrates (nitratation), assimilables par les plantes :



Lorsque les concentrations en oxygène dissous ou présent et biodisponible dans le milieu diminuent trop, le milieu est dit anoxique. Dans ces conditions, des bactéries dénitrifiantes transforment les nitrates en diazote au cours du processus de dénitrification :



Sans influence anthropique, le fonctionnement des écosystèmes consiste donc en un cycle dans lequel une quantité limitée d'azote minéral est prélevée par les plantes qui le transforment en biomasse. Cette biomasse est alors utilisée et reminéralisée par les animaux et les micro-organismes.

Dans un système agricole, les pratiques de fertilisation génèrent un apport supplémentaire d'azote dans le sol sous forme de nitrates, d'ammonitrates et d'urée, ces deux derniers se transformant en nitrates. Ces pratiques enrichissent ainsi le pool de NO_3^- dans le système.

1.5.2 Les transferts de nitrates dans un hydrosystème

La Figure 1.21 représente de manière simplifiée les transferts de nitrates dans un hydrosystème et y localise les processus de dénitrification.

1.5 Le transfert des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

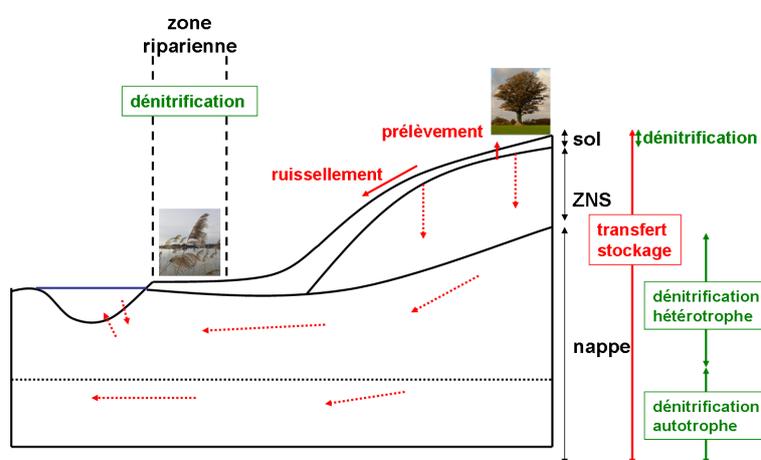


FIGURE 1.21: Représentation simplifiée des transferts d'azote dans un hydrosystème (en rouge) et localisation des processus de dénitrification (en vert)

Les nitrates disponibles dans le sol sont en grande partie transformés en biomasse par les végétaux au cours de leur cycle de croissance. Cependant, une part non négligeable de ces nitrates persiste dans le sol après les récoltes. Les nitrates sont la forme la plus mobile de l'azote dans le sol. Ils y sont donc stockés essentiellement dans la phase aqueuse sous forme dissoute.

De fait, lorsqu'un phénomène pluvieux intervient, les nitrates circulent facilement dans le sol et sont aisément entraînés avec les eaux ruisselées et infiltrées :

- le ruissellement : lors de fortes précipitations, le sol peut se saturer en surface et/ou en subsurface (à quelques centimètres de profondeur). De l'eau s'accumule ainsi à ce niveau et ruisselle selon la pente. Via cet écoulement, les eaux sont transférées vers les rivières. Le transfert des nitrates par ruissellement est d'autant plus important que l'intensité des précipitations est forte. L'état hydrique du sol joue également un rôle puisque plus le sol est saturé, plus le ruissellement sera important.

Ces eaux ruisselées atteignent la zone riparienne, une zone plus ou moins large longeant un cours d'eau. Cette zone riparienne est recouverte d'un ensemble de végétation arbustive et arborée adaptée aux contraintes hydriques de cette zone tampon et appelée ripisylve. Dans cette zone tampon entre le cours d'eau et la terre, les nitrates peuvent faire l'objet d'une dénitrification de par les conditions d'oxydo-réduction qui y règnent. Billen *et al.* (2001) mettent cependant en évidence que le recours à des drainages artificiels de terrain réduit les capacités de dénitrification de ces zones ripariennes.

1.5 Le transfert des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

Une fois dans les rivières, les nitrates n'y sont pas décomposés, car l'eau est en général aérée. Cependant, le flux de nitrates n'est pas entièrement conservé. En effet, des échanges de flux interviennent entre le cours d'eau et la nappe. Les sédiments déposés au fond de la rivière pouvant être riches en matières organiques et leur décomposition peut parfois créer des conditions anaérobies favorables à la dénitrification. On observe alors une consommation des nitrates par le fond de la rivière (De Marsily et Meybeck, 2003). Doussan *et al.* (1994) ont également mis en évidence une élimination des nitrates et des nitrites dans les premiers mètres des berges lors des transferts entre une rivière et une nappe alluviale sur différents sites en Europe, et notamment sur le bassin de la Seine.

- les eaux infiltrées traversent la zone non saturée qui est la zone située entre la base du sol et la surface de la nappe. L'épaisseur de ce milieu est variable (quelques dm à plusieurs dizaines de m). Lors d'une infiltration, la teneur en eau dans le milieu non saturé augmente. Ceci ne génère cependant pas toujours une infiltration puisque cette eau peut être retenue par capillarité. En revanche, lorsque la teneur en eau excède cette capacité de rétention du milieu, l'eau descend sous l'effet de la gravité, donc s'infiltré, et humidifie les couches inférieures. La probabilité de dépasser la capacité de rétention du milieu augmentant avec l'infiltration, plus celle-ci est importante, plus la vitesse de transfert des solutés à travers la zone non saturée est conséquente. La zone non saturée est cependant globalement caractérisée par des vitesses de transfert des solutés faibles (quelques $dm.an^{-1}$). Tout comme le sol, la zone non saturée peut être le siège de transformations bio-physico-chimiques impliquant les nitrates. Cependant, ces réactions sont bien moins prononcées que dans le sol. Baran *et al.* (2007) mettent en évidence un transfert des nitrates essentiellement conservatif dans des loess par exemple. Il est donc plus courant de considérer la zone non saturée comme une zone de transfert de polluants plutôt que comme un milieu où les nitrates sont impliqués dans des réactions bio-physico-chimiques (Vauclin, 1994, Serhal *et al.*, 2006, Baran *et al.*, 2007).

Une fois dans la nappe, les nitrates peuvent être transférés aux rivières par les échanges régnant entre ces deux compartiments. Ils peuvent également être réduits naturellement par une dénitrification dans la zone saturée.

Pour mieux comprendre la dynamique de contamination en nitrates dans les hydrosystèmes, des campagnes d'acquisition de données sur le terrain ont été réalisées. Nous présentons dans la section 1.6 un état des lieux des connaissances acquises concernant les transferts de ces solutés dans un hydrosystème.

1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées

Des campagnes d'acquisition de données sur le terrain ont permis de mieux comprendre la dynamique de transfert des nitrates dans un hydrosystème. Nous avons focalisé cet état des connaissances sur la principale cause de contaminations en nitrates, à savoir les contaminations diffuses d'origine agricole.

1.6.1 Les données agricoles

Pour comprendre la dynamique de la contamination diffuse en nitrates d'origine agricole, il est nécessaire tout d'abord d'estimer les quantités azotées apportées par l'agriculture. Pour cela, la connaissance de données concernant les types de cultures mis en jeu (répartition spatiales des cultures, successions culturales...) et les pratiques culturales associées (date de semis, de récolte, de fertilisations minérale et organique...) est requise.

Deux types de données sont disponibles pour obtenir ces informations (Mignolet *et al.*, 2004) :

- des données statistiques.

En France, tous les 10 ans, un recensement agricole est effectué et décrit précisément les cultures mises en oeuvre, la surface exploitée, etc. dans chaque Petite Région Agricole. Ces Régions sont des zones agricoles homogènes définies par un nombre entier de communes dans chaque département. Un recensement est actuellement en cours jusqu'en avril 2011.

Par ailleurs, l'enquête nationale TERUTI fournit de 1982 à 2004 des données annuelles sur l'occupation des sols en France sur un échantillon constant de plus de 550000 points. A partir de 2004, l'enquête TERUTI a été remplacée par l'enquête "TERUTI-LUCAS", qui est une adaptation de TERUTI au cahier des charges européen LUCAS (Land Use/Cover Area frame statistical Survey), notamment en ce qui concerne la conception de l'échantillon, la méthode d'observation et la nomenclature (Agreste, 2009).

- des données d'experts.

Les informations des conseillers agricoles sont précieuses puisqu'ils sont au coeur des plans de gestion des productions agricoles. Cependant une incertitude doit être prise en compte dans ces données (Mignolet *et al.*, 2004) : les pratiques agricoles restituées par ces experts correspondent en effet davantage aux pratiques recommandées plutôt qu'aux pratiques réelles. Ainsi, Baran *et al.* (2007) sont parvenus à mettre en évidence des manquements dans la signalisation d'intrants épandus sur des loess en Alsace en comparant un profil de concentration

1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées

en nitrates observé avec un profil simulé avec Agriflux (Hydriad, 2000).

1.6.2 Le transfert des nitrates dans le sol

La dynamique des transferts de solutés dans le sol ainsi que les facteurs influençant ces transferts ont été largement étudiés et sont plutôt bien connus.

Almasri et Kaluarachchi (2004), Costa *et al.* (2002), Moreno *et al.* (1996) démontrent tout d'abord que plus les précipitations efficaces sont importantes, plus les lixiviations de nitrates sont conséquentes.

D'autre part, des études ont permis de mettre en évidence l'influence de la texture et de la composition minéralogique d'un sol sur la concentration en nitrates des eaux du sol. Plus un sol est argileux, plus sa capacité de rétention de contaminants sera a priori forte. Au contraire un sol très sableux laissera plus facilement passer les polluants dissous, facilitant leur transfert dans l'hydrosystème. Tindall *et al.* (1995) ont mesuré les lixiviations d'azote par des colonnes de 40 cm d'épaisseur de sols nus argileux et sableux suite à des épandages de fertilisants. Les nitrates appliqués sur le sol sableux sont complètement transférés dans le système au bout de 10 jours, alors que sur le sol argileux, 5 à 6 semaines sont nécessaires pour que 60 % des nitrates apportés soient transférés par le sol.

Le type de culture influence également l'intensité de la lixiviation des nitrates dans les sols. Des comparaisons des concentrations en nitrates dans les eaux de percolation sous différentes occupations de sols ont en effet permis d'explicitier cette influence. Costa *et al.* (2002) mettent en évidence des lixiviations de nitrates trois fois plus importantes sous cultures de pommes de terre que sous pâturage, et Lasserre *et al.* (1999) montrent que sous blé, la lixiviation de nitrates est plus importante que sous maïs. On peut généraliser cette observation en constatant que les tendances de modification de l'occupation des sols opérée depuis plusieurs dizaines d'années influencent grandement la contamination en nitrates des hydrosystèmes. On observe en effet dans les régions tempérées une augmentation de l'allocation des terres à la production céréalière aux dépens des cultures fourragères (Foster, 2000). Cette production céréalière est essentiellement annuelle avec le blé et le maïs. Or ces céréales sont caractérisées par une phase de croissance respectivement au printemps et en été, phase au cours de laquelle elles assimilent les nitrates présents dans le sol. En revanche, après les récoltes, ces céréales deviennent 'inactives'. Mais la création de nitrates par les bactéries nitrifiantes continue, augmentant ainsi le pool de nitrates dans le sol et favorisant la lixiviation des solutés (Croll et Hayes, 1988, Foster, 2000, Costa *et al.*, 2002, Moreno *et al.*, 1996). La figure 1.22 illustre bien cette évolution de l'allocation des terres, ici sur le bassin de la Seine entre 1970 et 1988. On

1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées

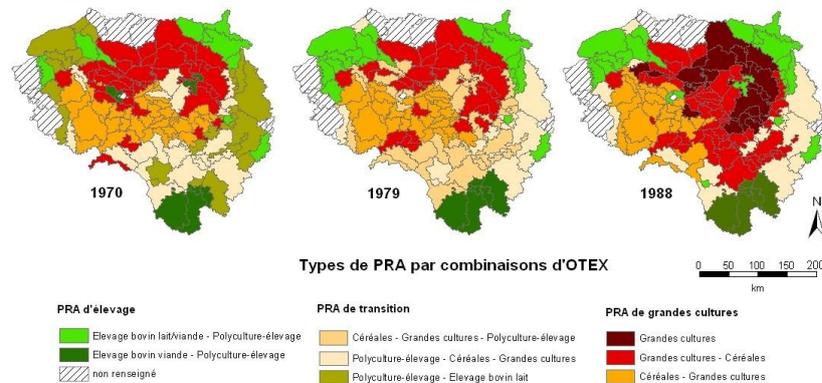


FIGURE 1.22: Illustration de la variation des grandes dominantes agricoles sur le bassin de la Seine entre les années 1970 et 1988, d'après les Recensements Généraux de l'Agriculture (Viennot, 2008)

peut constater que les trois catégories de culture sur ce document (élevage, grandes cultures et à la fois céréales et élevage bovin) évoluent de manière significative sur ce bassin entre 1970 et 1988. Les usages tendent en effet vers un système de grandes cultures. L'influence de la modification de l'usage des terres s'observe aussi dans le domaine de la production animale. L'augmentation de la taille des cheptels accompagnée d'une diminution de la taille des pâturages au profit d'une importation de la nourriture animale conduit à une diminution de la qualité des eaux (Landreau et Roux, 1984, Zebarth *et al.*, 1998).

1.6.3 Le transfert des solutés à travers la zone non saturée

La zone non saturée est un milieu triphasique (eau-air-solide) située entre la surface du sol et la surface piézométrique.

Des études ont permis de mettre en évidence les faibles vitesses de transfert des solutés à travers la zone non saturée : $0,60$ à $1,25 \text{ m.an}^{-1}$ dans la craie (Croll et Hayes, 1988, Barraclough *et al.*, 1994, Lacherez-Bastin, 2005, Serhal *et al.*, 2006, Van den Daele *et al.*, 2007), $0,23 \text{ m.an}^{-1}$ sur des loess (Baran *et al.*, 2007), moins de 5 m.an^{-1} sur arènes granitique (Legout *et al.*, 2007), et $0,20 \text{ m.an}^{-1}$ dans une zone non saturée argileuse (Binley *et al.*, 2002).

Or les épaisseurs de la zone non saturée sont très variables : de quelques dizaine de *dm* à plusieurs centaines de *m*. La combinaison de ces deux caractéristiques fait qu'une éventuelle pollution en nitrates dans le sol peut avoir des effets très différés dans le temps sur la qualité de la ressource en

1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées

eaux souterraines, en particulier lorsque la zone non saturée est très épaisse (Foster, 2000).

Le transfert de nitrates à travers la zone non saturée a donc été très étudié. Cependant ce transfert est très complexe puisque les concentrations des solutés peuvent varier dans le temps et l'espace. Des changements de phases accompagnés d'échanges physico-chimiques entre celles-ci peuvent en effet avoir lieu (Vauclin, 1994).

1.6.4 La dynamique de transfert des solutés dans la zone saturée

Des dynamiques de répartition des concentrations dans le temps et dans l'espace dans le domaine souterrain ont pu être mises en évidence sur plusieurs bassins versants.

- Dans le temps, les variations saisonnières de la recharge génèrent globalement une augmentation en hiver et une diminution en été des concentrations en nitrates dans les aquifères (Foster, 2000, Beeson et Cook, 2004, Costa *et al.*, 2002, Li *et al.*, 2006).
- Dans l'espace, les concentrations en nitrates dans les nappes diminuent lorsque leur profondeur augmente (Almasri et Kaluarachchi, 2004). Les nappes superficielles sont en effet plus rapidement atteintes par une pollution en surface que les nappes profondes (Almasri et Kaluarachchi, 2004, Beeson et Cook, 2004, Croll et Hayes, 1988, Landreau et Roux, 1984). De même, n'étant pas protégées par une couche imperméable, les nappes libres sont plus sensibles à une contamination en surface que les nappes captives (Landreau et Roux, 1984). Dans ces dernières, la pollution peut ainsi apparaître lorsque la couche imperméable est percée par un ouvrage (ancien forage...). De plus, dans les aquifères, comme l'illustre la Figure 1.23, une stratification des concentrations peut être mise en évidence avec une teneur en nitrates qui diminue avec la profondeur. Ceci est dû au fait qu'en profondeur, les nitrates sont dilués par les mélanges et impliqués dans des phénomènes de dénitrification (Almasri et Kaluarachchi, 2004, Honisch *et al.*, 2002, Foster, 2000).

1.6 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : les données observées

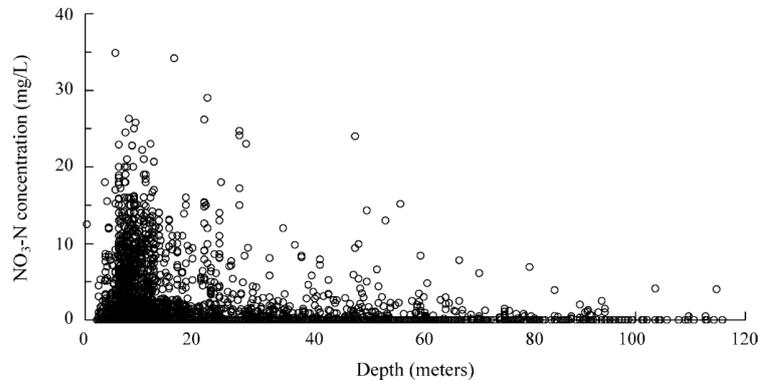


FIGURE 1.23: Concentration en azote sous forme nitrates en fonction de la profondeur d'échantillonnage dans un aquifère de l'Etat de Washington, d'après Almasri et Kaluarachchi (2004)

Cette stratification a pu également être mise en évidence en France sur le bassin de la Seine dans l'aquifère des Calcaires de Beauce (Schnebelen *et al.*, 1999). Les calcaires de Pithiviers, qui constituent la partie supérieure de cet aquifère, sont caractérisés par des teneurs en nitrates deux fois supérieures à celles observées dans les calcaires d'Etampes et de Morancez qui constituent la partie inférieure de l'aquifère de Beauce.

1.6.5 La dénitrification

Comme expliqué dans la section 1.5, la dénitrification est le processus biogéochimique au cours duquel des micro-organismes transforment les nitrates en azote.

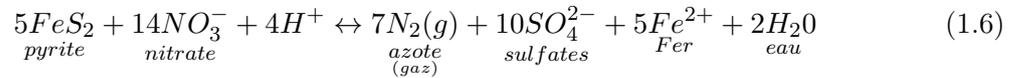
La dénitrification ne fonctionne efficacement que lorsque ces micro-organismes sont placés dans des conditions favorables en termes de teneurs en oxygène, en azote oxydé et en substrat carboné. En outre dans le sol, cette dénitrification dépend de la teneur en eau qui conditionne l'aération du milieu. A partir d'un seuil de 60 à 65 % de saturation, l'activité dénitrifiante augmente de façon exponentielle avec celle-ci (Germon et Couton, 1999).

On comprend à partir de là l'intérêt particulier des zones humides, comme par exemple les zones ripariennes, qui combinent à la fois des teneurs en donneurs d'électrons (carbone organique, sulfures) importantes et de faibles teneurs en oxygène.

Une diminution des concentrations en nitrates peut également s'opérer naturellement par une dénitrification dans les aquifères, en particulier dans les aquifères captifs (Roux, 1995, Rivett *et al.*, 2007). Deux types de dénitrification peuvent alors prendre place dans les aquifères :

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

- la dénitrification hétérotrophe : elle se produit lorsque de la matière organique est oxydée par des bactéries. Lorsque les teneurs en oxygène sont suffisamment faibles dans le milieu, ces bactéries utilisent les nitrates comme accepteurs finaux d'électrons (cf Equation 1.5).
- la dénitrification autotrophe : en milieu anaérobie, des bactéries sont capables de respiration-nitrate à partir de diverses formes minérales. Ainsi, la bactérie *Thiobacillus denitrificans* est capable de respiration nitrates à partir de minéraux soufrés. Ces éléments inorganiques soufrés sont alors oxydés et les nitrates agissent comme accepteurs d'électrons. Nous écrivons comme exemple ci-dessous le processus de dénitrification par oxydation de la pyrite :



Suivant les conditions environnementales exigées pour la mise en place de ces réactions chimiques, une zonation simplifiée de la capacité dénitrifiante des aquifères est mise en évidence (Figure 1.21). Cette capacité dénitrifiante en grande profondeur est cependant un processus lent à cause des faibles teneurs en donneurs d'électrons (Mariotti, 1994). De plus, cette réduction des nitrates nécessite des conditions biogéochimiques particulières en terme de pH, de température, etc. (Rivett *et al.*, 2008) qui fait qu'à grande échelle, ce phénomène dans les nappes profondes a un impact réduit (Rivett *et al.*, 2007).

A partir de la connaissance des mécanismes de transfert et des données observées sur le terrain, des travaux de modélisation peuvent être effectués pour comprendre les dynamiques dans le temps et dans l'espace des contaminations en nitrates des hydrosystèmes et tester l'impact de mesures compensatoires.

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

Un modèle est une représentation théorique simplifiée d'un système. Il comporte la définition d'une structure, la formulation de lois (relations déterministes ou probabilistes) reliant les sollicitations ou entrées du système à ses réponses ou sorties, et la définition des paramètres (constantes ou variables pouvant prendre des valeurs numériques) entrant dans ces relations (Margat et Castany, 1977).

Le travail de modélisation de la dynamique des contaminations en nitrates dans un hydrosystème

est nécessaire pour comprendre leur évolution dans le temps et dans l'espace. Il s'agit donc d'un outil d'analyse qui permet en plus de tester l'évolution de contaminations selon différents scénarios : changement de pratiques agricoles, changements climatiques, application de politiques compensatoires, etc.

Différents types de modèles sont disponibles pour conceptualiser un système.

1.7.1 La classification des modèles

1.7.1.1 Les modèles déterministes

Ces modèles considèrent que toutes les variables du système ont une valeur bien définie. Deux sous-catégories se distinguent parmi les modèles déterministes : les modèles mécanistes et les modèles conceptuels :

- les modèles mécanistes. Ces outils sont basés sur une représentation la plus fondamentale possible des processus étudiés par la résolution d'équations de la physique, chimie, thermodynamique et biologie. Ainsi la loi de Darcy et les équations de Richards, de St Venant et de Boussinesq décrivent les flux d'eau dans un hydrosystème tandis que la loi de Fick, des lois décrivant des processus chimiques comme la minéralisation ou les processus d'oxydo-réduction décrivent les transferts de solutés.

Cette description précise des phénomènes dans ce type de modèle permet d'obtenir, lorsque les paramètres de ces équations sont bien connus, des résultats concordants avec la réalité des transferts.

Cependant, l'utilisateur de ce type de modèle peut avoir des difficultés pour définir des paramètres. Par exemple la modélisation des transferts à travers les zones non saturée et saturée nécessite de connaître la structure et l'organisation des couches géologiques, ainsi que leurs propriétés, et des mesures directes ne sont pas toujours disponibles (Calvet, 2003). Il faut donc parfois procéder par analogie. De plus, pour une application sur grands bassins, l'utilisateur est confronté à la variabilité des paramètres requis pour résoudre les équations. Enfin, l'exécution des calculs avec un outil mécaniste nécessite souvent des temps de calcul importants. Les modèles mécanistes ont cependant été largement développés et sont beaucoup utilisés : MACRO (Scorza Junior *et al.*, 2007) pour les transferts dans les sols, METIS (Goblet, 2007, 2008) et Hydrus2D (Simunek *et al.*, 2006) pour la simulation des transferts conjoints zone non saturée - zone saturée, SWAP (Van Dam *et al.*, 1997) pour la simulation des transferts d'eau et de solutés dans des sols cultivés etc.

- les modèles conceptuels. Le fonctionnement d'un système dans un modèle conceptuel est simplifié et de fait dépourvu de réalité physique. Les modèles conceptuels s'intéressent à mimer au mieux le fonctionnement d'un système plutôt que d'expliquer les causes de ce fonctionnement. L'avantage de ces modèles conceptuels est qu'ils tendent à concilier une représentation probante des processus et des temps de calculs réduits. Ils sont en effet peu coûteux en paramètres et en temps d'exécution. Ces deux caractéristiques en font donc des outils appréciés pour des applications à grandes échelles.

Les inconvénients de ces outils sont qu'ils offrent moins de variables pouvant servir de validation et qu'ils sont moins précis que les modèles mécanistes. Mattern et Vanclooster (2009) ont ainsi montré que les résultats d'une simulation obtenus avec un modèle mécaniste concernant des transferts à travers une zone non saturée étaient plus proches de la réalité que les résultats obtenus avec un modèle conceptuel.

Cependant, du fait de leur structure simple et du peu de paramètres qu'ils exigent, ce type de modèles a largement été développé. Ainsi, les modèles LIXIM (Mary *et al.*, 1999) et STICS (Brisson *et al.*, 1998) modélisent les transferts à travers les sols avec un ou plusieurs réservoirs.

1.7.1.2 Les modèles stochastiques

Pour pallier les problèmes de détermination des paramètres rencontrés par les modèles déterministes, des modèles stochastiques ont été développés. Ces modèles stochastiques reposent sur la prise en compte de la variabilité spatiale des propriétés du milieu, et donc sur la variabilité supposée des transferts d'eau et de polluants dans l'espace. Deux classes se distinguent parmi ces outils :

- les outils déterministes utilisés dans un contexte stochastique (par exemple INCA-N (Whitehead *et al.*, 1998)). Ces modèles génèrent aléatoirement des données par des lois de distributions particulières, afin de déduire les lois de distributions des variables de sortie. Ce type de modèle fournit donc à partir de données d'entrée des variables de sortie associées à une loi de distribution.
- les modèles stochastiques mécanistes. La variabilité des données d'entrée est prise en compte sous la forme d'une distribution de ces données. A partir de ce postulat, des traitements statistiques des équations décrivant les processus d'intérêt permettent d'étudier ceux-ci en termes statistiques. Le modèle Agriflux (Hydriad, 2000) appartient à cette catégorie.

Les modèles stochastiques utilisent donc des concepts mathématiques et statistiques pour relier des données d'entrée à des données de sortie. On peut citer la méthode de Monte Carlo qui est

largement utilisée dans des études d'hydrologie. Cette méthodologie permet d'estimer la part d'incertitude dans les résultats obtenus avec un modèle. Et cette évaluation de l'incertitude fait partie intégrante de l'analyse et de la modélisation.

1.7.2 La modélisation des contaminations en nitrates dans les hydrosystèmes

Pour modéliser la contamination en nitrates d'un hydrosystème, deux cycles doivent être correctement représentés :

- le cycle de l'eau, avec les transferts de surface, de subsurface et souterrains.
- le cycle de l'azote dans l'hydrosystème.

Ainsi le modèle SHETRAN (Birkinshaw et Ewen, 2000, Ewen *et al.*, 2000) est un modèle mécaniste distribué qui simule les transferts d'eau, de sédiments et de solutés dans l'ensemble de l'hydrosystème en 3D. La subsurface dans ce modèle est représentée par un milieu hétérogène variablement saturé, ce qui permet de modéliser les écoulements dans des lithologies complexes, avec par exemple des combinaisons de nappes perchées, libres et captives. Cet outil simule par ailleurs le ruissellement et les écoulements en rivières avec les équations de Saint-Venant, et les écoulements dans les zones saturées et non saturées par une loi de Darcy généralisée décrivant ces différents régimes. Le transfert des solutés est modélisé avec les équations de convection-dispersion en tenant compte également de l'adsorption, des dépôts atmosphériques, des prélèvements par les plantes etc.

L'application de SHETRAN sur un bassin versant requiert donc la définition d'un grand nombre de paramètres pour résoudre les équations intervenant dans cet outil. Or l'acquisition de ces données, surtout sur un grand domaine, est difficile. Donc parmi les modèles disponibles, certains privilégient la description des flux d'eau, et d'autres les flux des solutés. Nous présentons ici quelques exemples de ces modèles.

1.7.2.1 La modélisation des transferts de nitrates

La dynamique des transferts d'eau et de solutés dans le sol doit être modélisée avec un soin tout particulier puisque ce milieu, d'une part, régit l'évapotranspiration, le ruissellement et l'infiltration et, d'autre part, concentre sur l'ensemble de l'hydrosystème une grande partie des réactions biogéochimiques impliquant l'azote. De nombreux modèles ont donc été développés pour simuler essentiellement les transferts d'eau et d'azote dans la zone pédologique. Citons par exemple le modèle STICS (Simulateur mulTIdisciplinaire pour les Cultures Standards), développé à l'INRA depuis 1996, est un modèle agronomique conceptuel destiné à simuler, au pas de temps journalier, et à

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

l'échelle de la parcelle agricole, le comportement du système sol-plante au cours d'un ou plusieurs cycles culturaux (Brisson *et al.*, 2003). Cet outil permet ainsi de calculer des variables agricoles (par exemple les rendements) et des variables environnementales (quantification de l'eau infiltrée et du lessivage des nitrates). Le sol est décrit par une succession de couches horizontales caractérisées par leurs teneurs en eau et en azote minéral et organique. Les cultures sont décrites par leur teneur en azote, leur biomasse, leur indice foliaire, leur densité racinaire etc. L'avantage de ce modèle est qu'il a été construit de façon modulaire pour permettre de l'adapter facilement aux objectifs requis, par exemple en décrivant précisément les pratiques culturales, l'irrigation etc.

Les transferts de polluants en rivières ont également fait l'objet de développements numériques. Ainsi le modèle PROSE est un modèle hydraulique 1D permettant de simuler l'impact de tout type de pollution, ponctuelle ou diffuse, en rivière. Les apports considérés peuvent être des apports permanents comme les rejets des stations d'épuration, ou des apports transitoires comme les rejets urbains par temps de pluie (Even, 2008). Cet outil dispose de 3 modules :

- un module hydraulique basé sur la résolution monodimensionnelle des équations de Saint-Venant
- un module de transport avec la modélisation de la convection et des processus de dispersion. Plusieurs schémas numériques sont disponibles dans ce module pour traiter différents types de pollutions (pollutions accidentelles, chroniques, représentation bidimensionnelle du transport). Ce module simule également les processus de sédimentation et d'érosion.
- un module biogéochimique de réactions entre les constituants qui représente des processus impliqués dans le cycle du carbone, de l'azote, du phosphore, de la silice et de l'oxygène (Billen *et al.*, 1994). Le modèle distingue trois compartiments dans la rivière pour la représentation de ces processus : la colonne d'eau, les sédiments et le périphyton (mélange complexe d'algues, de cyanobactéries, de microbes hétérotrophes et de détritiques attaché à toute surface immergée).

Enfin, des modèles comme the INtegrated CAtchment Model of Nitrogen INCA-N (Whitehead *et al.*, 1998, O'Shea et Wade, 2009) simulent précisément les transferts de solutés sur l'ensemble de l'hydrosystème, mais aux dépens d'une représentation simplifiée des transferts d'eau pour limiter le nombre de paramètres à calibrer. INCA-N est un modèle semi-distribué simulant les facteurs et processus-clé influençant les masses de nitrates et d'ammonium dans le sol, le système souterrain et les rivières. Une approche simplifiée à deux boîtes distinguant le sol et la nappe est utilisée. Un

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

troisième compartiment simule les transferts d'eau dans la rivière par une cascade non-linéaire de réservoirs. Les paramètres d'entrée de cet outil sont les dépôts atmosphériques d'ammonium et de nitrates, les apports de fertilisants, des données sur la minéralisation de la matière organique et sur la nitrification, et des données sur la fixation d'azote. A partir de ces données, le modèle simule dans le sol la consommation des nitrates par les plantes, l'immobilisation de ces solutés, la dénitrification et le flux de nitrates disponible pour le ruissellement. Ce calcul varie selon l'humidité du sol et la température. Dans les rivières, les décharges ponctuelles sont prises en compte, la nitrification est simulée, et les pertes d'N par reprise de la végétation et par dénitrification sont conceptualisées.

1.7.2.2 La modélisation des transferts d'eau

Les modèles à bases physiques simulant les transferts d'eau dans un hydrosystème sont nombreux. MODFLOW (<http://www.modflow.com/>) est un modèle mécaniste simulant les transferts d'eau dans des nappes libres et captives en 3 dimensions par la méthode des différences finies. Cet outil comprend également des modules permettant de simuler les échanges entre la nappe et la rivière et les écoulements dans les drains. Des modules additionnels permettent en outre de prendre en compte des processus spécifiques : les écoulements dans les couches limites d'un aquifère captif, la représentation de rivières temporaires, etc.

MIKE SHE (Refsgaard *et al.*, 1999) est un modèle à bases physiques distribué simulant les transferts d'eau, des précipitations aux écoulements en rivières, via divers processus de transfert : ruissellement, infiltration, évapotranspiration, fonte des neiges et écoulements souterrains. Ce modèle gère les interactions entre les principaux compartiments de l'hydrosystème (rivière-nappe, sol-nappe). Ce modèle résout les principales équations aux dérivées partielles gouvernant les transferts d'eau : le ruissellement (Saint-Venant 2D), le transfert en rivière (Saint-Venant 1D), le transfert à travers la zone non saturée (équation de Richards 1D) et la zone saturée (équation de Boussinesq 3D).

Des outils hydrologiques conceptuels ont également été développés. TOPMODEL (Montesinos-Barrios et Beven, 2001) est un modèle conceptuel semi-distribué. Deux composantes d'écoulement y sont prises en compte :

- l'écoulement en nappe souterraine qui alimente les cours d'eau par drainage latéral
- l'écoulement superficiel par saturation du sol sur les zones où la nappe atteint la surface

Ce modèle approxime le gradient hydraulique local en zone saturée par la pente de surface. Les points avec le même indice topographique sont donc supposés avoir les mêmes réactions hydrologiques. L'écoulement est modélisé par une série de réservoirs de stockage se remplissant et se

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

déversant avec une certaine dynamique. Le premier réservoir de stockage correspond au sol. Il est caractérisé par une capacité au champ et est soumis à de l'évapotranspiration. Lorsque la teneur en eau de ce réservoir excède la capacité au champ, une vidange intervient. Cette eau permet de remplir un second réservoir liant la zone non saturée à la zone saturée. Lorsque ce réservoir est complètement saturé, les précipitations génèrent du ruissellement.

TOPMODEL permet donc de déterminer sur chaque point et à chaque pas de temps la profondeur de la nappe (réponse lente de l'hydrosystème) ainsi que le ruissellement (la réponse rapide de l'hydrosystème).

Enfin, des modèles simulant précisément les transferts d'eau dans l'hydrosystème, aux dépens d'une représentation plus simplifiée des transferts de solutés ont été développés. Par exemple, le modèle ANSWERS (Areal Nonpoint Source Watershed Environmental Response Simulation) est un modèle distribué et évènementiel conçu pour simuler les processus d'écoulement, d'érosion et de transport des sédiments, et de la qualité des eaux dans un bassin versant agricole (Beasley *et al.*, 1980). Les processus simulés sont l'interception des précipitations par le couvert végétal, l'infiltration, le ruissellement de surface et le ruissellement hypodermique. Pour le transfert de soluté, ANSWERS utilise une équation empirique entre concentration en nitrates et volume d'eau écoulé.

1.7.2.3 Les couplages

Pour optimiser la représentation de ces contaminations en nitrates dans un hydrosystème, des couplages entre un modèle de transfert d'azote et un modèle hydrologique ont été réalisés.

Ainsi, Refsgaard *et al.* (1999) ont utilisé un couplage du modèle hydrogéologique MIKE SHE, qui décrit par des équations différentielles les écoulements dans les principaux compartiments d'un hydrosystème, avec le modèle agronomique DAISY simulant les réactions biogéochimiques impliquant l'azote dans le sol.

Le modèle hydrogéologique MODCOU (Ledoux *et al.*, 2007) que nous décrivons dans la section suivante a également été couplé avec un modèle de lessivage des nitrates, MORELN, qui simule les processus d'adsorption-désorption de l'ammonium, le prélèvement des nitrates par les plantes, la minéralisation, les réorganisations à partir de l'ammonium et des nitrates, et la nitrification (Geng, 1991, Cabon *et al.*, 1991). Ultérieurement, MODCOU a été couplé avec le modèle agronomique STICS pour simuler la contamination en nitrates dans l'hydrosystème Seine. Une description plus détaillée de ce couplage est présentée dans le chapitre suivant.

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

Flipo *et al.* (2007) ont également développé le modèle intégré CAWAQS qui est un couplage entre le modèle PROSE (écoulement en rivières), NEWSAM (écoulement et transport pseudo-3D en aquifères, présenté dans le chapitre suivant), le modèle agronomique STICS, et une version simplifiée du modèle d'hydrologie de surface MODSUR (présenté dans le chapitre suivant).

Le modèle hydrologique GARDENIA (Thiery, 1982), développé par le Bureau de Recherches Géologiques et Minières (BRGM) a été couplé avec le modèle de qualité BICHE, également développé au BRGM d'Orléans (Thiery, 1983) pour simuler en continu l'évolution des concentrations en nitrates à l'exutoire d'un bassin versant ou à un point de la nappe. GARDENIA est un modèle conceptuel à 3 réservoirs : le réservoir de surface qui partitionne les précipitations en évapotranspiration, percolation et ruissellement, le réservoir sol et le réservoir d'eau souterraine. BICHE simule quant à lui les processus biogéochimiques impliquant l'azote (adsorption-désorption de l'ammonium, minéralisation, réorganisation, nitrification et prélèvements par les plantes).

1.7.3 Utilisation de ces modèles pour tester des scénarios et entreprendre des actions compensatoires

Diverses interventions humaines sont menées pour tenter de réduire les contaminations diffuses en nitrates. Mais circonscrire une pollution d'origine agricole est complexe. Les actions ont donc tendance à se concentrer sur des zones caractérisées par des apports azotés agricoles importants, un fort potentiel de lessivage et des concentrations en nitrates élevées dans l'eau (Almasri et Kaluarachchi, 2004). Ces actions doivent également satisfaire à la fois les agriculteurs, qui craignent que ces mesures ne réduisent considérablement leurs rendements, et les consommateurs d'eau (Croll et Hayes, 1988).

En se basant sur des résultats de travaux de modélisation, plusieurs programmes, dont le panel d'actions est large, ont été développés : diminution des quantités appliquées (Moreno *et al.*, 1996), ajustement des quantités épandues aux besoins de la culture pratiquée, prise en compte des teneurs en azote déjà présentes dans le sol, application durant la période active de la culture, mise en place de cultures intermédiaires en automne et en hiver (Croll et Hayes, 1988, Foster, 2000), définition de zones protégées exemptes de fertilisation minérales (Almasri et Kaluarachchi, 2004)... Ainsi Serhal (2006) et Serhal *et al.* (2006) ont montré avec le modèle Agriflux (Hydriad, 2000) que le programme Ferti-Mieux visant à réduire les lixiviations de nitrates par les sols dans le Nord de la France permettrait en 2015 de réduire les concentrations en nitrates dans les nappes.

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

Dans un autre registre, O'Shea et Wade (2009) ont démontré à l'aide du modèle INCA-N (Whitehead *et al.*, 1998, O'Shea et Wade, 2009) couplé à un modèle économique que la mise en place d'une taxe sur les fertilisants azotés apparaîtrait comme la réglementation la plus efficace pour réduire la contamination en nitrates dans l'environnement.

Viavattene (2006) a quant à lui procédé à une exploitation socio-économique des contaminations en nitrates sur le bassin de la Seine avec MODCOU-NEWSAM. Il met en évidence que l'application d'un programme de mise en place systématique de CIPAN (Culture Intermédiaire Piège à Nitrates), avec en parallèle une réduction de 20 % des apports en fertilisants, générerait un bénéfice en terme de coût de la production d'eau potable assez faible par rapport au coût pour l'agriculture. L'auteur précise cependant que ce résultat doit être nuancé par le fait que de nombreux bénéfices ne sont pas pris en compte dans cette étude et que le scénario compensatoire testé n'est certainement pas l'approche la plus efficace en terme de coûts.

Puis une étude réalisée par Thieu *et al.* (2010) a consisté à tester avec le modèle Seneque/Riverstrahler 2 scénarios radicalement différents de pratiques agricoles sur trois bassins versants en France : un scénario le passage sur trois bassins versants en France d'une agriculture intensive à une agriculture biologique. Ces changements génèrent une diminution radicale des concentrations en nitrates dans les rivières à des valeurs inférieures à 10 mg.L^{-1} .

Conclusion du chapitre 1

Dans ce chapitre 1, nous avons posé et expliqué la problématique de la contamination en nitrates dans les hydrosystèmes. Cette partie a permis de souligner le caractère mondial de ce phénomène. Nous avons également pu mesurer les conséquences négatives tant d'un point de vue environnemental, sanitaire et économique de ces contaminations azotées.

Pour limiter les impacts de cette contamination, des normes et objectifs de qualité ont alors été mis en place. La Directive Cadre sur l'Eau impose ainsi aux Etats membres de l'Union Européenne d'atteindre un bon état écologique de leurs eaux d'ici à 2015, avec notamment des concentrations en nitrates inférieures à 50 mg.L^{-1} .

Pour respecter cette norme, une identification des sources de cette contamination par des campagnes d'acquisition a été nécessaire. Il a ainsi été mis en évidence que cette contamination est essentiellement d'origine agricole et donc diffuse. Ce chapitre nous a également permis de souligner l'influence toute particulière de la zone non saturée sur les transferts de solutés dans l'hydrosystème. En effet, ce milieu peut engendrer des délais très importants entre une contamination en surface et son impact sur les ressources souterraines.

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

A partir de toutes ces données observées, des outils de modélisation ont été développés pour comprendre la dynamique des contaminations souterraines en nitrates dans le temps et dans l'espace et tester des scénarios compensatoires.

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

1.7 Etat des connaissances sur la contamination en nitrates des hydrosystèmes : la modélisation

Chapitre 2

La modélisation de la contamination en nitrates des hydrosystèmes : nos outils disponibles

Nous disposons au sein de l'équipe SHR (Système Hydrologique et Réservoirs) du Centre de Géosciences de l'Ecole des Mines de Paris de plusieurs outils permettant de modéliser les transferts d'eau et de solutés dans les différents compartiments d'un hydrosystème.

Le programme NEWSAM a été conçu dans les années 70 en vue de la simulation numérique des transferts d'eau et de masse dans des aquifères multicouches (Ledoux, 1975).

Au fil des applications, il est devenu de plus en plus évident qu'une prise en compte des interactions entre ces écoulements souterrains et les écoulements de surface était nécessaire pour modéliser plus précisément les flux d'eau. En se basant sur le modèle hydrogéologique NEWSAM et sur le modèle de surface CEQUEAU (Girard *et al.*, 1972), le modèle couplé MODCOU a été mis au point pour simuler à la fois les écoulements d'eau de surface et souterrains et les interconnexions entre ces deux domaines dans un hydrosystème (Ledoux, 1980).

Ultérieurement, pour comprendre les contaminations diffuses en nitrates d'origine agricole dont les enjeux environnementaux ont été présentés dans le chapitre 1, un couplage entre le modèle hydrogéologique MODCOU, le modèle NEWSAM et le modèle agronomique STICS a été mis au point par Gomez (2002) pour simuler les transferts de nitrates dans un hydrosystème.

Nous présentons donc ici une description de ces outils de modélisation.

2.1 La modélisation des transferts d'eau et de masses dans les aquifères : NEWSAM

NEWSAM modélise à l'échelle régionale les transferts d'eau et de masse conservative (i.e. n'intervenant dans aucune réaction bio-physico-chimique) dans des aquifères libres ou captifs en régimes permanent et transitoire (Ledoux, 1975). NEWSAM gère un nombre variable de couches, sièges d'écoulements profonds, éventuellement connectées hydrauliquement entre elles, et figurant la succession verticale des aquifères (Figure 2.1).

Les équations aux dérivées partielles décrivant les flux d'eau et de solutés sont résolues par la méthode des différences finies sur un réseau à mailles emboîtées carrées auxquelles sont rattachées des caractéristiques physiques souterraines du milieu.

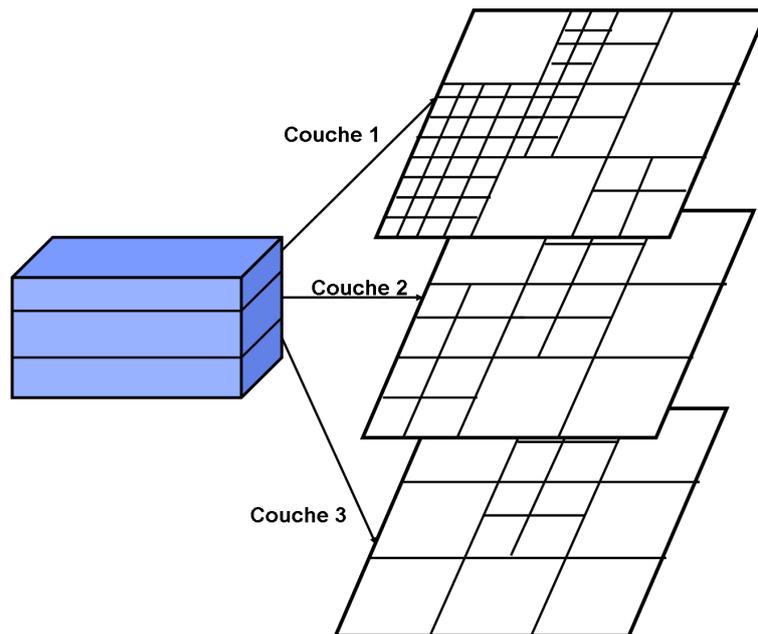


FIGURE 2.1: Principe du maillage multicouche adopté dans NEWSAM

2.1.1 Les transferts d'eau

Les écoulements d'eau dans les aquifères sont basés sur l'intégration numérique de l'équation de diffusivité qui régit les écoulements en milieux poreux. Par la schématisation multicouche adoptée, on distingue des niveaux aquifères sub-horizontaux, sièges d'écoulement en nappe, séparés par des

2.1 La modélisation des transferts d'eau et de masses dans les aquifères : NEWSAM

niveaux dits semi-perméables, où les écoulements sont faibles mais toutefois capables d'assurer des transferts verticaux notables à l'échelle régionale. NEWSAM considère que les écoulements sont bidimensionnels dans les aquifères et monodimensionnels subverticaux dans les semi-perméables. Le système aquifère est donc décrit de manière quasi-tridimensionnelle. L'équation de diffusivité s'écrit :

$$\operatorname{div} \left(\bar{T} \operatorname{grad} H \right) = S \frac{\partial H}{\partial t} + q \quad (2.1)$$

$$q = q_{inj} + q_{drain} + q_{pomp} + q_{sup} + q_{inf} \quad (2.2)$$

Avec H la charge hydraulique, \bar{T} le tenseur de transmissivité, S le coefficient d'emmaganement, q_{drain} , q_{inj} , q_{pomp} , q_{sup} et q_{inf} les débits par unité de surface respectivement drainé, injecté, prélevé, et échangés à travers les semi-perméables supérieurs et inférieurs. Par convention de signe, les débits sortants sont positifs et les débits entrants sont négatifs.

Les équations 2.3 et 2.4 permettent de calculer les débits verticaux :

$$q_{sup} = \frac{k_{sup}}{l_{sup}} (h - h_{sup}) \quad (2.3)$$

$$q_{inf} = \frac{k_{inf}}{l_{inf}} (h - h_{inf}) \quad (2.4)$$

Avec k_{inf} et k_{sup} respectivement les perméabilités des semi-perméables inférieur et supérieur d'un aquifère considéré, et l_{inf} et l_{sup} l'épaisseur des semi-perméables inférieur et supérieur de l'aquifère.

L'équation de diffusivité étant résolue numériquement par la méthode des différences finies, on résout alors l'équation suivante, valable pour chaque maille souterraine i :

$$\sum_{j=1}^{nvois} T_{ij} (H_i(t') - H_j(t')) = a_i^2 S_i \frac{H_i(t + \Delta t) - H_i(t)}{\Delta t} + q_i(t') \quad (2.5)$$

Avec H_i la valeur moyenne de la charge sur chacune des maille i , a_i la surface de la maille i , S_i le coefficient d'emmaganement de la maille i , $nvois$ le nombre de mailles j en relation avec la maille i , T_{ij} la transmissivité de passage définie par la moyenne harmonique des transmissivités des mailles i et j .

Le calcul de la charge à $(t+\Delta t)$ est fait de manière explicite ($t'=t$) ou implicite ($t'=t+\Delta t$) en fonction du rapport entre le pas de temps de calcul Δt et le pas de temps critique tc , qui caractérise la rapidité de réponse de la nappe définie par :

$$tc = \min_{1 \rightarrow N} \left(\frac{a_i^2 S_i}{\sum_{Nvois} (T_{ij})} \right) \quad (2.6)$$

2.1 La modélisation des transferts d'eau et de masses dans les aquifères : NEWSAM

Si ($\Delta t > tc$), l'approximation explicite devient instable. On utilise alors l'approximation implicite. A chaque pas de temps, la résolution de ces équations fournit la charge hydraulique en tout point du domaine souterrain.

Deux types de conditions aux limites sont possibles :

- potentiel imposé : des limites sont représentées à piézométrie constante et de valeur connue dans la nappe.
- flux imposé : cette condition est appliquée automatiquement à une valeur nulle sur la périphérie du modèle. Il est cependant possible d'imposer une valeur non nulle où cela est nécessaire.

2.1.2 Les transferts de solutés

L'approche la plus usuelle pour représenter les transferts d'un soluté conservatif en milieux poreux est basée sur un modèle hydrodispersif qui considère un transfert convectif et dispersif. L'équation de convection-dispersion est ainsi classiquement utilisée pour décrire ce transfert :

$$\text{div} \left(\bar{\bar{D}} \vec{\text{grad}} C - C \vec{V} \right) = \omega \frac{\partial C}{\partial t} + Q \quad (2.7)$$

Avec C la concentration en solutés, \vec{V} la vitesse de Darcy, ω la porosité cinématique, $\bar{\bar{D}}$ un tenseur de dispersion et Q un terme source rendant compte des phénomènes physiques, géochimiques et radiologiques affectant les éléments transportés.

A l'échelle de l'hydrosystème visé par NEWSAM cependant, les phénomènes de dispersion sont négligés et l'accent est mis sur les transports convectifs. En respectant la loi de conservation de la matière au cours du transport, ce modèle résout donc l'équation suivante pour un écoulement bidimensionnel :

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-\vec{V}_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-\vec{V}_y C \right) = \omega \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.8)$$

Trois types de conditions aux limites des transferts de masses sont disponibles dans cette version de NEWSAM :

- injection d'un débit d'eau à concentration constante
- pompage dans une nappe polluée
- si on considère une limite à potentiel hydraulique imposé, le sens de transfert de masse dépendra du potentiel calculé dans la nappe.

2.2 La modélisation des transferts d'eau dans un hydrosystème : MODCOU

De nombreuses applications ont été effectuées avec NEWSAM. Patyn *et al.* (1989) ont utilisé cet outil pour une simulation du stockage radioactif dans des argiles en Belgique. Dieng *et al.* (1990) ont quant à eux appliqué cet outil de modélisation sur un bassin sédimentaire au Sénégal. NEWSAM a également été employé pour modéliser les transferts d'eau, de chaleur et de masse dans l'aquifère géothermique du Dogger dans le bassin de Paris (Wei, 1990).

Dans les années 80, le modèle couplé MODCOU s'est basé sur le modèle NEWSAM pour simuler les écoulements souterrains (Ledoux, 1980). NEWSAM a cependant continué constamment à évoluer pour répondre à de nouvelles problématiques. Ainsi Levassor et Ledoux (1999) répertorient depuis 1980 une meilleure description des écoulements dans les aquitards, un plus grand réalisme des conditions aux limites (intégration d'option pour supprimer une charge hydraulique imposée, annuler l'effet d'un débit limite de drain ou d'une cote de drainage ou encore supprimer un drain...), la gestion des biseaux salés, la prise en compte de la compaction des aquitards...

Hoyos *et al.* (2010) ont également modifié le code NEWSAM de sorte qu'il soit possible dorénavant de prendre en compte l'écoulement densitaire dans les aquifères. Ainsi, la masse volumique du flux d'eau peut varier dans cet outil selon la densité du soluté étudié et la température. Dans le cadre de cette même étude, une prise en compte des transferts via des failles verticales a également été réalisée. Des failles horizontales ont également été simulées.

2.2 La modélisation des transferts d'eau dans un hydrosystème : MODCOU

Le modèle MODCOU a, comme NEWSAM été mis au point sur une structure multicouche à mailles emboîtées carrées (Figure 2.1).

Les étapes du cycle de l'eau dans cet outil sont segmentées en modules indépendants (Figure 2.2).

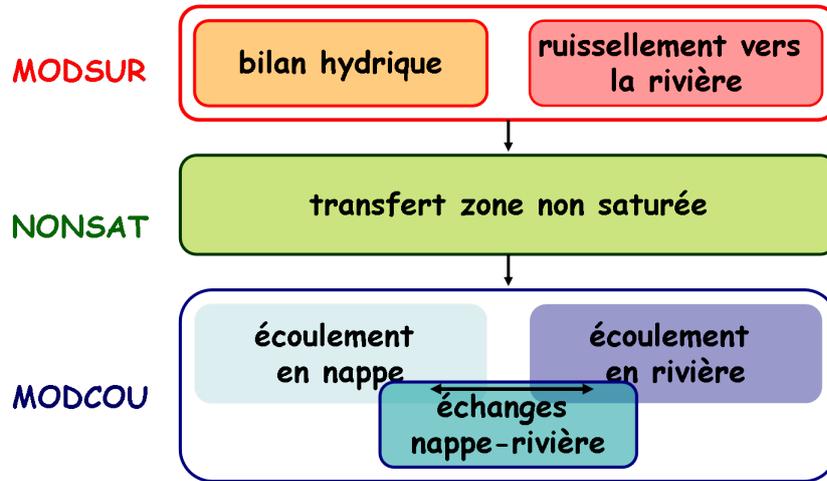


FIGURE 2.2: Structure du modèle hydrogéologique MODCOU (Ledoux, 1980)

MODSUR est ainsi consacré à la partition des précipitations entre infiltration et ruissellement, *NONSAT* assure le transfert de l'infiltration à travers la zone non saturée et MODCOU gère les écoulements en rivières et dans les nappes. Cette approche permet ainsi, tout en représentant le cycle de l'eau dans son ensemble, de vérifier chaque processus.

Chaque calcul est effectué sur le pas de temps des données météorologiques, classiquement un jour. Nous présentons ici succinctement les différents modules intervenant dans cet outil.

2.2.1 Les transferts d'eau conjoints en rivières et souterrains : MODCOU

Pour développer le programme MODCOU, Ledoux (1980) s'est basé sur le modèle hydrogéologique NEWSAM.

MODCOU simule ainsi comme NEWSAM à l'échelle régionale les transferts d'eau dans des aquifères multicouches en régime transitoire, en résolvant par la méthode des différences finies l'équation de diffusivité sur un réseau de mailles emboîtées carrées (cf section 2.1.1).

Cependant, contrairement à NEWSAM, MODCOU ne gère pas le transfert des solutés.

En revanche, ce modèle couplé simule les écoulements en rivières via un modèle linéaire. Pour simuler les débits à une station dans MODCOU, le réseau hydrographique est en effet découpé en biefs dont les mailles ont le même temps de transfert à la station simulée, temps égal à un nombre entier de pas de temps de calcul. Les biefs sont alimentés par du ruissellement pur dont nous présentons la conceptualisation dans la section 2.2.2. Ces biefs se vident les uns dans les autres, de l'amont vers l'aval, suivant une loi exponentielle.

2.2 La modélisation des transferts d'eau dans un hydrosystème : MODCOU

En plus de simuler les écoulements en surface et dans le souterrain, MODCOU modélise également les interactions entre ces deux domaines sur les éléments du maillage où existe un contact hydraulique entre la nappe et la rivière. Dans cette approche, le niveau de la rivière est considéré comme constant sur toute la durée d'une simulation. En revanche, la piézométrie évolue à chaque pas de temps dans MODCOU et les échanges nappe-rivières sont recalculés. Trois types de connexion entre la rivière et la nappe sont alors possibles (Figure 2.3) :

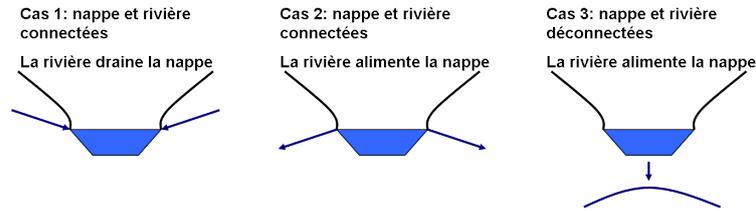


FIGURE 2.3: Les trois types de connexions nappe-rivière gérés par MODCOU

Dans le cas où la rivière draine la nappe (cas1), le débit échangé est calculé de la manière suivante :

$$q_{riv} = Tp(H - H_0) \quad (2.9)$$

Avec H le niveau piézométrique et H_0 la hauteur en rivière.

Dans le cas où la rivière alimente la nappe (cas 2 et 3), le débit échangé est égal au minimum de ces trois termes :

$$q_{riv} = \min \left\{ \begin{array}{l} Tp(H - H_0) \\ q_0 \text{ débit limite infiltrable} \\ q(r) \text{ débit disponible dans la rivière} \end{array} \right. \quad (2.10)$$

Ce terme q_{riv} est pris en compte explicitement dans la résolution de l'équation de diffusivité dans MODCOU (cf Equation 2.2) :

$$\sum_{j=1}^{nvois} T_{ij} (H_i(t') - H_j(t')) = a_i^2 S_i \frac{H_i(t + \Delta t) - H_i(t)}{\Delta t} + q_i(t') + q_{riv} \quad (2.11)$$

L'ensemble de ces calculs effectué dans MODCOU nécessite de déterminer le flux d'eau infiltré et ruisselé. Ces flux sont calculé dans le module MODSUR.

2.2.2 Le bilan hydrique : MODSUR

MODSUR est un modèle à réservoirs s'inspirant du modèle hydrologique CEQUEAU (Girard *et al.*, 1972). Il calcule à partir de deux variables atmosphériques en entrée que sont les précipitations P et l'évapotranspiration potentielle ETP , la répartition entre l'évapotranspiration réelle ETR , les précipitations efficaces EAU et le stockage dans le sol R . La variable EAU se répartit entre l'infiltration QI et le ruissellement QR (Figure 2.4).

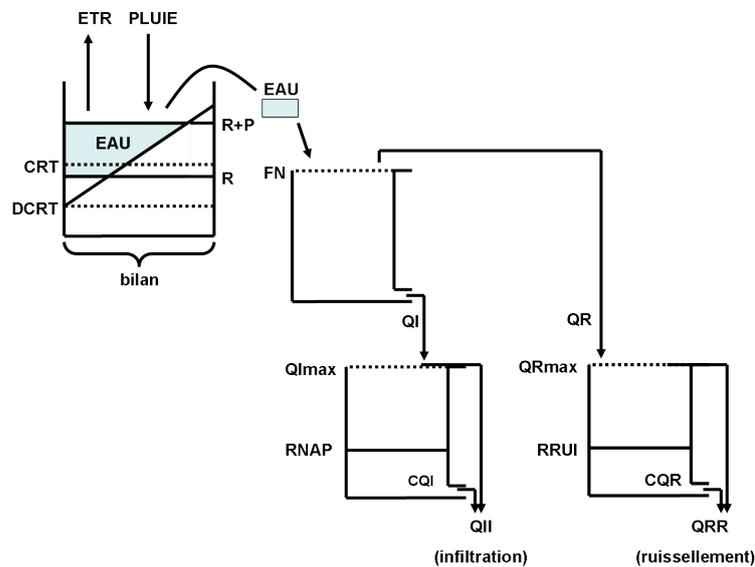


FIGURE 2.4: Principe du bilan hydrique effectué dans MODSUR

Ce calcul est mené selon le pas de temps des précipitations, et pour chaque association type de sol-végétation appelée "fonction-production".

On peut simplement dire qu'un premier réservoir effectue une répartition des précipitations entre l'évapotranspiration réelle ETR et les précipitations efficaces EAU . Ce partage fait intervenir 3 paramètres de stockage du réservoir : CRT (volume d'eau moyen), $DCRT$ (volume d'eau minimal en deça duquel ne peut plus se produire d'écoulement) et R (volume d'eau présent dans le réservoir à un instant donné) qui sont spécifiques à chaque groupe fonction-production.

Dans un deuxième réservoir, une répartition des précipitations efficaces EAU entre l'eau infiltrée QI et l'eau ruisselée QR est effectuée. L'infiltration est limitée par une valeur maximale FN , en $mm.jour^{-1}$, spécifique également à chaque fonction-production.

2.2 La modélisation des transferts d'eau dans un hydrosystème : MODCOU

Deux réservoirs supplémentaires gèrent le transfert des flux d'eau infiltré QI et ruisselé QR . Ce transfert est exponentiel et fait intervenir 4 paramètres : QI_{max} et QR_{max} qui sont respectivement le niveau de débordement du réservoir d'alimentation d'infiltration et de ruissellement, et CQI et CQR les coefficients de tarissement du réservoir d'infiltration et de ruissellement.

De plus MODSUR estime le routage de l'eau ruisselée QR jusqu'aux rivières. Ce transfert se fait par isochronisme.

Les paramètres requis dans ce modèle sont calibrés pour chaque fonction-production dans le domaine étudié. Cette approche conceptuelle avec peu de paramètres a l'avantage de nécessiter de faibles temps de calcul, ce qui la rend facilement applicable à l'échelle régionale.

On peut cependant se poser la question de savoir si cette approche conceptuelle est pertinente vis-à-vis de la grande complexité des phénomènes intervenant dans la répartition des précipitations efficaces et dans la circulation de l'eau dans les sols. En effet, en premier lieu, dans MODSUR, bien que les paramètres définis dépendent du type de sol et de la végétation présente, il n'y a pas d'influence explicite de la végétation sur le bilan hydrique. Cependant, l'impact de l'occupation du sol sur la répartition des précipitations efficaces est significatif. Les SVAT par exemple incluent des paramétrisations détaillées des échanges d'énergie, d'eau et de quantité de mouvements entre l'atmosphère, la végétation et le sol. Des modèles agronomiques comme STICS (Brisson *et al.*, 2003) font également intervenir explicitement des paramètres de culture (rotations, profondeur racinaire des cultures, surface foliaire...).

En second lieu, l'infiltration dans le sol est modélisée dans MODSUR par un transfert exponentiel. Cette approche est bien plus simpliste que ce qui est effectué par exemple dans MACRO (Scorza Junior *et al.*, 2007) ou SWAP (Van Dam *et al.*, 1997) qui simulent les transferts d'eau dans le sol par la résolution de l'équation de Richards.

Une vérification de la pertinence du concept fonctions-productions est cependant rapportée par Gomez (2002) et montre que cette schématisation est robuste : une transposition des valeurs des paramètres d'une application à une autre génère une évaluation satisfaisante du bilan hydrique.

Le flux d'eau infiltrée calculé dans MODSUR est ensuite acheminé vers le module *NONSAT* qui assure les transferts d'eau à travers la zone non saturée.

2.2.3 Les transferts d'eau à travers la zone non saturée : *NONSAT*

La conceptualisation des transferts d'eau à travers la zone non saturée repose sur l'approche de Besbes et Marsily (1984). Ceux-ci se sont basés sur des études ayant mis en évidence une relation linéaire entre l'infiltration dans le sol et l'alimentation des nappes. Ils ont montré que cette hypothèse de linéarité était valable à l'échelle d'un bassin versant. En effet, que ce soit en zones humides ou en zones arides, Besbes et Marsily (1984) ont montré que, principalement après un épisode de recharge, la zone non saturée d'un aquifère peut atteindre des teneurs en eau très élevées. L'examen de la courbe de la perméabilité en fonction de la teneur en eau montre que, dans ces conditions, la perméabilité du milieu se rapproche de la perméabilité à saturation. On a donc un écoulement linéaire dans la zone non saturée à l'échelle régionale.

Besbes et Marsily (1984) estiment que ces écoulements souterrains peuvent être décrits par l'approche de Nash (1960) qui assimile les écoulements en rivières à une cascade, appelée cascade de Nash. Ils ont alors assimilé la zone non saturée à une série de réservoirs de même épaisseur se déversant les uns dans les autres selon une loi exponentielle (Figure 2.5).

Plusieurs modèles utilisent cette approche simplifiée pour décrire les transferts à travers la zone non saturée : EPIC (Sohier *et al.*, 2009) et SWAT (Neitsch *et al.*, 2010) par exemple simulent les transferts d'eau à travers cette zone par un système de réservoirs non linéaires.

Reprenant cette approche, dans *NONSAT*, la forme des fonctions de retard de bassins est donc définie au pas de temps journalier par la relation paramétrique suivante :

$$Vin_{i+1}(t) = Vout_i(t) = Vol_i(t) \times \delta \quad (2.12)$$

avec Vin_{i+1} l'infiltration dans le réservoir $i + 1$ (m^3), $Vout_i$ la sortie d'eau du réservoir i (m^3), Vol_i le volume d'eau dans le réservoir i (m^3), δ un coefficient de vidange, i l'index des réservoirs variant de 1 à N , et t le pas de temps courant (s).

δ est lié à un temps de percolation τ (s) par la relation $\delta = 1 - \exp(-\frac{dt}{\tau})$ avec dt le pas de temps de calcul.

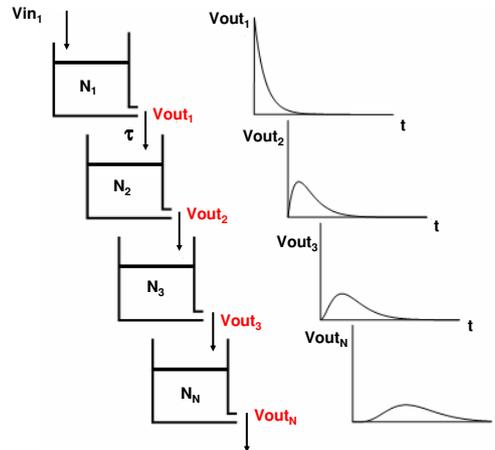


FIGURE 2.5: Représentation schématique de la cascade de Nash dans une zone non saturée

Lors d'un épisode d'infiltration, Vin_1 entre dans le réservoir N_1 (Figure 2.5). Le volume d'eau total dans ce réservoir est alors mis à jour. Simultanément, un volume d'eau $Vout_1$ égal au produit du volume d'eau total du réservoir par le coefficient de vidange δ est drainé à la base du réservoir. Le $Vout_1$ devient le Vin_2 et alimente le second réservoir, N_2 , dont le volume d'eau total est mis à jour. Ce réservoir est à son tour vidangé d'un volume d'eau $Vout_2$ égal au produit du volume d'eau total dans le réservoir par le coefficient de vidange δ .

Deux paramètres sont à définir dans ce modèle : le temps de percolation τ , qui varie en fonction du type de sol mais qui est constant sur toute l'épaisseur d'une ZNS, et le nombre de réservoirs N qui est déterminé en fonction de la profondeur moyenne de la zone non saturée et l'épaisseur des réservoirs (Besbes et Marsily, 1984).

Dans cette approche conceptuelle, les réservoirs ne sont en rien limités par des volumes minimal et maximal. Une infiltration très importante peut donc générer dans l'absolu un volume d'eau dans les réservoirs supérieur à la capacité de stockage d'une couche de sous-sol simulée.

Conclusion de la section 2.2

Ledoux (1980) a démontré la pertinence du modèle hydrogéologique MODCOU sur deux bassins

2.3 La modélisation de la contamination en nitrates dans un hydrosystème avec STICS-MODCOU-NEWSAM

versants ayant un fonctionnement hydrogéologique très différent :

- le bassin versant de la rivière Caramy situé dans le Var, d’une surface d’environ 250 km^2 , qui est caractérisé par un écoulement de base alimenté par de puissants aquifères calcaires ainsi qu’un ruissellement donnant lieu à des crues importantes.
- le bassin versant de la Haute-Lys dans le Nord de la France qui est lui caractérisé par une prédominance des écoulements souterrains dans la Craie.

Dès lors les applications se sont multipliées : sur les bassins versants de la Meuse et de la Moselle en Lorraine (Gille, 1985), sur le bassin versant de la Fecht dans les Vosges (Perrin, 1991), sur le bassin du Rhône (Habets, 1998, Golaz-Cavazzi, 1999), sur le bassin de la Seine (Gomez, 2002), de la Somme (Korkmaz, 2007)... Et ce modèle est actuellement appliqué sur la vallée du Rhin (Thierion *et al.*, 2010) et sur le bassin de la Loire (Monteil *et al.*, 2010).

2.3 La modélisation de la contamination en nitrates dans un hydrosystème avec STICS-MODCOU-NEWSAM

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les contaminations diffuses azotées d’origine agricole constituent un enjeu environnemental important puisqu’elles peuvent générer des concentrations en nitrates proches voire supérieures au seuil de potabilité fixé par la Directive Cadre sur l’Eau. Gomez (2002), Viavattene (2006) et Viennot (2008) ont donc développé une modélisation des transferts d’eau et de nitrates d’origine agricole dans un hydrosystème. Cet outil a pour but de comprendre l’évolution dans le temps et dans l’espace des concentrations en nitrates sur ce territoire.

Ce travail a été effectué dans le cadre du programme PIREN Seine, le Programme Interdisciplinaire de Recherche sur l’ENVironnement de la Seine, qui vise à développer, à partir de mesures de terrain et de modélisations, une vision d’ensemble du fonctionnement du système formé par le réseau hydrographique de la Seine, son bassin versant et la société humaine qui l’investit (Billen *et al.*, 2007). Ce travail de modélisation des flux d’eau et de nitrates dans l’hydrosystème Seine repose sur un couplage entre les modèles STICS, MODCOU et NEWSAM (Figure 2.6).

2.3 La modélisation de la contamination en nitrates dans un hydrosystème avec STICS-MODCOU-NEWSAM

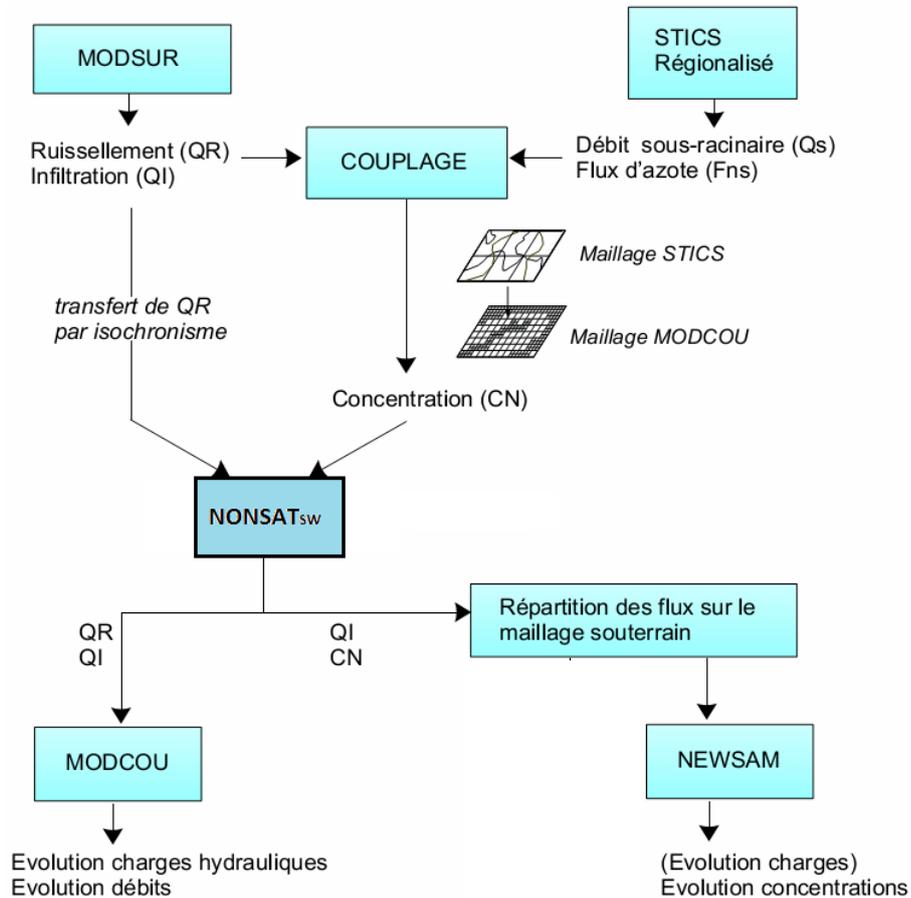


FIGURE 2.6: Représentation du couplage entre le modèle agronomique STICS, le modèle hydrogéologique MODCOU et le modèle hydrogéologique NEWSAM, d'après Gomez (2002)

Le modèle STICS fournit des flux d'azote (Fns) et des flux d'eau (Qs) sous-racinaires. Pour utiliser ces données fournies par le modèle STICS, qui opère à l'échelle de la parcelle, dans le modèle hydrogéologique, et ce sur plusieurs dizaines d'années, une procédure de régionalisation du modèle agronomique a été développée pour le faire fonctionner en chaque point d'un bassin et pour prendre en compte l'évolution temporelle des systèmes de cultures (Gomez, 2002). Spatialement, le domaine à modéliser est segmenté en unités spatiales par des conditions climatiques, pédologiques et agricoles homogènes. De surcroît, une unité spatiale est ensuite décrite par une description des proportions de chaque sols et de chaque type de successions culturales présents dans cette unité. Il est donc important de noter que l'on ne connaît pas la véritable distribution spatiale des sols et des cultures

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

dans une unité. Ceci implique que l'on ne pourra pas accéder à la distribution spatiale des quantités d'azote lixiviées à l'intérieur de chaque unité de simulations STICS. C'est un biais imposé par notre incapacité à décrire les pratiques agricoles et les hétérogénéités sur le bassin.

Seuls les flux d'azote de ce modèle sont pris en compte dans les données d'entrée du modèle couplé. Les flux d'eau correspondant (QI) sont en effet calculés avec le module MODSUR. Une correspondance entre le maillage STICS et le maillage de surface MODCOU permet alors de calculer une concentration du flux d'eau infiltré, en considérant que les nitrates fournis par STICS se répartissent uniformément entre le ruissellement et l'infiltration calculés par MODSUR.

Le flux d'eau ruisselé est transmis dans MODCOU par isochronisme jusqu'à une maille rivière. Le flux d'infiltration et la concentration sous-racinaire sont transmis au modèle $NONSAT_{SW}$ (SW=Solute and Water transfer) qui assure le transfert de l'eau et des solutés conservatifs type nitrates à travers la zone non saturée. Ce module est présenté dans la section 4.1.

$NONSAT_{SW}$ fournit alors à MODCOU le flux d'eau infiltré. MODCOU peut ainsi à partir du flux d'eau ruisselé et infiltré calculer les variations de charges piézométriques et l'évolution des débits dans les mailles rivières. Le flux d'eau et de nitrates en sortie de $NONSAT_{SW}$ sont par ailleurs transmis à NEWSAM pour calculer l'évolution des concentrations en nitrates dans le souterrain.

Grâce à ce couplage, il est donc possible de simuler les transferts de solutés dans les nappes avec NEWSAM en régime transitoire. La nappe est en effet alimentée par $NONSAT$ avec des flux d'eau et de nitrates qui varient selon les conditions météorologiques et les activités agricoles.

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

Pour l'application de ce couplage sur le bassin de la Seine, Gomez (2002) a distingué une couche de surface (avec 35698 mailles) et trois couches souterraines (22316 mailles au total) correspondant aux principaux aquifères libres du bassin de la Seine : l'Oligocène, l'Eocène et la Craie.

La Figure 2.7 présente une vue tridimensionnelle de ces trois couches souterraines.

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

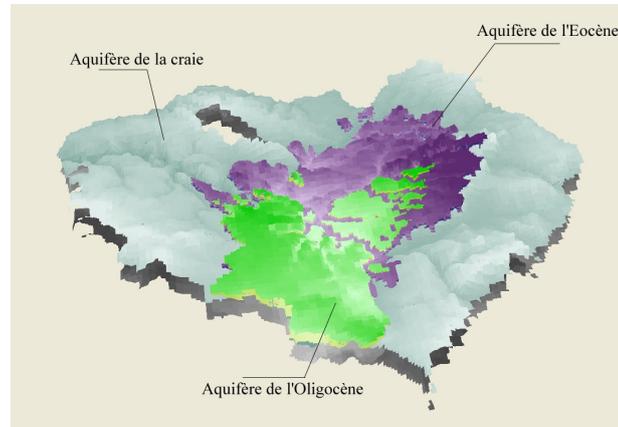


FIGURE 2.7: Vue tridimensionnelle des trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine (d'après Viennot (2008))

Les zones météorologiques y sont définies sur des mailles régulières carrées de 8 km^2 selon le système SAFRAN de Météo-France (Quintana-Segui *et al.*, 2008). SAFRAN fournit des données de précipitations P et d'évapotranspiration potentielle ETP.

Une évaluation des capacités du couplage STICS-MODCOU-NEWSAM à restituer les données observées sur l'hydrosystème Seine a été réalisée par Viavattene (2006) et Viennot (2008).

2.4.1 Evaluation des transferts d'eau

Suite à l'ajustement du modèle de surface MODSUR, le calage du modèle souterrain MODCOU permet de restituer le débit de base aux stations hydrométriques et les variations piézométriques observées dans les nappes du bassin de la Seine (Viennot et Ledoux, 2004). Viavattene (2006) a tracé la comparaison de niveaux piézométriques moyens observées et simulés entre 1985 et 2004 sur le bassin de la Seine, tous aquifères confondus (Figure 2.8).

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

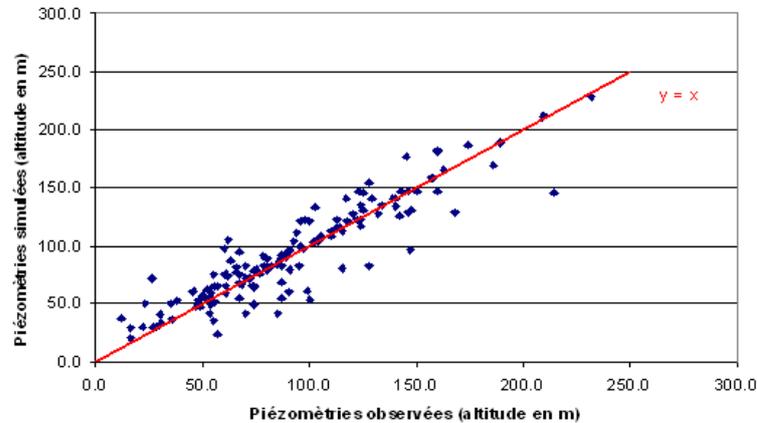


FIGURE 2.8: Comparaison entre des cotes piézométriques observées sur le bassin de la Seine et simulées par STICS-MODCOU-NEWSAM entre 1984 et 2005 (Viavattene, 2006)

On constate que STICS-MODCOU-NEWSAM permet de restituer des cotes piézométriques moyennes entre 1981 et 2003 se comparant bien avec les cotes moyennes observées sur la même période, même si des écarts parfois largement supérieurs à 10 m sont observés sur certains piézomètres.

2.4.2 Evaluation des transferts de nitrates

Pour évaluer la capacité de STICS-MODCOU-NEWSAM à restituer les concentrations en nitrates dans les eaux souterraines du bassin de la Seine, Viennot (2008) a effectué une comparaison des concentrations en nitrates observées et simulées dans les trois principaux aquifères libres de cette zone géographique. Il s'est pour cela basé sur la procédure de comparaison définie par Viavattene (2006) qui a utilisé une base de données des concentrations souterraines en nitrates retravaillée à partir de la base de données ONQES (Observatoire National de la Qualité des Eaux Souterraines) qui fournit plus de 6500 points de mesures bien répartis sur l'ensemble du bassin de la Seine entre 1972 et 1995 (Figure 2.9).

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

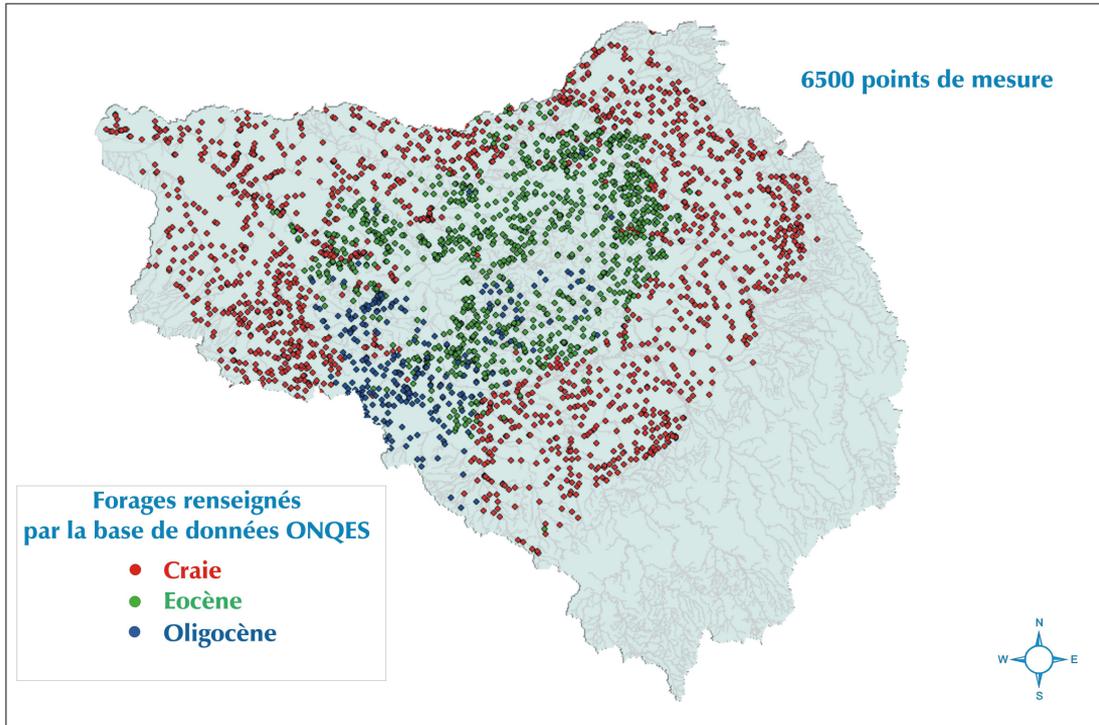


FIGURE 2.9: Répartition géographique des captages de la bases de données ONQES sur les aquifères de la Craie, de l'Eocène et de l'Oligocène (d'après Viavattene (2006))

Pour déterminer la meilleure méthode de comparaison entre les données observées et simulées, Viavattene (2006) a tout d'abord procédé à une analyse des histogrammes des concentrations en nitrates mesurées dans le milieu souterrain entre 1980 et 1984. Se basant sur la forme des histogrammes qui présentent une grande dispersion vers les valeurs élevées de concentrations, Viavattene (2006) estime alors que la médiane des concentrations est le meilleur indice statistique à utiliser pour procéder à une comparaison des concentrations observées et simulées (étant peu sensible aux valeurs extrêmes, contrairement à la moyenne).

Viennot (2008) a donc procédé à une comparaison de la médiane des concentrations observées et simulées dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine. Les résultats sont présentés sur la Figure 2.10.

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

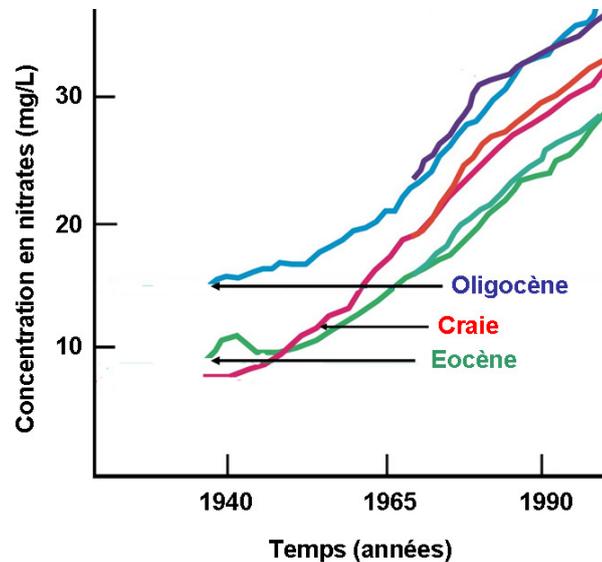


FIGURE 2.10: Evolution de la médiane des concentrations observée (section de droite) dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine (Oligocène en bleu, Eocène en vert et Craie en rouge) et simulée par STICS-MODCOU-NEWSAM (Viennot, 2008)

On constate que, même si STICS-MODCOU-NEWSAM parvient à restituer la tendance d'évolution de la médiane des concentrations en nitrates dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine, les médianes simulées par le modèle sont beaucoup moins lissées que les médianes observées correspondantes.

Cependant, une comparaison des médianes des concentrations observées et simulées sur chaque point de mesures a également été effectuée et permet de mettre en évidence localement des écarts importants. Ces différences sont présentées sur les Figures 2.11, 2.12 et 2.13.

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

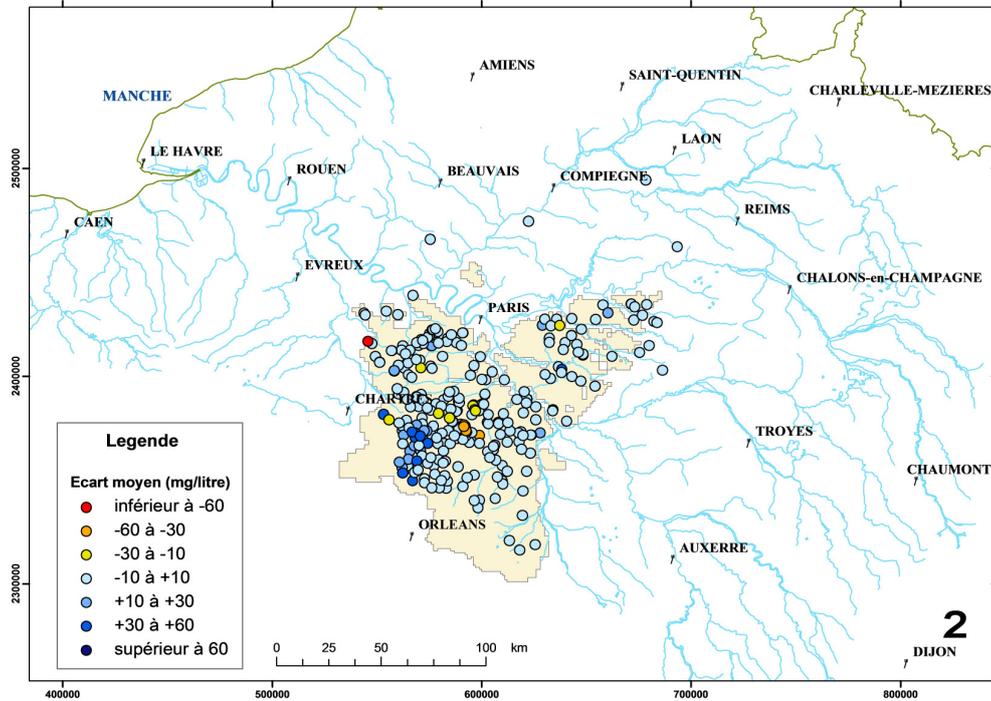


FIGURE 2.11: Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de l'Oligocène (Viennot, 2008)

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

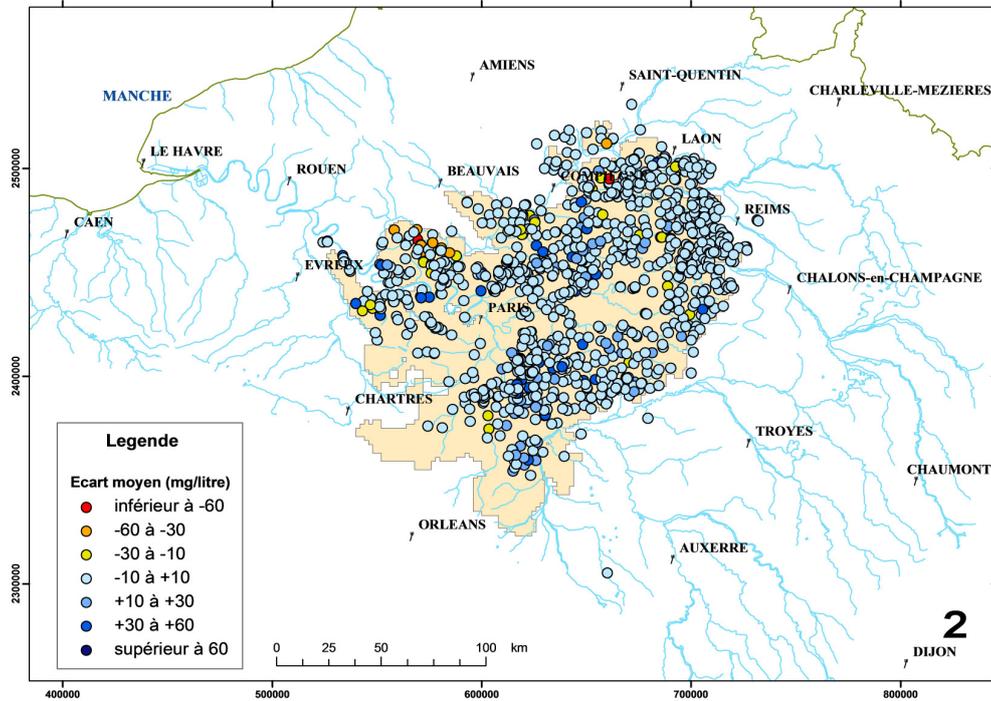


FIGURE 2.12: Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de l'Eocène (Viennot, 2008)

2.4 Evaluation de la modélisation de la contamination en nitrates de l'hydrosystème Seine avec STICS-MODCOU-NEWSAM

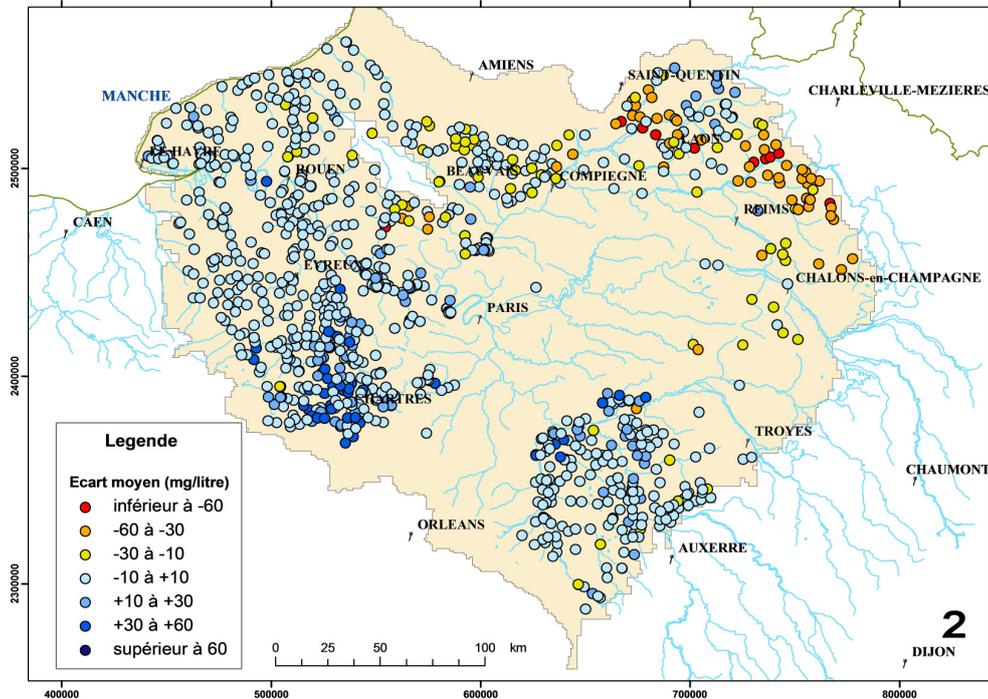


FIGURE 2.13: Différences entre les concentrations moyennes annuelles en nitrates observées et simulées en 2000 sur les forages de la Craie (Viennot, 2008).

Des écarts de simulations de $\pm 60 \text{ mg.L}^{-1}$ sont ainsi mis en évidence dans la Beauce et dans la partie Nord-Est du bassin.

Erreurs de modélisations : les causes possibles

De multiples facteurs sont à l'origine de ces écarts de modélisation.

Tout d'abord, une erreur dans l'estimation même des intrants doit être prise en compte. Des incertitudes dans la base de données de l'INRA utilisée dans STICS peuvent en effet être source d'erreurs dans la chaîne de modélisation des transferts de nitrates dans l'hydrosystème. En second lieu, les flux de nitrates calculés par STICS ne sont pas spatialisés à l'intérieur du maillage des Petites Régions Agricoles utilisé pour la distinction des zones homogènes. STICS fournit en effet un flux azoté moyen par unité de simulation, correspondant au flux moyen de l'ensemble des successions culturales définies sur cette unité.

Puis des erreurs dans la conceptualisation des flux dans MODCOU-NEWSAM peuvent biaiser l'es-

timation des concentrations en nitrates :

- des erreurs liées au cycle de l'eau dans MODCOU peuvent intervenir. D'éventuelles inexactitudes dans le bilan hydrique des précipitations, dans le transfert de l'eau à travers la zone non saturée et dans les nappes peuvent générer localement des erreurs de modélisation des flux de nitrates.
- ces défauts de modélisation peuvent également être liés à des défauts dans la conceptualisation des transferts des polluants dans l'hydrosystème. L'approche conceptuelle utilisée pour le transfert des nitrates à travers la zone non saturée par exemple n'a jamais été jusque-là validée. On considère en outre un transfert purement conservatif des nitrates dans le modèle hydrogéologique, or des dénitrifications sont possibles dans les zones non saturées, dans les nappes, dans les zones ripariennes et dans les rivières.
- puis des erreurs liées à la méthode d'initialisation adoptée jusqu'ici peuvent expliquer en partie les écarts locaux important mis en évidence entre les concentrations observées et simulées sur le bassin de la Seine. Nous développons ce point dans la section [4.4.2.3](#).

Enfin, les écarts entre les concentrations observées et simulées dans les nappes peuvent être dues au fait que certains phénomènes influençant la dynamique de transfert des solutés ne sont pas pris en compte dans ce modèle. En effet, le battement de nappe par exemple n'est pas pris en compte dans le modèle car les rétroactions entre les modules ne sont pas possibles. Or des études ont démontré que ce phénomène avait un impact significatif sur la dynamique de contamination souterraine (cf section [3.2.2.2](#)).

Un certain nombre de modifications sont donc possibles pour tenter d'améliorer les capacités de ce modèle couplé à simuler les transferts de solutés sur le bassin de la Seine.

Des améliorations ont donc été apportées à ce modèle couplé dans le cadre du développement du modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée, pour prendre en compte des phénomènes qui étaient jusque-là ignorés et/ou négligés.

2.5 Un outil intégré des hydrosystème en développement : Eau-dyssée

La modélisation des ressources en eaux tant d'un point de vue qualitatif que quantitatif, selon des scénarios climatiques, agricoles etc., nécessite de plus en plus le recours à des modèles intégrés des hydrosystèmes.

C'est dans cette optique qu'a été initié le développement du modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée (Habets *et al.*, 2010). Ce projet vise à mettre au point une structure pérenne et évolutive qui facilite les couplages entre différents modèles en bénéficiant des possibilités d'un coupleur externe, PALM (Piacentini et the PALM Group, 2003). Cette structure repose sur le couplage de modèles existants, dont le modèle MODCOU. On peut signaler que des couplages entre MODCOU et d'autres modèles ont déjà été réalisés, notamment avec le modèle de surface ISBA (Habets, 1998) et le modèle agronomique STICS (Gomez, 2002). Mais il s'agissait le plus souvent de simples échanges séquentiels entre code sans rétroaction possible. De plus, les modifications apportées au code pour ces couplages rendaient ceux-ci souvent peu évolutifs.

MODCOU a donc été restructuré pour être intégré dans Eau-dyssée. Cette restructuration a été mise à profit pour modéliser en plus des phénomènes qui étaient jusque-là ignorés ou négligés, notamment lorsqu'il s'agit de prendre en compte des rétroactions entre modules.

Restructuration de MODCOU dans Eau-dyssée

La Figure 2.14 présente une comparaison de la structure du modèle MODCOU-NEWSAM et du modèle hydrogéologique dans Eau-dyssée.

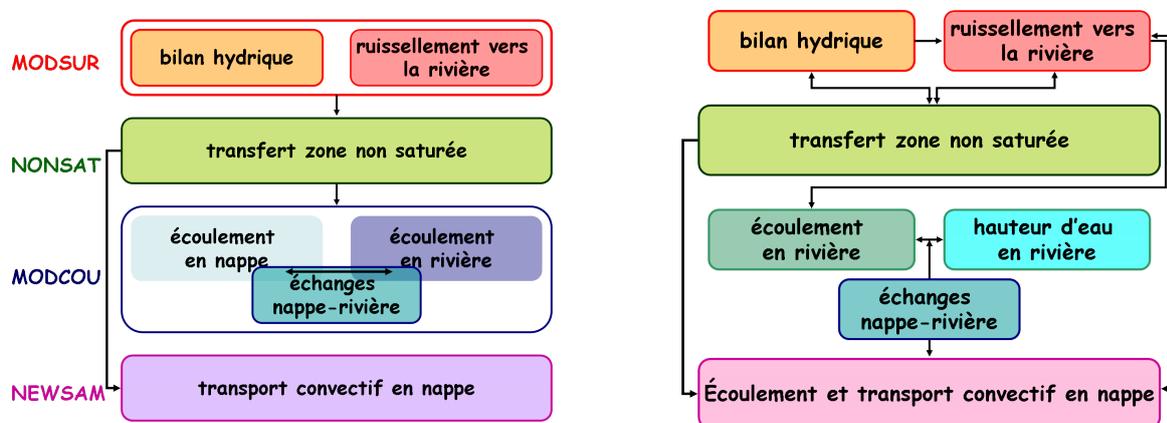


FIGURE 2.14: Comparaison entre MODCOU et MODCOU dans Eau-dyssée (Habets *et al.*, 2010)

L'ancienne version du modèle hydrogéologique est constituée de 4 modules : MODSUR qui calcule le bilan hydrique des précipitations et le routage des ruissellements, NONSAT pour les transferts dans la zone non saturée, MODCOU pour l'estimation des écoulements en nappe et les écoulements en rivières, et enfin NEWSAM pour l'écoulement et le transport convectif en nappe (Figure 2.14, partie gauche).

Le transfert des informations d'un compartiment du cycle hydrologique au suivant dans cette version est effectué de manière séquentielle : chaque partie tourne sur la période étudiée et transmet les flux aux modules suivants via des fichiers de sorties. Les rétroactions entre modules ne sont donc pas possibles. Dans la nouvelle version Eau-dyssée, la modularité de MODCOU a été améliorée. La structure générale du code est la même mais plusieurs modules peuvent dorénavant intervenir en même temps lors de la simulation d'un hydrosystème via un échange sous forme de variables globales des informations entre chaque module.

Puis, des options intégrées dans Eau-dyssée permettent de modéliser une entité par différents modules à disposition, ce qui donne un caractère interchangeable à ce modèle intégré. Le bilan hydrique par exemple, peut être effectué par MODSUR, mais également par ISBA.

Enfin, dans l'ancienne version, rappelons que les transferts conjoints d'eau en surface et en souterrain sont assurés par le modèle MODCOU tandis que les transferts de solutés dans les nappes sont modélisés par NEWSAM. Le couplage de ces deux modèles se traduit donc par deux résolutions successives de l'équation de diffusivité. Ce doublon génère une augmentation superflue des temps de calcul et de potentielles erreurs.

Dans la nouvelle version Eau-dyssée, la modélisation de ces flux d'eau et de solutés est effectuée dans un seul et même module, SAM (Simulation Aquifères Multicouches). Ce module fusionne les capacités de MODCOU à simuler à la fois les transferts d'eau dans les aquifères et les rivières ainsi que les interactions entre ces deux domaines, et les capacités de NEWSAM à simuler les transferts de solutés dans les nappes. La redondance de la résolution de l'équation de diffusivité est donc supprimée. La création de ce nouveau module a permis en outre d'ajouter un certain nombre d'options supplémentaires pour la modélisation des transferts dans le souterrain notamment l'écoulement densitaire.

Au cours de ce travail de thèse, des tests ont été effectués et ont permis de vérifier la compatibilité des résultats entre les simulations des concentrations en nitrates dans les nappes avec Eau-dyssée et les résultats obtenus avec le couplage STICS-MODCOU-NEWSAM.

Gestion des interactions avec le coupleur PALM

L'interactivité des échanges de variables entre les différents modules est définie par le coupleur externe PALM. PALM permet de gérer l'exécution de chaque module en parallèle sur des processeurs différents (Habets *et al.*, 2010). En plus des variables physiques, ce coupleur échange des dimensions ainsi que des variables dites de synchronisation. Une même variable peut être transmise à plusieurs modules.

Lorsqu'une application ne nécessite pas d'utiliser le modèle intégré Eau-dyssée mais uniquement le modèle hydrogéologique, la gestion informatique de l'interface PALM peut être trop contraignante. Une interface transparente ne faisant pas appel aux capacités de PALM mais conservant le formalisme de déclaration des variables qui y sont échangées a donc été développée (Habets *et al.*, 2010).

Les modifications apportées à MODCOU dans le cadre d'Eau-dyssée

Dans le cadre du développement de ce modèle intégré des hydrosystèmes, un certain nombre de phénomènes qui étaient jusque-là ignorés et/ou négligés ont pu être pris en compte dans le modèle hydrogéologique, celui-ci étant plus à-même de gérer un plus grand nombre d'interactions. Nous listons ci-dessous les modifications et améliorations apportées dans la nouvelle version du modèle hydrogéologique :

- Le transfert simultané de plusieurs solutés dans les hydrosystèmes. La gestion simultanée de plusieurs espèces chimiques au cours d'une même simulation a été intégrée dans la nouvelle version de MODCOU. Cette modification permet ainsi de prendre en compte dans cette version le transfert des pesticides et de leurs produits de dégradation.
- Les écoulements en rivières. Un nouveau module de routage en rivière a été adopté, RAPID (David *et al.*, 2009). Le transfert par zones isochrones utilisé dans l'ancienne version est ainsi abandonné au profit d'un modèle calculant les volumes d'eau et les débits dans chaque tronçon de rivière en se basant sur la méthode classique de Muskingum (Cunge, 1969). Le volume V d'un tronçon en rivière j est ainsi calculé en fonction des débits entrants Q_{in} et des débits sortants Q_{out} de ce tronçon :

$$V_{(t)} = k \times (x \times Q_{in(t)} + (1 - x) \times Q_{out(t)}) \quad (2.13)$$

Avec k un paramètre représentant le temps de parcours du flux dans le tronçon et x un facteur d'atténuation du flux sortant. Un tronçon n'a pas uniquement des échanges d'eau avec l'amont et l'aval de la rivière. Des échanges avec son sous-bassin versant, avec la nappe et des échanges anthropiques forcés interviennent également. Ces flux extérieurs se combinent avec le flux amont pour former le Q_{in} . Le volume d'eau calculé dans chaque maille rivière est donc différent de ce qui était effectué jusque-là dans l'ancienne version, et modifie en conséquences les échanges entre les rivières et les nappes. Bien sûr, lorsque la nappe alimente la rivière, les volumes échangés sont conditionnés par le niveau piézométrique puisque le niveau de la

rivière est considéré comme constant (cf section 2.2). En revanche, lorsque la rivière alimente la nappe, le volume calculé dans la maille rivière conditionne les échanges. Puis contrairement à la version originale, RAPID permet l'estimation des débits en tout point du réseau hydrographique. Dans l'ancienne version en revanche, il faut prédéfinir les points de mesures. Puis RAPID permet le calcul en parallèle, ce qui est un intérêt lors de travaux avec de grandes matrices.

- Les hauteurs d'eau en rivière. Le module QtoZ permettant d'estimer les hauteurs d'eau en rivière a été mis au point par Saleh *et al.* (2010). Ce module permet de calculer les hauteurs d'eau dans les mailles rivières en fonction du débit fourni par RAPID. Cette modification modifie ainsi les interactions nappe-rivière puisque le niveau de la rivière n'est plus considéré comme constant (cf section 2.2).

Conclusion du Chapitre 2

Nous disposons donc d'un outil intégré de modélisation Eau-dyssée permettant de simuler les transferts d'eau et de solutés dans un hydrosystème. Sur le bassin de la Seine, il a été démontré que cet outil restitue correctement l'évolution de la médiane des concentrations en nitrates sur les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine. Mais localement des écarts importants entre les concentrations observées et simulées ont été mises en évidence. Nous avons vu que des voies d'amélioration dans la modélisation de ces transferts de solutés sont possibles pour tenter de réduire ces écarts, d'autant plus que la gestion de rétroactions entre modules est possible dans Eau-dyssée, ce qui n'est pas le cas dans la chaîne de modélisation STICS-MODCOU-NEWSAM.

Nous avons choisi dans le cadre de cette thèse de nous intéresser à la modélisation des transferts à travers la zone non saturée car, comme nous l'expliquons dans le chapitre suivant, cette zone influence grandement la dynamique de transfert des nitrates dans un hydrosystème.

2.5 Un outil intégré des hydrosystème en développement : Eau-dyssée

2.5 Un outil intégré des hydrosystème en développement : Eau-dyssée

Chapitre 3

Les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée : observations et expérimentations numériques

Nous avons vu dans le premier chapitre l'intérêt tout particulier de la zone non saturée en ce qui concerne les transferts d'eau et de solutés dans un hydrosystème. En effet, cette zone étant caractérisée par des vitesses de transfert des solutés faibles, elle peut générer des délais très importants entre une contamination en surface et un impact sur la ressource souterraine, surtout si l'épaisseur de ce milieu est élevée (Foster, 2000). Des temps de transfert de plus de *10 ans* à travers cette zone ont ainsi été mis en évidence par Serhal *et al.* (2006). Nous présentons donc tout d'abord dans ce chapitre un état des connaissances sur la dynamique des transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée, que ce soit sur le terrain ou en modélisation. Puis, dans une seconde partie, nous étudions plus précisément la sensibilité des transferts à travers la zone non saturée, ainsi que l'influence du battement de nappe sur ces transferts, via des tests effectués sur des colonnes virtuelles avec le modèle à bases physiques *METIS* (Goblet, 2007), disponible au sein de l'équipe SHR du Centre de Géosciences de l'Ecole des Mines de Paris.

3.1 Etat des connaissances sur la zone non saturée

3.1.1 Les données observées

3.1.1.1 Description de la zone non saturée

La zone non saturée est un milieu triphasique (eau-air-solide) situé entre la surface du sol et la surface piézométrique.

Nous distinguons par convention la zone non saturée superficielle soumise à la reprise évaporative et la zone non saturée profonde. Dans la suite de ce travail, nous nous intéressons exclusivement à cette dernière que nous identifions par le terme ZNS. Ce milieu est caractérisé par une matrice possédant une porosité d'interstice. Des blocs de matrice peuvent également être séparés par un réseau de fractures d'épaisseur variable. Ainsi dans une zone non saturée crayeuse, Price *et al.* (2000) mettent en évidence une porosité de matrice de 20 à 45 % et un réseau de fractures occupant moins de 2 % de la porosité totale. Cette matrice est caractérisée par une perméabilité très faible, inférieure à $1.10^{-6} m.s^{-1}$ alors que dans les fractures, celle-ci peut être bien supérieure à $1.10^{-5} m.s^{-1}$. Dans des arènes granitiques, Legout *et al.* (2007) déterminent une porosité matricielle de 36 %, dont des blocs sont séparés par un réseau de fractures caractérisées par une perméabilité supérieure à $5.10^{-5} m.s^{-1}$.

3.1.1.2 Les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée

Une double dynamique des transferts à travers la zone non saturée est mise en évidence : une réponse du niveau de la nappe rapide (de l'ordre de quelques jours) à une infiltration dans cette zone, et, en parallèle, un temps de transfert des solutés lents (de l'ordre de quelques $m.an^{-1}$) à travers ce milieu. Cette double dynamique des transferts a été très observée dans la zone non saturée crayeuse, du fait de sa grande occurrence en Europe (Headworth, 1972, Serhal *et al.*, 2006).

Deux hypothèses ont été émises pour expliquer cette dynamique particulière des transferts :

- L'eau s'infiltrant en surface de la zone non saturée provoque la propagation d'une pression à travers ce milieu, ce qui génère rapidement une vidange de la zone non saturée vers la nappe. Ce processus est assimilable à un effet piston (Headworth, 1972).
- L'eau s'infiltré rapidement à travers les fractures et les solutés diffusent dans la matrice.

Pour déterminer quel processus régit les transferts d'eau, un suivi intensif des teneurs en eau dans la zone non saturée et du niveau de la nappe est nécessaire. Il faut cependant prendre en compte le fait que les transferts à travers les fractures sont un phénomène très transitoire. La mise

en évidence de ce transfert préférentiel nécessite donc une acquisition de données sur le terrain à haute fréquence temporelle.

Ireson *et al.* (2006) ont ainsi étudié la dynamique des transferts à travers une craie non saturée en Angleterre via un suivi expérimental des teneurs en eau. Ils mettent en évidence, suite à une infiltration, une variation du potentiel hydrique dans la matrice de cette zone non saturée. Cette variation est transmise rapidement de la surface vers la profondeur de la matrice, celle-ci étant proche de la saturation. En bas de la colonne, cette variation de potentiel provoque une vidange de la zone non saturée qui alimente la nappe.

Ainsi, par ce mécanisme, l'eau de pluie tend à se concentrer en haut de la zone non saturée, et l'eau alimentant la nappe est celle située initialement à l'interface zone non saturée-zone saturée, d'où une réponse rapide de la nappe à une infiltration.

Cependant, la porosité de fractures peut jouer un rôle non négligeable sur les transferts dans une zone non saturée. L'existence de ces transferts rapides est corroborée par Foster (2000) par la mise en évidence de bactéries à de grandes profondeurs et l'impossibilité de valider la balance de tritium d'une zone non saturée dans la craie en Angleterre. La dispersion observée du pic de tritium met également en évidence des échanges diffusifs entre ces deux porosités (Foster, 2000).

La quantification de la part de l'infiltration annuelle circulant par ces fractures est cependant complexe. En effet, des études ont permis de mettre en évidence que ces transferts sont régis par plusieurs facteurs que nous énonçons ci-dessous :

Conductivité hydraulique à saturation K_S dans la matrice

Les transferts d'eau à travers la zone non saturée sont fortement régis par le K_S de la matrice. En effet, quand le K_S de la matrice est élevé, une grande partie de l'infiltration passe par cette porosité matricielle. En revanche, plus le K_S est faible, plus les fractures seront sollicitées pour le transfert de l'eau (Ireson *et al.*, 2006). Il est donc essentiel de prendre en compte la variabilité spatiale du K_S dans une zone d'étude pour avoir une idée de la proportion de l'infiltration qui circule à travers les fractures.

Les conditions météorologiques

La dynamique dans le temps des précipitations a une influence certaine sur l'activation des transferts préférentiels via les fractures. Plus les précipitations sont intenses, plus la probabilité de dépasser la capacité d'infiltration de la matrice est élevée. La porosité de matrice se sature alors et les transferts

rapides via les fractures interviennent (Ireson *et al.*, 2006, Brouyère *et al.*, 2004).

L'effet tampon du sol

Mathias *et al.* (2006) ont mis en évidence l'importance du sol sur la dynamique des transferts à travers la zone non saturée. Le sol peut en effet jouer un rôle tampon dans le sens où il peut atténuer l'infiltration dans la zone non saturée. Des précipitations ponctuelles intenses, qui seraient susceptibles de provoquer des transferts rapides via les fractures par une saturation de la matrice, s'accumulent dans le sol. Le sol transfère ensuite cette eau à la zone non saturée, avec un débit moins important et donc une sollicitation moins importante des fractures.

Influence de la profondeur de la nappe

En comparant les transferts de solutés à travers deux zones non saturées, une de 18m d'épaisseur et une de 4m d'épaisseur, Haria *et al.* (2003) montrent que moins la nappe est profonde, plus les transferts préférentiels via les fractures sont conséquents. Les auteurs associent ce phénomène au fait que la frange capillaire rend la matrice de la zone non saturée plus proche de la saturation. Une infiltration provoquera donc plus facilement un écoulement via les fractures dans ces conditions.

Le fait que plusieurs facteurs influencent l'activation ou non des transferts préférentiels via les fractures permet, d'une part, de comprendre le fait qu'il s'agit d'un phénomène épisodique et irrégulier et, d'autre part, qu'il est difficile de le quantifier. Des modèles ont cependant été développés pour estimer la part des flux d'eau circulant à travers les fractures dans une zone non saturée. Certaines études soulignent ainsi l'importance de ces transferts préférentiels sur certains sites. Van den Daele *et al.* (2007) mettent par exemple en évidence que 40% du flux annuel circule via les fractures dans une zone non saturée de 5m d'épaisseur située dans le Cambridgeshire. Mathias *et al.* (2006) montrent quant à eux que 17 à 30% de la recharge annuelle s'effectue via les fractures dans une zone non saturée de 10m d'épaisseur dans le Berkshire. De nombreuses études (Ireson *et al.*, 2006, Brouyère *et al.*, 2004) montrent cependant via des expériences de traçage que les transferts de solutés à travers la zone non saturée sont essentiellement de type matriciel. En effet, les vitesses de transfert des solutés mises en évidence dans cette liste non exhaustive d'études réalisées en France sont faibles et reflètent donc un transfert prédominant via la matrice :

- dans une zone non saturée crayeuse du Nord de la France, des analyses de profils azotés combinées aux historiques cultureux ont permis de déterminer des vitesses de transfert des nitrates d'environ 1 m.an^{-1} (Lacherez-Bastin, 2005).

3.1 Etat des connaissances sur la zone non saturée

- sur des loess en Alsace (France), à partir de profils de concentrations en nitrates observées, Baran *et al.* (2007) déterminent une vitesse de transfert d'environ $0,25 \text{ m.an}^{-1}$.
- sur un site d'arènes granitiques en Bretagne (France), des expériences de traçage permettent à Legout *et al.* (2007) de déterminer des vitesses de transfert de 2 à 3 m.an^{-1} .

Ce transfert à travers la zone non saturée se 'complique' par le fait que les nitrates peuvent faire l'objet de réactions bio-physico-chimiques dans ce milieu.

Ces solutés peuvent en effet être impliqués dans des phénomènes de dénitrification lorsque le milieu est anaérobie et que de la matière organique et des bactéries dénitrifiantes sont présentes (cf section 1.5). En se référant à des données observées sur le terrain, Onsoy *et al.* (2005) estiment ainsi que pour une zone non saturée alluviale de 20 m d'épaisseur, jusqu'à 10 % de l'azote peut être dénitrifié au cours de son transfert dans cette zone.

Cependant, les réactions sont bien moins prononcées que dans le sol car, dans les zones non saturées profondes notamment, les teneurs en matière organique sont beaucoup moins importantes que dans la zone pédologique, ce qui limite les réactions.

Il est donc souvent courant de considérer la ZNS comme une zone de transfert de polluant plutôt que comme un milieu où les nitrates sont impliqués dans des réactions bio-physico-chimiques (Vauclin, 1994).

3.1.2 La modélisation des transferts à travers la zone non saturée

3.1.2.1 La modélisation conceptuelle

Des modèles assimilant la zone non saturée à une cascade de réservoirs ont été développés pour simuler de manière simplifiée les transferts d'eau et de solutés à travers ce milieu. L'avantage d'une telle approche est qu'elle est robuste et requiert de faibles temps de calcul (Gandolfi *et al.*, 2006). Ainsi le modèle LIXIM (Mary *et al.*, 1999), un modèle déterministe conceptuel avec une approche par couches, permet d'estimer la minéralisation de l'azote et la lixiviation des nitrates sur des sols nus à grande échelle, en considérant que ce sont les processus principaux impliquant l'azote dans ces conditions. La ZNS est divisée en plusieurs couches horizontales. Ces couches sont caractérisées par une capacité de rétention en eau maximale, assimilée à la capacité au champ, et une teneur en eau minimale, le point de flétrissement permanent.

L'eau dans le sol circule soit vers le haut par évaporation ou vers le bas par drainage. Le drainage s'effectue de la couche i à la couche $i+1$ lorsque le volume dans la couche i est supérieur à la

capacité au champ. Le processus d'évaporation n'affecte quant à lui que les couches au-dessus d'une profondeur maximale définie, et avec comme contrainte l'impossibilité de diminuer le volume d'eau dans une couche en-dessous de la teneur en eau correspondant au point de flétrissement permanent. Pour le transfert des solutés, LIXIM utilise le concept de mixing-cell. Cette approche considère que les solutés arrivant dans une couche sont totalement mélangés avec les solutés déjà présents dans celle-ci. Ces solutés sont transférés d'une couche à l'autre avec l'eau vidangée.

Nous décrivons plus en détail dans la section 4.1 le modèle de transferts à travers la zone non saturée *NONSAT_{SW}*, utilisé dans Eau-dyssée.

3.1.2.2 La modélisation à bases physiques

Les écoulements verticaux d'eau à travers un milieu poreux non saturé dans un modèle à bases physiques sont approchés en considérant d'une part la loi de Darcy (équation 3.1) et d'autre part l'équation de continuité (équation 3.4) :

$$\vec{V} = -K(\theta) \cdot \vec{\nabla}H \quad (3.1)$$

Avec \vec{V} la vitesse de Darcy ($m.s^{-1}$), $K(\theta)$ la conductivité hydraulique ou perméabilité de Darcy ($m.s^{-1}$) qui dépend de la teneur en eau volumique θ (volume d'eau par volume de ZNS) variant entre 0 et la porosité ($m^3.m^{-3}$) et H la charge hydraulique (m).

La conductivité hydraulique à saturation K_s ($m.s^{-1}$) est reliée à la perméabilité intrinsèque du milieu k (m^2) par la relation suivante :

$$K_s = \frac{k\rho g}{\eta} \quad (3.2)$$

Avec ρ la masse volumique de l'eau ($kg.m^{-3}$), g l'accélération de la pesanteur ($N.kg^{-1}$ ou $m.s^{-2}$) et η la viscosité ($Pa.s$).

On définit la perméabilité effective à l'eau k_e (m^2) le produit de la perméabilité intrinsèque du milieu k (m^2) par la perméabilité relative k_r (-) qui dépend de la teneur en eau :

$$k_r = \frac{k_e}{k} \quad (3.3)$$

Plus k_r est élevé, plus la capacité du milieu à laisser s'écouler un fluide est importante.

L'équation de continuité exprime le fait que la variation de la teneur en eau dans le temps est égale aux variations spatiales du flux. Elle est posée en supposant un fluide incompressible de masse

3.1 Etat des connaissances sur la zone non saturée

volumique et de viscosité dynamique constante :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{V} \quad (3.4)$$

En combinant ces deux équations, on obtient l'équation de Richards :

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \vec{\nabla} \left[K(\theta) \cdot \vec{\nabla} H \right] \quad (3.5)$$

La résolution de l'équation de Richards repose sur la définition de deux relations essentielles caractéristiques du matériau : la courbe de perméabilité relative $k_r(S_e)$ et la courbe de succion $\phi(S_e)$. S_e est la saturation effective (-). S_e est liée à la teneur en eau volumique du milieu θ ($m^3.m^{-3}$), à sa teneur en eau volumique maximale θ_m ($m^3.m^{-3}$) et à sa teneur en eau volumique minimale θ_r ($m^3.m^{-3}$) par la relation suivante :

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_m - \theta_r} \quad (3.6)$$

θ_r est le volume d'eau dans le milieu non saturé qui ne peut pas être déplacé par un gradient de charge. θ_m est le volume maximal d'eau qui peut être retenu dans la porosité durant un processus d'imbibition.

La succion ϕ (m) à chaque point est définie comme suit :

$$\phi = H - z \quad (3.7)$$

avec z l'altitude (m) du point considéré dans la ZNS. Cette succion exprime la valeur de pression de l'eau en hauteur d'eau.

Parmi les équations disponibles pour décrire les courbes caractéristiques du matériau non saturé, citons les relations de Van Genuchten (Van Genuchten, 1980) et les relations de Brooks and Corey (Brooks et Corey, 1966).

La modélisation des transferts de solutés dans un modèle mécaniste est représentée par une équation aux dérivées partielles, l'équation de convection-diffusion. En considérant un coefficient de diffusion et une vitesse de convection constants, ainsi que l'absence de termes source et puits, l'équation prend la forme :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \nabla^2 C - \vec{U} \cdot \nabla C \quad (3.8)$$

Avec D le coefficient de dispersion ($m^2.s^{-1}$), \vec{U} la vitesse de transfert ($m.s^{-1}$) qui est égal au rapport $\frac{\vec{V}}{\theta}$ et C la concentration de l'espèce chimique ($kg.m^{-3}$).

Nous constatons donc qu'un grand nombre de paramètres sont requis pour simuler dans un modèle mécaniste les transferts à travers la zone non saturée. La connaissance de ces paramètres peut cependant être difficile, surtout à grande échelle. De plus, l'exécution d'un outil mécaniste nécessite des temps de calculs importants, ce qui les rend difficilement utilisables pour des applications sur grands bassins. Mais malgré ces limites, de nombreux outils à bases physiques ont été développés. En effet, lorsque les paramètres sont bien connus, ils permettent de simuler très précisément les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée. Citons par exemple MACRO (Scorza Junior *et al.*, 2007), *METIS* (Goblet, 2007, 2008), Hydrus2D (Simunek *et al.*, 2006), SWAP (Van Dam *et al.*, 1997), etc. Nous décrivons ci-dessous plus précisément le modèle mécaniste *METIS*, disponible au sein de l'équipe SHR.

Le modèle mécaniste *METIS*

METIS (Goblet, 2007) est un modèle à bases physiques résolvant par la méthode des éléments finis les équations de transfert d'eau dans les zones saturées (équation de diffusivité) et non saturées (équation de Richards) à chaque noeud d'un maillage (Goblet, 2007, Larsson, 1992). Les transferts de solutés sont calculés avec l'équation de convection-diffusion par la méthode des éléments finis. *METIS* a été utilisé dans de nombreuses études : estimation de la vitesse d'infiltration dans des sols (Goblet, 2008), simulations des transferts de chaleur et d'hélium dans les eaux souterraines (Castro *et al.*, 2005), calcul de l'âge des eaux (Castro et Goblet, 2005).

METIS utilise les relations de Van Genuchten (Van Genuchten, 1980) pour décrire les courbes caractéristiques du matériau non saturé.

La courbe de perméabilité relative $k_r(S_e)$ est décrite par l'Equation 3.9 :

$$k_r = \sqrt{S_e} \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (3.9)$$

avec m (-) un paramètre de forme de la courbe.

Si l'on considère que le volume remplit toute la porosité et que le milieu peut être totalement asséché, S_e est égal à $\frac{\theta}{\omega}$ (Equation 3.6).

La partie gauche de la Figure 3.1 présente l'évolution de la perméabilité relative en fonction de S_e . Plus la saturation est élevée, plus la perméabilité effective se rapproche de la perméabilité intrinsèque du milieu.

La courbe de succion $\phi(S_e)$ est décrite par l'Equation 3.10 :

$$S_e = \frac{1}{[1 + (\alpha\phi)^n]^m} \quad (3.10)$$

avec n (-) et α (m^{-1}) des paramètres de formes de la courbe, $m = 1 - \frac{1}{n}$, et ϕ la succion exprimée en hauteur d'eau (m).

La partie droite de la Figure 3.1 présente l'évolution de la succion en fonction de la saturation du milieu. Plus la saturation est importante, moins la succion est forte.

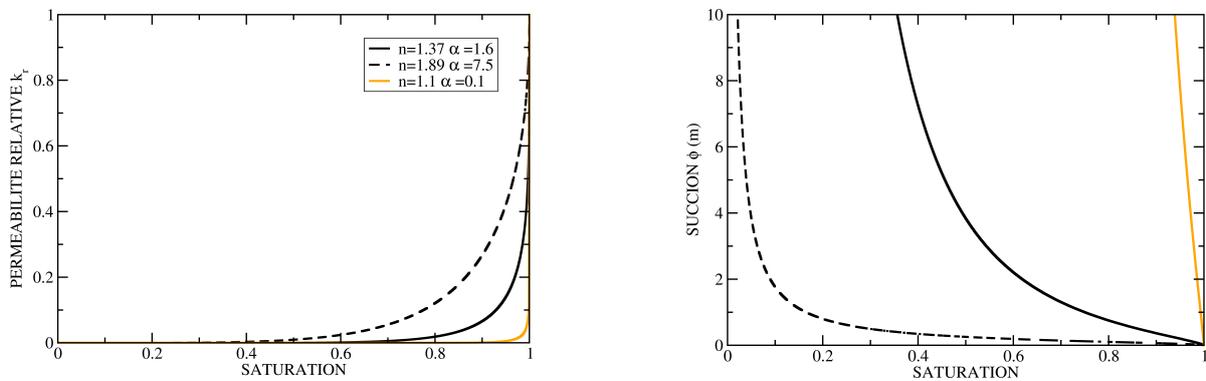


FIGURE 3.1: Evolution de la perméabilité relative (à gauche) et de la succion (à droite) en fonction de la saturation en eau du milieu, pour différentes valeurs de paramètres

Pour s'affranchir des difficultés inhérentes à l'utilisation d'un modèle à bases physiques, des méthodes ont été développées. Ainsi, Ross (2003) propose une méthode rapide et simplifiée de la résolution de l'équation de Richards. L'approche, qui est non itérative et qui utilise les relations de Brooks et Corey (1966) pour décrire les courbes de succion et de perméabilité relative, permet de réduire significativement les temps de calcul en conservant la précision des résultats. Restent cependant les éventuelles difficultés quant à la variabilité des paramètres pour de grandes applications.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

Pour mieux comprendre la dynamique des transferts à travers la ZNS, nous avons procédé à des tests sur des colonnes virtuelles avec le modèle à bases physiques *METIS* disponible au sein de l'équipe SHR et présenté dans la section précédente.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

Une étape préalable à ces tests a cependant consisté à tester la validité du modèle *METIS* en simulant les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée.

3.2.1 Validation de *METIS*

Un suivi des profils de concentrations en nitrates dans deux zones non saturées crayeuses situées en Champagne-Ardenne (France) à Haussimont (48 ° 45' 0" Nord - 4 ° 10' 0" Est) et à Thibie (48 ° 55' 49" Nord - 4 ° 12' 59" Est) est assuré par l'INRA de Laon (Nord, France). A Haussimont, un suivi des profils de concentrations en nitrates entre 1982 et 2003 a été assuré de 1 à 20 m de profondeur. A Thibie, des mesures de concentrations en nitrates ont été effectuées entre 1990 et 2008 de 0,13 m à 6 m de profondeur.

De tels suivis sont rares, surtout sur de grandes profondeurs de ZNS. Ils constituent une très bonne source de compréhension des flux de solutés à travers la ZNS, et une bonne base de référence pour évaluer des modèles. Nous avons donc utilisé ces données pour évaluer le modèle à bases physiques *METIS*.

La localisation de ces deux sites est présentée sur le Figure 3.2.

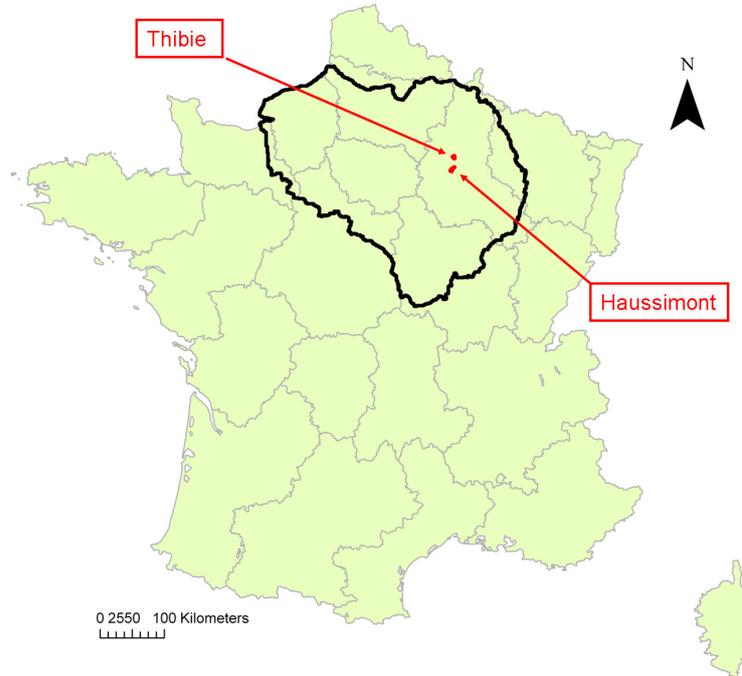


FIGURE 3.2: Localisation géographique des sites de suivis des concentrations en nitrates dans la zone non saturée crayeuse à Haussimont et Thibie, France (en rouge). En noir est représentée la délimitation du bassin de la Seine.

Une description succincte de la géologie est disponible dans l'Annexe [A](#).

Les profils observés sur le site d'Haussimont et de Thibie sont présentés respectivement sur les Figures [3.3](#) et [3.4](#).

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

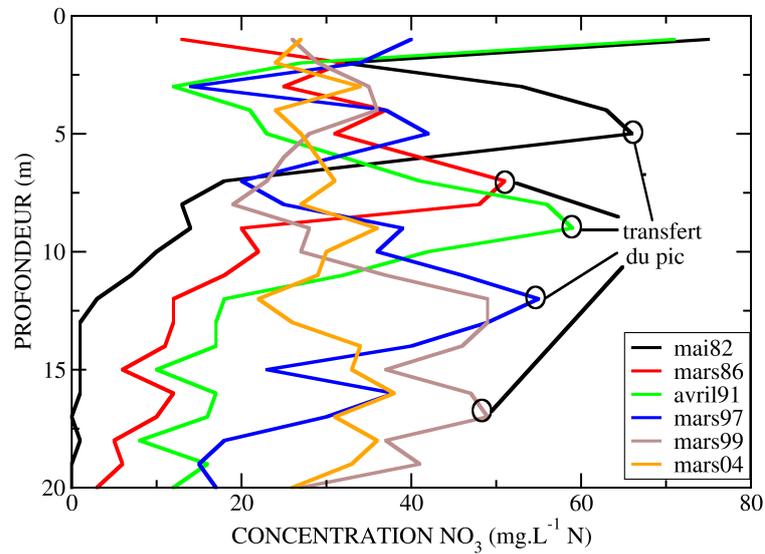


FIGURE 3.3: Représentation des profils de concentrations en nitrates observés à Haussimont de 1982 à 2003 entre 1 et 20 m de profondeur.

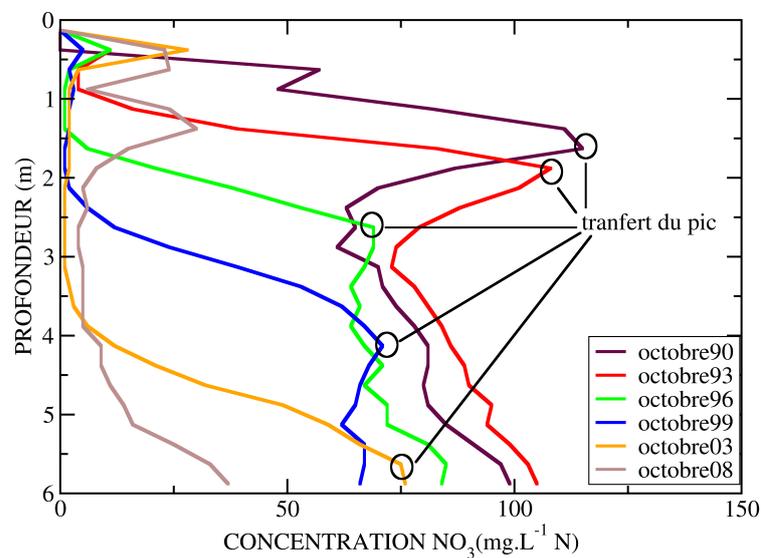


FIGURE 3.4: Représentation des profils de concentrations en nitrates observés à Thibie de 1990 à 2008 entre la surface et 6 m de profondeur.

Sur les deux sites, on observe la propagation d'un pic de concentrations dans le temps, signalé par des ronds noirs sur les Figures 3.3 et 3.4.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

Ce pic de concentrations en nitrates a été créé par la succession de deux phases dans le temps :

- une phase au cours de laquelle des quantités importantes de fertilisants azotés ont été utilisées pour augmenter la production (montée du pic vers des concentrations élevées)
- une deuxième phase au cours de laquelle l'utilisation des engrais s'est faite de manière raisonnée (diminution du pic vers des concentrations faibles)

Au cours du temps, la remarquable conservation du pic de solutés et son transfert lent à travers la zone non saturée permettent de conclure que les transferts à travers ce milieu sur ces sites sont essentiellement de type matriciel (Vachier et Dever, 1990). Nous utilisons donc ce pic comme un traceur permettant de restituer la dynamique des transferts à travers ces zones non saturées. Les données nécessaires pour simuler la propagation de ce pic ne sont cependant pas toutes disponibles. Par exemple les flux d'infiltration et les historiques culturaux d'épandages d'azote ne sont pas connus en continu sur les sites. Nous avons donc fait un certain nombre d'hypothèses pour simuler au mieux la propagation de ce pic dans le modèle *METIS* :

- Les précipitations et l'évaporation potentielle journalières sont définies à partir de l'analyse SAFRAN de Météo France (Quintana-Segui *et al.*, 2008).
- Les flux d'infiltration ont été estimés par le module MODCOU (débit imposé au sommet de la colonne).
- Les profondeurs de la nappe des deux sites sont définies à partir des données piézométriques disponibles dans des puits voisins (ADES). Une profondeur constante de la nappe à 15 m à Thibie et à 25 m à Haussimont est prise en compte et permet de représenter la condition de charge imposée à la base de la colonne.
- Le premier profil de concentration en nitrates observé sur le terrain (en 1982 pour Haussimont et 1990 pour Thibie) est imposé en conditions initiales dans le modèle. Aucun flux de nitrates n'est considéré durant toute la simulation à la surface. De plus, nous ne prenons absolument pas en compte la rotation culturale de blé d'hiver, de betteraves, de luzerne et d'orge observée sur les sites et susceptible de moduler l'infiltration et l'évapotranspiration. Nous ne prenons donc pas en compte l'allocation réelle des terres.

Pour cette évaluation du modèle *METIS* à simuler les transferts de solutés à travers la zone non saturée, nous souhaitons nous placer dans les conditions les plus proches d'une application grands bassins. Pour cela nous ne procédons pas à une calibration des paramètres requis dans ce modèle. Nous choisissons en effet d'utiliser une base de données existante pour les définir. Nous nous basons ainsi ici sur l'étude de Brouyère (2006) qui a défini des paramètres spécifiques pour les matrices des zones non saturées crayeuses (cf Tableau 3.1). La dispersivité a (m), égale à $\frac{D}{U}$, a été fixée égale à

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec METIS

celle utilisée dans le modèle LIXIM ($1,25.10^{-1}$ m, Mary *et al.* (1999)).

TABLE 3.1: Valeurs moyennes des paramètres de capacité de rétention et de conductivité hydraulique selon Brouyère (2006) pour la matrice crayeuse. θ_r et θ_s sont les teneurs en eau minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$).

<i>Brouyère</i>					
<i>Texture</i>	θ_r	θ_s	α	n	K_s
<i>matrix chalk</i>	–	0.410	0.100	1.100	$1.300.10^{-8}$

Précisons cependant que nous augmentons le K_s à une valeur de $9,0.10^{-7} m.s^{-1}$. En effet, avec la valeur de K_s définie par Brouyère (2006), le volume injecté parvient à dépasser la capacité d'infiltration de la colonne non saturée testée. Le transfert en profondeur du volume d'eau infiltré n'est donc pas assez rapide et la colonne se sature en sa surface à 100%. Nous avons donc choisi d'augmenter le K_s pour éviter ce phénomène.

Le Tableau 3.2 récapitule l'ensemble des conditions numériques considérées dans le modèle METIS pour ces tests d'évaluation du modèle à bases physiques.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

TABLE 3.2: Conditions expérimentales dans METIS des tests de traçage sur Haussimont et Thibie

	<i>HAUSSIMONT</i>	<i>METIS</i>
Résolution spatiale		
<i>Discretisation verticale</i>	1cm	
<i>Surface de la maille</i>	1km ²	
<i>Epaisseur de la colonne</i>	25m	15m
Résolution temporelle		
<i>Pas de temps de calcul</i>	1heure	
<i>Pas de temps des sorties</i>	1jour	
<i>Durée de la simulation</i>	8030jours	5110jours
Conditions initiales		
<i>Teneur en eau</i>	Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique, défini par les relations de Van Genuchten sur chaque maille	
<i>Concentration</i>	<i>Profil de concentration observé en mai 1982 discrétisé sur l'ensemble des mailles de la colonne</i>	<i>Profil de concentration observé en octobre 1990 discrétisé sur l'ensemble des mailles de la colonne</i>
Conditions aux limites		
<i>Surface de la colonne</i>	Injection du volume d'eau infiltré calculé par MODCOU sur chaque site Concentration nulle du flux d'eau infiltré	
<i>Base de la colonne</i>	Charge imposée constante et égale à 0 à la base de la colonne donc niveau de la nappe constant	
Paramètres		
<i>Paramètres de Van Genuchten</i>	$\alpha=0,1$; $n=1,1$ et $m = 1 - \frac{1}{n}$	
<i>Porosité</i>	0,41	
<i>K_S</i>	$9,0.10^{-7}m.an^{-1}$	
<i>Saturation minimale</i>	0	
<i>Saturation maximale</i>	1	
<i>Dispersivité</i>	$1,25.10^{-2}m$	

3.2.1.1 Site d'Haussimont

Le profil de concentrations en nitrates en 1982 est caractérisé par un pic à 5 m de profondeur. Ce pic est nettement visible sur les autres profils de la Figure 3.3 jusqu'en 1999 (pics signalés par un cercle). Après cette date, le pic est très atténué, et légèrement visible en 2003 à 19 m de profondeur. Il se peut donc qu'à cette période, une partie du pic de 1982 ait été transféré au-delà des 20 m de profondeur. Pour tenter de mettre en évidence ce phénomène, on regarde l'évolution des quantités de nitrates dans les 20 premiers mètres de ZNS. Or, nous ne disposons pas des données de teneurs en eau qui permettraient de transformer les profils de concentration en profils de quantités en nitrates.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

Nous pouvons cependant approximer l'évolution de ces quantités par l'évolution des profils de concentrations en considérant un profil de saturation constant sur toute la profondeur de la ZNS crayeuse (Normand *et al.*, 2004). La somme des quantités de nitrates approximées par les profils de concentrations sur les 20 m de ZNS à chaque pas de temps et en considérant une surface de $1m^2$ est représentée sur la Figure 3.5.

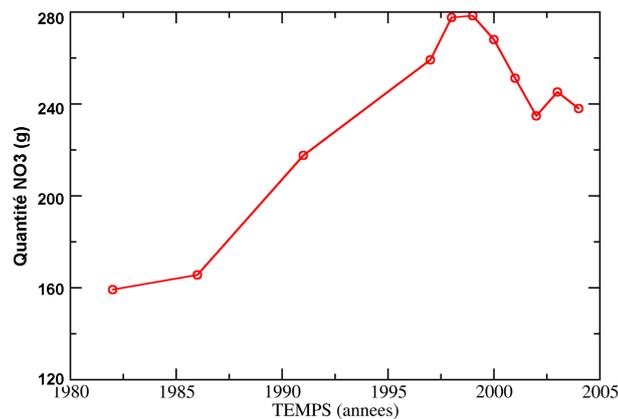


FIGURE 3.5: Evolution des quantités totales de nitrates accumulées entre 1 et 20 m de profondeur dans la ZNS crayeuse d'Haussimont entre 1982 et 2004

De 1982 à 1999, la quantité totale de nitrates dans la zone non saturée augmente à cause des apports agricoles successifs. Puis, une diminution importante des quantités de nitrates est observée sur l'ensemble de la ZNS. Nous considérons donc qu'une partie du pic qui nous intéresse a été transférée à travers les 20 premiers mètres de la ZNS. Le test de comparaison pour ce site consiste donc à comparer le transfert du pic de 1982 jusqu'à Mars 2000. Le pic de nitrates est à 5 m en 1982, 7 m en 1986 et 14 m en 2000. La vitesse moyenne de transfert (VMT) des solutés à travers la ZNS à Haussimont est donc d'environ $0,5 m.an^{-1}$. On retrouve des vitesses de transfert de solutés comparables dans d'autres études (Brouyère *et al.*, 2004, Serhal *et al.*, 2006).

La Figure 3.6 présente l'évolution du pic de solutés entre 1982 et 2000 observée sur le terrain et simulée par *METIS*. On constate que, par rapport à ce qui est observé sur le terrain, la profondeur des pics de solutés et la dispersion simulées par le modèle mécaniste sont légèrement sous-estimées. La VMT simulée est en effet d'environ $0,40 m.an^{-1}$ et l'intensité du pic obtenue avec *METIS* diminue en 18 ans d'environ 20 % (contre environ 30 % sur le terrain).

On obtient cependant, dans des conditions proches d'une application sur grands bassins, une restitution satisfaisante des transferts à travers la zone non saturée sur ce site.

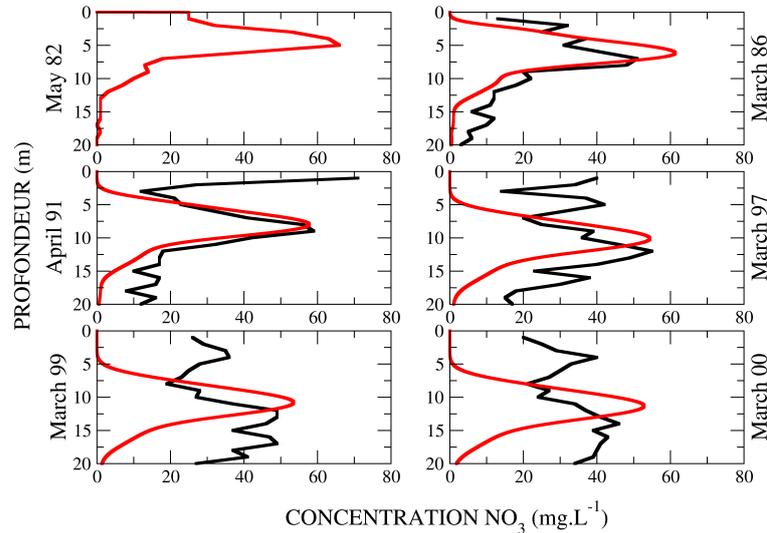


FIGURE 3.6: Propagation au cours du temps d'un pic de solutés dans une zone non saturée de 20 m de profondeur sur le site d'Haussimont entre 1982 et 2000 (en noir), et simulée par *METIS* (en rouge).

3.2.1.2 Site de Thibie

Le pic observé en Octobre 1990 est presque totalement transféré à travers les 6 m de ZNS en Octobre 2008. Le tests de comparaison sur ce site se focalise donc sur le transfert de ce pic entre 1990 et 2003.

La profondeur du pic est à 1,65 m en 1990, 1,88 m en Octobre 1993, 4,13 m en Octobre 1999 et 5,88 m en Octobre 2003. La VMT de ce pic est donc de 0,32 m.an⁻¹.

Les résultats des tests de comparaison entre les données observées et les données simulées par *METIS* sont présentés sur la Figure 3.7. Contrairement à Haussimont ici, la profondeur des pics simulés par *METIS* est plus importante que celle observée sur le terrain, avec une VMT de 0,47 m.an⁻¹. La dispersion est également mieux simulée que sur le site d'Haussimont (diminution du pic de solutés de 35 % dans le modèle mécaniste et 40 % sur le terrain).

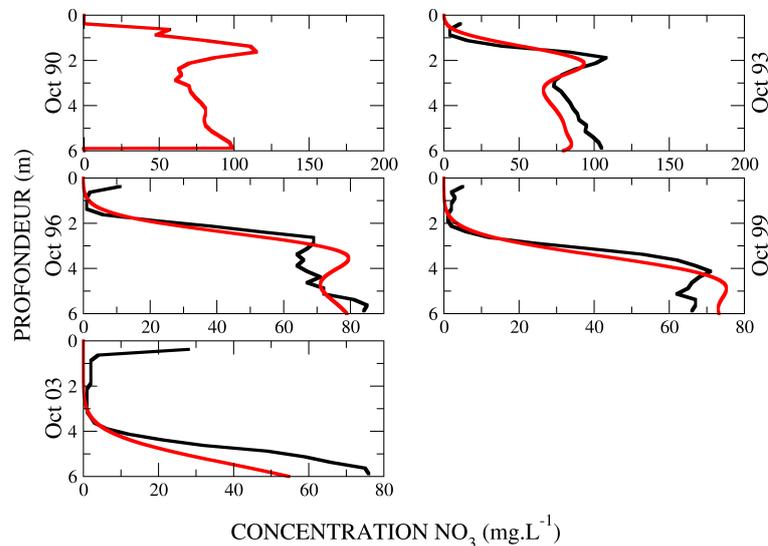


FIGURE 3.7: Propagation au cours du temps d'un pic de solutés dans une zone non saturée de 20 m de profondeur sur le site de Thibie entre 1990 et 2003 (en noir), et simulée par *METIS* (en rouge).

Ces résultats permettent donc de conclure que le modèle *METIS*, dans des conditions proches d'une application grands bassins, à savoir avec des paramètres issus d'une base de données existante et non calibrés, permet d'obtenir des résultats satisfaisants en ce qui concerne les transferts de solutés à travers des zones non saturées de grandes épaisseurs. Nous utilisons donc cet outil pour étudier précisément la dynamique des transferts à travers la zone non saturée.

3.2.2 Résultats des expérimentations numériques

La première série de tests est effectuée sur des colonnes avec un niveau de la nappe constant dans le temps. Les résultats nous permettent ainsi d'analyser la dynamique des transferts à travers la zone non saturée.

Dans la seconde série, nous analysons ces transferts de solutés en considérant cette fois-ci une fluctuation du niveau de la nappe.

Détermination des paramètres requis dans *METIS*

Nous avons mis en évidence dans l'étape de validation de *METIS* que le recours à des bases de données pour définir les paramètres requis dans cet outil permet d'obtenir des résultats pertinents concernant les transferts de solutés à travers la zone non saturée. Pour ces tests de sensibilité, nous

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

nous référons donc encore une fois aux données disponibles dans l'étude de Brouyère (2006) pour la craie. Nous souhaitons cependant également tester un autre type de zone non saturée avec des paramètres de Van Genuchten différents de ceux de la craie. Pour cela, nous nous basons sur la base de données de Carsel et Parrish (1988). Celle-ci fournit des paramètres pour différentes catégories texturales de sols (Tableau 3.3), paramètres que nous appliquerons dans notre expérimentation numérique à nos ZNS profondes. Nous avons en particulier retenu le cas limon.

TABLE 3.3: Valeurs moyennes des paramètres selon Carsel et Parrish (1988) pour 12 groupes texturaux de sols. θ_r et θ_s sont la teneur en eau minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$)

<i>Carsel and Parrish</i>					
<i>Texture</i>	θ_r	θ_s	α	n	K_s
<i>sand</i>	0.045	0.430	14.500	2.680	$8.250.10^{-5}$
<i>loamy sand</i>	0.057	0.410	12.400	2.280	$4.050.10^{-5}$
<i>sandy loam</i>	0.065	0.410	7.500	1.890	$1.220.10^{-5}$
loam	0.078	0.430	3.600	1.560	$2.890.10^{-6}$
<i>silt</i>	0.034	0.460	1.600	1.370	$6.940.10^{-7}$
<i>silt loam</i>	0.067	0.450	2.000	1.410	$1.250.10^{-6}$
<i>sandy clayloam</i>	0.100	0.390	5.900	1.480	$3.640.10^{-6}$
<i>clay loam</i>	0.000	0.410	1.900	1.310	$7.220.10^{-7}$
<i>silty clayloam</i>	0.089	0.430	1.000	1.230	$1.940.10^{-7}$
<i>sandy clay</i>	0.100	0.380	2.700	1.230	$3.330.10^{-7}$
<i>silty clay</i>	0.070	0.360	0.500	1.090	$5.550.10^{-8}$
<i>clay</i>	0.068	0.380	0.800	1.090	$5.550.10^{-7}$

3.2.2.1 La dynamique des transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée

Conditions initiales et aux limites dans les colonnes testées

Le Tableau 3.4 résume les conditions numériques considérées dans *METIS* pour étudier les transferts à travers la zone non saturée avec le modèle à bases physiques.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec METIS

TABLE 3.4: Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS sur les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée

Résolution spatiale		
<i>Discrétisation verticale</i>	1cm	
<i>Surface de la maille</i>	1km ²	
<i>Epaisseur de la colonne</i>	25m	
Résolution temporelle		
<i>Pas de temps de calcul</i>	1heure	
<i>Pas de temps des sorties</i>	1jour	
<i>Durée de la simulation</i>	10000jours	
Conditions initiales		
<i>Teneur en eau</i>	Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique, défini par les relations de Van Genuchten sur chaque maille	
<i>Concentration</i>	<i>Pic de concentration en haut des colonnes</i>	
Conditions aux limites		
<i>Surface de la colonne</i>	Injection d'un volume d'eau constant égal à 0,52mm.jour ⁻¹ Concentration nulle du flux d'eau infiltré	
<i>Base de la colonne</i>	Charge imposée constante et égale à x m à la base de la colonne, x=5, 10, 15 et 20m	
Paramètres		
	Limons	Craie
<i>Paramètres de Van Genuchten</i>	$\alpha = 3,6; n = 1,56 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$	$\alpha = 0,1; n = 1,1 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$
<i>Porosité</i>	0,43	0,41
<i>K_S</i>	2,89.10 ⁻⁶ m.an ⁻¹	9.10 ⁻⁷ m.an ⁻¹
	2,89.10 ⁻⁵ m.an ⁻¹	9.10 ⁻⁶ m.an ⁻¹
<i>Saturation minimale</i>	0	
<i>Saturation maximale</i>	1	
<i>Dispersivité</i>	1,25.10 ⁻² m	

Nous représentons sur la Figure 3.8 deux exemples de conditions expérimentales testées. L'épaisseur de la zone non saturée (ZNS) et de la zone saturée (ZS) varie selon la charge imposée à la base de la colonne. Cette charge est constante durant toute la durée de la simulation.

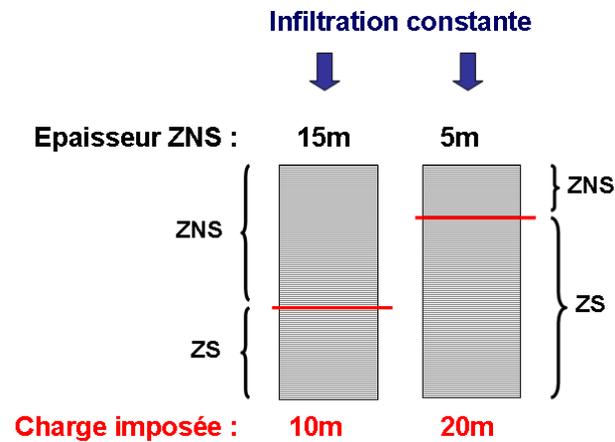


FIGURE 3.8: Représentation schématique des conditions numériques et aux limites imposées pour comprendre la dynamique des transferts à travers la ZNS dans *METIS* en considérant un niveau de la nappe constant.

Les transferts d'eau à travers la zone non saturée

Nous considérons un profil initial de la saturation à l'équilibre hydrostatique. Les profils utilisés dans ces tests sont représentés sur la Figure 3.9 pour différentes épaisseurs d'une zone non saturée, à gauche de type limon selon la classification de Carsel et Parrish (1988), et à droite de type craie. On obtient une évolution de la teneur en eau sur toute l'épaisseur de la zone non saturée d'une valeur minimale à la surface vers une valeur maximale en profondeur. Le gradient de teneur en eau entre la surface et la nappe diminue cependant avec la profondeur de celle-ci et lorsque les paramètres de Van Genuchten sont faibles, comme dans le cas craie, dont l'ensemble de l'épaisseur est proche de la saturation.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

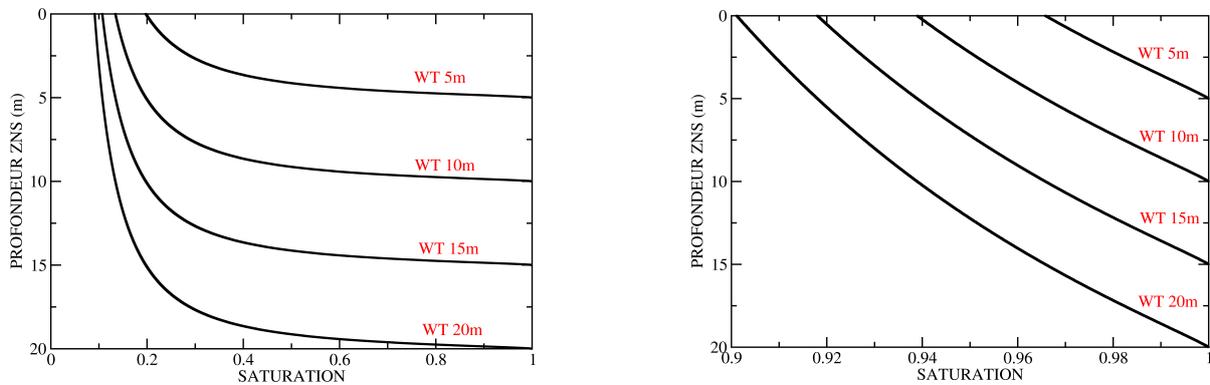


FIGURE 3.9: Evolution de la saturation dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite) à l'équilibre hydrostatique pour différentes profondeurs de la nappe WT (m).

La Figure 3.10 présente l'évolution au cours du temps du profil de saturation dans la zone non saturée de type limon.

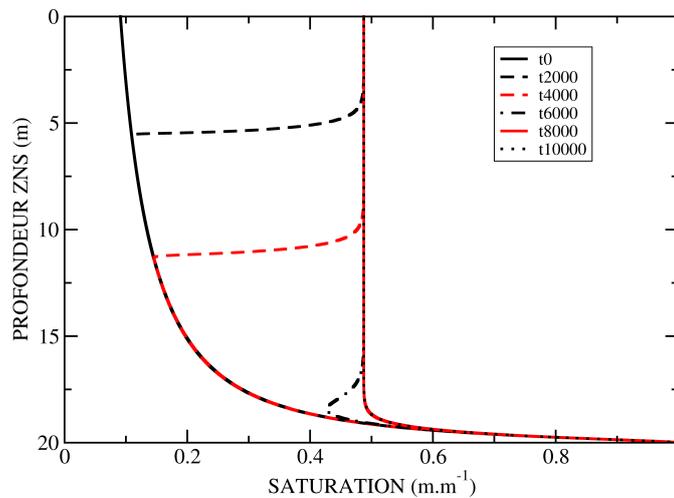


FIGURE 3.10: Evolution de la saturation dans la zone non saturée de type limon initialisée à l'équilibre hydrostatique d'après les paramètres définis par Carsel et Parrish (1988) avec un niveau de la nappe à 20 m de profondeur. La colonne tend vers un profil à l'équilibre dynamique correspondant à une infiltration constante de $0,52 \text{ mm.jour}^{-1}$, à différentes dates t en jours.

Nous constatons que, aussi bien pour le cas limon que pour le cas craie (qui n'est pas représenté ici), la saturation tend vers l'équilibre dynamique correspondant à l'infiltration constante. Une

importante partie de l'épaisseur de la zone non saturée est en effet caractérisée dans ce nouvel équilibre par une teneur en eau constante. Cette caractéristique est d'autant plus importante que le K_s est faible et que les paramètres de Van Genuchten sont élevés (Figure 3.11).

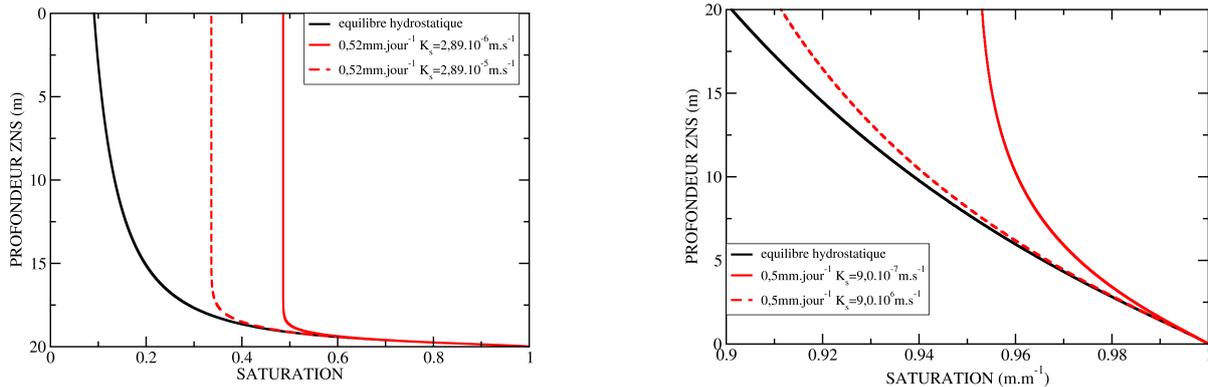


FIGURE 3.11: Evolution de la saturation dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite) à l'équilibre hydrostatatique et à l'équilibre de flux non nul pour différentes valeurs de conductivités hydrauliques à saturation K_s .

Nous souhaitons à présent évaluer dans quelles mesures la répartition de l'eau dans la colonne non saturée mise en évidence ici impacte la dynamique des transferts de solutés. Nous souhaitons cependant également savoir si en initialisant la colonne non saturée avec un profil de saturation égal à ce profil à l'équilibre de flux non nul, la dynamique des transferts de solutés à travers la zone non saturée en est modifiée. Les résultats sont présentés dans la section suivante.

Les transferts de solutés à travers la zone non saturée

La Figure 3.12 présente l'évolution de profils de saturation et du transfert d'un pic de solutés dans une ZNS de type limon au cours du temps, avec une initialisation à l'équilibre hydrostatatique.

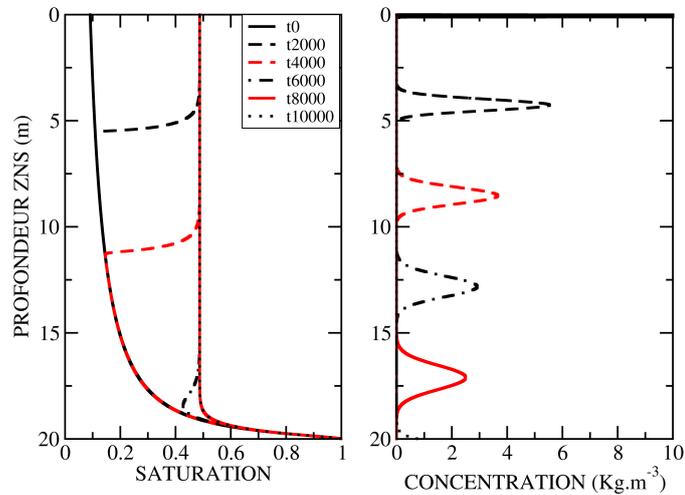


FIGURE 3.12: Evolution des saturations et des transferts de solutés dans la zone non saturée de type limon d'après les paramètres définis par Carsel et Parrish (1988) avec un niveau de la nappe à 20 m de profondeur, à différentes dates t en jours.

Lorsque le profil initial est à l'équilibre hydrostatique, l'atteinte du nouvel équilibre de saturation se propage de la surface vers la profondeur de la colonne. Sur la Figure 3.12, nous remarquons cependant que la propagation de cet équilibre de saturation se fait plus rapidement que les transferts des solutés. Les solutés progressent donc dans un milieu présentant des teneurs en eau similaires quelle que soit la méthode d'initialisation choisie, d'où une vitesse de transfert des solutés identiques pour une infiltration donnée.

Nous n'observons donc pas d'influence pour les jeux de données considérés de la méthode d'initialisation sur les transferts à travers la zone non saturée. Les résultats présentés par la suite sont donc uniquement obtenus avec une initialisation à l'équilibre hydrostatique.

La Figure 3.13 représente le transfert d'un pic de solutés à chaque section de 5 m d'une colonne non saturée dans *METIS* pour des niveaux piézométriques à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur. A gauche sont présentés les transferts pour le cas limon et à droite pour la craie.

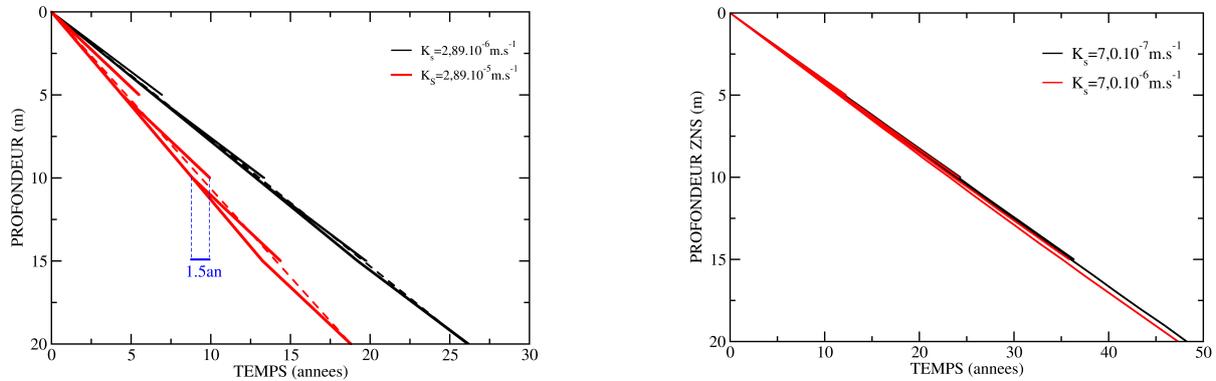


FIGURE 3.13: Evolution de la profondeur d'un pic de solutés dans une zone non saturée limon (à gauche) et craie (à droite), selon deux valeurs de conductivité hydraulique à saturation K_s et pour des niveaux piézométriques à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur. La ligne pointillée représente les temps de transfert des solutés lorsque l'on considère une vitesse de transfert constante dans la zone non saturée avec un niveau piézométrique à 20 m de profondeur.

Nous constatons tout d'abord que pour le cas limon, la vitesse de transfert des solutés n'est pas constante sur toute l'épaisseur d'une zone non saturée et augmente avec le K_s . Ceci est lié à la dynamique de transfert de l'eau dans la colonne non saturée. La teneur en eau est en effet minimale en haut de colonne sur une importante épaisseur de la zone non saturée, épaisseur qui varie selon la conductivité hydraulique à saturation utilisée, et maximale en bas de colonne. Là où la zone non saturée présente une teneur en eau constante, les vitesses de transferts des solutés sont constantes. En revanche, les sections de 5 m les plus profondes caractérisées par une teneur en eau plus fortes ont des temps de transfert des solutés plus élevés, puisque ces derniers traversent un milieu à teneur en eau plus importante.

Dans la zone non saturée crayeuse, la vitesse de transfert est quasiment constante sur toute l'épaisseur de la zone non saturée du fait que la saturation est proche de 100 % sur presque toute la colonne. Les transferts dans la craie ne varient pas non plus avec le K_s .

Puis, ces résultats mettent en évidence une influence de la profondeur de la nappe sur la dynamique de transfert des solutés. En effet, pour le cas limon par exemple, le transfert des solutés jusqu'à la profondeur 10 m est en avance de plus de 1,5 an lorsque la nappe est située à 15 m de profondeur que lorsqu'elle est située à 10 m de profondeur. Ceci est lié au fait que moins la nappe est profonde, plus la teneur en eau à une profondeur donnée est élevée et donc plus le transfert des solutés est lent.

Nous mettons donc en évidence dans ces tests une influence du niveau de la nappe sur la dynamique des transferts des solutés dans la zone non saturée. Cette influence est cependant significative uniquement à la base de cette interface.

Nous avons testé par la suite l'influence d'une fluctuation du niveau de la nappe sur la dynamique des transferts à travers la ZNS.

3.2.2.2 Influence du battement de nappe sur les transferts à travers la zone non saturée

Brouyère *et al.* (2004), Fretwell *et al.* (2005), Legout *et al.* (2007) mettent en évidence un lien explicite entre le niveau piézométrique et la dynamique de contamination souterraine en nitrates. En effet, dans la zone de battement de nappe, ou zone non saturée saisonnière, située entre les niveaux piézométriques haut et bas, des échanges diffusifs interviennent. Lorsque la nappe est à son plus bas niveau, cette zone se comporte en une zone non saturée, avec un transfert des solutés par flux gravitationnel. Lorsque la nappe monte en revanche, les transferts de solutés deviennent essentiellement horizontaux. Ce phénomène peut être non négligeable puisque, en réponse à la variabilité saisonnière de la recharge, les aquifères comme la craie sont sujets à des fluctuations très importantes du niveau de la nappe. Price *et al.* (1993) y mettent ainsi en évidence des fluctuations du niveau piézométrique supérieures à 40 m en Angleterre.

Ce phénomène doit donc être pris en compte dans les outils de modélisation pour conceptualiser au mieux une dynamique de contamination dans un hydrosystème. Dans les modélisations à bases physiques, comme *METIS*, les écoulements sont calculés par la résolution d'une forme généralisée de l'équation de diffusivité pour les milieux saturé et non saturé. Nous avons donc une continuité entre les deux milieux, ce qui permet de faciliter la prise en compte du battement de nappe. L'outil BF2000 (Ababou et Tregarot, 2002), dérivé de BIGFLOW, a également été développé avec cette forme mixte pour prendre en compte le battement de nappe (Ababou et Al-Bitar, 2008).

Mais des approches conceptuelles ont également été développées pour prendre en compte ce phénomène. Legout *et al.* (2007) proposent ainsi une conceptualisation à 3 réservoirs pour représenter le continuum du sol à la nappe. Chaque réservoir est caractérisé par deux compartiments : la porosité rapide et la porosité lente. Dans le premier réservoir, qui représente le sol, l'eau et les solutés circulent dans la porosité lente par gravité. Lorsque la capacité d'infiltration est dépassée, l'eau circule par le compartiment de transferts rapides. Le troisième réservoir correspond à la nappe. Les transferts sont horizontaux et les solutés des deux compartiments sont mélangés par diffusion. Entre ces deux zones se trouve le réservoir correspondant à la zone de battement de nappe. Il est alimenté par le

premier réservoir. Lorsque cette zone de battement se sature, des échanges apparaissent entre la porosité rapide et la porosité lente, comme dans le réservoir nappe. Et lorsque la nappe redescend, ce réservoir se comporte comme une zone non saturée, avec des transferts d'eau et de solutés par gravité.

Fretwell *et al.* (2005) proposent également un modèle à double porosité permettant de simuler la distribution de contaminants conservatifs entre la nappe et la matrice dans la zone de battement de nappe selon les fluctuations saisonnières de celle-ci. Dans cet outil, la montée et la descente de la nappe dans la zone de fluctuations piézométriques représentent le remplissage ou la vidange des fractures dans cette zone, la matrice restant en permanence saturée. Le transfert de contaminants entre la matrice et les fractures dans la zone de battement de nappe s'effectue par diffusion (Lois de Fick).

Nous notons que les modèles conceptuels décrits ci-dessus ne prennent pas en compte de modification des teneurs en eau dans la zone non saturée en dehors de la zone de battement de nappe. Or, nous pouvons citer Fan *et al.* (2007) qui mettent en évidence, aux Etats-Unis, une humidité du sol plus importante dans les zones où la nappe est peu profonde (autour de 5 m de profondeur), ce qui permet d'établir un lien direct entre le niveau de la nappe et la teneur en eau dans le milieu non saturé. On peut également citer les travaux de Cazal et Lacazedieu (1974) qui ont analysé l'évolution des teneurs en eau dans une zone initialement non saturée d'environ 5 m d'épaisseur lors d'un pompage d'une nappe. Cette étude met ainsi en évidence une diminution de la teneur en eau à la base de ce milieu lors de l'abaissement du niveau de la nappe. Ces observations mettent donc en évidence l'existence d'un flux d'eau échangé entre la zone non saturée et la nappe lorsque le niveau de celle-ci varie.

Le battement de nappe est donc un phénomène qui peut influencer significativement la dynamique de transfert des solutés dans un hydrosystème non seulement en lessivant les solutés situés à la base de la zone non saturée, mais également en modifiant les conditions hydriques et donc la dynamique de transfert des solutés dans ce milieu.

Les modèles à bases physiques, comme *METIS*, gèrent ces modifications de saturation dans la zone non saturée via la résolution de l'équation de Richards. Nous souhaiterions savoir cependant ici plus précisément par des tests sur des colonnes effectués avec le modèle *METIS* dans quelles mesures les transferts d'eau, mais également de solutés, dans la zone non saturée sont impactés par un battement de nappe.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec METIS

Les transferts d'eau

Nous voulons dans cette partie mettre en évidence et quantifier les échanges de flux d'eau entre la zone non saturée et la nappe lors d'un battement de celle-ci. Pour cela, nous avons procédé à quelques tests numériques simples dont les conditions sont rassemblées dans le Tableau 3.5.

TABLE 3.5: Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS pour étudier les transferts d'eau dans la zone non saturée en considérant une fluctuation du niveau de la nappe

Résolution spatiale		
<i>Discrétisation verticale</i>	1cm	
<i>Surface de la maille</i>	1km ²	
<i>Epaisseur de la colonne</i>	25m	
Résolution temporelle		
<i>Pas de temps de calcul</i>	1heure	
<i>Pas de temps des sorties</i>	1jour	
<i>Durée de la simulation</i>	2000jours	
Conditions initiales		
<i>Teneur en eau</i>	Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique, défini par les relations de Van Genuchten sur chaque maille	
<i>Concentration</i>	Concentration nulle sur toute la colonne	
Conditions aux limites		
	Montée	Descente
<i>Surface de la colonne</i>	Pas de volume d'eau infiltré Pas de concentration injectée	
<i>Base de la colonne</i>	Débit injecté entre 0,5 et 20mm.jour ⁻¹	Débit prélevé entre 0,5 et 20mm.jour ⁻¹
Paramètres		
	Limon	Craie
<i>Paramètres de Van Genuchten</i>	$\alpha = 3,6; n = 1,56 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$	$\alpha = 0,1; n = 1,1 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$
<i>Porosité</i>	0,43	0,41
<i>K_S</i>	2,89.10 ⁻⁶ m.an ⁻¹	9,0.10 ⁻⁷ m.an ⁻¹
<i>Saturation minimale</i>	0	
<i>Saturation maximale</i>	1	
<i>Dispersivité</i>	1,25.10 ⁻² m	

La Figure 3.14 représente une schématisation des conditions expérimentales testées pour cette série de tests.

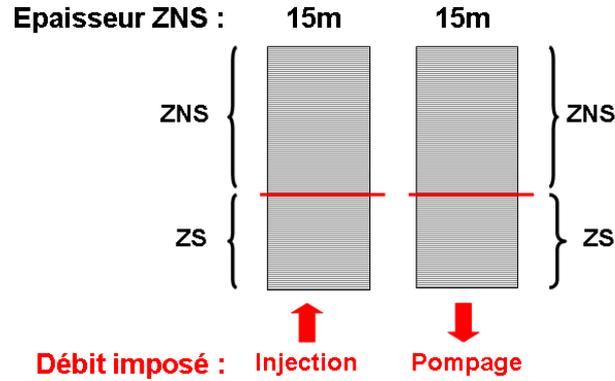


FIGURE 3.14: Représentation schématique des conditions initiales et aux limites imposées pour mesurer l'influence du battement de nappe sur les transferts d'eau.

Les colonnes font 25 m d'épaisseur et ont un niveau initial de la nappe à 15 m de profondeur. La variation du niveau de la nappe est générée ici par un volume injecté ou prélevé à la base de la colonne. Nous considérons en parallèle que l'infiltration est nulle. Dans de telles conditions, la déformation du profil de saturation est uniquement liée au volume injecté ou prélevé à la base de la colonne, ce qui nous permet de quantifier les échanges entre la zone non saturée et la zone saturée. Ainsi dans le cas d'un volume injecté, en considérant un pas de temps de un jour, une montée de la nappe, définie comme le déplacement de la surface où l'eau est à la pression atmosphérique, est générée. En effet, ce volume injecté, d'une part, sature la porosité occupée par de l'air entre les deux niveaux de la nappe et, d'autre part, alimente le milieu au-dessus de la surface libre. Le volume injecté se répartit donc selon l'équation suivante :

$$Vol_{inj} = part_{ZNS} \times Vol_{inj} + part_{ZS} \times Vol_{inj} \quad (3.11)$$

Avec $part_{ZS}$ et $part_{ZNS}$ la part du volume injecté alimentant respectivement la nappe et la zone non saturée.

Dans le cas d'un volume pompé à la base de la colonne, en considérant toujours un pas de temps de 1 jour, une descente de la nappe intervient puisque le volume pompé désature une partie de la porosité entre les deux niveaux de la nappe et le milieu au-dessus de la surface libre. Ce volume d'eau se répartit donc selon l'équation suivante :

$$Vol_{preleve} = part_{ZS} \times Vol_{preleve} + part_{ZNS} \times Vol_{preleve} \quad (3.12)$$

Avec $part_{ZS}$ et $part_{ZNS}$ la part du volume prélevée respectivement dans la nappe et la zone non saturée.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

Pour chaque cas testé, nous calculons ainsi un coefficient de répartition $Coef_{repart} = \frac{part_{ZNS}}{part_{ZS}}$ à l'aide de la simulation *METIS*.

La Figure 3.15 représente ce coefficient de répartition dans des zones non saturées de type limon et craie en fonction de différentes variations observées du niveau de la nappe au bout de 1 jour. Nous constatons tout d'abord que $Coef_{repart}$ est essentiellement supérieur à 1, ce qui signifie que la part du volume d'eau injecté (pour le cas montée de la nappe) ou prélevé (pour le cas descente de la nappe) affectant la zone non saturée est plus importante que celle affectant la zone de battement de nappe pour les variations piézométriques testées. Cette part est également plus importante dans le milieu craie que dans le milieu limon et lorsque la variation piézométrique diminue. En revanche, $Coef_{repart}$ ne varie pas avec la profondeur initiale choisie de la nappe.

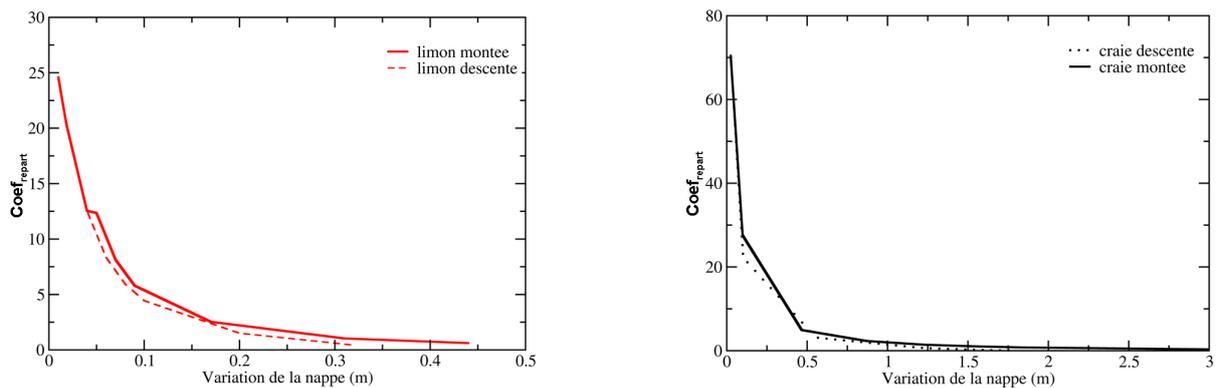


FIGURE 3.15: Coefficient de répartition $Coef_{repart}$ des volumes d'eau entre la zone non saturée et la zone saturée au bout de 1 jour de simulation dans le cas d'une montée (lignes continues) ou d'une descente de nappe (lignes pointillées) dans un milieu type limon (gauche) ou craie (droite).

Nous mettons donc ici bien en évidence des échanges de flux d'eau entre la zone non saturée et la nappe lors d'une fluctuation du niveau piézométrique, échanges qui varient avec le type de zone non saturée testée et l'intensité de la fluctuation. Nous présentons dans la partie suivante l'impact de ces échanges de flux sur les transferts de solutés.

Les transferts de solutés

Pour mesurer l'influence des fluctuations piézométriques sur les transferts de solutés, nous nous plaçons dans les conditions numériques regroupées dans le Tableau 3.6 pour cette série de tests.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

TABLE 3.6: Conditions expérimentales des tests effectués avec METIS sur les transferts de solutés en considérant une fluctuation du niveau de la nappe

Résolution spatiale		
<i>Discretisation verticale</i>	1cm	
<i>Surface de la maille</i>	1km ²	
<i>Epaisseur de la colonne</i>	25m	
Résolution temporelle		
<i>Pas de temps de calcul</i>	1heure	
<i>Pas de temps des sorties</i>	1jour	
<i>Durée de la simulation</i>	2000jours	
Conditions initiales		
<i>Teneur en eau</i>	Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique, défini par les relations de Van Genuchten sur chaque maille	
<i>Concentration</i>	<i>Pic de concentration en haut des colonnes</i>	
Conditions aux limites		
<i>Surface de la colonne</i>	Injection d'un volume d'eau constant égal à 0,52mm.jour ⁻¹ Concentration nulle du flux d'eau infiltré	
<i>Base de la colonne</i>	Charge imposée sinusoïdale variant annuellement entre 7 et 13m ou entre 8,5 et 11,5m.	
Paramètres		
	Limón	Craie
<i>Paramètres de Van Genuchten</i>	$\alpha = 3,6; n = 1,56 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$	$\alpha = 0,1; n = 1,1 \text{ et } m = 1 - \frac{1}{n}$
<i>Porosité</i>	0,43	0,41
<i>K_S</i>	2,89.10 ⁻⁶ m.an ⁻¹ 2,89.10 ⁻⁵ m.an ⁻¹	9,0.10 ⁻⁷ m.an ⁻¹ 9,0.10 ⁻⁶ m.an ⁻¹
<i>Saturation minimale</i>	0	
<i>Saturation maximale</i>	1	
<i>Dispersivité</i>	1,25.10 ⁻² m	

Nous représentons schématiquement sur la Figure 3.16 les conditions expérimentales adoptées dans ces tests.

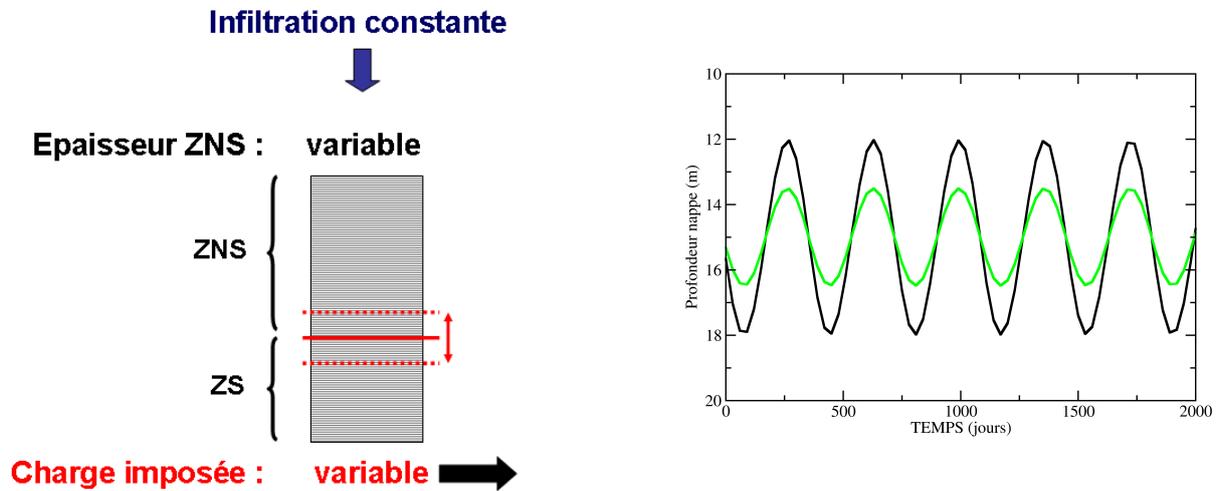


FIGURE 3.16: Représentation schématique des conditions initiales et aux limites imposées pour mesurer l'influence du battement de nappe sur les transferts de solutés.

La charge variable imposée à la base de chaque colonne permet d'obtenir une fluctuation de la profondeur du niveau piézométrique, fluctuation représentée sur la partie droite de la Figure 3.16.

La Figure 3.17 représente, pour les deux fluctuations testées, les délais requis en années pour que le pic de solutés soit transféré de la surface vers la nappe, c'est-à-dire vers la partie saturée de la colonne, dans le cas, à gauche, d'un limon (Carsel et Parrish, 1988) et, à droite, d'un système craie (Brouyère, 2006). Sur cette figure sont également représentés les délais nécessaires pour un transfert des solutés de la surface vers la nappe en considérant différents niveaux constants de celle-ci.

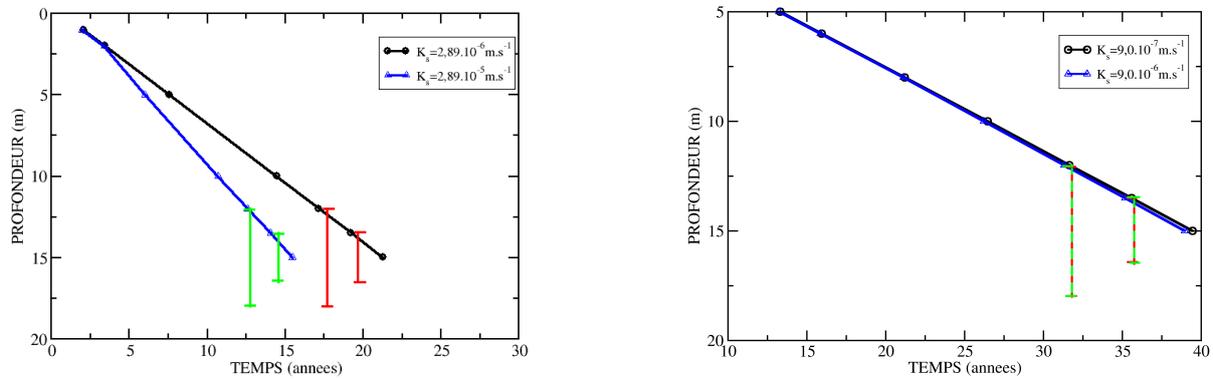


FIGURE 3.17: Temps de transfert du pic de solutés de la surface vers la nappe pour différentes épaisseurs de zones non saturées de type limon (gauche) et craie (droite) et 2 valeurs de conductivité hydraulique à saturation K_s . L'abscisse des segments verticaux représente ce même temps de transfert pour une variation annuelle périodique de la nappe d'amplitude égale à l'ordonnée correspondant à la longueur du segment.

Nous constatons ainsi que pour les deux types de zones non saturées testées et quelle que soit la conductivité hydraulique à saturation, les temps de transfert des solutés de la surface vers la nappe sont similaires à ceux obtenus avec une épaisseur de zone non saturée correspondant au niveau haut de la nappe, et non pas à un niveau moyen de la nappe. Ainsi, lorsque la nappe fluctue autour d'un niveau moyen de 15 m avec un K_s de $2,89.10^{-6}\text{m.s}^{-1}$ dans une zone non saturée de type limon, les solutés sont transférés à la nappe avec une avance de $1,6$ et $3,6$ ans pour respectivement une fluctuation de $\pm 1,5\text{ m}$ et $\pm 3,0\text{ m}$ par rapport au niveau moyen.

Si on regarde l'évolution des profils de saturation dans les colonnes au cours des simulations (Figure 3.18), on constate que les échanges de flux entre la ZNS et la nappe n'impacte que la zone de fluctuations piézométriques et les 2 m au-dessus du niveau haut de ce battement. Cette même dynamique a été retrouvée pour le cas craie.

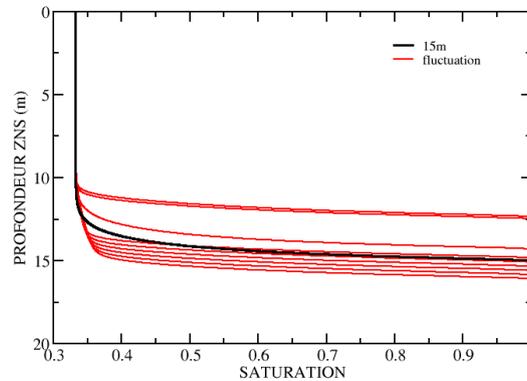


FIGURE 3.18: Evolution de la saturation le long d'une zone non saturée de type limon avec un $K_s = 2,89.10^{-6}m.s^{-1}$, pour un niveau de la nappe constant à 15 m de profondeur (noir) et un niveau de la nappe fluctuant annuellement à $\pm 3m$ autour de ce niveau moyen (rouge) à des dates aléatoires.

La vitesse de transfert des solutés à travers la zone non saturée n'est donc absolument pas impactée dans ces conditions par le battement de nappe. En revanche, du fait de la fréquence élevée des variations piézométriques par rapport à la vitesse de transferts des solutés, le lessivage de ces derniers par la nappe est régi par le niveau haut de celle-ci.

Conclusion

Plusieurs conclusions peuvent être faites à partir des résultats obtenus en considérant un niveau de la nappe constant dans les colonnes.

Tout d'abord les vitesses de transfert des solutés dans une zone non saturée varient selon la forme de la courbe de pression capillaire. Lorsque la variation de saturation de la surface vers la profondeur de la zone non saturée à l'équilibre est prononcée, son influence sur les transferts de solutés est significative (cas limon). En revanche, lorsque ce profil de saturation se verticalise, son influence sur les transferts de solutés est atténuée (cas craie). Cette influence est d'autant plus importante que la conductivité hydraulique à saturation est élevée puisque la variation de saturation de la surface vers la profondeur est davantage prononcée.

Puis, nous montrons également grâce à ces résultats une influence de la profondeur de la nappe sur ces dynamiques de transfert à travers la zone non saturée. En effet, moins la nappe est profonde, plus la vitesse de transfert des solutés varie dans la zone non saturée.

Enfin, nous mettons en évidence dans ces résultats que quel que soit le profil d'initialisation choisi

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec *METIS*

(à l'équilibre hydrostatique ou à l'équilibre dynamique), cette influence sur les transferts des solutés à travers la ZNS n'est en rien modifiée.

Lorsque l'on considère maintenant une fluctuation du niveau piézométrique, un échange de flux d'eau intervient entre la zone non saturée et la zone saturée. Cet échange est d'autant plus important que la fluctuation est conséquente et les paramètres de Van Genuchten faibles. Un lessivage des solutés par la nappe intervient alors. Les solutés impactent ainsi la zone saturée et migrent selon la dynamique intervenant à ce niveau. Mais ce lessivage de la fraction basse de la zone non saturée dépend de la fréquence des oscillations de la nappe. Si la fréquence est élevée devant le temps de parcours des solutés dans la zone non saturée, comme dans notre exemple testé, le phénomène de transfert amortit l'influence des fluctuations et ce sont les niveaux hauts qui régissent les temps de transfert de la zone non saturée vers la zone saturée. En revanche, si la fréquence de fluctuation est basse en regard du temps de transfert, la variation du niveau moyen de la nappe aura une influence importante sur ce temps de transfert.

Ceci permet de poser quelques hypothèses pour des applications grands bassins. En effet, si l'on considère un lessivage instantané des solutés une fois qu'ils sont sous le niveau piézométrique nous pouvons considérer que la simulation du lessivage des solutés par des fluctuations piézométriques avec des valeurs de niveaux hauts constants et fréquents (comme illustré sur la partie gauche de la Figure 3.19) n'est pas nécessaire.

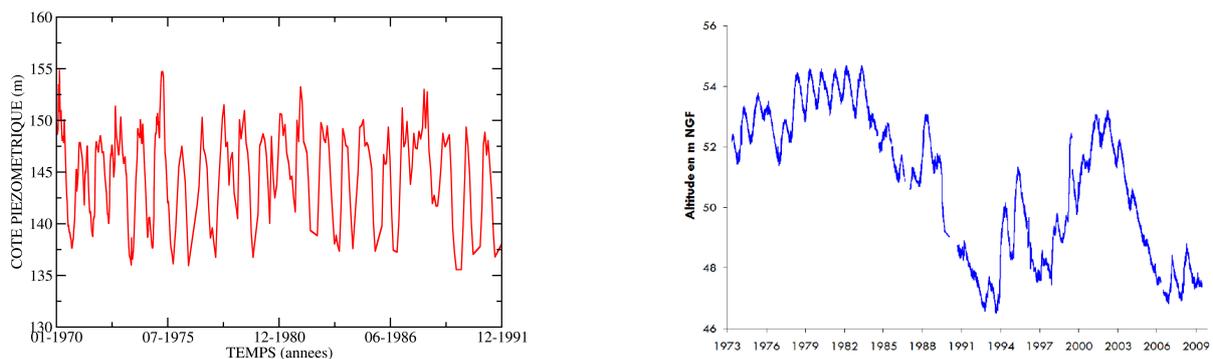


FIGURE 3.19: A gauche, évolution de la côte piézométrique à Bussy-le-Château entre 1970 et 1991 (ADES) et à droite, tendance à long-terme au piézomètre de Montereau-sur-le-Jard (données Ministère de l'Ecologie-BRGM)

En effet, la définition d'une épaisseur de zone non saturée égale à la différence entre la surface et ces niveaux hauts permet de restituer des temps de transfert des solutés vers la nappe corrects. Ce

résultat remet donc en cause l'approche adoptée dans MODCOU qui consiste à définir l'épaisseur de la zone non saturée comme la différence entre la surface du sol et le niveau piézométrique moyen obtenu en régime permanent.

En revanche, cette approximation de l'épaisseur moyenne de la zone non saturée n'est plus satisfaisante lorsqu'on souhaite prendre en compte une évolution sur le long terme d'un niveau de nappe. Ainsi, actuellement, les pompages pour irriguer les cultures par exemple peuvent générer sur le long terme des diminutions notables du niveau piézométrique, comme cela est illustré à droite sur la Figure 3.19 à Montereau-sur-le-Jard (Seine et Marne). Mais les évolutions les plus conséquentes sont attendues dans un futur proche, sous l'action du changement climatique. Ducharne *et al.* (2003) estiment en effet avec *MODCOU* que sur le bassin de la Seine, une diminution de la recharge des nappes de 30 % est possible après 2050. Cette baisse de la recharge génèrera une diminution des niveaux piézométriques et impactera donc l'épaisseur de la zone non saturée et son profil de saturation. Un couplage entre ce milieu et la nappe est donc nécessaire pour prendre en compte cette évolution sur le long terme et simuler ainsi au mieux les transferts de solutés dans les aquifères.

3.2 Les transferts à travers la zone non saturée : expérimentation numérique avec
METIS

Chapitre 4

Amélioration de la simulation des transferts à travers la zone non saturée dans le modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée

Nous avons vu dans la section précédente que la zone non saturée présente un intérêt tout particulier en ce qui concerne la contamination en nitrates des hydrosystèmes. En effet, les transferts à travers ce milieu étant très lents, il peut générer des délais très importants entre une contamination en surface et un impact sur la ressource en eau souterraine.

En se basant sur les résultats obtenus dans le Chapitre 3, nous avons souhaité évaluer le modèle de transfert d'eau et de solutés à travers la zone non saturée $NONSAT_{SW}$, disponible dans le modèle hydrogéologique MODCOU, en vue de son implémentation dans Eau-dyssée. Ce modèle intégré étant destiné à des applications sur grands bassins, $NONSAT_{SW}$ présente l'avantage d'adopter une approche conceptuelle qui donc requiert peu de paramètres et conduit à de faibles temps de calcul. Nous présentons tout d'abord la méthode adoptée pour procéder à cette évaluation de $NONSAT_{SW}$ ainsi que les résultats de cette évaluation. Nous proposons ensuite dans ce chapitre une amélioration de ce modèle conceptuel ainsi qu'une évaluation de cette nouvelle version. Un article restituant l'ensemble de ce travail a été publié dans la revue Hydrological Processes et est disponible dans l'Annexe B.

4.1 Description du modèle conceptuel $NONSAT_{SW}$

Nous disposons d'un modèle conceptuel $NONSAT_{SW}$ (SW pour Solute and Water transfer) simulant les transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée. Nous avons expliqué dans la section 2.2.3 l'approche $NONSAT$ adoptée pour le transfert de l'eau à travers cette zone. Gomez (2002) ont modifié ce modèle $NONSAT$ en un module $NONSAT_{SW}$ pour simuler le transfert à travers la ZNS des solutés conservatifs, c'est-à-dire des solutés n'étant nullement impliqués dans des réactions biochimiques lors de leur transfert à travers la zone non saturée.

Pour cela, Gomez *et al.* (2003) ont introduit une capacité de stockage des réservoirs, assimilable à l'eau retenue par capillarité dans les pores de la zone non saturée. Un volume minimal d'eau V_{min} a donc été introduit dans les réservoirs de la cascade de Nash. V_{min} est identique dans tous les réservoirs i d'une colonne non saturée. $NONSAT_{SW}$ gère donc à la fois un flux d'eau gravitaire, déjà pris en compte dans $NONSAT$, et un volume d'eau capillaire.

En l'absence d'infiltration, les réservoirs se vidangent jusqu'au V_{min} . Une fois ce volume atteint, plus aucun transfert d'eau et de nitrates ne se produit et une quantité plus ou moins importante de solutés est retenue dans la zone non saturée.

Pour limiter les mélanges dans les réservoirs qui pourraient générer une dispersion trop importante des solutés, Gomez *et al.* (2003) ont également introduit une stratification (Figure 4.1).

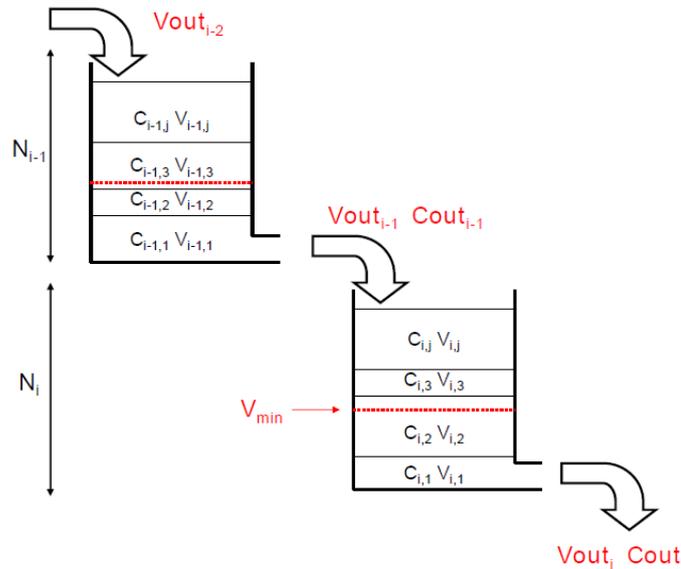


FIGURE 4.1: Représentation schématique des transferts de solutés conservatifs dans la cascade de Nash

On retrouve dans ce modèle conceptuel les caractéristiques de *NONSAT* : la zone non saturée est divisée en N réservoirs horizontaux de même épaisseur et caractérisés par un temps de percolation τ identique.

Lors d'une infiltration, une strate j correspondant au volume disponible sur le pas de temps t est introduite dans le premier réservoir. Chaque strate j dans chaque réservoir i est définie par un volume d'eau $V_{i,j}$ et une concentration en nitrates $C_{i,j}$ spécifiques. Les strates s'accumulent dans les réservoirs et aucun mélange n'intervient. Cet apport d'eau dans un réservoir génère instantanément une vidange de ce réservoir selon la formule suivante :

$$Vin_{i+1}(t) = Vout_{i(t)} = (Vol_{i(t)} - V_{min(i)}) \times \delta \quad (4.1)$$

avec $V_{min(i)}$ le volume minimal d'eau dans le reservoir i (m^3) et δ un coefficient de vidange. δ est lié au temps de percolation τ (s) par la relation $\delta = 1 - \exp(\frac{-dt}{\tau})$ avec dt le pas de temps de calcul (s).

Durant ce processus, un mélange de strates intervient. La concentration en nitrates du flux d'eau vidangé est en effet calculée de la manière suivante :

$$Cout_{i(t)} = \frac{\sum_{i,j=1}^{i,j=nl} C_{i,j} V_{i,j}}{Vout_{i(t)}} \quad (4.2)$$

Avec $Cout_i$ la concentration ($kg.m^{-3}$) du volume d'eau $Vout_i$ sortant du réservoir i , $V_{i,j}$ le volume de la strate j dans le réservoir i (m^3), $C_{i,j}$ la concentration de la strate j dans le réservoir i ($kg.m^{-3}$), nl le nombre de strates dénombrés à partir de la strate la plus profonde et contribuant à la fourniture du $Vout_i$ à la date t (s).

Pour des raisons numériques, un nombre maximal de strates $Nbstrate_{max}$ par réservoir a été introduit. Quand cette valeur maximale est atteinte, un mélange fusionne les deux strates les plus proches du V_{min} . Ce mélange génère une dispersion des solutés dans la zone non saturée dont l'expérience montre qu'elle reste assez limitée.

NONSAT_{SW} a donc deux paramètres additionnels par rapport à *NONSAT* : le nombre maximal de strate $Strate_{max}$ et le volume minimal V_{min} qui peut varier dans l'espace selon le type de sol. En conditions initiales, les volumes d'eau dans les réservoirs d'une ZNS sont égaux au V_{min} . *In fine*, on constate que comme dans *NONSAT_{SW}*, les volumes dans les réservoirs ne sont pas limités par un volume maximal, bien qu'ils soient maintenant limités par un volume minimal.

Le modèle *NONSAT_{SW}* est donc un modèle très simple simulant les transferts d'eau et de solutés à travers la ZNS avec un nombre réduit de paramètres.

La sensibilité du modèle *NONSAT_{SW}*

Des tests ont été effectués avec le modèle *NONSAT_{SW}* pour estimer l'influence respective sur la dynamique des transferts d'eau et de solutés à travers la zone non saturée des paramètres intervenant dans ce modèle, à savoir :

- le nombre de réservoirs N
- le volume minimal dans chaque réservoir V_{min} , qui représente le contenu en eau à l'équilibre hydrostatique en conditions non saturées dans un réservoir.
- le temps de percolation τ qui module la vitesse d'écoulement à travers la zone non saturée.
- le nombre maximal de strates qui influence la dispersion des solutés

Pour analyser le comportement du modèle, on se place dans des conditions simples avec des flux d'eau infiltrée et de nitrates constants sur toute la durée des simulations. L'épaisseur de la zone non saturée est régie par le nombre de réservoirs N et le temps de percolation τ . On aboutit à terme à un équilibre des flux d'eau et de nitrates en entrée et en sortie de la zone non saturée, ainsi qu'à un équilibre des volumes d'eau et des concentrations dans les réservoirs. Les tests de sensibilité portent sur le temps nécessaire pour atteindre cet équilibre.

Les conditions expérimentales considérées dans le modèle *NONSAT_{SW}* pour ces tests de sensibilité sont résumées dans le Tableau 4.1.

4.1 Description du modèle conceptuel $NONSAT_{SW}$

TABLE 4.1: Conditions expérimentales des tests effectués avec $NONSAT_{SW}$ sur les transferts d'eau et de solutés

Résolution spatiale	
<i>Discrétisation verticale</i>	Réservoir de 5m d'épaisseur
<i>Surface de la maille</i>	$1km^2$
Résolution temporelle	
<i>Pas de temps de calcul</i>	$1jour$
<i>Pas de temps des sorties</i>	$1jour$
<i>Durée de la simulation</i>	$2000jours$
Conditions initiales	
<i>Teneur en eau</i>	Volume égal à V_{min} dans chaque réservoir
<i>Concentration</i>	Concentration nulle dans chaque réservoir
Conditions aux limites	
<i>Surface de la colonne</i>	Injection d'un volume d'eau constant égal à $1,7mm.jour^{-1}$ Concentration du flux d'eau injecté égale à $30mg.L^{-1}$
<i>Base de la colonne</i>	Niveau de la nappe constant
Paramètres	
TESTS SENSIBILITE EAU	
<i>TEST 1</i>	$N=4$; $\tau=2, 4, 6, 8$ ou $10jours$; $V_{min} = 0,02m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
<i>TEST 2</i>	$N=2, 4, 6, 8$ ou 10 ; $\tau=5jours$; $V_{min} = 0,02m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
<i>TEST 3</i>	$N=4, 6$ ou 10 ; $\tau=6, 5$ ou $3jours$; $V_{min} = 0,02m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
TESTS SENSIBILITE SOLUTES	
<i>TEST 4</i>	$N=4$; $\tau=2, 4, 6, 8$ ou $10jours$; $V_{min} = 0,02m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
<i>TEST 5</i>	$N=2, 4, 6, 8$ ou 10 ; $\tau=5jours$; $V_{min} = 0,02m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
<i>TEST 6</i>	$N=4$; $\tau=5jours$; $V_{min} = 0,02; 0,04; 0,06$ et $0,08m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 50$
<i>TEST 7</i>	$N=5$; $\tau=5jours$; $V_{min} = 0,04m^3.m^{-2}$ et $Nbstrate_{max} = 10, 20, 30, 40$ ou 50

Délais de mise à l'équilibre des débits entrant et sortant de la zone non saturée

La Figure 4.2 présente l'évolution des débits infiltré et vidangé en fonction, à gauche, de différents temps de percolation τ pour une zone non saturée de 4 réservoirs (TEST 1) et, à droite, de différents nombres de réservoirs N pour une zone non saturée avec un temps de percolation $\tau = 5 jours$ (TEST 2).

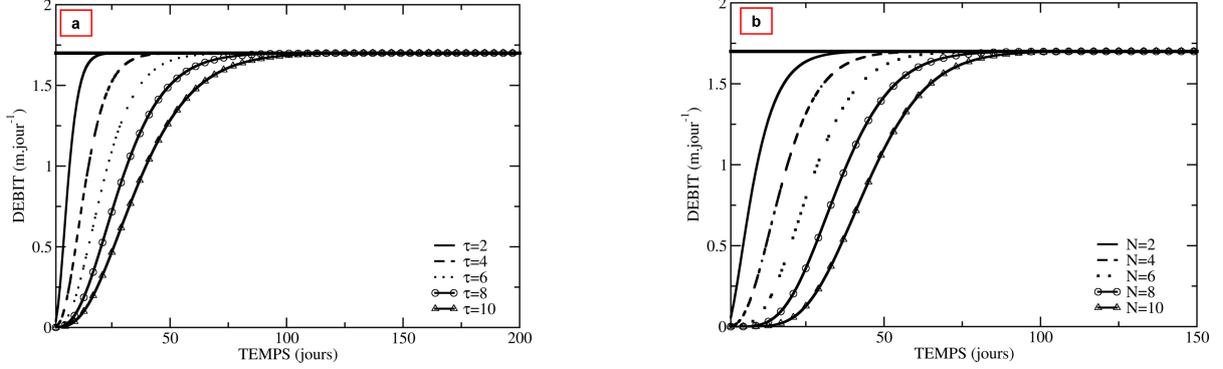


FIGURE 4.2: Circulation de l'eau à travers des zones non saturées obtenue avec $NONSAT_{SW}$ pour des colonnes de surface unité. L'infiltration est constante et égale à $1,7 \text{ mm.jour}^{-1}$ (ligne noire continue horizontale). Nous considérons un V_{min} de $0,2 \text{ m}^3.\text{m}^{-2}$ et un nombre maximal de strates par réservoir de 50. Sur la Figure a, le temps de percolation τ varie de 2 à 10 jours pour une zone non saturée de 4 réservoirs. Sur la Figure b, l'épaisseur des zones non saturées varie de 2 à 10 réservoirs N pour un temps de percolation τ de 5 jours.

Ces tests de sensibilité nous ont tout d'abord permis de mettre en évidence que l'atteinte d'un état stationnaire des transferts d'eau à travers une zone non saturée définie par un nombre de réservoirs N et un temps de percolation τ ne dépend absolument pas du V_{min} et du nombre maximal de strates dans les réservoirs. Donc en pratique, la capacité de stockage à l'équilibre hydrostatique imposée dans une colonne non saturée et les mélanges générés par le paramètre $Nbstrate_{max}$ n'influencent en rien la dynamique de transfert d'eau à travers la zone non saturée. En revanche, pour une zone non saturée caractérisée par un nombre donné de réservoirs N , ce délai d'équilibre augmente avec le temps de percolation τ . Rappelons en effet que le coefficient δ qui régule la capacité d'un réservoir à se vidanger est une fonction qui dépend de l'inverse du temps de percolation ($\delta = 1 - e^{-\frac{dt}{\tau}}$ avec dt le pas de temps de calcul). Donc lorsque ce temps de percolation augmente, les volumes d'eau dans les réservoirs sont plus importants à l'équilibre. Cet état de stabilité est donc atteint plus tardivement à la sortie de $NONSAT_{SW}$. De même, pour une zone non saturée caractérisée par un temps de vidange donnée τ , plus le nombre N de réservoirs est important, plus le délai pour atteindre un équilibre des flux d'eau à travers la zone non saturée est élevé (Figure 4.2), puisque cette augmentation de N implique une augmentation de l'épaisseur de la zone non saturée. Au vu des résultats obtenus dans ces tests de sensibilités, nous remarquons que l'influence respective de ces deux paramètres τ et N sur les transferts d'eau à travers la zone non saturée est assez proche. Une variation similaire de l'un ou l'autre de ces paramètres pour une zone non saturée donnée génère

des variations dans les délais d'équilibre des débits entrant et sortant de la zone non saturée assez comparable.

Différentes combinaisons 'temps de percolation τ et nombre de réservoirs N ' permettent donc d'obtenir des délais d'équilibre des débits entrant et sortant de la zone non saturée identiques. En revanche, la dynamique de transfert d'eau à travers la colonne pour atteindre cet équilibre diffère d'une combinaison de paramètres à l'autre, comme l'illustre la Figure 4.3 (TEST 3) :

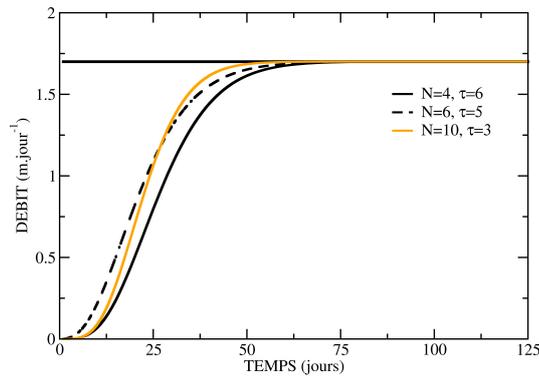


FIGURE 4.3: Circulation de l'eau à travers trois colonnes non saturées simulées par $NONSAT_{SW}$ en considérant une infiltration constante de $1,7 \text{ mm.jour}^{-1}$ (ligne noire continue horizontale). Chaque colonne est caractérisée par un certain nombre de réservoirs N et un certain temps de percolation τ .

Délais de mise à l'équilibre des quantités de nitrates transférées à travers la zone non saturée

La Figure 4.4 présente l'évolution des flux de nitrates s'infiltrant et s'exfiltrant de la zone non saturée en fonction, à gauche, de différentes valeurs de τ pour une zone non saturée de 4 réservoirs (TEST 4) et, à droite, de différents nombre de réservoirs N pour une zone non saturée avec un temps de percolation $\tau = 5 \text{ jours}$ (TEST 5).

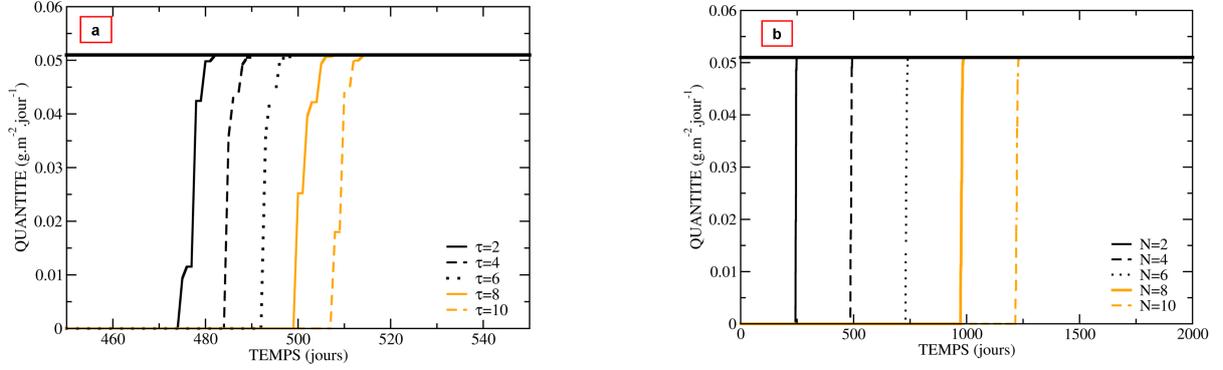


FIGURE 4.4: Circulation des solutés à travers des zones non saturées obtenue avec $NONSAT_{SW}$ pour des colonnes de surface unité. L'infiltration est constante et égale à $1,7 \text{ mm.jour}^{-1}$. Le flux massique entrant est également constant et égal à $0,051 \text{ g.m}^{-2}.\text{jour}^{-1}$ (ligne noire continue). Nous considérons un V_{min} de $0,2 \text{ m}^3.\text{m}^{-2}$ et un nombre maximal de strates par réservoir de 50. Sur la Figure a, le temps de percolation τ varie de 2 à 10 jours pour une zone non saturée de 4 réservoirs. Sur la Figure b, l'épaisseur des zones non saturées varie de 2 à 10 réservoirs pour un temps de percolation τ de 5 jours.

Nous retrouvons comme pour les transferts d'eau l'influence du nombre de réservoirs et du temps de percolation sur la dynamique de transfert des solutés à travers la zone non saturée. En effet, plus le nombre de réservoirs et le temps de percolation sont importants, plus l'épaisseur de la zone non saturée est conséquente, et donc plus les délais d'équilibre des quantités entrant et sortant de la zone non saturée sont élevés.

Cependant, contrairement aux résultats obtenus pour les transferts d'eau, nous observons ici une influence prépondérante du nombre de réservoirs par rapport au temps de percolation sur la dynamique des transferts de solutés. Ceci est lié au fait que les transferts de solutés sont influencés par le V_{min} . En effet, ce V_{min} représente la capacité de stockage de la colonne non saturée. Plus cette capacité de stockage à l'équilibre hydrostatique est importante, plus le volume d'eau à traverser dans chaque réservoir pour les solutés est conséquent. La vitesse de transfert des solutés d'un réservoir à l'autre est donc plus faible et le délai d'atteinte d'un équilibre des quantités entrant et sortant de la zone non saturée plus important. La Figure 4.5 illustre le fait que plus ce V_{min} est important, plus les délais d'équilibre des débits entrant et sortant dans une zone non saturée caractérisée par un certain nombre de réservoir N et un certain temps de percolation τ sont importants (TEST 6). Ces résultats concernant l'influence du V_{min} nous permettent donc de comprendre la raison de l'effet prépondérant du nombre de réservoirs N sur le temps de percolation τ concernant les délais d'équi-

libre des quantités entrant et sortant de la zone non saturée. En effet, l'augmentation du nombre de réservoirs d'une zone non saturée avec un temps de percolation τ donné ne permet pas uniquement ici d'augmenter l'épaisseur de la zone non saturée, mais également la capacité de stockage à l'équilibre hydrostatique de cette zone non saturée.

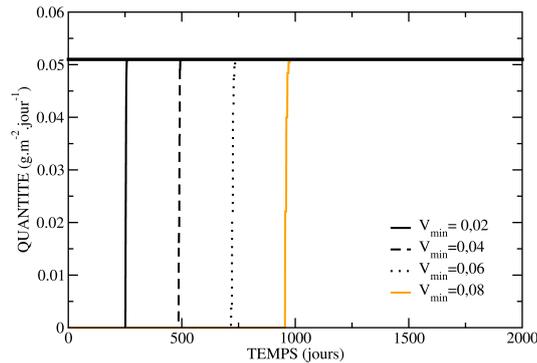


FIGURE 4.5: Circulation des solutés à travers la zone non saturée obtenue avec $NONSAT_{SW}$ pour 4 colonnes de 4 réservoirs, avec un τ de 5 jours, un nombre maximal de strates par réservoir de 50 et un V_{min} variant de 0,02 à 0,08 $m^3.m^{-2}$. L'infiltration est constante et égale à 1,7 $mm.jour^{-1}$. Le flux massique entrant est également constant et égal à 0,051 $g.m^{-2}.jour^{-1}$ (ligne noire continue).

Les résultats de ces tests de sensibilité ont également permis de mettre en évidence l'influence du nombre maximal de strates autorisé par réservoir sur la dynamique de transfert des solutés. Rappelons que lorsque le nombre maximal de strates est atteint dans un réservoir, un mélange des strates situées autour du V_{min} est effectuée. Plus le nombre maximal de strates est faible, plus les mélanges sont fréquents dans chaque réservoir. Nous observons ainsi sur la Figure 4.6 que plus le nombre maximal de strates est faible, plus les nitrates sortent précocement et plus le délai pour atteindre un équilibre des quantités de nitrates entrant et sortant de la zone non saturée est long (TEST 7). Ce paramètres influencent donc la dispersion des solutés dans la colonne. Notons cependant également que le temps moyen correspondant au transfert de la moitié des quantités reste cependant inchangé selon le nombre de strates maximal imposé.

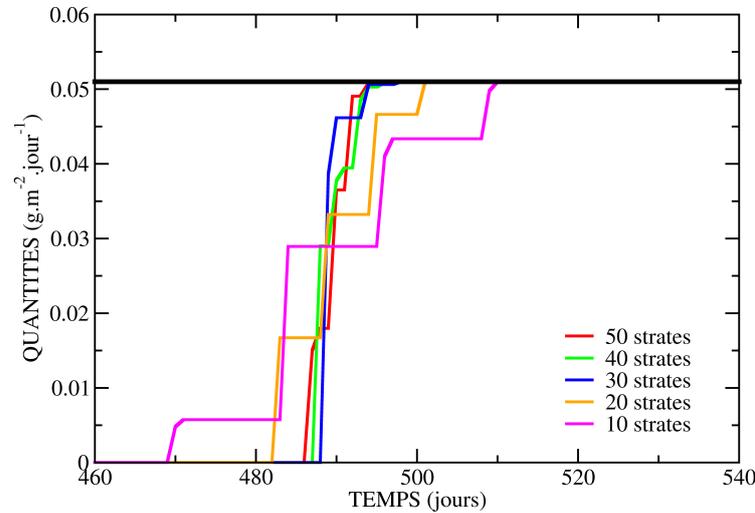


FIGURE 4.6: Evolution des quantités en sortie d'une zone non saturée de 5 réservoirs, avec un $V_{min} = 0,04m^3.m^{-2}$, un $\tau = 5$ jours, une infiltration de $1,70 mm.jour^{-1}$, et un nombre maximal de strates par réservoirs variant de 10 à 50.

Ces tests de sensibilité nous permettent de mettre en évidence un point important : le transfert des solutés est sensible à la capacité de stockage et au mélange dans la colonne alors que le transfert d'eau ne l'est pas. Cette différence implique donc par voie de conséquence des vitesses de transfert du signal eau et du signal nitrates différentes. Une infiltration dans une zone non saturée conduira rapidement à une vidange à la base de celle-ci, alors qu'une injection de nitrates à la surface de ce milieu aura un impact plus tardif sur les concentrations en sortie de la zone non saturée. Ainsi, bien que régi par des relations paramétriques simples, ce modèle permet de restituer la double dynamique de transfert d'eau et de solutés observée sur le terrain (cf Chapitre 3).

L'approche conceptuelle adoptée dans le modèle pour les transferts d'eau a été validée par Besbes et Marsily (1984). En revanche, la conceptualisation des transferts de solutés avec ce type de modèle n'a jamais été évaluée. Nous avons donc souhaité évaluer ce modèle $NONSAT_{SW}$ pour le transfert des solutés. Une première étape de ce travail a tout d'abord consisté à déterminer une méthode d'évaluation de ce modèle.

4.2 Evaluation du modèle conceptuel de zone non saturée *NONSAT_{SW}*

Nous avons procédé à des tests de comparaison avec le modèle à bases physiques *METIS* (Goblet, 2007), disponible au sein de l'équipe SHR. Une description détaillée de ce modèle mécaniste ainsi qu'une validation des capacités de cet outil à restituer les transferts dans une zone non saturée est proposée dans la section 3.1.2.2.

4.2.1 La méthodologie de comparaison

La difficulté pour ces tests comparatifs réside dans le fait que ces deux modèles ont des paramètres et des variables ayant des significations très différentes. En effet les écoulements d'eau par exemple sont régis dans *NONSAT_{SW}* par un temps de percolation τ et dans *METIS* par une conductivité hydraulique et une porosité. Puis la capacité de stockage à l'équilibre hydrostatique des zones non saturées est déterminée dans *NONSAT_{SW}* par un volume minimal par réservoir V_{min} et dans *METIS* par les paramètres de Van Genuchten. En outre ces deux modèles ne calculent pas les mêmes variables : *NONSAT_{SW}* fournit des volumes d'eau par réservoir alors que *METIS* gère des saturations.

Une stratégie a donc été mise en place pour comparer les transferts de solutés entre ces modèles :

- La mise en évidence des différences de transfert des solutés dans les zones non saturées des deux modèles passe par la définition d'un état de référence commun entre ces deux outils. La référence choisie pour ces tests est un temps de transfert des solutés similaire en sortie des colonnes non saturées. Les éventuelles différences de transfert dans les sections des colonnes constatées entre les deux modèles sont donc uniquement dues à la conceptualisation adoptée dans chaque outil.

NONSAT_{SW} ayant été appliqué sur le bassin de la Seine, nous disposons d'un jeu de paramètres pour 7 types de zones non saturées prédominantes sur cette zone géographique (Gomez, 2002). Nous choisissons donc de calibrer *METIS* de sorte à obtenir avec les deux modèles des temps de transfert des solutés similaires en sortie des colonnes non saturées. Pour cette calibration, nous avons utilisé des bases de données existantes pour définir les paramètres de Van Genuchten et nous avons ajusté la porosité et la conductivité hydraulique à saturation.

- La comparaison des transferts de solutés dans les colonnes non saturées est effectuée à chaque section de 5 m dans *METIS* et à chaque interface de réservoirs dans *NONSAT_{SW}*.

Les tests de comparaison sont effectués en considérant une infiltration constante de $1,70 \text{ mm.jour}^{-1}$ à la surface de colonnes de 20 m de profondeur. Un contaminant conservatif (type nitrates donc)

est injecté les trois premiers jours de simulation. La zone non saturée dans *METIS* est initialisée avec un profil de saturation à l'équilibre hydrostatique. Nous savons en effet de toute façon grâce au Chapitre 3 que la méthode d'initialisation n'influence pas la dynamique des transferts à travers la zone non saturée avec les jeux de paramètres que nous avons considérés. Pour chaque type de zone non saturée défini sur le bassin de la Seine, les paramètres requis dans *METIS* sont, comme dans le Chapitre 3, définis à partir de bases de données des paramètres disponibles pour différentes catégories texturales de sols. Nous nous référons à la base de données de Carsel et Parrish (1988) pour définir les paramètres requis dans *METIS*. Brouyère (2006) a cependant étudié spécifiquement la zone non saturée crayeuse et a déterminé des paramètres de Van Genuchten spécifique que nous utiliserons pour cette zone non saturée. L'ensemble des paramètres définis par les bases de données auxquelles nous nous référons, ainsi que leur correspondance avec les zones non saturées définies sur le bassin de la Seine sont présentés dans le Tableau 4.2.

4.2 Evaluation du modèle conceptuel de zone non saturée $NONSAT_{SW}$

TABLE 4.2: Valeurs moyennes des paramètres de capacité de rétention et de conductivité hydraulique selon Carsel et Parrish (1988) pour 12 groupes texturaux de sols et selon Brouyère (2006) pour la matrice crayeuse. θ_r et θ_s sont la teneur en eau volumique minimale et maximale du milieu poreux ($m^3.m^{-3}$), α (m^{-1}) et n (-) sont les paramètres de Van Genuchten et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$). Dans la dernière colonne est faite la correspondance avec les catégories de zones non saturées définies par Gomez (2002) sur le bassin de la Seine.

<i>Texture</i>	θ_r	θ_s	α	n	K_s	
<i>Carsel and Parrish</i>						$NONSAT_{SW}$
<i>sand</i>	0.045	0.430	14.500	2.680	$8.250.10^{-5}$	<i>urbain cristallin</i> <i>limon</i> <i>alluvion</i> <i>sable</i> <i>argile</i>
<i>loamy sand</i>	0.057	0.410	12.400	2.280	$4.050.10^{-5}$	
<i>sandy loam</i>	0.065	0.410	7.500	1.890	$1.220.10^{-5}$	
<i>loam</i>	0.078	0.430	3.600	1.560	$2.890.10^{-6}$	
<i>silt</i>	0.034	0.460	1.600	1.370	$6.940.10^{-7}$	
<i>silt loam</i>	0.067	0.450	2.000	1.410	$1.250.10^{-6}$	
<i>sandy clayloam</i>	0.100	0.390	5.900	1.480	$3.640.10^{-6}$	
<i>clay loam</i>	0.000	0.410	1.900	1.310	$7.220.10^{-7}$	
<i>silty clayloam</i>	0.089	0.430	1.000	1.230	$1.940.10^{-7}$	
<i>sandy clay</i>	0.100	0.380	2.700	1.230	$3.330.10^{-7}$	
<i>silty clay</i>	0.070	0.360	0.500	1.090	$5.550.10^{-8}$	
<i>clay</i>	0.068	0.380	0.800	1.090	$5.550.10^{-7}$	
<i>Brouyère</i>						$NONSAT_{SW}$
<i>matrix chalk</i>	–	0.410	0.100	1.100	$1.300.10^{-8}$	<i>craie</i>

Pour obtenir des temps de transfert similaires à la sortie des colonnes non saturées entre $NONSAT_{SW}$ et $METIS$, le volume d'eau capillaire dans les deux modèles doit être proche. C'est en effet ce volume d'eau qui assure la capacité de stockage des solutés dans les colonnes, capacité qui influence grandement la dynamique de transfert des polluants. La procédure de calibration de $METIS$ débute donc par une calibration de la porosité : plus la porosité est faible, plus le volume d'eau, et donc la capacité de stockage du système est faible. Puis pour ajuster le calage de $METIS$, une modification de la conductivité hydraulique à saturation K_s est effectuée. Si le transfert en sortie de la colonne $METIS$ est trop rapide, le K_s est diminué, et, dans le cas contraire, il est

augmenté.

4.2.2 Résultats des tests de comparaison

La procédure de calibration de *METIS* aboutit à la détermination dans ce modèle de paramètres différents de ce que l'on observe dans les bases de données prises comme référence. Nous présentons ainsi dans le Tableau 4.3 les paramètres définis suite à la procédure de calibration pour des zones non saturées de type crayeux et limoneux dans *NONSAT_{SW}* et *METIS*. On constate ainsi que le K_s défini dans *METIS* pour la zone non saturée de type limon est plus élevé d'une puissance 3 que le K_s de la catégorie texturale "Loam" dans la base de données de Carsel et Parrish (1988). Pour la zone non saturée crayeuse, la porosité de *METIS* est 5 fois inférieure à la porosité définie par Brouyère (2006).

TABLE 4.3: Paramètres utilisés dans *NONSAT_{SW}* et *METIS* pour les tests de comparaison. N est le nombre de réservoirs, τ et le temps de percolation (jours), $thick$ est l'épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m^3.m^{-2}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté ($10^{-2}m$) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$).

Limon		Craie	
<i>NONSAT_{SW}</i>	<i>METIS</i>	<i>NONSAT_{SW}</i>	<i>METIS</i>
$N = 4$	$nqu = 2000$	$N = 4$	$nqu = 2000$
$\tau = 5$	$K_s = 8,15.10^{-3}$	$\tau = 5$	$K_s = 9,00.10^{-7}$
$V_{min} = 0,07$	$\omega = 33,00.10^{-2}$	$V_{min} = 0,08$	$\omega = 8,50.10^{-2}$
	$thick = 20$		$thick = 20$
	$n = 1,56$		$n = 1,10$
	$\alpha = 3,60$		$\alpha = 0,10$
	$a = 1$		$a = 1$

Les grandes différences de K_s et de porosité obtenues entre ces paramètres calibrés et les paramètres des bases de données ne nous permettent donc pas de valider les paramètres définis sur le bassin de la Seine en 2002 par Gomez (2002).

Ceci n'est pas étonnant puisqu'à l'époque, Gomez (2002) n'avait pas de données pour calibrer ce modèle et n'avait pu se contenter que de se satisfaire d'un certain réalisme de ces transferts.

Les transferts de solutés conservatifs

La Figure 4.7 présente les transferts de solutés à chaque section de 5 m de profondeur dans $NONSAT_{SW}$ et $METIS$ pour les zones non saturées de type craie et limon.

Sur chaque figure, le premier 'pic' correspond au transfert à 5 m de profondeur, le deuxième à 10 m, le troisième à 15 m et enfin le quatrième à 20 m de profondeur.

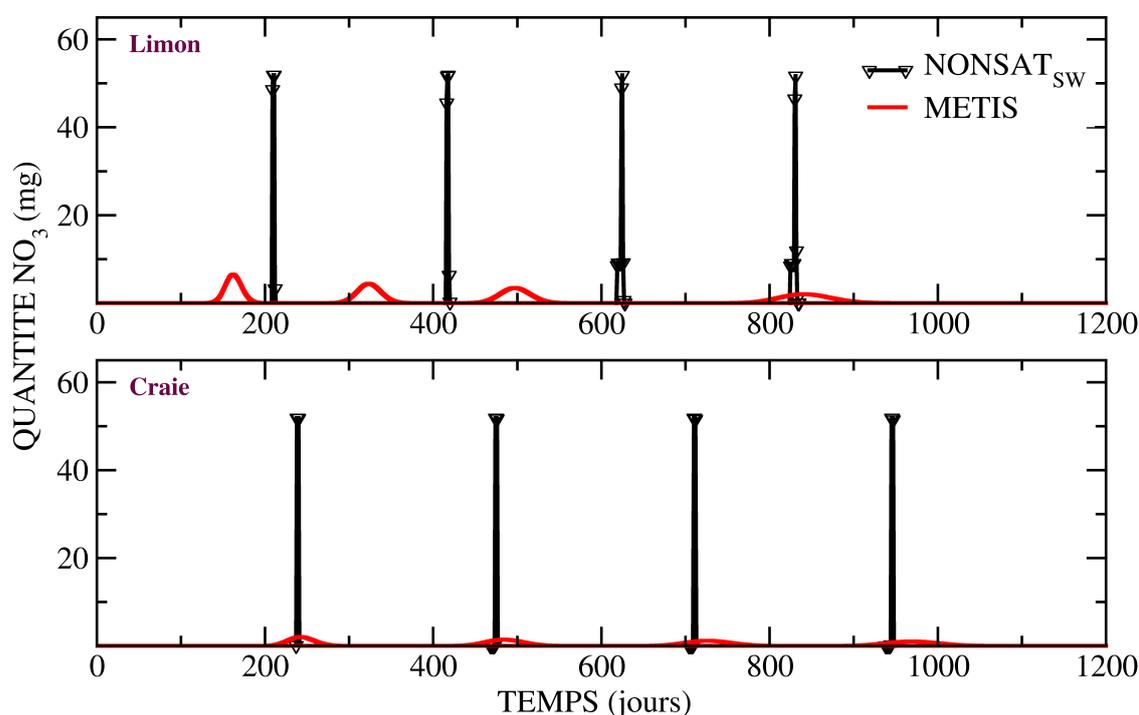


FIGURE 4.7: Transfert des solutés dans $METIS$ (rouge) et $NONSAT_{SW}$ (noir-triangle) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans des zones non saturées de type limon et craie (Gomez, 2002)

Compte tenu de la méthodologie de calibration adoptée, on observe un bon phasage dans le temps du transfert des nitrates obtenu avec $METIS$ et $NONSAT_{SW}$ à 20 m de profondeur.

La dynamique de transfert des solutés à travers la zone non saturée diffère cependant entre les deux modèles. Dans $NONSAT_{SW}$, la vitesse de transfert des solutés à travers chaque ZNS simulée est constante et la dispersion est quasi-nulle. Dans $METIS$ en revanche, la vitesse de transfert des solutés diminue de la surface vers la profondeur de la zone non saturée. En parallèle, la distribution des solutés dans le temps prend une forme gaussienne dans le modèle $METIS$. En effet, dans tous

les cas testés avec le modèle mécaniste, la dispersion, représentée par l'écart-type ou encore l'étendue de la gaussienne, augmente dans la profondeur de la ZNS.

Ces différences de transfert des solutés entre les deux modèles sont liées en partie à leur différente dynamique de transfert d'eau à l'équilibre hydrostatique dans la colonne. Nous décrivons ce transfert d'eau dans la section suivante.

Les transferts d'eau

Nous procédons à une comparaison des teneurs en eau dans les colonnes non saturées. Les profils de saturation à l'équilibre hydrostatique et à l'équilibre dynamique dans les zones non saturées crayeuse et limoneuse sont présentés sur la Figure 4.8. Pour $NONSAT_{SW}$, la saturation $SatSW_i$ dans chaque réservoir i a été calculée de la manière suivante :

$$SatSW_i(t) = \frac{Vol_i(t)}{l \times \omega} \quad (4.3)$$

Avec $Vol_i(t)$ le volume dans le réservoir i à l'instant t , l l'épaisseur du réservoir (5 m), et ω la porosité de $METIS$ définie lors de la procédure de calage pour ces tests de comparaison.

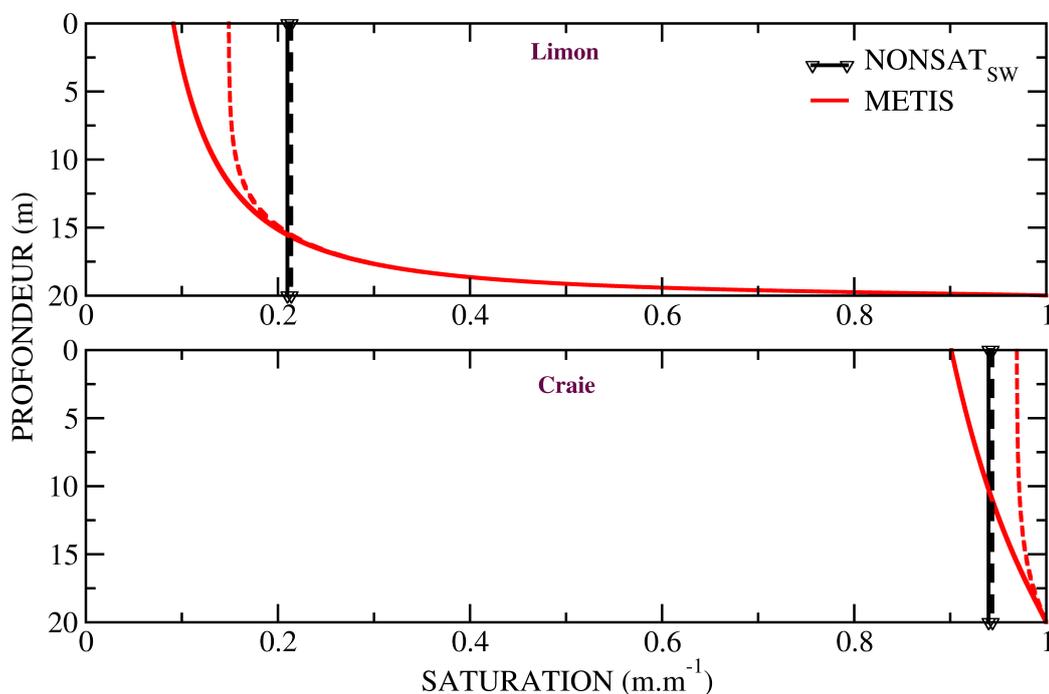


FIGURE 4.8: Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique (lignes pointillées) dans $METIS$ (lignes rouges) et dans $NONSAT_{SW}$ (lignes noires) pour les zones non saturées de type limon et craie.

On constate que dans $NONSAT_{SW}$, les saturations à l'initialisation et à l'équilibre sont constantes et quasiment confondues sur toute l'épaisseur de la zone non saturée. Ceci est lié au fait que les volumes des réservoirs sont initialisés au même V_{min} sur la colonne et que le volume d'eau gravitaire s'équilibre sur toute l'épaisseur de la zone non saturée avec l'infiltration constante considérée. Dans $METIS$ en revanche, la teneur en eau est régie par les relations de Van Genuchten et augmente ainsi de la surface vers la profondeur de la zone non saturée.

Nous constatons en outre que la valeur moyenne de la saturation dans les deux modèles est quasi-similaire pour chaque type de zones non saturées. Ceci est inhérent à la méthode de calcul de la saturation dans $NONSAT_{SW}$ et à la procédure de calibration adoptées pour ces tests de comparaison.

Donc dans $METIS$, la teneur en eau dans la zone non saturée augmente de sa surface vers la nappe d'où un transfert plus lent et une plus grande dispersion des solutés en bas de colonne. Dans $NONSAT_{SW}$ en revanche, le volume d'eau est constant dans tous les réservoirs d'une même

zone non saturée, ce qui génère une vitesse de transfert des solutés constante.

Nous avons ensuite procédé à une comparaison de l'évolution des volumes d'eau percolant à la base des colonnes non saturées dans les deux modèles (Figure 4.9).

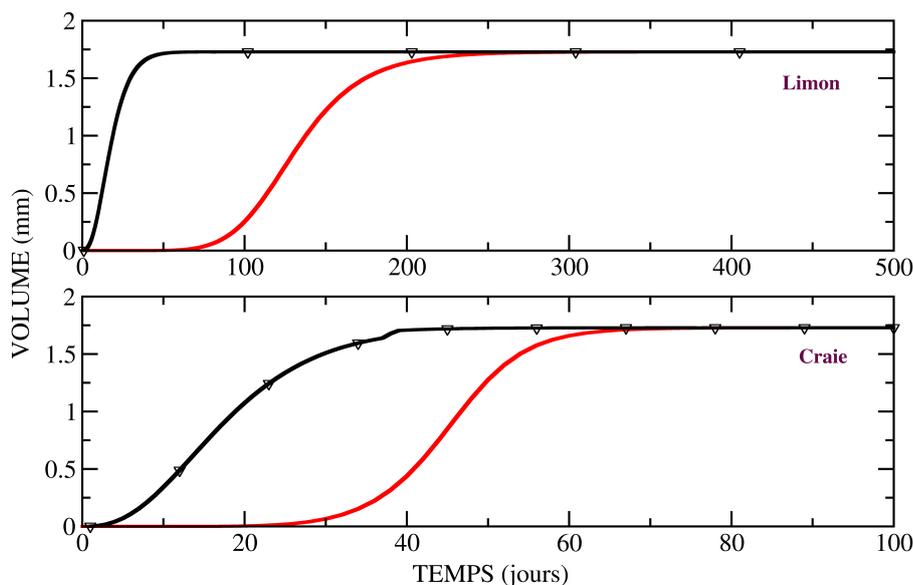


FIGURE 4.9: Volume vidangé de la colonne dans $NONSAT_{SW}$ (noir-triangle) et $METIS$ (rouge) pour des zones non saturées de type craie et limon.

Pour l'ensemble des zones non saturées testées, les délais pour atteindre un équilibre des flux d'eau entrant et sortant de la zone non saturée sont plus longs dans $METIS$ que dans $NONSAT_{SW}$. En effet, dans le modèle $NONSAT_{SW}$, dès le premier pas de temps, un volume d'eau percole de la colonne. Ceci est lié à l'approche piston adoptée dans le modèle conceptuel. Dans $METIS$ en revanche, un délai plus ou moins long est nécessaire selon le type de zone non saturée avant d'obtenir une percolation à la base de la colonne (environ 20 jours pour la craie et 50 jours pour la zone non saturée limoneuse). Ce délai est lié au temps nécessaire pour que le transfert de pression se propage dans la colonne.

L'ensemble de ces résultats nous permettent de mettre en évidence des différences majeures concernant le transfert d'eau et de solutés à travers la ZNS dans les deux types de modèles. Pour essayer d'obtenir dans $NONSAT_{SW}$ un transfert des solutés à travers la ZNS plus réaliste,

c'est-à-dire plus proche de ce que l'on obtient avec le modèle mécaniste *METIS*, des modifications ont été apportées à ce modèle.

4.3 Amélioration de $NONSAT_{SW}$

Pour tenter d'améliorer dans $NONSAT_{SW}$ la simulation des transferts de solutés à travers la zone non saturée, deux modifications ont été apportées à $NONSAT_{SW}$:

- Introduction d'un profil de saturation variable
- Introduction d'un coefficient modulant les transferts selon l'état de saturation du milieu.

4.3.1 Introduction d'un profil de saturation

Van Genuchten (1980) et Brooks et Corey (1966) ont déterminé les équations les plus classiques décrivant la répartition de l'eau dans la zone non saturée. Entre l'équilibre hydrostatique et l'équilibre dynamique, la ZNS est sujette à une évolution de sa teneur en eau, depuis sa base qui est complètement saturée, jusqu'à sa surface qui est caractérisée par une faible teneur en eau (lignes continue et pointillée rouges sur la Figure 4.10).

Dans $NONSAT_{SW}$ en revanche, à l'initialisation et à l'équilibre, la saturation dans la ZNS est constante sur toute sa profondeur (ligne continue-triangle sur la Figure 4.10).

Pour améliorer le réalisme de $NONSAT_{SW}$, un profil de saturation basé sur la courbe de succion de Van Genuchten (1980) est donc intégré dans $NONSAT_{SW}$. Nous choisissons d'imposer un profil de saturation initial à l'équilibre hydrostatique en se basant sur le fait que dans le Chapitre 3, nous n'avons pas mis en évidence de différence dans les transferts de solutés à travers ce milieu entre une initialisation de la zone non saturée avec un profil de saturation à flux nul ou à flux non nul.

Ainsi pour chaque réservoir, le V_{min} est calculé de la manière suivante :

$$V_{min(i)} = \sum \frac{1}{[1 + (\alpha \times \phi)^n]^m} \times \omega \times Surf \times \Delta z \quad (4.4)$$

Avec n (-) et α (m^{-1}) les paramètres de Van Genuchten décrivant la courbe de succion, $m = 1 - \frac{1}{n}$, ω la porosité ($m \cdot m^{-1}$), $Surf$ la surface de la maille (m^2), et ϕ la succion (m).

Pour le calcul de V_{min} , la discrétisation Δz utilisée est de $10^{-2}m$, comme pour *METIS*.

Trois paramètres supplémentaires (α , n et la porosité) sont donc requis dans le modèle conceptuel modifié que nous appelons ici $NONSAT_{SW}modif$. On obtient ainsi dans $NONSAT_{SW}modif$ une variation de la saturation depuis la surface jusqu'à la profondeur de la zone non saturée (ligne continue-ronds dans la Figure 4.10).

Notons que dans cette version modifiée, les réservoirs correspondent à des sections de ZNS et ont donc dorénavant un volume maximal.

Nous procédons à une évaluation de ce modèle conceptuel modifié en considérant que les nouveaux paramètres requis sont égaux à ceux de $METIS$ (Tableau 4.4).

TABLE 4.4: Paramètres utilisés dans $NONSAT_{SW}$, $NONSAT_{SW}modif$ et $METIS$ pour les tests de comparaison. N est le nombre de réservoirs, τ le coefficient de vidange (jours), $thick$ est l'épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m.m^{-1}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté (10^{-2} m) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$).

Limon			Craie		
$NONSAT_{SW}$	$NONSAT_{SW}modif$	$METIS$	$NONSAT_{SW}$	$NONSAT_{SW}modif$	$METIS$
$N = 4$	$N = 4$	$nqu = 2000$	$N = 4$	$N = 4$	$nqu = 2000$
$\tau = 5$	$\tau = 5$	$K_s = 8,15.10^{-3}$	$\tau = 5$	$\tau = 5$	$K_s = 9,00.10^{-7}$
$V_{min} = 0,07$	$\omega = 33,00.10^{-2}$	$\omega = 33,00.10^{-2}$	$V_{min} = 0,08$	$\omega = 8,50.10^{-2}$	$\omega = 8,50.10^{-2}$
	$thick = 20$	$thick = 20$		$thick = 20$	$thick = 20$
	$n = 1,56$	$n = 1,56$		$n = 1,10$	$n = 1,10$
	$\alpha = 3,60$	$\alpha = 3,60$		$\alpha = 0,10$	$\alpha = 0,10$
		$a = 1$			$a = 1$

Influence de la modification sur les transferts d'eau

L'introduction de ce nouveau calcul de V_{min} dans le modèle conceptuel permet d'y intégrer une saturation minimale variable de la surface vers la profondeur de la zone non saturée (Figure 4.10). On obtient donc avec ce nouveau modèle conceptuel une évolution de la saturation dans la colonne non saturée plus proche de ce qui est obtenu avec $METIS$.

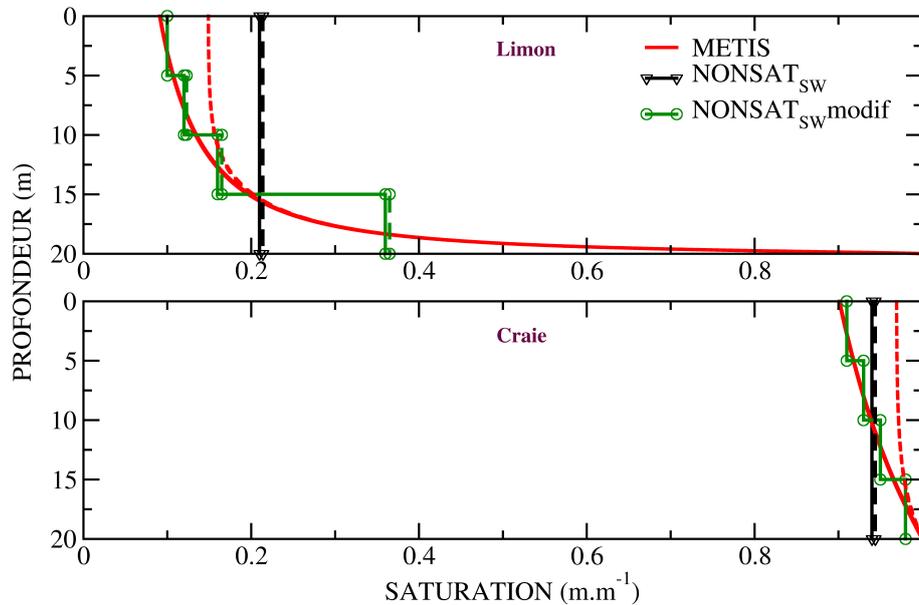


FIGURE 4.10: Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique de flux non nul (lignes pointillées) dans *METIS* (lignes rouges), dans $NONSAT_{SW}$ (ligne noires-triangles) et dans $NONSAT_{SW}modif$ (lignes vertes-rouds) pour les zones non saturées limon et craie.

La prise en compte d'un profil hydrostatique plus réaliste dans cette nouvelle version ne modifie cependant en rien le calcul du flux d'eau gravitaire à travers la zone non saturée (cf section 4.1). La percolation de la colonne est ainsi identique à celle obtenue avec $NONSAT_{SW}$.

En revanche, nous avons mis en évidence dans les tests de sensibilité que le transfert des solutés dépend du V_{min} . Nous nous attendons donc à une modification des transferts de solutés à travers la zone non saturée dans cette nouvelle version du modèle conceptuel. Ceci est présenté dans la section suivante.

Influence de la modification sur le transfert des solutés

La Figure 4.11 représente les transferts de solutés obtenus avec $NONSAT_{SW}$, *METIS* et $NONSAT_{SW}modif$ dans des colonnes de zones non saturées limon et craie.

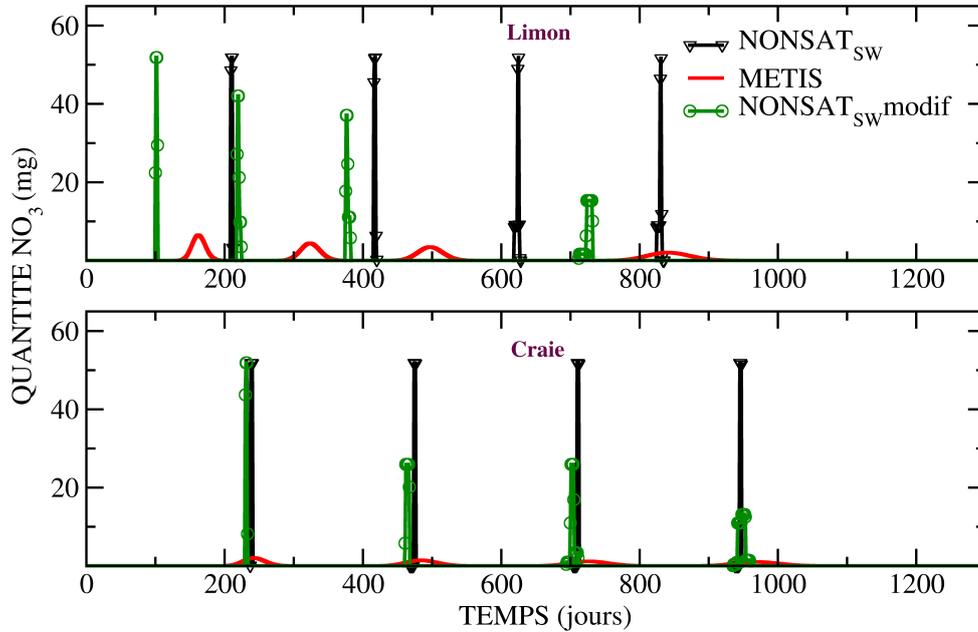


FIGURE 4.11: Transfert des solutés dans $NONSAT_{SW}$ (noir-triangle), $METIS$ (rouge) et $NONSAT_{SW}$ modifié (vert-rond) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans les zones non saturées de type craie et limon définies par Gomez (2002)

En l'absence de nouveau calage, la définition d'un V_{min} variant sur la profondeur de la ZNS dans le modèle conceptuel permet d'obtenir une dynamique de transfert des solutés se rapprochant de ce que l'on obtient avec le modèle à bases physiques pour le cas limon. L'intégration pour cette zone non saturée de ce profil de saturation permet d'obtenir en effet comme dans le modèle $METIS$ une diminution de la vitesse de transfert et une augmentation de la dispersion dans la profondeur de la ZNS. Pour la craie, l'introduction de ce V_{min} variable impacte surtout la dispersion du soluté. En effet, comme la teneur en eau dans la colonne est proche de la saturation à 100%, le V_{min} varie finalement très peu de la surface vers la profondeur de la zone non saturée ce qui génère une vitesse de transfert des solutés quasi-constante dans la colonne.

Même si cette modification du modèle conceptuel permet d'obtenir un transfert des solutés plus proche de ce qui est obtenu avec $METIS$, la dispersion dans nos deux exemples reste moins prononcée que dans le modèle à bases physiques. Pour le cas limon, les vitesses de transfert des solutés

dans le modèle conceptuel modifié sont plus importantes que dans le modèle $METIS$ (respectivement $2,7.10^{-2}m.jour^{-1}$ et $2,4.10^{-2}m.jour^{-1}$).

Pour tenter d'améliorer davantage les transferts dans $NONSAT_{SW}$, une deuxième modification a été apportée à cet outil.

4.3.2 Evolution de la vitesse de percolation dans la zone non saturée

Dans $NONSAT_{SW}$, le temps de percolation τ peut être assimilé au temps requis en jours pour vider une fraction du volume gravitaire disponible égale à $1 - e^{-1}$ soit 63 %. Une vitesse de percolation peut alors être approchée à partir de ce paramètre. Comme la valeur du τ est identique sur toute la profondeur de la ZNS, on peut considérer que la vitesse de transfert est constante sur toute l'épaisseur de la ZNS.

En milieu non saturé, la loi de Darcy énonce que plus la saturation est faible, plus la perméabilité est faible. La vitesse de transfert de l'eau dans la zone non saturée dans $METIS$ n'est donc pas constante sur toute son épaisseur.

Pour prendre en compte ce phénomène, on intègre alors dans $NONSAT_{SW}$ un coefficient *coef* égal au rapport entre le volume d'eau dans le réservoir et le volume à saturation de ce réservoir :

$$coef = \frac{Vol_{i(t)}}{\omega \times Surf \times l} \quad (4.5)$$

$$Vin_{i+1}(t) = Vout_{i(t)} = (Vol_{i(t)} - Vmin_{i(t)}) \times \delta \times coef \quad (4.6)$$

avec l l'épaisseur du réservoir (m).

Ainsi, par la prise en compte de ce coefficient, plus la saturation d'un réservoir est importante, plus la percolation de ce réservoir est conséquente.

La version $NONSAT_{SW}$ prenant en compte à la fois le profil de saturation variable et ce coefficient est appelée $NONSAT_{VG}$.

Influence de la modification sur le transfert d'eau

L'introduction d'un coefficient modulant les transferts d'eau d'un réservoir à l'autre en fonction de l'état de saturation de ceux-ci modifie significativement le profil de saturation obtenu à l'équilibre dynamique dans le cas limon (Figure 4.12).

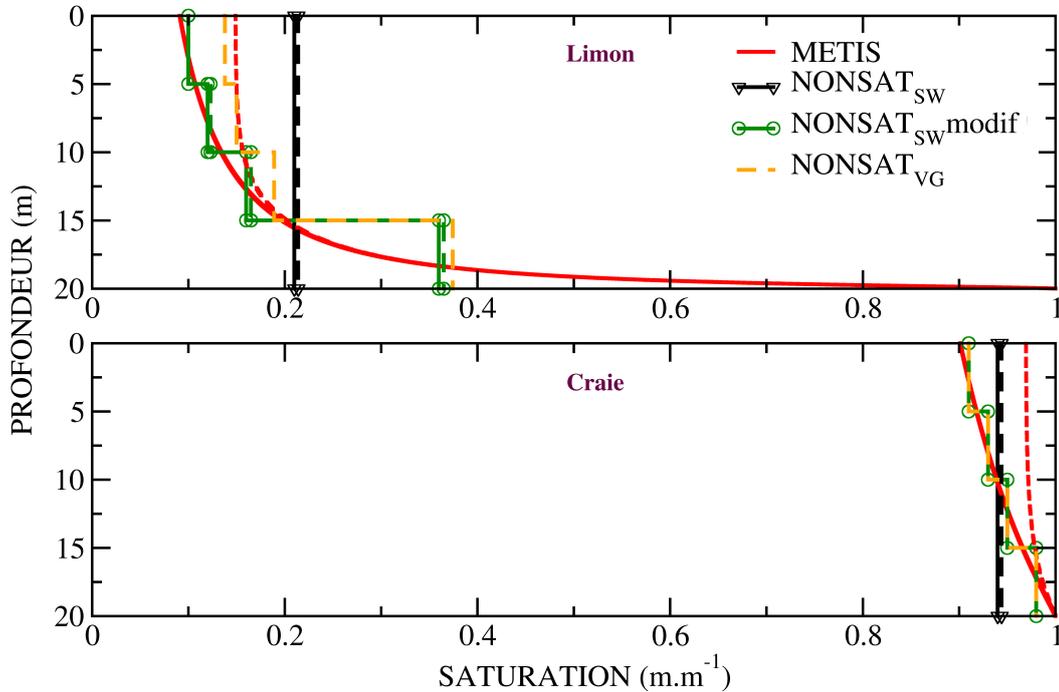


FIGURE 4.12: Profil de saturation à l'équilibre hydrostatique (lignes continues) et à l'équilibre dynamique de flux de non nul (lignes pointillées) dans $METIS$ (lignes rouges), dans $NONSAT_{SW}$ (ligne noires-triangles), dans $NONSAT_{SW} modif$ (lignes vertes-ronds) et dans $NONSAT_{VG}$ (orange) pour les zones non saturées limon et craie.

Le profil de saturation obtenu à l'équilibre dynamique dans $NONSAT_{VG}$ est en effet beaucoup plus similaire à ce qu'on obtient dans le modèle mécaniste pour cette ZNS testée. Nous constatons également que dans $NONSAT_{VG}$, le flux d'eau s'exfiltrant de la zone non saturée toujours pour le cas limon ressemble davantage à ce qui est obtenu avec le modèle $METIS$ (Figure 4.13).

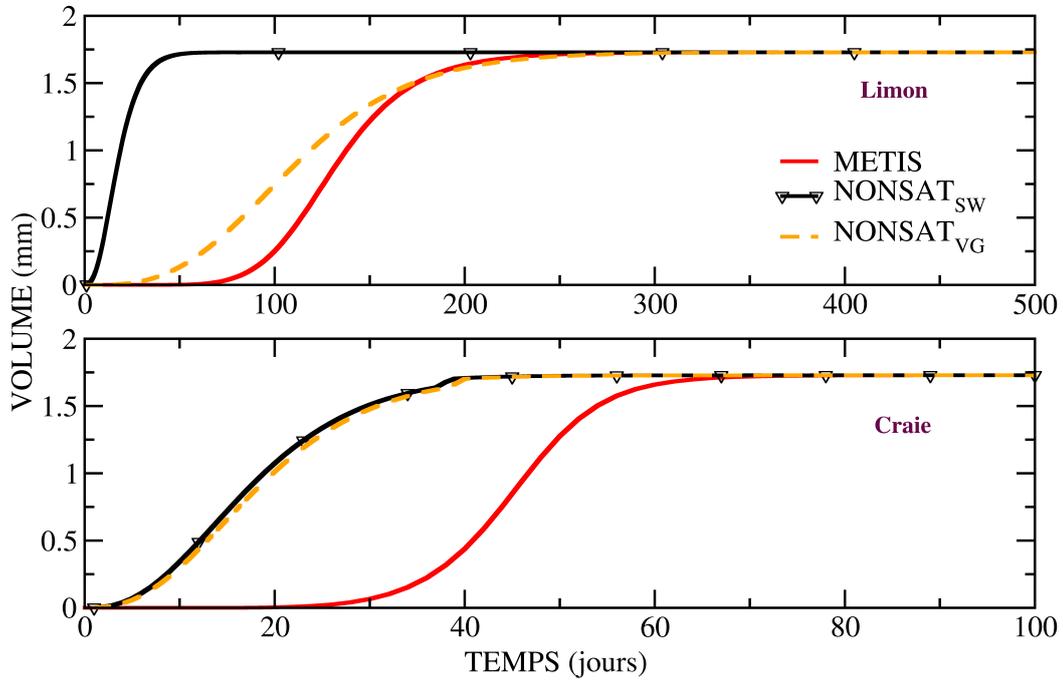


FIGURE 4.13: Volume percolant de la colonne dans $NONSAT_{SW}$ (noir-triangles), $NONSAT_{VG}$ (orange-tiret) et $METIS$ (rouge) dans des zones non saturées de type limon et craie.

Pour le cas craie en revanche, du fait que la colonne est proche de la saturation dès l'initialisation, l'introduction de ce coefficient ne modifie en rien la dynamique de transfert de l'eau dans la zone non saturée.

Influence de la modification sur le transfert des solutés

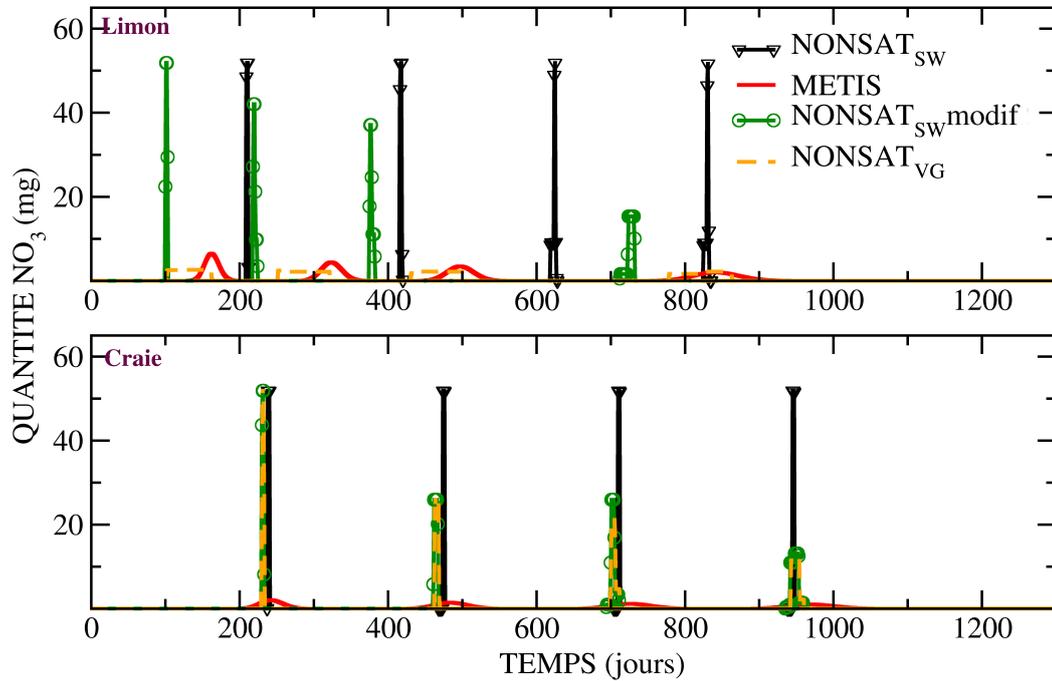


FIGURE 4.14: Transfert des solutés dans $METIS$ (rouge), $NONSAT_{SW}$ (noir-triangle), $NONSAT_{SW}modif$ (vert-rond) et $NONSAT_{VG}$ (orange pointillé) à 5, 10, 15 et 20 m de profondeur dans des zones non saturées de type limon et craie.

En considérant dans le modèle conceptuel à la fois un profil de teneur en eau variable et une variation du volume d'eau percolant d'un réservoir en fonction de la saturation de celui-ci, on obtient pour le cas limon dans $NONSAT_{VG}$ une diminution des vitesses de transfert des solutés et une augmentation de la dispersion dans la profondeur de la zone non saturée proches de ce qui est obtenu avec $METIS$. Pour le cas craie, l'influence de ce coefficient sur le transfert des solutés n'est pas significative. En effet, les teneurs en eau sur toute l'épaisseur de la colonne sont quasi-constantes et les vitesses de transfert de solutés varient donc peu.

Transfert des solutés pour différentes profondeurs de nappe

Pour évaluer la robustesse de $NONSAT_{VG}$, la dynamique de transfert des solutés pour différentes profondeurs de nappe a été également analysée.

En effet, étant donné que le profil de saturation varie en fonction de la profondeur de la nappe, on s'attend, comme dans les résultats mis en évidence dans le Chapitre 3 avec le modèle à bases physiques $METIS$, à ce que le transfert des solutés varie en fonction de l'épaisseur de la ZNS.

Pour ces tests, nous conservons les paramètres calibrés pour une épaisseur de zone non saturée de 20 m. Les résultats présentés ici illustre le cas des zones non saturées limon et craie (Figure 4.15 et Tableau 4.5).

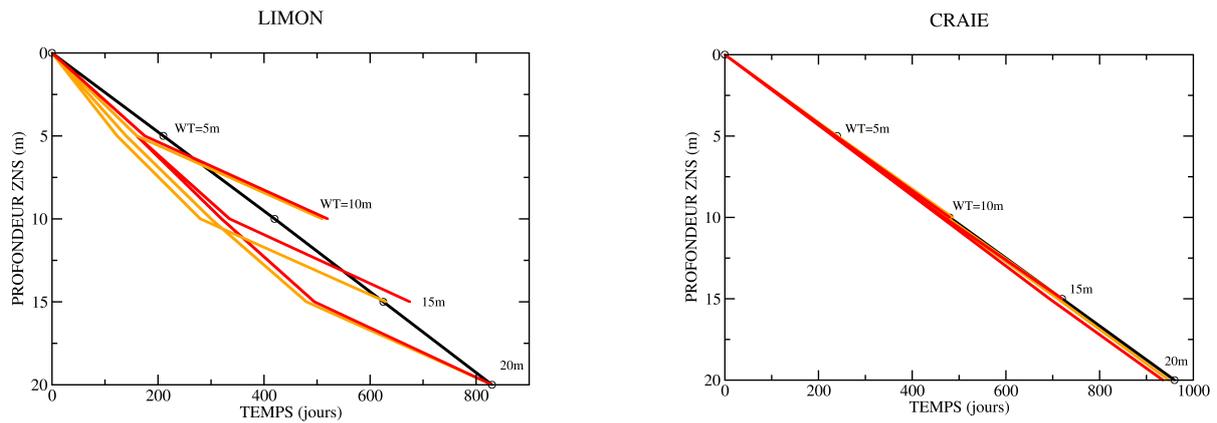


FIGURE 4.15: Temps de transfert des solutés à chaque section de 5 m et pour différentes profondeurs de nappe (WT) en m, simulé par *METIS* (rouge), *NONSAT_{VC}* (orange) et *NONSAT_{SW}* (noir) dans une zone non saturée de type limon (gauche) et de type craie (droite)

TABLE 4.5: Vitesse de transfert moyenne des nitrates à travers la ZNS ($m.an^{-1}$) obtenue avec $NONSAT_{SW}$, $NONSAT_{VG}$ et $METIS$ pour atteindre une profondeur de la ZNS donnée $section$ (m), en considérant une profondeur de la nappe WT (m) pour les cas simples.

		<i>Limon</i>			<i>Craie</i>		
<i>WT</i>	<i>section</i>	$NONSAT_{SW}$	$NONSAT_{VG}$	$METIS$	$NONSAT_{SW}$	$NONSAT_{VG}$	$METIS$
20	5	8,70	11,40	13,00	7,60	7,90	7,90
	10	8,70	11,40	12,20	7,60	7,80	7,90
	15	8,70	11,06	11,40	7,60	7,70	7,90
	20	8,70	8,80	8,80	7,60	7,70	7,80
15	5	8,70	11,40	14,80	7,60	7,80	7,90
	10	8,70	10,90	13,00	7,60	7,70	7,80
	15	8,70	8,10	8,70	7,60	7,60	7,60
10	5	8,70	11,10	11,40	7,60	7,60	7,70
	10	8,70	7,00	7,20	7,60	7,50	7,60

Dans $METIS$, nous retrouvons pour le cas limon les résultats obtenus dans le Chapitre 3 (mais de manière plus prononcée du fait des paramètres définis par la méthodologie de comparaison), à savoir que le temps requis pour atteindre la base de chaque section de 5 m augmente lorsque la profondeur de la nappe diminue. Ceci est dû au fait que dans chaque section de ZNS, le volume d'eau augmente lorsque la profondeur de la nappe diminue. Ainsi lorsque le niveau de la nappe augmente, les solutés traversent un milieu avec une teneur en eau plus importante, d'où une diminution de la vitesse de transfert des solutés. Cette dynamique obtenue avec le modèle mécaniste n'est pas du tout restituée par $NONSAT_{SW}$. En revanche $NONSAT_{VG}$ parvient à bien la capturer.

Les mêmes tests ont été réalisés pour une zone non saturée de type craie. La conclusion est la même que pour la zone non saturée limoneuse : contrairement à $NONSAT_{SW}$, les résultats obtenus avec $NONSAT_{VG}$ sont comparables à ceux obtenus avec le modèle mécaniste $METIS$, c'est-à-dire que les vitesses de transfert des solutés diminuent en profondeur. Cependant, cette évolution de la vitesse de transfert des solutés avec la profondeur de la nappe est bien moins marquée dans la zone non saturée crayeuse que dans la zone non saturée limoneuse, comme nous l'avons mis en évidence dans le Chapitre 3. En effet, dans la craie, les paramètres définis génèrent une saturation supérieure à 90 % sur toute la colonne. Quelle que soit la profondeur de la nappe, la colonne crayeuse est

toujours proche de la saturation et les vitesses de transfert à travers la zone non saturée varient donc peu selon l'épaisseur de la ZNS.

Les résultats de l'ensemble de ces tests d'évaluation ont donc permis d'une part de mettre en évidence les limites de la version *NONSAT_{SW}* en ce qui concerne les transferts d'eau et de solutés et, d'autre part, d'améliorer ce modèle conceptuel en y intégrant un profil de saturation variable et une vitesse d'écoulement proportionnelle à l'état de saturation de la colonne.

4.4 Evaluation du modèle *NONSAT_{VG}*

Nous avons vu dans la section précédente que les modifications apportées à *NONSAT_{SW}* permettent d'obtenir, dans des cas simples, des transferts de solutés plus proches de ce que l'on peut obtenir avec un modèle à bases physiques.

Nous souhaitons dans cette section procéder à une comparaison des capacités de modélisation des flux de notre nouveau modèle conceptuel *NONSAT_{VG}* avec des données observées sur le terrain.

4.4.1 Evaluation au niveau de la parcelle expérimentale

4.4.1.1 Méthodologie

Nous avons illustré dans la section 3.2.1 la capacité du modèle à bases physiques *METIS* à simuler le transfert d'un pic de solutés à travers deux zones non saturées profondes situées à Haussimont et Thibie en Champagne-Ardenne (France). Nous allons donc dans les mêmes conditions et sous les mêmes hypothèses que celles énoncées dans la section 3.2.1 procéder à l'évaluation de nos modèles conceptuels à partir de ces données observées.

Pour *NONSAT_{SW}*, nous reprenons les paramètres définis par Gomez (2002) sur le bassin de la Seine pour la catégorie de ZNS crayeuse. Pour *NONSAT_{VG}*, les paramètres de Van Genuchten et la porosité sont définis à partir de l'étude de Brouyère (2006). L'ensemble des paramètres utilisés pour chaque modèle dans ces tests sont regroupés dans le Tableau 4.6.

TABLE 4.6: Paramètres utilisés dans *NONSAT_{SW}*, *NONSAT_{VG}* et *METIS* pour les tests de comparaison sur les sites d’Haussimont et Thibie. N est le nombre de réservoirs, τ le coefficient de vidange (jours), *thick* est l’épaisseur de la ZNS (m), nqu est le nombre de mailles, V_{min} est le volume minimal dans chaque réservoir ($m^{-3}.m^{-2}$), ω est la porosité ($m.m^{-1}$), n et α sont les paramètres de Van Genuchten, a est la dispersivité du soluté ($10^{-2} m$) et K_s est la conductivité hydraulique à saturation ($m.s^{-1}$).

<i>NONSAT_{SW}</i>		<i>NONSAT_{VG}</i>		<i>METIS</i>	
<i>Haussimont</i>	<i>Thibie</i>	<i>Haussimont</i>	<i>Thibie</i>	<i>Haussimont</i>	<i>Thibie</i>
$N = 5$	$N = 3$	$N = 5$	$N = 3$	$nqu = 2500$	$nqu = 1500$
$\tau = 5$	$\tau = 5$	$\tau = 5$	$\tau = 5$	$K_s = 9.10^{-7}$	$K_s = 9.10^{-7}$
$V_{min} = 0,08$	$V_{min} = 0,08$	$V_{min} = 0,08$	$V_{min} = 0,08$	$\omega = 41.10^{-2}$	$\omega = 41.10^{-2}$
		<i>thick</i> = 25	<i>thick</i> = 15	<i>thick</i> = 25	<i>thick</i> = 15
		$n = 1,1$	$n = 1,1$	$n = 1,1$	$n = 1,1$
		$\alpha = 0,10$	$\alpha = 0,10$	$\alpha = 0,10$	$\alpha = 0,10$
				$a = 12,5$	$a = 12,5$

Nous testons également dans *NONSAT_{VG}* un profil de saturation initial égal au profil à l’équilibre dynamique obtenu dans *METIS*. En effet, nous avons vu dans le Chapitre 3 que quelle que soit la méthode d’initialisation choisie, les transferts de solutés à travers la zone non saturée n’en sont en rien modifiés dans *METIS*. Mais dans notre modèle conceptuel, la valeur du V_{min} a une influence considérable sur les transferts de solutés (4.1). Nous testons donc ici également l’influence d’un autre V_{min} sur la dynamique des transferts de solutés dans *NONSAT_{VG}*.

4.4.1.2 Site d’Haussimont

Le test pour ce site consiste à comparer le transfert du pic de 1982 jusqu’à Mars 2000 (cf section 3.2.1). La vitesse moyenne de transfert (VMT) des solutés observée dans la ZNS à Haussimont est d’environ $0,5 m.an^{-1}$. Les résultats sont présentés dans la Figure 4.16. Le modèle mécaniste *METIS* permet d’obtenir un transfert des solutés proche de ce qui est observé sur le terrain. La profondeur des pics à chaque date et la diffusion sont cependant légèrement sous-estimées avec le modèle mécaniste (VMT= $0,4 m.an^{-1}$).

NONSAT_{SW} n’est pas capable de restituer les profils de solutés observés : le pic est transféré beaucoup trop rapidement à travers la ZNS (presque $10 m$ en seulement 4 ans, VMT= $2,5 m.an^{-1}$). Notre nouveau modèle conceptuel permet d’obtenir des transferts qui concordent beaucoup mieux que *NONSAT_{SW}* avec les données observées sur le terrain. Le transfert des solutés dans cette

nouvelle version est cependant trop lent : la profondeur du pic simulé en 2000 est situé à 13 m de profondeur, soit une $VMT=0,44\text{ m.an}^{-1}$.

Notons également que les profils simulés par $NONSAT_{VG}$ sont quasi-identiques entre les deux V_{min} testés, avec seulement une dispersion un peu plus marquée lorsque le profil de saturation de V_{min} est égal au profil à l'équilibre dynamique.

On constate aussi que la dispersion simulée par $NONSAT_{VG}$ ne ressemble pas à la dispersion observée sur le terrain. A Haussimont, l'intensité du pic diminue de 30% en 18 ans. Dans $METIS$, ce pic diminue d'environ 20% alors que dans $NONSAT_{VG}$, la dispersion est quasi-nulle durant toute la simulation.

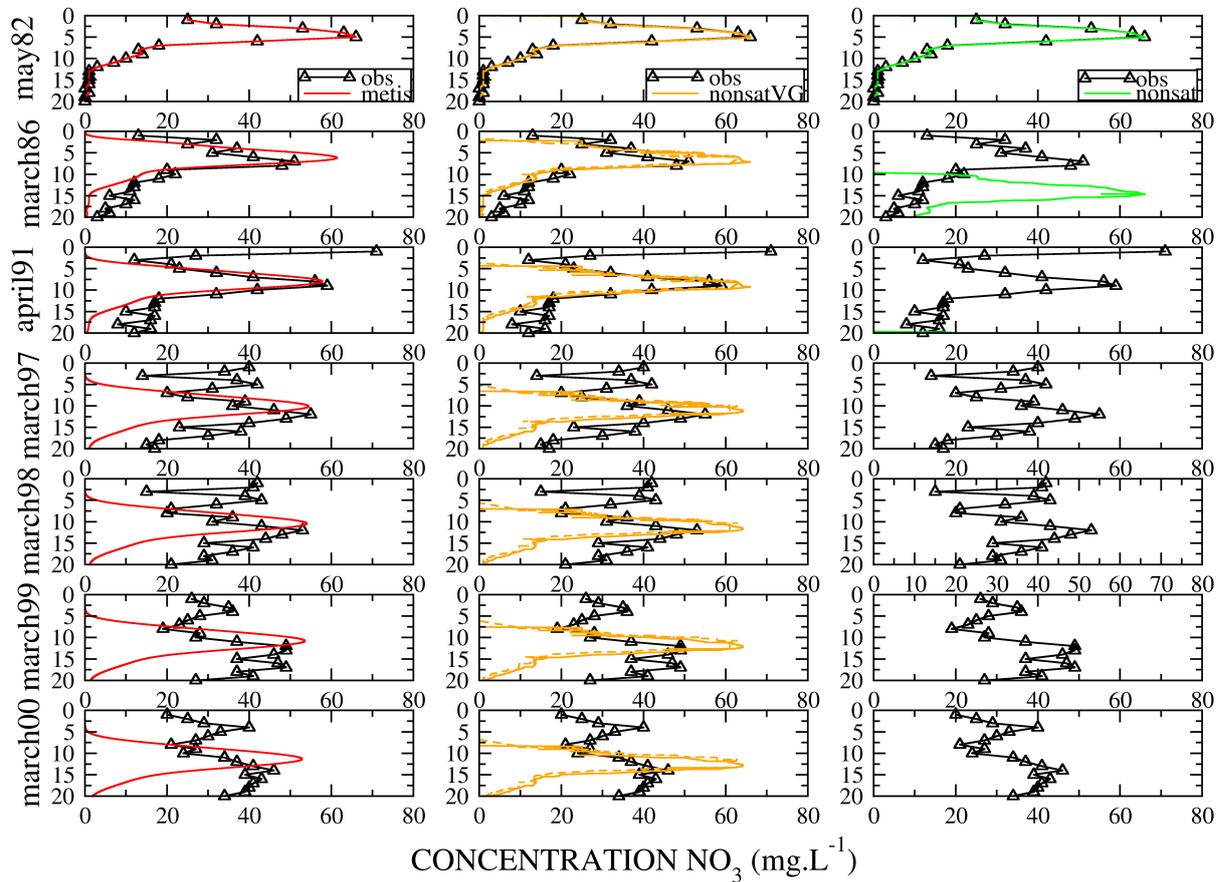


FIGURE 4.16: Transfert des solutés observé sur le site d'Haussimont (courbe noire avec des triangles) et simulé par $METIS$ (rouge), $NONSAT_{VG}$ (orange continu avec le V_{min} à l'équilibre hydrostatique et pointillé avec le V_{min} à l'équilibre dynamique) et $NONSAT_{SW}$ (vert) entre 1982 et 2003.

4.4.1.3 Site de Thibie

Le pic observé en Octobre 1990 est presque totalement transféré à travers les 15 m de ZNS en Octobre 2008. Les tests de comparaison sur ce site se focalisent sur le transfert de ce pic entre 1990 et 2003.

La VMT de ce pic observé est de $0,32\text{ m.an}^{-1}$.

Les résultats des tests de comparaison sont présentés dans la Figure 4.17. Comme pour Haussimont, nous n'observons pas dans notre nouveau modèle conceptuel de différence significative dans les transferts de solutés entre les deux profils de V_{min} testés.

En ce qui concerne la dynamique de ces transferts, contrairement à ce que l'on observe pour Haussimont, la profondeur des pics simulés par $METIS$ et $NONSAT_{VG}$ est plus importante que celle observée sur le terrain. La VMT est respectivement de $0,38\text{ m.an}^{-1}$ et $0,47\text{ m.an}^{-1}$ pour $NONSAT_{VG}$ et le modèle mécaniste. La meilleure simulation de transfert du pic est donc obtenue avec $NONSAT_{VG}$. Cependant, dans ce nouveau modèle conceptuel, la dispersion est quasi-nulle. En revanche, avec $METIS$, même si la vitesse de transfert simulée est moins bonne qu'avec $NONSAT_{VG}$, la dispersion est proche de ce que l'on observe sur le terrain (diminution du pic de solutés de respectivement 35% dans le modèle mécaniste et 40 % sur le terrain).

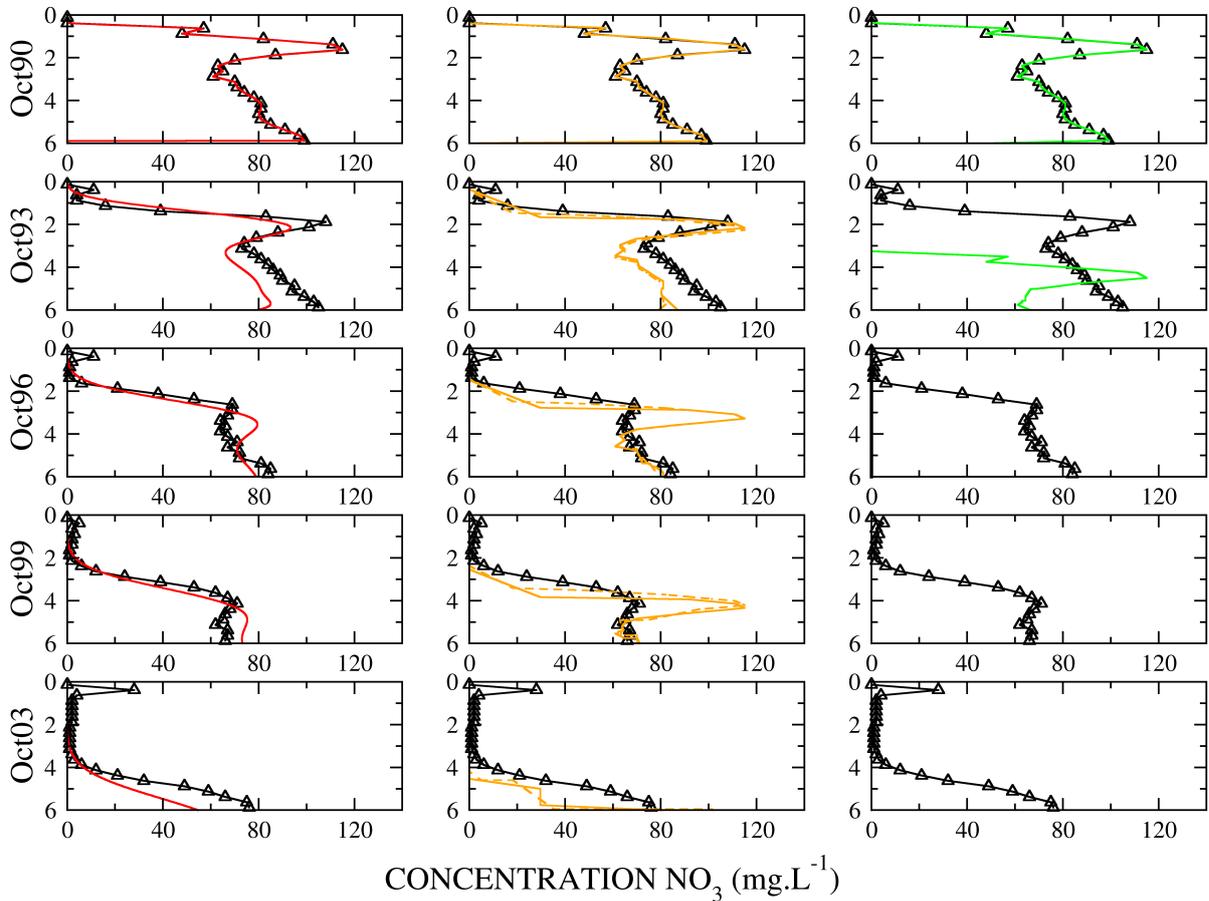


FIGURE 4.17: Transfert des solutés observé sur le site de Thibie (courbe noire avec des triangles) et simulé par $METIS$ (rouge), $NONSAT_{VG}$ (orange continu avec le V_{min} à l'équilibre hydrostatique et pointillé avec le V_{min} à l'équilibre dynamique), et $NONSAT_{SW}$ (vert) entre 1982 et 2003.

4.4.1.4 Tests additionnels

Aucun des trois modèles n'est capable de restituer parfaitement les dynamiques de transfert des solutés observées sur les deux sites. Ces imprécisions peuvent bien sûr être dues en partie à des insuffisances de représentations physiques des modèles. Mais cela peut également être dû à des erreurs dans les estimations des infiltrations et des valeurs des paramètres. Des tests additionnels ont donc été effectués pour tester la sensibilité des résultats de nos trois modèles pour différentes infiltrations et différents jeux de paramètres.

Une première série de tests a été effectuée avec une infiltration égale à celle définie par le modèle

$LIXIM$ (Mary *et al.*, 1999). Cette infiltration est dans $LIXIM$ 25 % plus importante pour Haussimont et 33% plus faible pour Thibie par rapport à l'infiltration obtenue avec MODCOU.

Une deuxième série de tests est effectuée avec les paramètres du sol ayant le profil le plus proche de la zone crayeuse dans la base de donnée de Carsel et Parrish (1988), à savoir l'argile (Tableau 4.2). Plusieurs tests additionnels ont été effectués avec $NONSAT_{SW}$, avec des variations du V_{min} pour se rapprocher de valeurs réalistes et des augmentation du temps de percolation τ (ce qui revient à diminuer la conductivité hydraulique).

Pour chaque test, une erreur a été calculée de la manière suivante :

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Dpeak_i^{obs} - Dpeak_i^{simu})^2} \quad (4.7)$$

Avec n le nombre de profils de concentrations comparés, $Dpeak_i^{obs}$ et $Dpeak_i^{simu}$ la profondeur des pics respectivement observé et simulé pour le profil i .

La Figure 4.18 représente la valeur de RMSE des trois modèles pour les différentes séries de tests à Haussimont et Thibie.

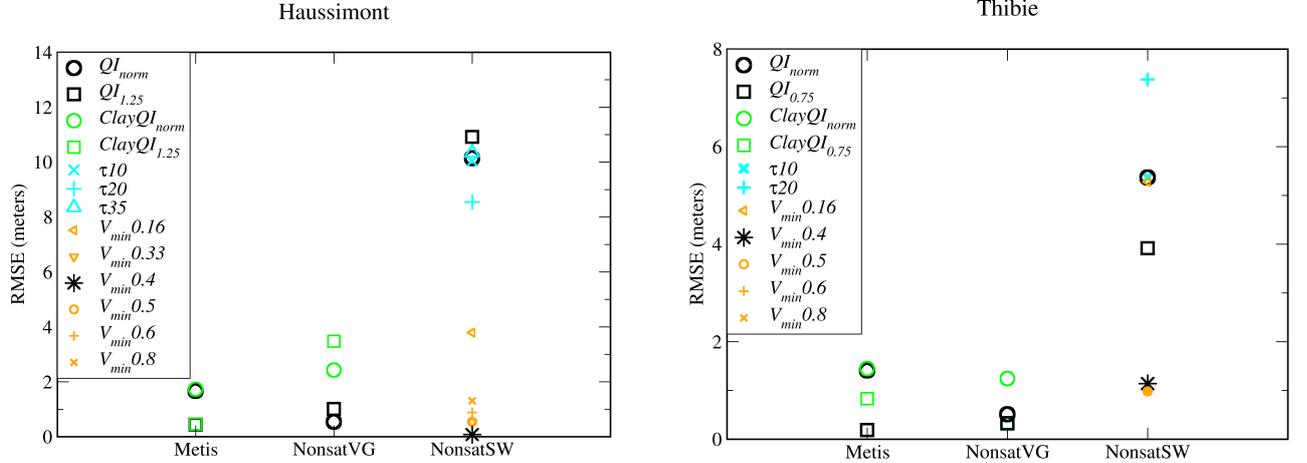


FIGURE 4.18: Erreur de simulation du pic de nitrates dans $NONSAT_{SW}$, $NONSAT_{VG}$ et $METIS$ de 1982 à 2000 à Haussimont et Thibie, calculée selon l'Equation 4.7 dans une ZNS crayeuse, avec les paramètres définis par Brouyère *et al.* (2004). QI_{norm} est obtenu avec l'infiltration de MODCOU, $QI_{1.25}$ avec une infiltration 25 % plus importante, $QI_{0.75}$ avec une infiltration 25 % moins importante. $Clay$ correspond à la série réalisée avec les paramètres de l'argile (Tableau 4.2). Avec l'infiltration de MODCOU, les points $V_{min}x$ sont obtenus avec un volume minimal dans les réservoirs égal à x ($m^3.m^{-2}$) et les points τx sont obtenus avec un temps de percolation $\tau=x$ jours.

Pour les deux sites, chaque modèle dispose d'un jeu de paramètres permettant une bonne adéquation entre observation et simulation des pics de nitrates (c'est-à-dire avec une RMSE proche de 0).

Pour Haussimont, $METIS$ obtient des résultats presque similaires avec les paramètres de la craie et de l'argile. Les RMSE sont cependant meilleures avec l'infiltration de $LIXIM$ qu'avec l'infiltration de $MODCOU$ (RMSE respectivement égal à 0,40 et 0,90). Des tendances similaires sont observables à Thibie.

Avec les paramètres par défaut dans $NONSAT_{SW}$, la RMSE est très importante : autour de 10 à Haussimont et de 8 à Thibie. Sur les deux sites, le V_{min} nécessite d'être augmenté d'un facteur 5 pour obtenir des RMSE satisfaisante.

Avec $NONSAT_{VG}$, les paramètres de la craie permettent d'obtenir de meilleures RMSE que les paramètres de l'argile sur les deux sites. Les meilleures RMSE obtenues avec $NONSAT_{VG}$ sont obtenues avec l'infiltration de $MODCOU$ à Haussimont et l'infiltration de $LIXIM$ à Thibie.

Nous mettons donc bien en évidence ici l'importance des données d'infiltration sur la variabilité des résultats.

A partir de l'ensemble des résultats de tests effectués dans des conditions idéales et réelles, il est clair qu'en l'absence de tout calage, $NONSAT_{VG}$ permet d'obtenir une dynamique de transfert des solutés plus réaliste que $NONSAT_{SW}$ à l'échelle de la parcelle. Nous avons donc dans la partie suivante souhaité procéder à une évaluation de ce nouveau modèle conceptuel à l'échelle régionale.

Ce changement dans la procédure d'évaluation de notre modèle de l'échelle de la parcelle à l'échelle régionale, en l'occurrence à celle du bassin de la Seine, mérite tout de même quelques précisions. En effet, dans les modèles que nous utilisons dans cette étude, à savoir le modèle à bases physiques $METIS$ et les modèles conceptuels $NONSAT_{SW}$ et $NONSAT_{VG}$, la structure de la zone non saturée est homogène, dans le sens où nous considérons une porosité uniforme sur l'ensemble de la zone d'étude. Nous ne modélisons donc aucunement des fractures permettant de générer des écoulements préférentiels dans le système non saturé. Malgré cette simplification, nous avons vu qu'à l'échelle de la parcelle crayeuse, les résultats obtenus par $METIS$ et $NONSAT_{VG}$ sont satisfaisants. Cette approche à simple porosité et à simple perméabilité est-elle encore acceptable à l'échelle du bassin de la Seine ?

Ce bassin présente une structure générale en 'pile d'assiettes', comme illustré sur la Figure 4.19.

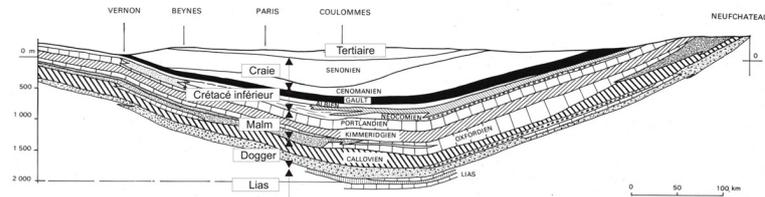


FIGURE 4.19: Coupe générale transversale du bassin de Paris (Gomez, 2002).

Cette structure est déformée par des plissements anticlinaux et synclinaux, accidentés de fractures suivant trois directions NW-SE à l'ouest, E-W au centre et SW-NE à l'est, qui correspondent à la phase Alpine ayant réactivée les structures hercyniennes (Gomez, 2002). Des écoulements préférentiels interviennent alors dans ces zones. Ne pas prendre en compte ces écoulements rapides dans nos modèles conceptuels est donc contestable. Nous ne souhaitons cependant pas complexifier nos outils avec la gestion simultanée de transferts lents et rapides d'eau à travers la zone non saturée. Nous considérons donc sur l'ensemble des trois couches un fonctionnement de type matriciel, tout en sachant que dans les zones à fractures, zones dont la surface est réduite tout de même sur l'ensemble du bassin, la vitesse de transfert est sous-estimée.

4.4.2 Evaluation de $NONSAT_{VG}$ à l'échelle du bassin de la Seine

Nous avons vu précédemment que les transferts à travers une zone non saturée crayeuse sont améliorés avec $NONSAT_{VG}$. Nous procédons donc ici à une évaluation à l'échelle du bassin de la Seine, en appliquant pour chaque type de zones non saturées les paramètres disponibles dans le Tableau 4.2.

4.4.2.1 La simulation des variations de niveaux piézométriques

Par l'introduction d'un coefficient modulant l'écoulement de l'eau d'un réservoir à l'autre (équation 4.1), le passage à $NONSAT_{VG}$ impacte la simulation des niveaux piézométriques. On tend avec cette modification à un transfert plus lent de l'eau à travers la ZNS (équation 4.6). Pour estimer l'influence de cette nouvelle dynamique de transfert de l'eau sur la qualité de la modélisation des variations piézométriques par MODCOU, une comparaison des piézométries observées et simulées d'une part avec $NONSAT_{SW}$ et $NONSAT_{VG}$ sur le bassin de la Seine a été réalisée. La détermination de l'eau infiltrée dans la ZNS et les transferts dans la nappe ont été effectuées avec le module MODCOU.

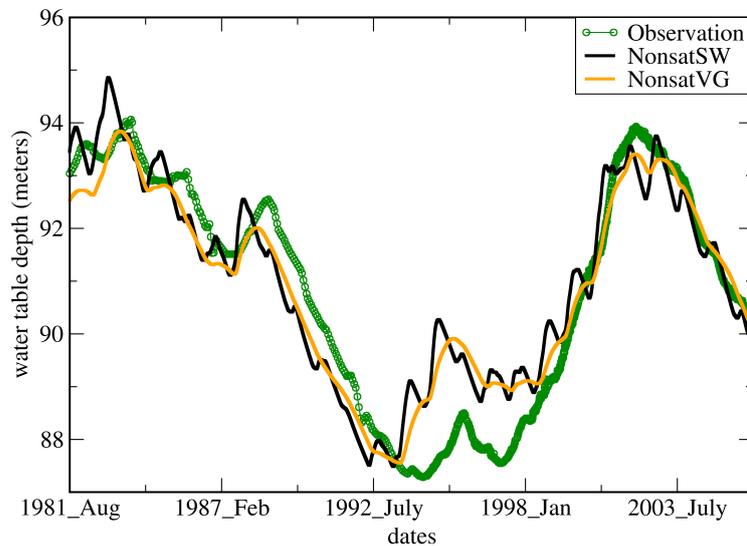


FIGURE 4.20: Evolution de la profondeur de la nappe à Mainvilliers observée entre 1981 et 2004 et simulée par $NONSAT_{SW}$ et $NONSAT_{VG}$.

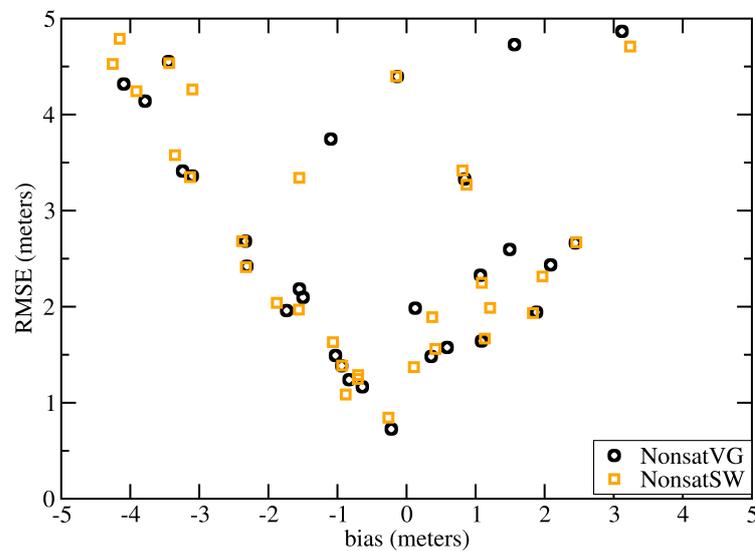


FIGURE 4.21: RMSE en fonction du biais calculé par $NONSAT_{SW}$ et $NONSAT_{VG}$ pour 32 piézomètres sur le bassin de la Seine entre 1981 et 2004.

La Figure 4.20 montre la comparaison entre l'évolution de la profondeur de la nappe obtenues à Mainvilliers ($48^{\circ} 27' 12''$ Nord, $1^{\circ} 27' 43''$ Est) entre 1981 et 2004.

Nous constatons que les variations de grande amplitude ne sont pas modifiées d'une version à l'autre. En revanche, avec *NONSAT_{VG}*, les variations intra-annuelles sont lissées et donc plus conformes aux observations. Des résultats similaires ont été obtenus pour d'autres piézomètres. La Figure 4.21 présente deux critères statistiques obtenus avec *NONSAT_{SW}* et *NONSAT_{VG}* pour 32 piézomètres sur le bassin de la Seine. Les résultats sont très similaires pour les deux modèles.

4.4.2.2 La simulation des transferts de polluants à travers la zone non saturée

Les résultats des tests de comparaison dans des cas simples et réels ont démontré que *NONSAT_{VG}* permet d'obtenir des transferts de solutés plus réalistes que ceux obtenus avec *NONSAT_{SW}*. Nous avons donc testé l'influence de *NONSAT_{VG}* sur la modélisation des transferts des solutés à l'échelle du bassin de la Seine. Une simulation de 35 ans a été réalisée selon les données disponibles pour l'application Seine. Des nitrates sont introduits sous forme de concentrations imposées avec l'infiltration entre le 181^{ème} et le 191^{ème} jour (c'est-à-dire en janvier 1972). Un apport de solutés à cette période, c'est-à-dire lors d'infiltration importante, garantit ainsi une entrée de nitrates dans la zone non saturée. Le calcul de l'infiltration a été réalisé par le modèle MODCOU. On définit alors une vitesse de transfert comme le temps nécessaire pour que 50 % de la masse de solutés injectée au niveau de sol atteignent la nappe. Nous caractérisons la variation de ces transferts en fonction de la vitesse de filtration moyenne annuelle de l'eau sur le laps de temps nécessaire pour que le traceur traverse la zone non saturée.

Une cartographie de l'infiltration moyenne annuelle entre 1971 et 2006 est présentée sur la Figure 4.22.

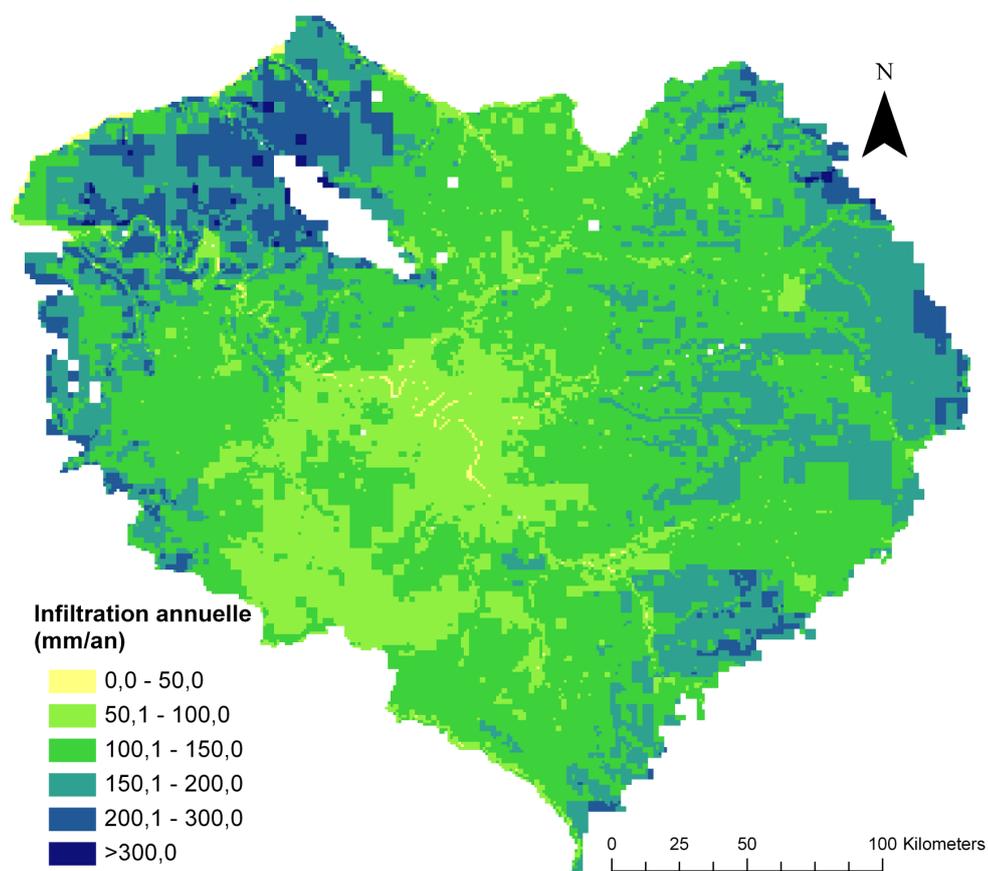


FIGURE 4.22: Infiltration moyenne annuelle calculée sur la période 1971-2006 sur le bassin de la Seine avec le module MODCOU

On constate une hétérogénéité relativement importante de cette infiltration, hétérogénéité liée à la variabilité géographique des précipitations et des sols.

La Figure 4.23 représente la distribution de ces infiltrations moyennes annuelles. Nous constatons que l'infiltration moyenne annuelle sur l'ensemble du bassin de la Seine est d'environ 165mm.an^{-1} .

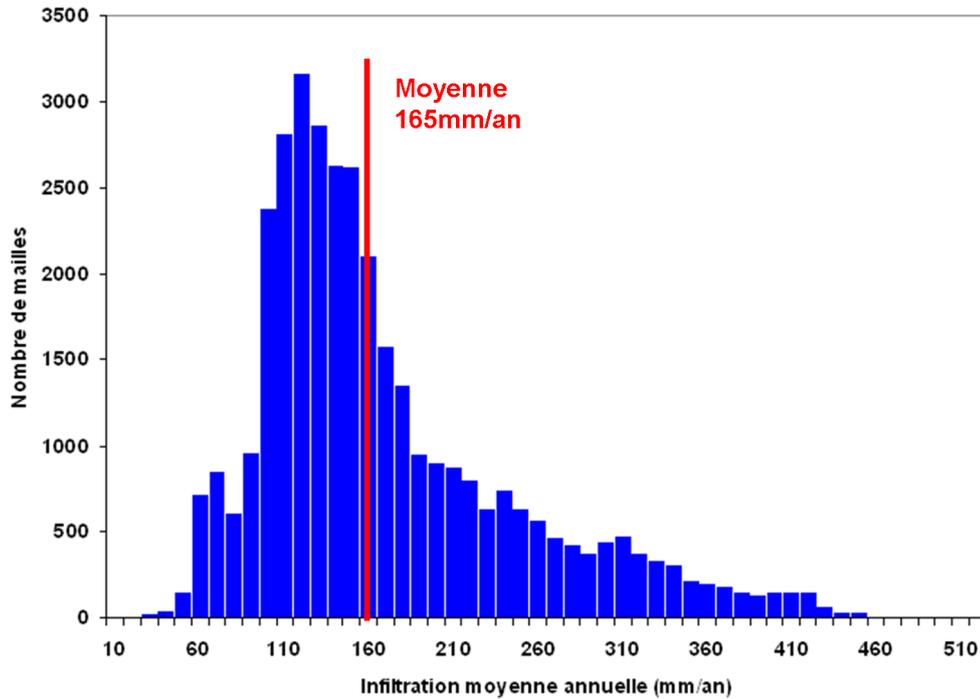


FIGURE 4.23: Distribution et moyenne (rouge) de l'infiltration moyenne annuelle calculée sur la période 1971-2006 sur le bassin de la Seine avec le module MODCOU

La Figure 4.24 représente pour des ZNS de type limon et craie les vitesses de transfert en fonction de l'infiltration annuelle sur la période de transfert simulées par *NONSAT_{SW}* et *NONSAT_{VG}*.

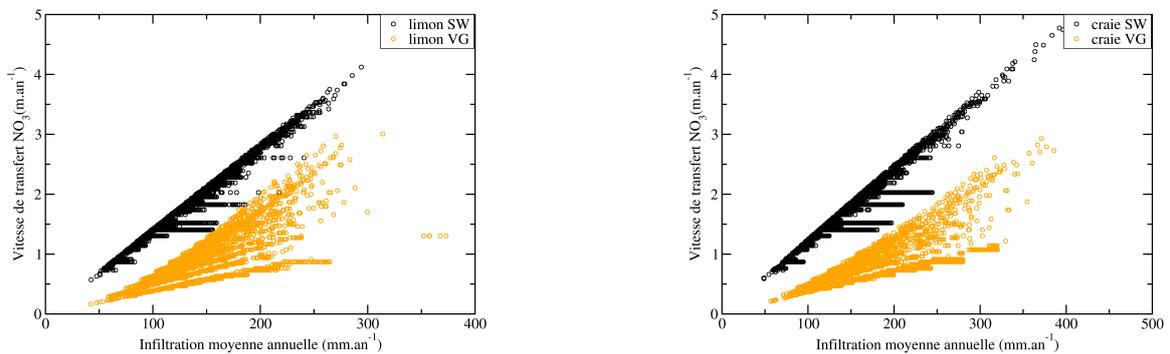


FIGURE 4.24: Vitesse de transfert des solutés à travers une ZNS de type limon et craie en fonction de l'infiltration moyenne annuelle.

Dans les deux modèles, on constate que les vitesses de transfert augmentent avec la vitesse de filtration ce qui est bien naturel. On constate également que $NONSAT_{VG}$ engendre une vitesse de transfert plus faible que $NONSAT_{SW}$ pour une vitesse d'infiltration donnée. Ainsi, avec l'ancienne version, les vitesses sont d'environ 2 m.an^{-1} pour tous les types de ZNS. Avec $NONSAT_{VG}$, ces vitesses de transferts moyennes sont de $0,5 \text{ m.an}^{-1}$ dans les ZNS argileuses et alluvionnaires, 1 m.an^{-1} dans la craie et le limon, et plus de 2 m.an^{-1} dans les ZNS sableuses et cristallines. Ces valeurs obtenues avec la nouvelle version concordent mieux que $NONSAT_{SW}$ avec les valeurs recensées dans la littérature : $0,80$ à $0,90 \text{ m.an}^{-1}$ (Jackson *et al.*, 2006) pour la craie, $0,27$ à $0,42 \text{ m.an}^{-1}$ pour l'argile (Johnson *et al.*, 1989) et 2 m.an^{-1} pour le sable (Legout *et al.*, 2007).

On constate également que la variabilité des vitesses de transfert est plus grande avec $NONSAT_{VG}$. Ceci met bien en évidence qu'avec $NONSAT_{VG}$ la teneur en eau est variable avec la profondeur. Ainsi, lorsque la nappe est profonde, la teneur en eau moyenne est plus faible que lorsque la nappe est peu profonde, ce qui conduit à une vitesse de transfert moyenne plus élevée pour la même valeur d'infiltration.

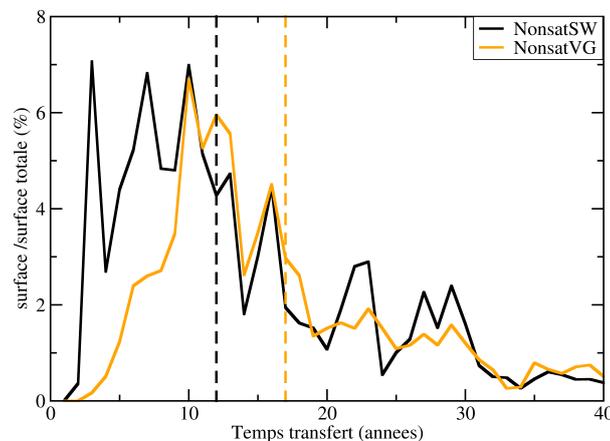


FIGURE 4.25: Répartition des surfaces du bassin de la Seine selon le temps requis en années pour une sortie de nitrates de la ZNS. Les lignes pointillées marquent le temps nécessaire pour que 50 % des ZNS du bassin de la Seine aient transmis les nitrates à la nappe. Cette répartition ne prend pas en compte la partie Est du bassin.

La Figure 4.25 présente la répartition des surfaces du bassin de la Seine en fonction du temps requis dans $NONSAT_{VG}$ et $NONSAT_{SW}$ pour que les nitrates imposés à la surface d'une zone non saturée atteignent la nappe sous-jacente. Un décalage entre les deux versions est observable :

dans *NONSAT_{VG}*, une part significative des polluants sort de la ZNS en 10-15 ans alors que dans *NONSAT_{SW}*, l'essentiel des sorties s'effectue en moins de 10 ans. Dans *NONSAT_{VG}*, 17 ans sont requis pour obtenir une sortie des nitrates sur 50 % des ZNS du bassin de la Seine, alors que seulement 12 ans sont nécessaires dans *NonsatSW*.

Les Figures 4.26 et 4.27 représentent la répartition spatiale des temps de transfert des nitrates à travers les ZNS du bassin de la Seine.

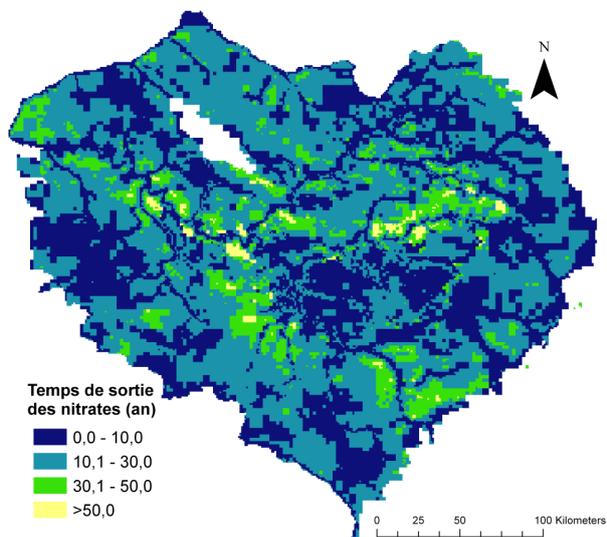


FIGURE 4.26: Temps en années requis pour une sortie de 50% des nitrates injectés en entrée de la ZNS avec *NONSAT_{SW}*

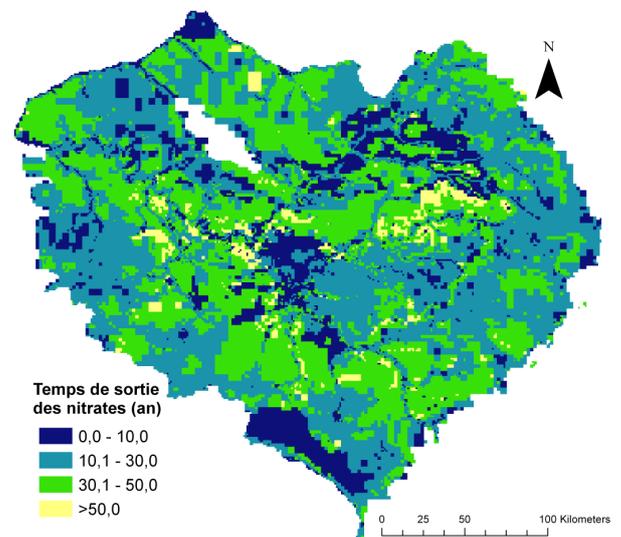


FIGURE 4.27: Temps en années requis pour une sortie de 50% des nitrates injectés en entrée de la ZNS avec *NONSAT_{VG}*

Dans *NONSAT_{SW}*, l'essentiel des nitrates des zones non saturée du bassin de la Seine sort en moins de 30 ans. Avec *NONSAT_{VG}* en revanche, une part significative des polluants requiert 30 à 50 ans pour atteindre la nappe. Ces transferts avec cette nouvelle version peuvent être supérieurs à 50 ans là où les ZNS sont épaisses.

4.4.2.3 Les transferts de polluants dans la nappe

Un des objectifs principaux de l'incorporation du modèle couplé dans l'outil intégré des hydro-systèmes Eau-dyssée et des modifications qui y ont été apportées est de réduire les écarts entre les concentrations en nitrates observées et simulées dans les trois principaux aquifères du bassin de la

Seine, à savoir l'Oligocène, l'Eocène et la Craie (Viennot *et al.*, 2006). Les simulations entre 1971 et 2004 des transferts souterrains des nitrates effectués par Viennot *et al.* (2006) avec la chaîne de modélisation STICS-MODCOU-NEWSAM ont donc été refaites avec l'outil Eau-dyssée, en considérant d'une part le modèle $NONSAT_{SW}$ et d'autre part le modèle $NONSAT_{VG}$ pour simuler les transferts à travers la ZNS.

Une des questions majeures qui se posent pour réaliser ces simulations provient du fait que l'on ne dispose de données validées pour les intrants de nitrates qu'à partir de 1971, et que se pose alors le problème de l'initialisation des concentrations dans l'hydrosystème au démarrage de la simulation. Pour faire face à cette difficulté, nous avons dans un premier temps, comme Viennot *et al.* (2006), initialisé les concentrations en nitrates dans les nappes et dans la zone non saturée avec une simulation effectuée pendant 35 ans en considérant la moyenne des flux d'eau et de nitrates de la période 1971-1979 obtenue avec STICS-MODCOU. Cette approche conduit à imposer une concentration sous-racinaire annuelle variable dans l'espace mais constante dans le temps, représentée sur la Figure 4.28.

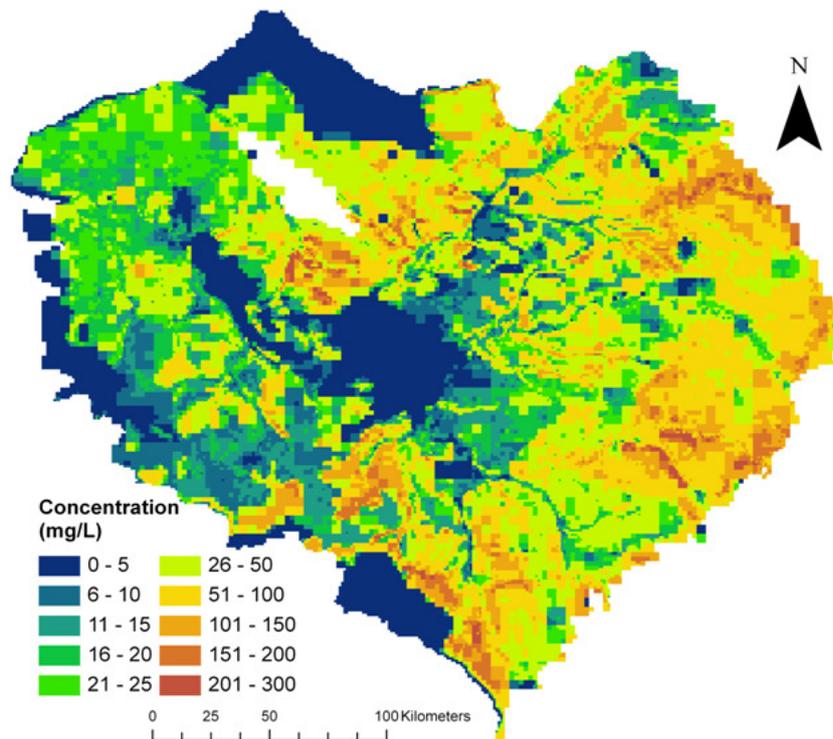


FIGURE 4.28: Concentration sous-racinaire moyenne sur la période 1971-1979 sur le bassin de la Seine calculée avec l'outil STICS-MODCOU.

La simulation sur la période entre 1971 et 2004 est ensuite réalisée en introduisant des flux de nitrates fournis par STICS, flux variant dans l'espace et dans le temps. Comme il se doit, ces flux augmentent durant cette période (cf Chapitre 1).

La Figure 4.29 représente l'évolution de la médiane des concentrations en nitrates observées et simulées par Eau-dyssée dans les trois principaux aquifères du bassin de la Seine entre 1971 et 2004 selon les conditions présentées précédemment. Les transferts à travers la zone non saturée sont simulés à gauche par $NONSAT_{SW}$ et à droite par $NONSAT_{VG}$.

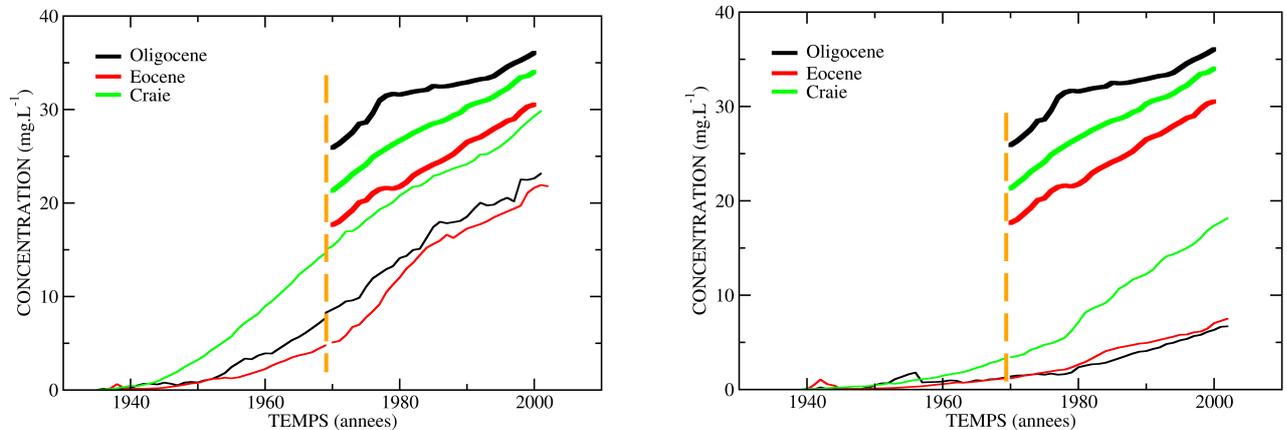


FIGURE 4.29: Evolution de la médiane des concentrations en nitrates observées (traits épais) et simulée (traits fins) avec les modèles de transfert à travers la ZNS $NONSAT_{SW}$ à gauche et $NONSAT_{VG}$ à droite, entre 1971 et 2004. L'initialisation consiste à répéter pendant 35 ans le forçage d'eau et de nitrates moyen entre 1971 et 1979. La droite pointillée sépare la phase d'initialisation, caractérisée par des flux d'eau et de nitrates constants dans le temps mais variant dans l'espace, et la phase avec une variation à la fois temporelle et spatiale des flux d'eau et de nitrates.

Comme l'avaient déjà constaté Viennot *et al.* (2006) puisque nos simulations sont réalisées dans des conditions identiques aux leurs avec $NONSAT_{SW}$, la dynamique simulée de l'évolution de la médiane des concentrations, représentée par la pente des courbes, entre 1971 et 2004 est assez similaire à celle observée sur le terrain. En revanche, malgré l'initialisation des concentrations souterraines en nitrates, on observe une différence très importante entre les concentrations observées et simulées. Jugeant qu'il s'agissait d'un problème de conditions initiales, Viennot *et al.* (2006) ont fait un décalage de 15 mg.L^{-1} pour l'Oligocène, 9 mg.L^{-1} pour l'Eocène et 7 mg.L^{-1} dans la Craie dans l'objectif de compenser un défaut d'initialisation du modèle. Ceci permet d'obtenir une évolution

des médianes des concentrations en nitrates simulées proche de celles observées (cf Figure 2.10). Avec *NONSAT_{VG}*, on observe également cet important décalage entre les concentrations observées et simulées. Mais on constate aussi que les pentes des courbes simulées sont moins prononcées que celles des médianes observées (à l'exception de la Craie). Ceci était prévisible car nous avons mis en évidence dans la section précédente que les transferts avec *NONSAT_{VG}* sont globalement plus lents qu'avec *NONSAT_{SW}*. Ainsi, avec ces vitesses de transfert plus faibles dans le nouveau modèle, les problèmes d'initialisation déjà mis en évidence avec *NONSAT_{SW}* ne peuvent qu'être exacerbés car la stabilisation des concentrations est plus longue à obtenir.

Cette méthode d'initialisation utilisée à l'époque a été réalisée faute de mieux puisque nous ne disposons pas d'une description détaillée avant 1970 des pratiques agricoles et des itinéraires techniques. Elle est cependant discutable car plusieurs questions se posent. Comment justifier le fait que cette initialisation est réalisée sur une période de 35 ans? Comment peut-on considérer qu'en 1935, soit plus de 10 ans avant la révolution agricole, nous considérons un flux d'azote identique à la moyenne des flux d'azote des années 70, années caractérisées par une agriculture très intensive? Est-ce raisonnable de procéder à un décalage des médianes des concentrations modélisées pour prendre en compte une concentration de fond du système?

Nous avons donc tenté de mettre au point une méthode d'initialisation en nous basant sur les quelques données observées disponibles avant 1970 sur le bassin de la Seine. Landreau et Roux (1984) rapportent ainsi qu'autour de 1930 des concentrations en nitrates d'environ 25 mg.L^{-1} dans le Calcaire de Brie et autour de 15 mg.L^{-1} dans les Calcaires de Champigny étaient constatées (cf Chapitre 1). Landreau et Roux (1984) montrent également que ces teneurs en nitrates augmentent localement de manière assez marquée dès les années 50. Ainsi, dans la source de la petite Traconne dans le Calcaire de Brie, les concentrations en nitrate entre 1955 et 1975 augmentent de 28 à 68 mg.L^{-1} . De la même manière, dans les Calcaires de Champigny, une augmentation des concentrations en nitrates entre 1960 et 1975 de 15 à 35 mg.L^{-1} est mise en évidence par les auteurs. De telles évolutions des concentrations en nitrates dans les eaux sont cohérentes avec l'intensification de l'usage des intrants chimiques à cette époque, comme le rapporte l'Agreste (2009) et comme nous pouvons l'observer sur les Figures 1.16 et 1.17.

Nous distinguerons donc deux phases dans la méthode d'initialisation que nous proposons. Une première phase permettant d'obtenir, avant la révolution agricole, des concentrations non nulles à

l'équilibre dans les aquifères, puis une seconde phase avec une augmentation des flux d'azote commençant dès 1935, considérant qu'avant cette date les concentrations en nitrates étaient en régime stationnaire.

Première phase d'initialisation

Thieu *et al.* (2010) rapportent des concentrations sous-racinaires en nitrates variant d'environ 13 à 26 $mg.L^{-1}$ dans des zones d'agriculture biologique. Nous considérons alors que ces concentrations sont comparables aux teneurs azotées sous-racinaires précédant la révolution agricole. Nous utilisons donc ces valeurs de concentrations dans une simulation permettant d'obtenir des teneurs proches de ce que Landreau et Roux (1984) ont recensé sur le terrain en 1930. Pour ce faire, une concentration annuelle sous-racinaire constante est ainsi imposée sur chaque maille de surface concernée par un apport agricole de STICS. Le flux de nitrates résultant sur chaque maille est pondéré par la surface agricole définie dans le modèle agronomique. Les différentes tentatives nous ont conduits à imposer finalement une concentration sous-racinaire en nitrates assez homogène sur l'ensemble du bassin. Dans les mailles de surface alimentant l'Oligocène celle-ci est en effet de 25 $mg.L^{-1}$, de 21 $mg.L^{-1}$ pour les mailles alimentant l'Eocène et de 23 $mg.L^{-1}$ pour la Craie. Ces concentrations sont imposées pendant 500 ans, durée nécessaire pour obtenir un régime stationnaire.

Les résultats sont exprimés en évolution de la médiane des concentrations en nitrates dans chaque aquifère. On constate ainsi sur la Figure 4.30 que les concentrations obtenues sont conformes à celles rapportées par Landreau et Roux (1984) et que plusieurs centaines d'années sont nécessaires pour équilibrer ces concentrations en nitrates dans les nappes.

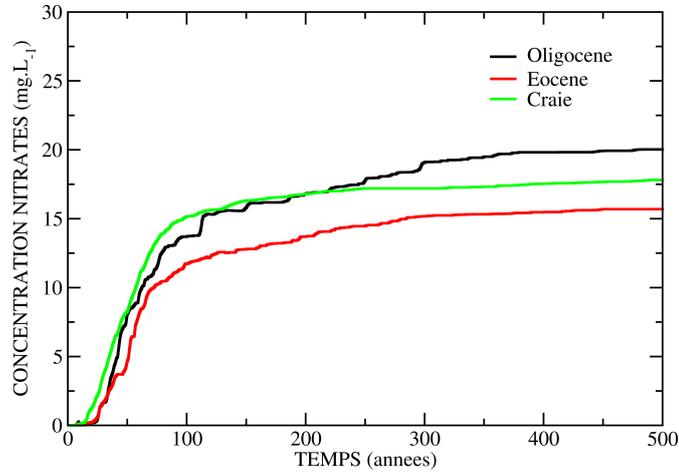


FIGURE 4.30: Evolution de la médiane des concentrations en nitrates dans les nappes de l'Oligocène (noir), de l'Eocène (rouge) et de la Craie (vert) en considérant une concentration en nitrates sous-racinaire dans les mailles de surface alimentant respectivement l'Oligocène, l'Eocène et la Craie de 25 mg.L^{-1} , 21 mg.L^{-1} et 23 mg.L^{-1} . La concentration sous-racinaire est pondérée par la surface agricole dans chaque maille.

Seconde phase d'initialisation

Nous devons considérer à la fin de la première phase une augmentation des apports d'azote sur la période 1935-1970 pour être en concordance avec les données relevées par Landreau et Roux (1984) et l'Agreste (2009).

Nous considérons que les flux de nitrates sous-racinaires en 1935 sont égaux à ceux obtenus en régime quasi-stationnaire, soit environ 150000 tonnes par an sur la Craie, 21000 tonnes sur l'Oligocène et environ 18000 tonnes sur l'Eocène. Ces valeurs pour chaque aquifère sont inférieures aux flux de nitrates sous-racinaires calculés en 1971 (Figure 4.31). Pour déterminer les flux de nitrates sous-racinaires entre 1935 et 1970, nous traçons alors la droite reliant la valeur du flux en régime stationnaire et la valeur du flux en 1971 comme nous le montrons sur la Figure 4.31.

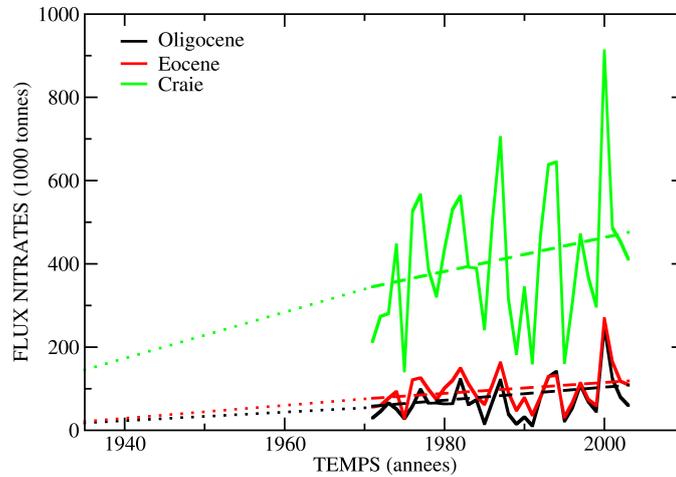


FIGURE 4.31: Détermination du flux de nitrates sous-racinaire entre 1935 et 1970 à partir d'une droite linéaire.

Impact de la nouvelle méthode d'initialisation sur la contamination souterraine en nitrates Avec cette méthode d'initialisation en deux temps, nous obtenons des évolutions des médianes présentées sur la Figure 4.32.

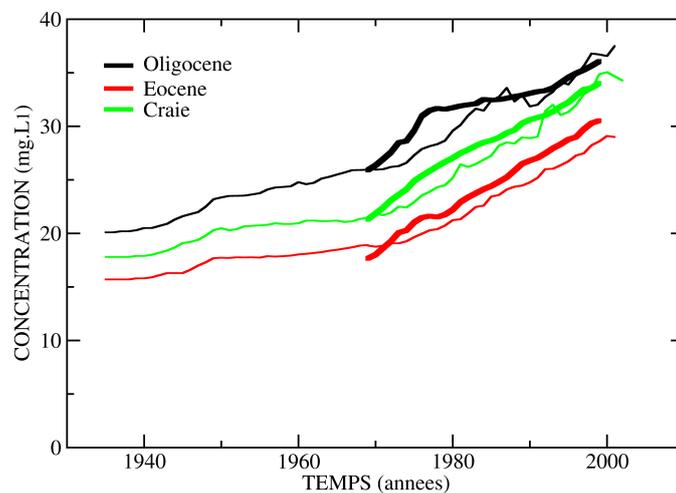


FIGURE 4.32: Evolution de la médiane des concentrations en nitrates observée (section épaisse) et simulée avec les modèles de transferts à travers la ZNS *NONSAT_{VG}*, entre 1935 et 2004.

Nous constatons avec ces résultats que globalement, avec cette nouvelle méthode d'initialisation,

l'évolution des médianes des concentrations souterraines est plutôt bien restituée avec $NONSAT_{VG}$. Tout d'abord, la prise en compte en 1935 de concentrations souterraines en nitrates au régime stationnaire permet d'augmenter considérablement les valeurs de concentrations dans les trois aquifères, dont les médianes se retrouvent dans les gammes de valeurs des concentrations observées. Puis, l'évolution des concentrations au cours du temps est plutôt bien restituée. Entre 1935 et 1970, une augmentation des concentrations en nitrates est amorcée dans chaque aquifère. En comparaison de la partie droite de la Figure 4.29 obtenue avec l'ancienne méthode d'initialisation, nous constatons que cette pente est plus prononcée dans les trois aquifères. Lors de la phase de simulation, l'évolution des concentrations en nitrates dans l'Oligocène et l'Eocène devient beaucoup plus importante qu'avec l'ancienne méthode d'initialisation. Nous observons donc ici un effet cumulatif de l'augmentation des concentrations sous-racinaires lors de la seconde phase d'initialisation et lors de cette phase de simulation.

Des écarts entre observations et simulation sont cependant encore visibles. Ceux-ci sont bien sûr en partie dus aux incertitudes inhérentes à cette nouvelle méthode d'initialisation. Mais ces écarts peuvent également être liés au fait que les flux de nitrates sous les villes et les forêts n'étant pas pris en compte dans STICS, nous intégrons un biais dans les intrants azotés imposés entre 1971 et 2004. Ceci peut donc être en particulier une importante source d'erreur dans l'Eocène qui est surplombé par l'agglomération parisienne (Billen *et al.*, 2001). Puis, nous ne prenons pas en compte dans notre outil de modélisation les phénomènes de dénitrification pouvant intervenir en profondeur dans les nappes, en particulier dans les nappes captives, ce qui est le cas de l'Eocène et de la Craie sur une grande partie de leur surface.

Nous avons procédé dans un second temps à une évaluation des capacités d'Eau-dyssée à simuler localement, sur chaque point de prélèvements, les concentrations en nitrates selon que l'on utilise le modèle $NONSAT_{SW}$ ou le modèle $NONSAT_{VG}$ pour simuler les transferts à travers la zone non saturée. Précisons qu'avec le modèle $NONSAT_{VG}$, nous utilisons la nouvelle méthode d'initialisation développée dans ce travail, méthode d'initialisation en deux phases.

Sur la Figure 4.33 sont représentées les concentrations souterraines en nitrates observées en 2000 sur l'ensemble du bassin de la Seine.

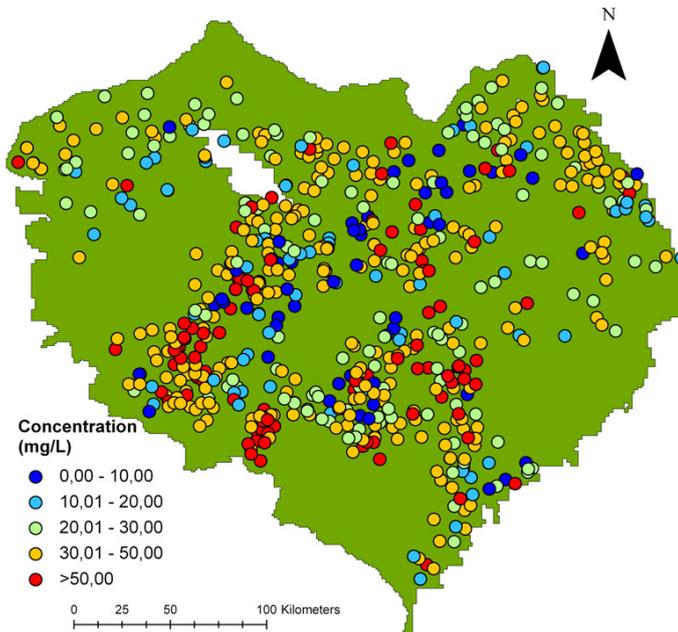


FIGURE 4.33: Concentration observée en 2000 dans les trois principaux aquifères libres du bassin de la Seine, d'après la base de données ADES.

Nous constatons que des concentrations en nitrates supérieures au seuil de potabilité (50mg.L^{-1}) sont mesurées, notamment dans la Beauce. On met également en évidence des zones où les concentrations sont supérieures à 30mg.L^{-1} . Ces dernières sont donc susceptibles, dans un futur proche, de dépasser le seuil de potabilité.

Sur les Figures 4.34 et 4.35 sont représentés les écarts entre les concentrations annuelles simulées et observées en 2000. La Figure de gauche illustre ces erreurs de modélisation obtenues avec le modèle *NONSAT_{SW}* alors que la Figure de droite restitue les écarts obtenus avec le modèle *NONSAT_{VG}*.

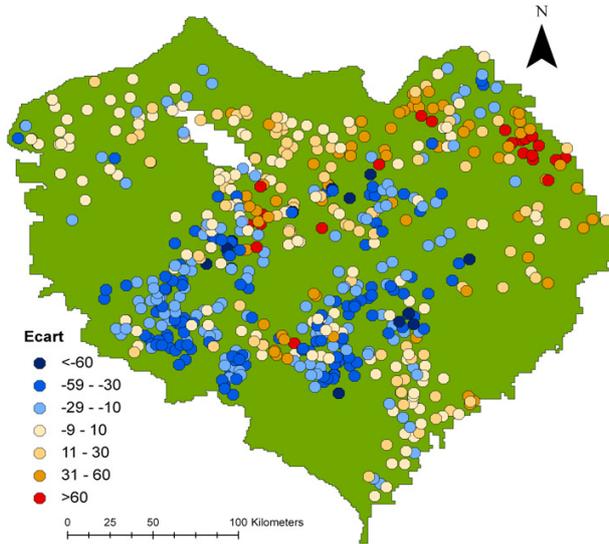


FIGURE 4.34: Ecart entre les concentrations simulées par $NONSAT_{SW}$ et observées en 2000.

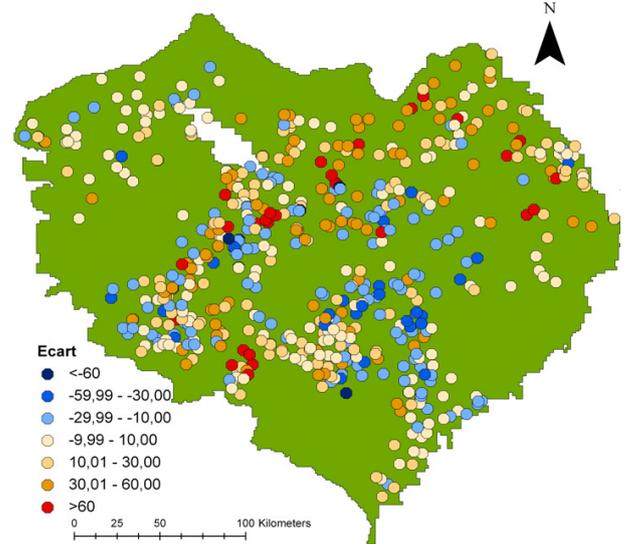


FIGURE 4.35: Ecart entre les concentrations simulées par $NONSAT_{VG}$ et observées en 2000.

Nous constatons avec ces deux Figures que selon le modèle de transfert à travers la zone non saturée utilisé, les résultats simulés obtenus sont très différents. Globalement, nous pouvons cependant mettre en évidence qu'avec $NONSAT_{SW}$, les concentrations souterraines en nitrates sont plutôt sous-estimées alors qu'avec $NONSAT_{VG}$, les concentrations en nitrates sont plutôt surestimées. Par contre, nous ne pouvons, à partir de ces Figures, voir dans quelles mesures le nouveau modèle $NONSAT_{VG}$ améliore ou dégrade les capacités d'Eau-dyssée à restituer les concentrations souterraines en nitrates. Pour mettre ce point en évidence, nous calculons un "score" qui est égal au rapport des écarts de simulation obtenus avec $NONSAT_{VG}$ sur ceux obtenus avec $NONSAT_{SW}$:

$$score = \frac{conc_{NONSAT_{VG}} - conc_{observ}}{conc_{NONSAT_{SW}} - conc_{observ}} \quad (4.8)$$

Ainsi, lorsque ce rapport est inférieur à 1, l'utilisation de $NONSAT_{VG}$ dans Eau-dyssée permet d'améliorer les capacités de cet outil à restituer localement les concentrations souterraines en nitrates. Par contre si ce rapport est supérieur à 1, les capacités du modèle intégré à restituer les concentrations souterraines en nitrates sont dégradées avec $NONSAT_{VG}$. La Figure 4.36 présente ce score calculé pour l'année 2000.

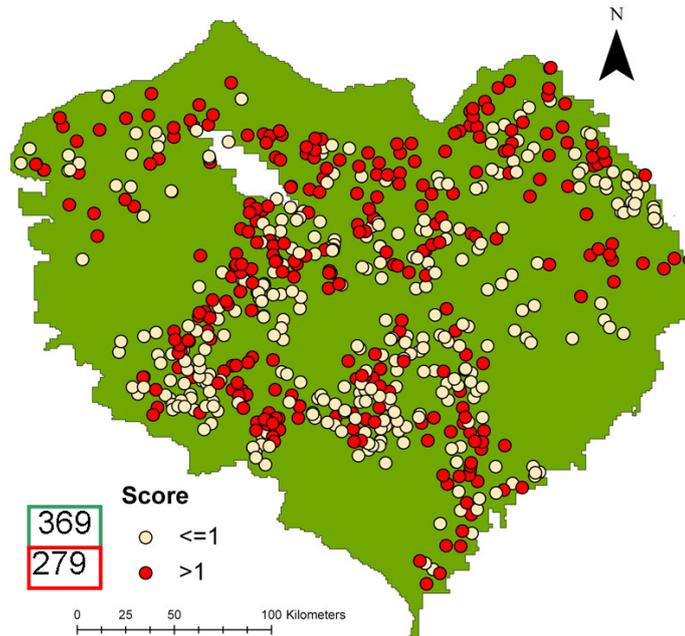


FIGURE 4.36: Score calculé pour l'année 2000 avec Eau-dyssée.

Le calcul de ce score permet de mettre en évidence le fait qu'en utilisant le modèle $NONSAT_{VG}$, les capacités d'Eau-dyssée à restituer les concentrations sur des points d'observation en 2000 sont davantage améliorées que dégradées.

Nous avons alors étudié les évolutions au cours du temps (entre 1970 et 2000) des concentrations en nitrates obtenues avec $NONSAT_{VG}$ et $NONSAT_{SW}$ et les avons comparées aux données observées sur le terrain. Quelques résultats représentatifs sont représentés sur la Figure 4.37.

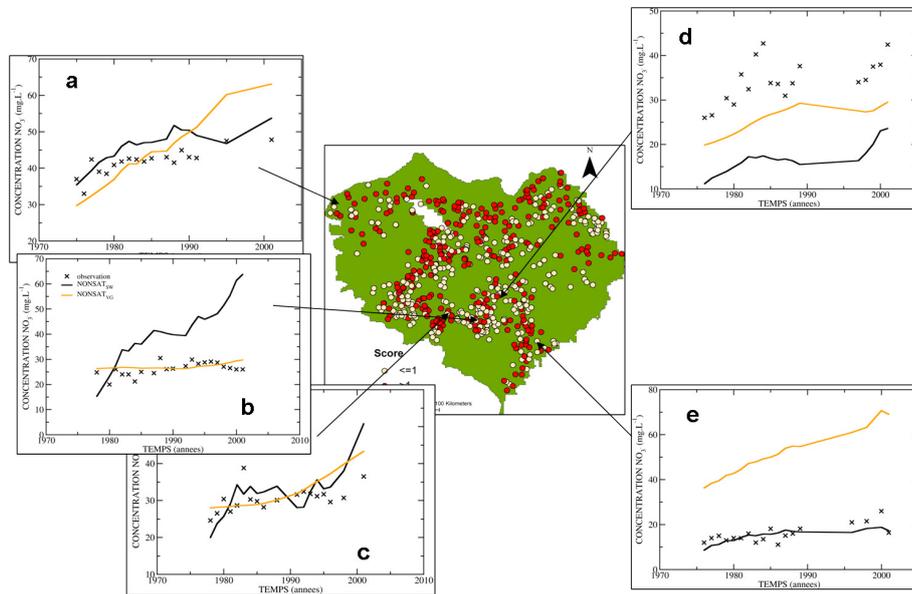


FIGURE 4.37: Evolution au cours du temps des concentrations en nitrates observées sur le terrain (points) et modélisées en considérant pour simuler les transferts à travers la zone non saturée $NONSAT_{SW}$ (noir) ou $NONSAT_{VG}$ (orange). Codes bss : 00743X0085 (a), 02932X0009 (b), 02567X0019 (c), 02582X0012 (d), 04021X0034 (e)

Nous constatons avec ces résultats que, malgré le fait que $NONSAT_{VG}$ permette de globalement améliorer les capacités d'Eau-dyssée à simuler les concentrations souterraines en nitrates (Figure 4.36), la restitution de la dynamique temporelle de ces concentrations entre 1970 et 2000 est plus problématique. Nous constatons ainsi globalement que les évolutions des concentrations en nitrates obtenues avec $NONSAT_{VG}$ sont plus lisses que celles obtenues avec $NONSAT_{SW}$. Mais, sur les graphiques d et e de la Figure 4.37, notre nouveau modèle ne parvient pas à restituer l'évolution dans le temps des concentrations observées sur le terrain. $NONSAT_{VG}$ dégrade même les capacités d'Eau-dyssée à simuler ces concentrations sur le graphique e. Par contre, sur d'autres points, $NONSAT_{VG}$ permet d'obtenir une évolution temporelle des concentrations en nitrates satisfaisante, comme illustré sur les graphique b et c de la Figure 4.37.

Nous avons finalement utiliser nos deux modèles de transfert à travers la zone non saturée, $NONSAT_{SW}$ et $NONSAT_{VG}$, pour tester leur impact sur des scénarios agricoles qui ont été étudiés dans le cadre du PIREN-Seine. L'objectif n'est pas de tester tous les scénarios possibles mais

de mettre en évidence les éventuelles différences de résultats obtenus avec ces deux modèles dans des scénarios prospectifs. Nous avons donc choisi de tester uniquement deux scénarios extrêmes : un arrêt total des intrants après 2004 et un scénario 'laisser-faire' consistant à répéter les intrants moyens sur la période 1990-2003.

Nous testons ces scénarios pour la nappe de l'Oligocène qui est particulièrement sollicitée par l'Agriculture (présence de la Beauce).

Les résultats obtenus sont représentés sur la Figure 4.38.

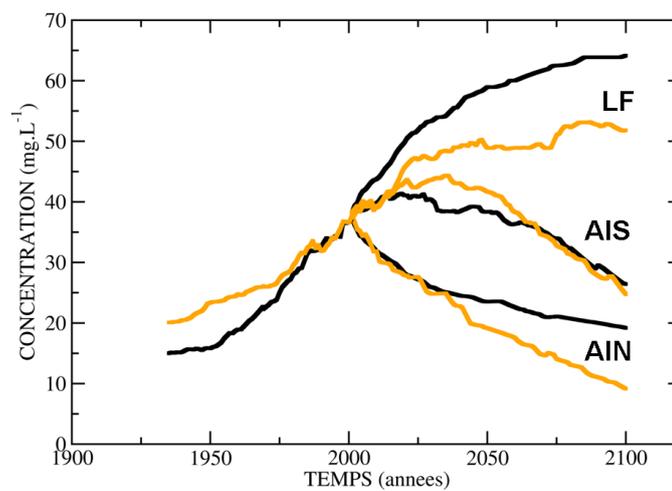


FIGURE 4.38: Evolution de la médiane des concentrations dans la nappe de l'Oligocène pour deux scénarios agricoles ('laisser faire (LF)' et 'arrêt des intrants en surface (AIS)') et en considérant un arrêt total des intrants transférés de la zone non saturée vers la nappe (AIN) avec $NONSAT_{SW}$ (noir) et $NONSAT_{VG}$ (orange)

Nous avons simulé deux schémas "arrêt des intrants" en considérant d'une part le cas où la suppression des intrants intervient à la surface du sol au niveau de la zone racinaire et, d'autre part, le cas théorique où cette suppression est effectuée à la base de la zone non saturée au niveau de la surface libre de la nappe. Ces calculs permettent de distinguer la dynamique de la zone non saturée de celle de la nappe.

Nous constatons avec cette Figure que les évolutions des concentrations dans les nappes sont significativement différentes selon que l'on utilise le modèle $NONSAT_{SW}$ ou le modèle $NONSAT_{VG}$ pour simuler les transferts à travers la zone non saturée. En considérant le scénario 'laisser faire', nous constatons en effet que les concentrations en nitrates augmentent davantage au cours du temps avec $NONSAT_{SW}$ qu'avec $NONSAT_{VG}$. De même, pour le scénario 'arrêt des intrants en surface',

nous constatons que la diminution de la concentration en nitrates dans la nappe est amorcée plus rapidement avec *NONSAT_{SW}* qu'avec *NONSAT_{VG}*. Nous constatons cependant également pour ce scénario qu'au bout d'environ 60 ans, les évolutions des concentrations en nitrates obtenues avec les deux modèles sont quasi-similaires.

Deux facteurs influencent ces différences d'évolutions des concentrations obtenues avec chacun des modèles :

- les dynamiques de transfert différentes de l'eau et des solutés à travers la zone non saturée
- les méthodes d'initialisation différentes pour chacun des modèles

Avec *NONSAT_{VG}*, nous avons montré dans ce chapitre que les transferts des solutés à travers la zone non saturée sont plus lents que ceux obtenus avec *NONSAT_{SW}*. Ceci explique donc le fait que nous ayons, pour le scénario 'laisser faire', une augmentation des concentrations en nitrates un peu moins prononcée avec le nouveau modèle. Ces transferts plus lents avec le nouveau modèle explique également la plus grande inertie obtenue pour le scénario 'arrêt des intrants' entre un arrêt des nitrates en surface et une diminution de leur concentration dans la nappe. En effet, durant presque 40 ans, la teneur en nitrates dans cette nappe continue à augmenter grâce au stock de solutés accumulé dans la zone non saturée. Avec l'ancien modèle en revanche, ce stock génère une augmentation des concentrations en nitrates pendant encore uniquement 15 ans.

Cette inertie observée est exclusivement liée à ces transferts à travers la zone non saturée. En effet, si l'on considère un arrêt total des intrants de nitrates dans la nappe dès 2004, on observe une diminution instantanée de la concentration azotée dans celle-ci.

Mais la méthode d'initialisation a également joué sur les résultats obtenus. En effet, rappelons qu'avec *NONSAT_{SW}*, la concentration de fond du système avant le développement de l'agriculture intensive est prise en compte par une simple translation de la médiane alors qu'avec *NONSAT_{VG}*, cette concentration de fond est explicitement prise en compte dans les intrants. La simulation *NONSAT_{SW}* ne tient donc pas compte de la quantité de nitrates initiale stockée dans la zone non saturée. Ceci explique donc le fait que, dans le scénario 'laisser faire', l'équilibre est atteint plus rapidement avec le nouveau modèle et que, dans le scénario 'arrêt des intrants', la diminution de la médiane des concentrations en nitrates avec *NONSAT_{VG}* est plus importante.

Conclusion Chapitre 4

Nous avons dans ce chapitre procédé à une évaluation du modèle de transfert d'eau et de solutés à travers la zone non saturée *NONSAT_{SW}*. Cette évaluation a permis de montrer que le transfert

des solutés à travers ce milieu était biaisé. Nous proposons donc une version améliorée de ce modèle conceptuel, version qui a été validée à l'échelle de la parcelle et du bassin de la Seine. La nécessité de définir 3 paramètres supplémentaires dans ce nouveau modèle conceptuel peut tout de même constituer une limite à son application. Nous avons cependant montré dans ces tests qu'en utilisant des paramètres de bases de données de sol de Carsel et Parrish (1988), les résultats sont satisfaisants. Il faut également signaler que d'autres bases de données sols sont disponibles, citons par exemple celle de Wösten *et al.* (1999). Mais nous avons constaté que les profils fournis par Wösten *et al.* (1999) ont tendance à se recouper avec des profils définis par Carsel et Parrish (1988). Il est important de noter également que *NONSAT_{VG}*, bien que permettant d'obtenir des résultats ici comparables au modèle mécaniste *METIS* est beaucoup plus rapide en temps d'exécution que ce dernier.

Une application à grande échelle sur le bassin de la Seine a finalement permis de mettre en évidence des problèmes liés à l'initialisation des concentrations souterraines qui avaient une très forte influence sur les concentrations simulées. Nous avons donc développé une méthodologie permettant d'initialiser les zones non saturées et les nappes selon des données observées sur le terrain. Cette méthode permet de restituer avec *NONSAT_{VG}* une évolution correcte des médianes des concentrations observées correctes dans les trois principaux aquifères du bassin de la Seine. En analysant chaque point d'observation, nous avons également mis en évidence qu'avec cette méthode, nous parvenons à réduire davantage les erreurs locales de simulations des concentrations souterraines en nitrates dans Eau-dyssée. Nous avons donc utilisé *NONSAT_{VG}* pour tester des scénarios agricoles. Les résultats démontrent notamment qu'avec ce nouveau modèle, pour le scénario 'arrêt des intrants', presque 40ans sont nécessaires pour observer une diminution des concentrations en nitrates dans la nappe de l'Oligocène après un arrêt des intrants, contre environ 15ans avec *NONSAT_{SW}*. Ceci doit permettre d'alimenter la réflexion sur les politiques mises en place pour réduire les contaminations en nitrates dans cet hydrosystème en vue d'atteindre les objectifs imposés par la Directive Cadre sur l'Eau. Notre nouveau modèle de transfert à travers la zone non saturée *NONSAT_{VG}*, qui est conceptuellement plus réaliste que *NONSAT_{SW}* comme nous l'avons montré dans ce chapitre, montre en effet clairement que pour la nappe de l'Oligocène, les objectifs de la DCE ne sont pas atteignables d'ici à 2015 du fait de la grande inertie du système non saturé.

Conclusions et Perspectives

Nous avons choisi dans ce travail de nous focaliser sur l'étude des transferts à travers la zone non saturée. En effet, nous montrons dans le Chapitre 3 que cette zone peut générer des délais très importants entre une contamination en surface et son impact sur la qualité des ressources en eau souterraines. Une modélisation adéquate de ce milieu est donc nécessaire pour comprendre correctement l'évolution dans le temps et dans l'espace des transferts de solutés dans un hydrosystème. Nous avons été cependant confrontés au cours de ce travail au nombre réduit de données disponibles sur le long terme et sur de grandes profondeurs d'évolution de concentrations de solutés dans des zones non saturées, données qui nous auraient permis de comprendre précisément la dynamique des transferts à travers ce milieu. Nous avons donc procédé à un certain nombre de tests de sensibilité avec le modèle à bases physiques *METIS* pour mieux saisir la dynamique des transferts d'eau et de solutés dans des conditions d'application proches de grands bassins. Les résultats nous ont tout d'abord permis de mettre en évidence que la vitesse de transfert des solutés à travers la zone non saturée varie selon l'état de saturation de la colonne : plus le volume d'eau à traverser par les solutés est important, plus leur vitesse de transfert sont faibles. Nous avons également montré que la profondeur de la nappe impacte la dynamique de transfert des solutés à travers la zone non saturée. En effet, moins la nappe est profonde, plus les transferts de solutés dans les sections profondes de la zone non saturée sont importants car le profil hydrique à l'équilibre, que ce soit à flux nul ou flux non nul, tend vers des teneurs en eau plus élevées.

En se basant sur l'ensemble de ces résultats, nous avons procédé à une évaluation du modèle conceptuel de transfert d'eau et de solutés à travers la zone non saturée *NONSAT_{SW}*. Cette évaluation a montré que les transferts de solutés dans cet outil sont biaisés puisque les vitesses de transferts y sont constantes sur toute l'épaisseur de la zone non saturée et ne varient pas selon la profondeur de la nappe. Nous avons donc pris en compte un profil hydrostatique plus réaliste et une vitesse d'écoulement variant selon l'état de saturation de la colonne. Cette nouvelle version, appelée

NONSAT_{VG} permet d'obtenir des dynamiques de transfert des solutés beaucoup plus similaires à ce qui est observé sur le terrain. Notons également que ce nouveau modèle est parfaitement adapté pour des applications sur grands bassins. D'une part, nous montrons que les paramètres supplémentaires requis dans ce nouveau modèle peuvent être efficacement définis à partir de bases de données existantes et, d'autre part, les temps de calcul de cet outil sont bien moindre que ceux d'un modèle mécaniste.

Au vu de ces résultats, nous avons procédé à une phase d'exploitation de cet outil en quantifiant son impact sur la qualité de modélisation de la contamination souterraine en nitrates dans Eau-dyssée. En effet, un des principaux objectifs des modifications apportées au modèle hydrogéologique est de réduire les écarts entre les concentrations observées et simulées dans les trois principaux aquifères du bassin de la Seine, comme nous l'expliquons dans le Chapitre 2. Pour cela, il est nécessaire de partir d'un état initial. Cependant, la procédure d'initialisation utilisée jusqu'ici a été mise en place faute de mieux puisque nous ne connaissons pas précisément les historiques cultureux. Or en se référant aux quelques données observées sur le terrain, nous parvenons tout de même à mettre en évidence que cette méthodologie ne concorde en rien avec la réalité des évolutions de pratiques agricoles au cours du *XX^{ème}* siècle. Une meilleure prise en compte de la réalité de ces historiques a donc été considérée pour tenter de modéliser au mieux les transferts de nitrates dans cet hydrosystème. Nous avons vu que la nouvelle méthodologie que nous présentons dans le Chapitre 4 permet d'obtenir avec *NONSAT_{VG}* une évolution de la médiane des concentrations assez satisfaisante, même si des écarts importants sont encore observés pour l'Oligocène.

Enfin, les tests de sensibilité effectués avec *METIS* ont permis de quantifier l'impact du battement de nappe sur les transferts à travers la zone non saturée. En effet, nous avons mis en évidence un échange de flux d'eau entre la zone non saturée et la zone saturée lors d'une fluctuation du niveau piézométrique, échange susceptible de modifier la dynamique des transferts de solutés à travers la zone non saturée. Nous avons cependant montré que cette influence dépend de la fréquence de ces fluctuations piézométriques. Lorsque cette fréquence est élevée, nous montrons que l'impact du battement de nappe peut être approximé par la définition d'une épaisseur de la zone non saturée égale à la différence entre le sol et le niveau haut atteint fréquemment par la nappe. Nous remettons donc en cause ici la méthode de définition de l'épaisseur de la zone non saturée dans MODCOU qui consiste à approximer l'épaisseur de la zone non saturée par la différence entre le sol et le niveau de la nappe obtenu en régime permanent.

En revanche, lorsque l'on considère des évolutions du niveau de la nappe sous l'action du changement climatique ou de pratiques anthropiques (pompage), la fréquence devient basse en regard de la vitesse de transfert des solutés à travers la zone non saturée et la prise en compte d'un couplage entre ce milieu et la nappe est nécessaire. En effet, nous aurons sur le long terme une modification de l'épaisseur de la zone non saturée et donc une modification de la dynamique des transferts de solutés à travers ce milieu liée à une modification du profil de saturation à l'équilibre hydrostatique. La modélisation de ce phénomène constitue donc une perspective importante de ce travail. Nous avons procédé à quelques tests préliminaires pour prendre en compte cette dynamique de la nappe dans la zone non saturée. Nous nous sommes pour cela basés sur le fait qu'un lien explicite dans *NONSAT_{VG}* est établi entre le volume minimal dans la colonne non saturée de ce modèle conceptuel et le niveau de la nappe. Des tests sont ainsi en cours pour gérer l'échange d'un flux entre ces deux milieux, en se basant sur le coefficient de répartition d'un flux d'eau entre la nappe et la zone non saturée établi dans les tests de sensibilité effectués avec *METIS*. La prise en compte d'une telle dynamique permettra ainsi peut être d'améliorer significativement dans Eau-dyssée la qualité de modélisation de la contamination souterraine en nitrates.

L'amélioration de la qualité de modélisation des transferts de nitrates par Eau-dyssée sur le bassin de la Seine passera aussi par une application avec le modèle à 6 couches souterraines actuellement en cours de développement sur cette zone géographique. L'impact de *NONSAT_{VG}* sur la dynamique de contamination souterraine en nitrates sera donc à réévaluer avec cette nouvelle discrétisation souterraine.

Une utilisation de *NONSAT_{VG}* peut également être envisagée sur un autre bassin. Une application STICS-MODCOU a ainsi été développée pour simuler les transferts d'eau et de solutés sur la Basse-Normandie (collaboration MINES ParisTech/AESN/INRA Mirecourt, 2010) et peut constituer une application intéressante pour *NONSAT_{VG}*.

NONSAT_{VG} ayant été développé pour gérer le transfert de plusieurs espèces chimiques, le transport des pesticides à travers la zone non saturée pourrait également être pris en compte. Ceci pourra être testé dans le cadre du développement d'un module phytosanitaire actuellement en cours.

Enfin, des développements ultérieurs seraient à envisager pour prendre en compte les phénomènes de dénitrification pouvant intervenir dans la zone non saturée. En effet, même si cette zone est souvent considérée comme uniquement une zone de transfert des nitrates, et c'est le cas dans Eau-dyssée, des phénomènes de dénitrification peuvent intervenir en profondeur, notamment dans la zone de battement de nappe.

Annexe A

Description des sites expérimentaux

L'Institut National de la Recherche Agronomique (INRA) a instrumenté les sites d'Haussimont et Thibie pour permettre de mieux comprendre le comportement hydrologique et chimique d'un système soumis à des épandages agricoles.

Haussimont et Thibie sont situés dans le département de la Marne, en région Champagne-Ardenne (Nord-Est de la France). Ils sont localisés dans l'auréole crétacée du Bassin de Paris qui est limitée par :

- les cuestas de la Brie sur son flanc occidental
- les 'falaises' crayeuses à l'Est
- des recouvrements limoneux qui assurent un passage progressif vers le Laonnais, au Nord et vers le Pays d'Othe

Nous nous basons sur les études de Durand (1979), de Dever (1985) et de Moulin (1990) pour décrire la géologie et les dispositifs expérimentaux sur ces deux sites.

A.1 Généralités

A.1.1 Le climat

La Champagne est soumise au climat tempéré du Bassin Parisien. Sur la période 1941-1970, les précipitations moyennes annuelles s'établissent à environ 653mm (Dever, 1985). Ces précipitations sont réparties de façon homogène sur l'ensemble de l'année avec une température moyenne annuelle de 10°C. L'évapotranspiration potentielle (ETP) est de l'ordre de 640mm. Des bilans de drainage effectués sur des cases lysimétriques ont permis d'estimer la recharge annuelle autour de 200-220mm, recharge qui s'étend de novembre à mars (Dever, 1985).

A.1.2 La géologie

Nous procédons ici à une description succincte de la géologie sur ces sites. Une description précise de l'histoire géologique et une étude pétrographique pour l'ensemble de la Champagne sont disponibles dans la thèse de Durand (1979).

La Champagne se distingue nettement par ses paysages à relief mou, dont l'originalité est due à l'affleurement de la craie du Sénonien. Simplement, si les processus d'altération ont débuté dès la fin du Crétacé, donnant naissance à des argiles à silex issues de la décalcarification de la craie, il n'en reste trace à l'affleurement, à cause des phénomènes érosifs postérieurs. En revanche, le développement d'une pédogénèse en climat périglaciaire a donné naissance à des poches de cryoturbation. Ces poches de cryoturbation, réparties uniformément sur l'ensemble de la Champagne, atteignent 20 à 140 cm de profondeur. Conjointement à la formation de ces poches, la pédogénèse sous climat froid a induit une fracturation intensive de la craie par gélifraction dans les 150cm sous-jacents. Ces altérations sont surmontées d'un encroûtement calcaire discontinu de structure massive fortement cimentée (augmentation du pourcentage de CaCO_3) ayant pour effet de diminuer localement la porosité totale du matériau. Un sol de type rendzine encroûtée, lieu actuel de la décarbonatation, repose sur l'ensemble des altérations quaternaires.

A.2 Propriétés physico-chimiques de la Craie

A.2.1 Composition chimique et minéralogique

La craie est essentiellement composée de carbonate de calcium (CaCO_3), dont la proportion varie selon le faciès. Nos sites d'étude sont implantés dans la craie sénonienne qui est constituée à plus de 95% (et souvent plus de 97%) de carbonates. Le reste, matériau résiduel, est constitué de quartz ou d'argiles (Durand, 1979, Moulin, 1990).

A.2.2 Propriétés physiques (Durand, 1979)

La craie est une roche poreuse avec une friabilité caractéristique qui l'oppose aux calcaires durs. Sa grande friabilité est due au fait qu'elle est constituée essentiellement de fragments de coccolithes qui ne sont pas liés par un ciment. L'ensemble a donc une faible cohésion interparticulaire. Cette faible cohésion explique ainsi l'importante porosité mise en évidence dans la craie (40 à 45%). La porosité capillaire, mesurée au porosimètre à mercure, est inférieure à $0,75\mu\text{m}$ (90% de la porosité

A.3 Les transferts à travers la zone non saturée crayeuse

est compris entre $0,75\mu m$ et $0,40\mu m$). Il faut donc pour extraire l'eau contenue dans les pores de la craie blanche des pressions supérieures à $pF=3,6$. La craie présente également un réseau de fissures subverticales et subhorizontales qui engendre une porosité de fissures de l'ordre de 1 à 3% dans les zones non altérées.

A.3 Les transferts à travers la zone non saturée crayeuse

La forte microporosité des fragments de craie et l'intense fissuration de la roche sur plusieurs mètres d'épaisseur conditionnent la dynamique de l'eau dans la zone non saturée. Cette fissuration de la craie résulte de la gélifraction, qui s'est surimposée aux réseaux de diaclases courbes d'origine tectonique. Enfin, il faut souligner la présence des reliquats de limons, d'argile, sédimentaire ou pédogénétique, et de grès siliceux, qui ont pu contaminer les sols se développant sur la craie à poches.

A.3.1 Description des zones non saturées

La zone non saturée surmontant l'aquifère libre de la craie se développe dans la craie blanche du Sénonien sur une vingtaine de mètres à Haussimont et sur une quinzaine de mètres à Thibie. La zone non saturée ne peut être considérée comme lithologiquement homogène. En effet, comme nous l'avons dit précédemment, à l'affleurement, la craie sénonienne présente des phénomènes d'altérations dans sa partie supérieure. Les porosités totales des horizons de craie remaniée par cryoturbation et de craie gélifractée, entre 100 et 150cm de profondeur, sont supérieures à celles des fragments de craie, elles atteignent 50%. Ces zones non saturées sont également caractérisées par un réseau de fissures de forte densité (entre 5 et 6%). Ces fissures représentent cependant un volume très faible à teneur en eau peu élevée et n'interfèrent pas de façon significative dans le mode de transfert des solutions dans la zone non saturée. La phase liquide est donc essentiellement localisée dans la matrice poreuse avec une teneur en eau volumique proche de 100%. La différenciation zone non saturée - zone saturée est basée sur la modification de teneur en eau du réseau de fissures.

A.3.2 La dynamique des transferts à travers la zone non saturée

Pour comprendre la circulation des solutés à travers la zone non saturée à Haussimont, Dever (1985) a procédé à une analyse isotopique. A partir des analyses d' ^{18}O et de tritium entre 1982 et 1984, Dever (1985) distingue 3 zones dans cette zone non saturée :

- une zone de 0 à 1m dans laquelle l’influence des derniers épisodes pluvieux antérieurs aux prélèvements est ressentie (variation de la teneur en ^{18}O). Dever (1985) met en évidence le fait que la reprise évaporative n’affecte que cette zone et affecte plus ou moins la lame d’eau infiltrée selon la vitesse de percolation de la solution, selon les conditions climatiques ponctuelles lors de l’infiltration et selon les fréquences des précipitations et leur répartition dans le temps.
- une zone de 1 à 14m où le transfert de la solution s’opère par “effet piston” (conservation de la signature isotopique). A partir d’une analyse isotopique, Dever (1985) détermine une vitesse de transfert d’environ $0,60m.an^{-1}$. Ceci démontre que le transfert par “effet piston” est le mécanisme prédominant qui gouverne la circulation des solutés à travers cette zone non saturée.
- une zone inférieure à 14m dans laquelle on observe les fluctuations du niveau piézométrique. Dans la nappe libre de la craie, ces fluctuations peuvent atteindre 6m. La remontée de la nappe s’opère par saturation temporaire du réseau de fissures et il apparaît une certaine homogénéisation des masses d’eau.

A.3.3 Le dispositif expérimental

Des bougies poreuses en céramique ont été disposées *in situ* entre 1m et 6 à 20m selon les profils., avec un espacement vertical d’un mètre, de façon à se libérer des interactions eventuelles entre deux bougies voisines. Chaque bougie est équipée d’un double tubage (un tube d’entrée et un de sortie). L’ensemble des tubes sont rassemblés et sort à la surface dans une fosse de deux mètres de profondeur, afin de faciliter les prélèvements.

Prélèvement des solutions (Moulin, 1990)

Du fait de l’importance du potentiel matriciel dans la matrice crayeuse, il n’est pas possible de prélever des solutions à n’importe quel moment de l’année puisque la dépression maximale applicable aux bougies poreuses est de l’ordre de -800hPa. Hors des périodes de recharge de la nappe, le potentiel matriciel est très inférieur à cette valeur et l’eau ne peut pas entrer dans les bougies. Les périodes de prélèvements ne peuvent s’effectuer que durant la période de drainage, entre novembre et mars. Les bougies sont alors mises en dépression pendant 24 heures à -800hPa ; les solutions sont ensuite recueillies par injection d’un gaz neutre propulseur sous pression (argon ou azote) par un des deux tubes. Il est ainsi possible d’échantillonner jusqu’à environ un litre de solution.

A.3 Les transferts à travers la zone non saturée crayeuse

analyses chimiques

Les nitrates sont mesurés par colorimétrie en flux continu (analyseur automatique Skalar). Moulin (1990) montre que les incertitudes de mesures sont inférieures à 3%.

A.3 Les transferts à travers la zone non saturée crayeuse

Annexe B

Article publié dans le cadre de la thèse

Improvement of the solute transfer in a conceptual unsaturated zone scheme: a case study of the Seine River basin

Elodie Philippe,^{1*} Florence Habets,² Emmanuel Ledoux,¹ Patrick Goblet,¹ Pascal Viennot¹ and Bruno Mary³

¹ Mines Paristech, Geosciences Center, 35 rue St Honoré, 77305 Fontainebleau, France

² CNRS/UPMC UMR Sisyphé, Paris, France

³ INRA, Agronomical Unit, rue F. Christ, 02007 Laon Cedex, France

Abstract:

For predicting the evolution of solute concentrations in groundwater and testing the impact of remediation policies, a coupling between the agronomical model STICS and the hydrogeological model MODCOU was implemented. When applied to the Seine River basin, this model accurately represents the temporal evolution of average nitrate concentrations in the aquifer, but with large local errors.

We propose an improvement to the simple unsaturated zone (UZ) scheme NonsatSW used in STICS–MODCOU. The modifications are based on a comparison with the mechanistic model Metis considered as a reference as it solves Richards' equation. A more realistic saturation profile and a varying percolation rate are integrated in NonsatSW. This new model, named NonsatVG, is assessed by comparing it with NonsatSW and Metis. In an ideal case, NonsatVG generates a solute transfer and a dispersion closer to that of Metis than of NonsatSW. In real cases, without additional calibration, NonsatVG and Metis simulate better the average transfer velocities of the observed nitrate profiles.

Furthermore, modifications in NonsatVG give a direct relationship between the depth of the water table and the saturation profile. We obtain, therefore, as in Metis, an evolution of the solute transfer velocity depending on the piezometric level. These dynamics are not simulated in NonsatSW.

Despite a modified water transfer through the UZ, NonsatVG is also as valid as NonsatSW in the modelling of water transfer to the saturated zone.

Finally, an application to the Seine basin shows that solute transfer velocities are lower with NonsatVG than with NonsatSW, but are in better agreement with literature. Copyright © 2010 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS unsaturated zone; hydrogeological modelling; solute transfer; nitrate contamination

Received 19 December 2009; Accepted 28 July 2010

INTRODUCTION

Since mid-1950s, fertilizers and phytosanitary products have been extensively used for agricultural purposes. Such practices have led to increasing diffusion of pollutant in aquifers. The Water Framework Directive (#2000/60/EC) adopted by the European Commission requires all groundwater bodies to achieve a good status by 2015. This goal includes nitrate limit of 50 mg l⁻¹ set by the Nitrate Directive (91/676/EEC). However, this threshold has already been exceeded in many groundwater bodies in Europe, as noted by Rivett *et al.* (2008). To adopt efficient policies regarding agricultural practices and water quality, integrated water models are used to support the decision making (Refsgaard, 2002; Flipo *et al.*, 2007; Ledoux *et al.*, 2007; O'Shea and Wade, 2009; Sohier *et al.*, 2009).

In the STICS–MODCOU model (Gomez *et al.*, 2003; Ledoux *et al.*, 2007), the agronomical model STICS

(Brisson *et al.*, 1998) is used together with the hydrogeological model MODCOU in order to estimate the nitrate contamination in surface and groundwaters. The model was first set up over the Seine basin (78 650 km²) in northern France. This basin is characterized by an intensive agriculture, as it encompasses the urban area of Paris, a high density of population and a significant industry. Significant work has been done for the collection of agricultural data, e.g. crops rotation and agricultural practices (Mignolet *et al.*, 2007).

The STICS–MODCOU model is capable of representing the temporal evolution of the average nitrate concentration in the aquifer; however, some large local errors persist (Ledoux *et al.*, 2007). To improve this modelling, special attention is given to the representation of the unsaturated zone in the MODCOU model. The unsaturated zone (UZ) is responsible for the delay in nitrate reaching the water table. This delay can be rather long depending on the thickness of the UZ and its geological nature. Indeed, the transfer velocity of nitrate varies for example from 2.50 m year⁻¹ in eroded granite (Legout *et al.*, 2007) to a value as low as 0.60 m year⁻¹ in chalk

* Correspondence to: Elodie Philippe, Mines Paristech, Geosciences Center, 35 rue St Honoré, 77305 Fontainebleau, France.
E-mail: elodie.philippe@mines-paristech.fr

(Serhal *et al.*, 2006; Gutierrez and Baran, 2009). Therefore, to study the impact of nitrate control policies, a good estimation of the transfer through the UZ is required (O'Shea and Wade, 2009; Sohler *et al.*, 2009). The UZ is a polyphasic zone (water, air and solid) where phase change as well as physico-chemical exchange between the phases due to mechanical and thermal energy variations can occur (Vauclin, 1993). These modifications can influence the dynamics of solute in the UZ. However, the nitrate transfer phenomenology in the UZ can be simplified by assuming that most bio-physico-chemical reactions occur in the pedological area (Baran *et al.*, 2007). Thus, although some physically based models take into account the reactions through the entire hydrosystem, e.g. SHETRAN (Birkinshaw and Ewen, 2000), it is more often considered that no reaction occurs during the transfer of nitrate through the UZ as in MIKE SHE, SWAT and EPIC (Refsgaard and Storim, 1995; Neitsch *et al.*, 2005; Sohler *et al.*, 2009). We also assume a passive nitrate transfer through the UZ.

As MODCOU is generally applied to large-scale basins, it is not a completely physically based model. The flow in the UZ is modeled with a simple cascade reservoirs scheme (Besbès and De Marsily, 1984) based on the Nash cascade principle (Nash, 1960). This model was extended by Gomez *et al.* (2003) to allow the transfer of a passive contaminant. This simple model shares some specific features with recently developed UZ models. For instance, EPIC (Sohler *et al.*, 2009) also uses several reservoirs to reproduce the UZ, while Jackson *et al.* (2006) developed a model for chalk, which uses a piston-flow mechanism with a constant velocity for the transfer of water.

To evaluate this UZ module, a comparison with the physically based model Metis (Castro *et al.*, 2005; Goblet, 2007) was done on both ideal and real cases. Indeed, since Metis solves Richards' and convection–dispersion equations using a finite-element method, we assume that it is a reference for our UZ module in these comparison tests. However, the results show some discrepancies, leading to a modification in the conceptual model.

Both UZ models are presented in the section on *Description of UZ Model*. In the section on *Assessment of NonsatVG*, assessment test results of ideal and real cases are discussed. An application to the Seine basin is presented in the section on *Impact on the Estimation of the Solute Transfer Time in the Seine Basin*.

DESCRIPTION OF UZ MODEL

Two models are used in this study: the mechanistic model (Metis), based on the resolution of the Richards' and convection–dispersion equations, and the conceptual model (Nonsat).

Nonsat model

Nonsat is a conceptual model, simulating the vertical transfer through the UZ. The UZ is assimilated to a

series of reservoirs. The original version of Nonsat deals only with water transfer (NonsatW). This version was modified by Gomez *et al.* (2003) to include the transfer of conservative solute (NonsatSW, (Gomez *et al.*, 2003; Viennot *et al.*, 2006)). This model combines piston flow and some inter-layer mixings.

Modelling of water transfer with NonsatW. By studying the relationship between soil infiltration and groundwater supply at regional scale, Besbès and De Marsily, (1984) showed that the water transfer function in the UZ is comparable to a Nash reservoir cascade (Nash, 1960). The water transfer through the UZ is, therefore, assimilated to a series of N reservoirs of same thickness, flowing into each other. The drainage of each reservoir follows an exponential law. Figure 1 presents the Nash cascade principle. It shows the effect of the cascade on an impulse input. The continuity of flow between reservoirs i and $i + 1$ can be written as

$$Vin_{i+1(t)} = Vout_{i(t)} = Vol_{i(t)} \times \delta \quad (1)$$

where Vin_{i+1} is the inflow into reservoir $i + 1$ (m^3), $Vout_i$ the outflow of water from the reservoir i (m^3), Vol_i the volume of water in the reservoir i (m^3), δ a drainage coefficient, i the reservoir's index ranging from 1 to N and t the current time step (s). δ is related to the percolation time τ (s) by the relationship $\delta = 1 - \exp\left(-\frac{dt}{\tau}\right)$, where dt is the computation time step (86 400 s).

The water transfer is, therefore, based on the drainage of the water volume in the reservoirs, without any storage. Thus, it can be considered that NonsatW deals only with gravitational water.

NonsatW requires only two parameters: τ , which is set according to the soil type, and N . N is set depending on

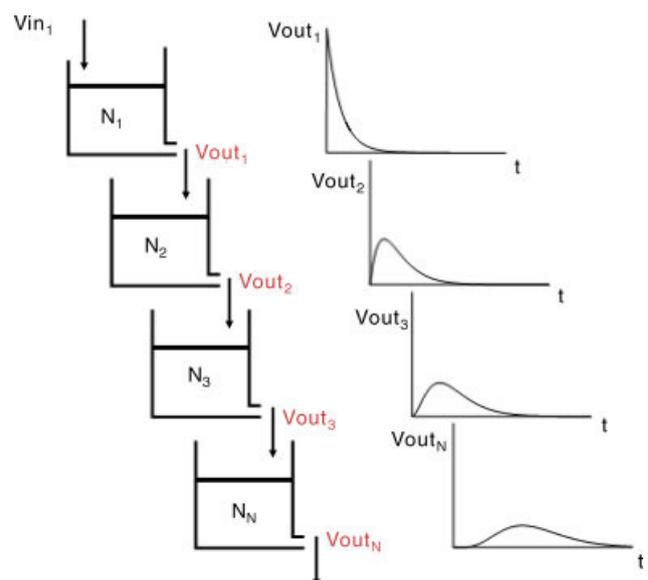


Figure 1. Representation of the Nash cascade. N is the reservoir, varying from N_1 to N_N , τ is the percolation time (s), Vin_1 is the infiltration at the surface of the UZ, and $Vout_i$, i varying from 1 to N , is the outflow from each reservoir N_i . The amplitude of the given infiltration is modified by the transfer through the cascade

the average thickness of the UZ and the given depth of the reservoir (Besbès and De Marsily, 1984). A deeper UZ is simulated by adding some more reservoirs; therefore, water will take a longer time to flow through the UZ. This can be compensated by a decrease of τ . Thus, an equivalent velocity transfer can be obtained with different sets of parameters, but with different flow.

Modelling of the water and passive solute transfer with NonsatSW. NonsatW was modified by Gomez et al. (2003) to manage the passive solute transfer.

Solute transfer needs to explicitly manage the volume of whole water in the UZ, that is not only the gravity water already taken into account in NonsatW but also the capillary water retained in small pores. Indeed, this immobile phase contributes to the storage of solute in the UZ. Therefore, Gomez et al. (2003) introduced a minimal volume V_{min} that represents the water retained in the UZ. V_{min} is set identical in all the reservoirs i of a UZ column.

To limit mixing within the whole reservoir, Gomez et al., (2003) also introduced a stratification (Figure 2). When infiltration occurs at a time step, a stratum j is introduced at the top of the UZ. Strata j in each reservoir i are defined by a given water volume and a given concentration depending on pedo-climatic and agricultural conditions at the current time step. These strata pile up in the reservoirs and there is no mixing. Then, a piston effect occurs: an inflow at the top of the reservoir leads instantaneously to an outflow at the bottom of the reservoir. During this discharge, a strata mixing can occur. Indeed, the concentration of this outflow is calculated as

$$C_{out_i(t)} = \frac{\sum_{i,j=1}^{i,j=nl} C_{i,j} V_{i,j}}{V_{out_i(t)}} \quad (2)$$

where C_{out_i} is the concentration of the outflow from the reservoir i (kg m^{-3}), V_{out_i} the volume of the outflow from the reservoir i (kg m^{-3}), $V_{i,j}$ the volume of the stratum j in the reservoir i (m^3), $C_{i,j}$ the concentration of the stratum j in the reservoir i (kg m^{-3}), nl the number of drained strata and t the current time step (s).

Water transfer through the UZ is described by the following equation:

$$V_{in_{i+1}(t)} = V_{out_i(t)} = (Vol_{i(t)} - V_{min(i)}) \times \delta \quad (3)$$

where $V_{min(i)}$ is the minimal volume of water in the reservoir i (m^3).

For numerical reasons, a maximal number of strata are set. When this maximum is reached, an additional mixing occurs: two strata near V_{min} are mixed together. In this way, strata mixed for numerical reasons are located around the top of the reservoir, while those mixed during the water transfer are located at the outflow of the reservoir. These mixings lead to diffusion. However, this diffusion is still limited.

Compared to NonsatW, NonsatSW has two additional parameters. The maximum number of strata S_{max} is set

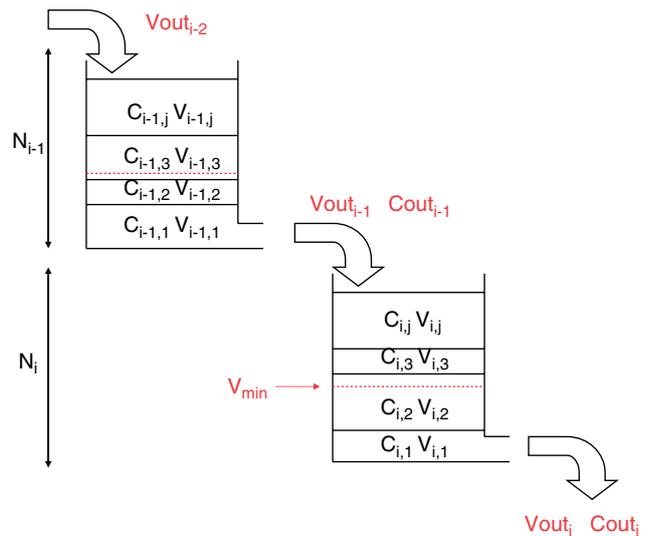


Figure 2. Representation of the passive solute transfer through the UZ in NonsatSW with two reservoirs N . V_{min} is the minimal water volume in each reservoir and $C_{i,j}$ and $V_{i,j}$ the concentration and the volume of each stratum j in each reservoir i . An infiltration at the surface of the UZ at the time step t generates an immediate water outflow with a volume V_{out_i} and a concentration C_{out_i} by piston effect

uniform in the whole domain. The value of the minimal volume V_{min} can vary in space depending on the type of soil. As initial conditions, the volume of water in each reservoir of the UZ is equal to the defined V_{min} . These two parameters do not affect the water transfer dynamics; they impact only the solute transfer. When the value of V_{min} is large, the solute takes a longer time for transfer since it has to flow through a larger amount of water. The value of the maximum number of strata affects only the diffusion; a small value leads to a larger diffusion of the solute.

Improvement of Nonsat

By comparing the literature on passive solute velocity, Gomez et al., (2003) only partially assessed the solute transfer simulated by NonsatSW. On the basis of comparisons with the physically based model and *in situ* data (cf the section on Assessment of Nonsat VG), a more detailed assessment presented in this study shows some important bias in the solute transfer. To improve the quality of the simulations, we propose two modifications: the introduction of a saturation profile and a varying percolation rate depending on the water content.

Introduction of a saturation profile. The UZ is subjected to an evolution of the water content, from its base almost saturated to its top that is drier when a steady-state is reached. Van Genuchten (1980) and Brooks and Corey (1966) determined the two main equations describing the water retention curve in the UZ. Figure 3 presents the evolution of the saturation profile as a function of depth in a loamy UZ as described by Van Genuchten (continuous line) for a given set of parameters listed in Table I. In NonsatSW, the steady-state saturation profile for this type of UZ is constant in each reservoir and is equal

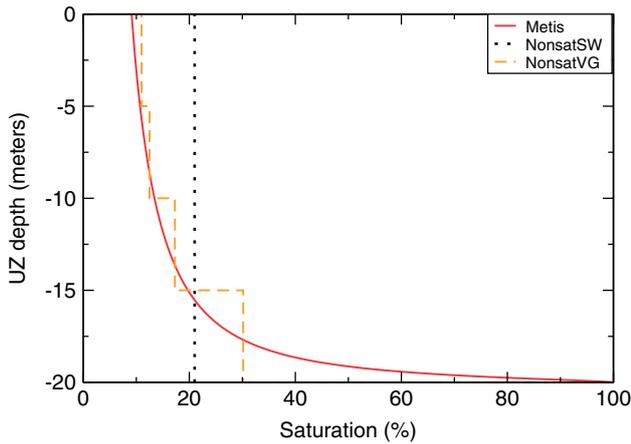


Figure 3. Evolution of the saturation with depth in Metis, NonsatVG and NonsatSW in a loamy UZ for a given set of parameters listed in Table I

to V_{min} through all the reservoirs (represented by dotted line in Figure 3). To improve the realism of the model, a saturation profile is integrated in NonsatSW based on the Van Genuchten, (1980) retention curve. This modified version is referred to as NonsatVG. This leads to a variation of the minimal volume V_{min} between each reservoir as presented in Figure 3 (dashed line) for a loamy soil. For each reservoir, V_{min} is computed as follows:

$$V_{min(i)} = \int_{bottom_i}^{top_i} \frac{1}{[1 + (\alpha \times \Phi)^n]^m} \times por \times S \times \Delta z \tag{4}$$

where n and α are the curve parameters, $m = 1 - \frac{1}{n}$, por the porosity ($m\ m^{-1}$), S the surface of the grid cell (m^2) and Φ the capillary pressure head (m). In this study, the discretization Δz used is 10^{-2} m.

As the volume of water in the UZ reservoirs increases with the increase in depth, the time transfer of the solute also increases, whereas the velocity transfer is constant in the former version of NonsatSW.

Evolution of the percolation rate. The percolation time τ is related to the time in seconds required to entirely drain a reservoir. A percolation velocity can, therefore, be approximated from this data. As τ is constant in

the UZ column, the percolation velocity is considered to be constant. This velocity is not modified by the introduction of a varying saturated profile (Equation 4). However, it should vary according to the saturation. To take this process into consideration in NonsatVG, we use a generalization of Darcy’s law for the saturated zone by assuming that the water transfer is proportional to the saturation. To take this relationship into account, a coefficient of percolation $coef$ is integrated in the model. $coef$ is equal to the saturation fraction of the reservoir:

$$coef = \frac{Vol_{i(t)}}{por \times S \times d} \tag{5}$$

$$Vin_{i+1}(t) = Vout_{i(t)} = (Vol_{i(t)} - V_{mini}) \times \delta \times coef \tag{6}$$

where d is the thickness of the reservoir (m).

Indeed, as the saturation fraction increases in the deeper UZ, the outflow of the reservoir also increases.

Therefore, NonsatVG has three additional parameters compared to NonsatSW: two Van Genuchten’s parameters α and n and the porosity. The use of the porosity implies that NonsatVG now takes into account a maximal volume. Indeed, when the volume of water in a reservoir i fills the porosity volume completely, the excess water is directly added to the $Vout_i$ (Figure 2) and is supplied to the reservoir $i + 1$.

The use of three additional parameters may be a problem for regional-scale modelling. Indeed, n and $alpha$ as well as porosity data are insufficient for deep UZ, which are not easily accessible. Therefore, to specify these three new parameters in regional-scale applications, the Carsel and Parrish, (1988) database is used. For each soil type, it gives Van Genuchten’s parameters and the porosity (Table II). The use of this soil database for the characterization of the UZ is based on the fact that soils and UZ are defined from the parent material. Therefore, different textural soil types individualize different UZ types. However, the chalk UZ type is an exception. This UZ is characterized by a double porosity of matrix and fractures, with a solute transfer occurring mainly in the matrix (Normand *et al.*, 2004; Lacherez-Bastin, 2005).

Table I. Set of parameters used in NonsatSW, NonsatVG and Metis for the ideal case

Loam UZ			Chalky UZ		
NonsatSW	NonsatVG	Metis	NonsatSW	NonsatVG	Metis
$N = 4$	$N = 4$	$nqu = 2000$	$N = 4$	$N = 4$	$nqu = 2000$
$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 8.15 \times 10^{-3}$	$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 9.00 \times 10^{-7}$
thick = 20					
$V_{min} = 0.07$	por = 0.33	por = 0.33	$V_{min} = 0.08$	por = 8.50×10^{-2}	por = 8.50×10^{-2}
	$n = 1.56$	$n = 1.56$		$n = 1.10$	$n = 1.10$
	$\alpha = 3.60$	$\alpha = 3.60$		$\alpha = 0.10$	$\alpha = 0.10$
		Dispersivity = 1			Dispersivity = 1

N is the number of reservoirs, thick is the thickness of the UZ (m) that is to say the product $N \times d$ with d the reservoir’s thickness (5 m in this study), nqu is the number of nodes, V_{min} is the minimal water volume in each reservoir ($m\ m^{-1}$), por is the porosity ($m\ m^{-1}$), n (–) and α (m^{-1}) are Van Genuchten’s parameters, dispersivity is the solute dispersion ($10^{-2}m$) and K_s is the saturation permeability ($m\ s^{-1}$). K_s in NonsatSW and NonsatVG is determined from the percolation time τ (s) and the reservoir’s thickness d by considering a unit gradient: $K_s = \frac{d}{\tau}$.

Van Genuchten's parameters defined by Brouyère *et al.* (2004) for the chalk matrix are, therefore, used for the characterization of the chalk UZ in our study (Table II).

The physically based model Metis

Metis is a mechanistic model that can be compared to Hydrus-2D (Simunek *et al.*, 1999). Metis is a finite-element code solving the water and solute transfer equations in the saturated/unsaturated zones (Larsson, 1992; Goblet, 2007) at each node of a discretized mesh. Therefore, it describes very precisely the processes occurring in the UZ and, thus, allows a water and solute model more realistic than a conceptual model. This model has been applied in various studies: the estimation of infiltration velocity in soils (Goblet, 2008), simulations of heat and helium transfer in groundwater (Castro *et al.*, 2005) and calculation of groundwater ages (Castro and Goblet, 2005).

Metis uses Van Genuchten's relationships to describe the hydrodynamic properties of the UZ. The water retention curve is given by

$$S_e = \frac{1}{[1 + (\alpha\Phi)^n]^m} \quad (7)$$

where S_e is the effective saturation ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), n and α the curve parameters, $m = 1 - \frac{1}{n}$ and Φ the capillary pressure head (m).

The hydraulic conductivity curve is described by

$$K_r = \sqrt{S_e} \left[1 - \left(1 - S_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (8)$$

where K_r is the relative permeability.

$$S_e = \frac{S - S_r}{S_m - S_r} \quad (9)$$

S_e is related to the saturation of the medium S ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$), the maximal saturation S_m ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$) and the minimal saturation S_r ($\text{m}^3 \text{m}^{-3}$). S_r is the portion of water in the porosity that cannot be displaced by a pressure gradient. S_m is the maximal portion of water in the porosity that can be retained by the medium during the saturation. In this study, S_m is fixed to 1 and S_r to 0. S is therefore equal to S_e .

ASSESSMENT OF NONSATVG

To assess the new version of the simple UZ scheme, two types of comparisons were carried out. First, a comparison with the physically based model Metis was done in an ideal case, with various UZ depths in two UZ types. Then, two types of real cases were studied and the modelling was compared to observed data. To assess in NonsatVG the sole impact of the introduction of a saturation profile and a varying percolation rate, the value of the percolation time τ was the same as that in NonsatSW.

Ideal case study

The test consisted in comparing the dynamics of the transfer simulated by Metis, the former and the new version of Nonsat over a UZ column of 20 m depth with constant infiltration flux and an initial impulse flux of solute. In both Nonsat versions, the thickness of the reservoirs was set to 5 m (Gomez *et al.*, 2003; Ledoux *et al.*, 2007). In Metis, the column was discretized into 2000 square elements of 10^{-2} m depth.

NonsatSW, NonsatVG and Metis do not use the same physical variables (saturation in % for Metis and volume in m^3 for Nonsat), neither the same kind of parameters, nor the same spatial geometry. Therefore, to compare these models, the following strategy was used:

- As NonsatSW was already applied over the Seine basin, a set of parameters is available for the seven predominant soil types of the basin (Gomez *et al.*, 2003). Thus, the results of NonsatSW were used as a reference. The methodology consisted in calibrating Metis to have similar solute time transfers as NonsatSW at the outflow of the 20-m column. Default parameters in Metis were obtained from the existing database. Then, the calibration was carried out by modifying the saturated hydraulic conductivity and the porosity.
- The Van Genuchten's parameters and the porosity used by NonsatVG were set identical to those of Metis.
- The comparison of the solute time transfer was done at each depth corresponding to the output of each Nonsat reservoir (5, 10, 15 and 20 m).

The test was done with a constant infiltration (1 mm day^{-1}) and an input of passive contaminant during the first three days. For each UZ type defined by Gomez *et al.* (2003) in the Seine basin, the parameters required in Metis were determined from Carsel and Parrish (1988) and Brouyère *et al.* (2004) databases (Table II). To avoid generating puddles that cannot be managed by Metis, the value of K_s was fitted to be compatible with the imposed infiltration.

For the calibration, the first strategy was to have a similar water volume in the soil column and thus to adjust the porosity in Metis. Then, when the solute transfer simulated by Metis was too fast compared to the solute transfer in NonsatSW, K_s decreased or por increased. Reverse modifications were performed when solute transfer velocity in Metis was too slow compared to that of NonsatSW. This calibration process was performed until a good agreement with the solute transfer at the outflow in NonsatSW was reached.

The first test was performed in a loamy UZ column (parameters listed in Table I). Figure 4 presents the time evolution of the solute transfer simulated by NonsatSW, Metis and NonsatVG at the four depths of a loamy UZ. For a given UZ model, the first peak corresponds to the transfer of the solute at 5 m, the second at 10 m, etc. By construction, the average time period needed by the solute to flow through the entire column is comparable

Table II. Average values for selected soil water retention and hydraulic conductivity parameters for 12 major soil textural groups according to Carsel and Parrish, (1988) and for chalk matrix according to Brouyère *et al.*, (2004)

Texture	θ_r	θ_s	α	n	K_s	
<i>Carsel and Parrish</i>						
Sand	0.045	0.430	14.500	2.680	8.250×10^{-5}	
Loamy sand	0.057	0.410	12.400	2.280	4.050×10^{-5}	
Sandy loam	0.065	0.410	7.500	1.890	1.220×10^{-5}	Urban crystalline
Loam	0.078	0.430	3.600	1.560	2.890×10^{-6}	Loam
Silt	0.034	0.460	1.600	1.370	6.940×10^{-7}	Alluvium
Silt loam	0.067	0.450	2.000	1.410	1.250×10^{-6}	
Sandy clay loam	0.100	0.390	5.900	1.480	3.640×10^{-6}	Sand
Clay loam	0.000	0.410	1.900	1.310	7.220×10^{-7}	
Silty clay loam	0.089	0.430	1.000	1.230	1.940×10^{-7}	
Sandy clay	0.100	0.380	2.700	1.230	3.330×10^{-7}	
Silty clay	0.070	0.360	0.500	1.090	5.550×10^{-8}	
Clay	0.068	0.380	0.800	1.090	5.550×10^{-7}	Clay
<i>Brouyère</i>						
Matrix chalk	—	0.410	0.100	1.100	1.300×10^{-8}	Chalk

θ_r and θ_s are the minimal and the maximal saturation of the medium ($m\ m^{-1}$), α (m^{-1}) and n (—) are Van Genuchten's parameters and K_s is the saturation permeability ($m\ s^{-1}$). The corresponding soil type defined by Gomez *et al.* (2003) on the Seine basin is listed in the last column.

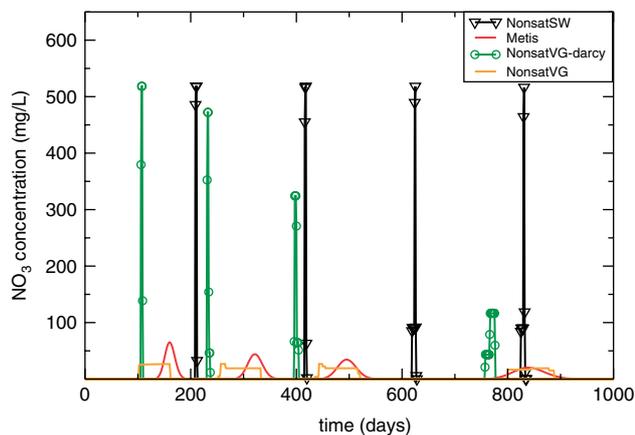


Figure 4. Transfer of passive solute in an ideal case at four depths (5, 10, 15 and 20 m) through a loamy UZ column in Metis, NonsatSW and NonsatVG, with only Van Genuchten's saturation profile (NonsatVG–Darcy) and NonsatVG

to that of in NonsatSW and Metis. When considering the results at 5, 10, 15 and 20 m depth, the velocity of the solute transfer in Metis decreases with depth, while it is constant in NonsatSW. In addition, the mixing increases in Metis, leading to a diminution of the peak and an increase in the duration of the transfer with depth, while NonsatSW presents almost no mixing. Solute transfer simulated by NonsatVG is close to results obtained by Metis. The sole introduction of the saturation profile in Nonsat ('NonsatVG–darcy' in Figure 4) leads to a decrease in the solute transfer velocity with depth and an increase in the mixing. However, the mixing is not as large as in Metis and the solute reaches the 20-m depth earlier than that in Metis. By using the same τ in NonsatVG as in NonsatSW, but in addition considering an evolutive percolation coefficient in the column, the results obtained for NonsatVG are more similar to those of Metis.

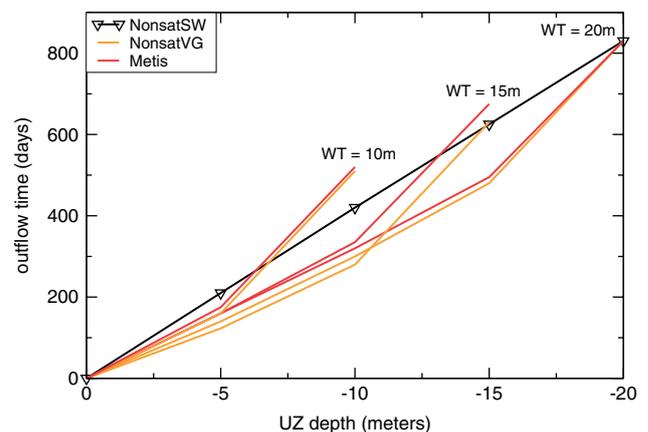


Figure 5. Time required for a passive solute to reach four depths (5, 10, 15 and 20 m) in a loamy UZ for three different water table depths WT (m) in NonsatSW, NonsatVG and Metis

To assess the robustness of the model, different depths of the UZ were tested. As the saturation profile varies according to the depth of the water table, the variation of the UZ depth should impact the solute transfer. The tests were done by assuming the same parameters as those calibrated for a 20-m deep UZ. For a loam UZ type, the results are presented in Figure 5 and Table III. Compared to NonsatSW, the time required by the solute in NonsatVG to reach a 5 m depth is longer for a shallower UZ. This is consistent with the Metis simulation. This is due to the fact that there is more amount of water in the first 5 m of the UZ when the water table is closer to the surface. Thus, the solute has to flow through a greater volume of water to go beyond the first 5 m and the transfer velocity decreases. Such dynamics are not represented by NonsatSW, which has a constant velocity, but is well captured by NonsatVG.

The same type of tests was also performed on a chalk column. The results presented in Table III lead

Table III. Average passive solute velocity transfer (m year^{-1}) obtained with NonsatSW, NonsatVG and Metis to reach a given depth D (m) considering a given water table depth WT (m) for the ideal case

WT	D	Loam UZ			Chalk UZ		
		NonsatSW	NonsatVG	Metis	NonsatSW	NonsatVG	Metis
20	5	8.70	11.40	13.00	7.60	7.90	7.90
	10	8.70	11.40	12.20	7.60	7.80	7.90
	15	8.70	11.06	11.40	7.60	7.70	7.90
	20	8.70	8.80	8.80	7.60	7.70	7.80
15	5	8.70	11.40	14.80	7.60	7.80	7.90
	10	8.70	10.90	13.00	7.60	7.70	7.80
	15	8.70	8.10	8.70	7.60	7.60	7.60
10	5	8.70	11.10	11.40	7.60	7.60	7.70
	10	8.70	7.00	7.20	7.60	6.50	7.60

to the same conclusion: the modifications introduced in NonsatVG lead to results comparable with those of the physical model Metis, with a decrease in the solute transfer at a given depth when the water table is shallower. However, for this UZ case, variations of solute transfer velocity are low. Indeed, Van Genuchten's parameters used for a chalky UZ generate a saturation greater than 90% through the column. The variations of the saturation profile with a piezometric level are, therefore, small.

Calibrated parameters obtained with this methodology for these comparison tests differ significantly from those of the Carsel and Parrish (1988) and Brouyère *et al.* (2004) database. After calibration, the defined K_s for loam is three orders of magnitude larger than the one from Carsel and Parrish (1988) (8.15×10^{-3} and $2.89 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1}$, respectively). For chalk, the porosity has decreased to an unrealistic value ($\text{por} = 8.50 \times 10^{-2} \text{ m m}^{-1}$) when compared to the *in situ* observed water content (Normand *et al.*, 2004; Amraoui *et al.*, 2008). Such parameters are unrealistic, which probably means that the solute transfer simulated by NonsatSW with the parameters defined over the Seine basin is biased. The following section confirms this assumption by using *in situ* data.

Assessment of NonsatVG with observed data

To more accurately assess the new model, water and solute transfer dynamics obtained with NonsatVG were compared with *in situ* data. Two types of data were used: some piezometric levels in the Seine basin and the monitoring of the nitrate concentration profile in two sites in Northern France located in the Seine basin.

Comparison with the observed piezometric head. The sole introduction of a saturation profile in NonsatVG does not modify the water table fluctuation simulated by MODCOU with NonsatSW (Equation 3). However, the introduction of a relationship between the percolation ratio and the saturation ratio modifies the dynamics of the flow. The general trend is a lower water transfer velocity through the UZ (Equation 6) that modifies the dynamics of the simulated piezometric levels.

To evaluate the impact of such a modification on the water transfer, a comparison between the observed and the simulated piezometric head was made over the Seine basin. The simulations were performed using the same model MODCOU (Ledoux *et al.*, 2007) to estimate the surface water budget and, thus, the infiltration in the UZ and the water transfer in the aquifer. Thus, the differences in the simulation of the piezometric head were only due to the differences in the simulation of the water table recharge. Figure 6 shows the comparison of the evolution of the piezometric level observed and simulated by MODCOU with NonsatSW and NonsatVG at the Mainvilliers well ($48^\circ 27' 12''$ North, $1^\circ 27' 43''$ East) between 1981 and 2004. It can be seen that the fluctuations of the piezometric head are dampened in NonsatVG compared to NonsatSW. However, it is not clear whether this dampening leads to an improvement or a degradation of the simulation of the observed piezometric head. Similar results are obtained for other piezometric wells of the Seine basin. Figure 7 presents the statistical data (bias and root mean square error) obtained by NonsatSW and NonsatVG for 32 wells. It appears that the two statistical results are very similar for both models. This result means that this modification does not make NonsatVG more valid than NonsatSW for the simulation of piezometric fluctuations.

Local comparison of the solute transfer. The Agro-Impact group from INRA (Institut National de Recherche Agronomique—National Institute in Agronomical Research) at Laon (North France) monitors nitrate transfer through two chalky UZ at Haussimont ($48^\circ 45' 0''$ North– $4^\circ 10' 0''$ East) and Thibie ($48^\circ 55' 49''$ North– $4^\circ 12' 59''$ East) in the Champagne–Ardenne region (Normand *et al.*, 2004).

At Haussimont, nitrate concentration profiles from 1 to 20 m depth are available for a period from 1982 to 2004. At Thibie, nitrate concentration profiles from 0.13 to 6 m depth were monitored for a period from 1990 to 2008. For both sites, the propagation of a nitrate peak through time can be observed. This type of a long-term experiment is not very common and provides very useful data to both understand the transfer of nitrate through the

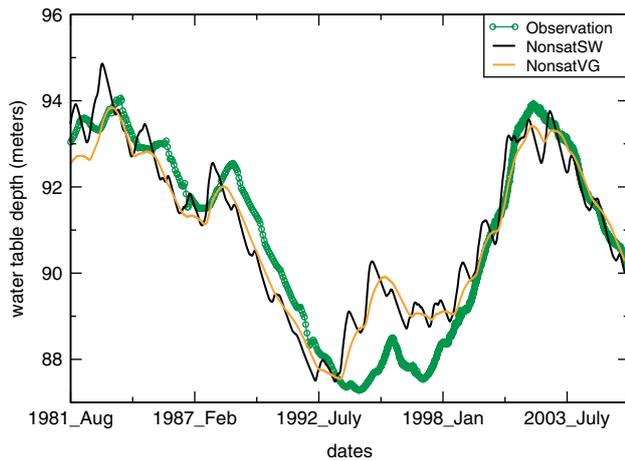


Figure 6. Comparison of the piezometric head observed at the Mainvilliers well and simulated by NonsatSW and NonsatVG (from 1981 to 2004)

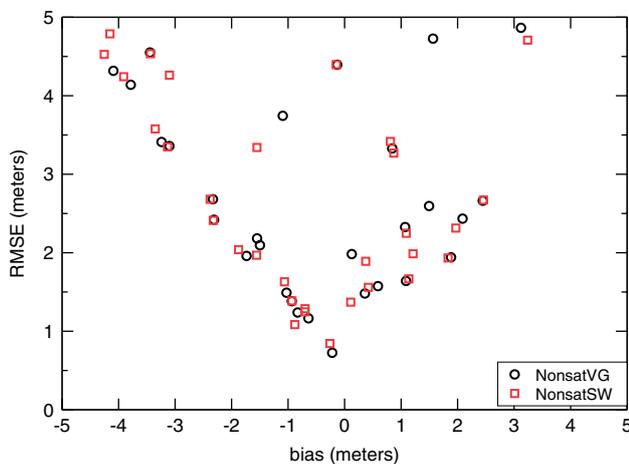


Figure 7. RMSE and bias in the modelling of water table fluctuation by NonsatSW and NonsatVG on 32 wells over the Seine basin (from 1981 to 2004)

UZ and assess its modelling. We used, therefore, this data set to test the three UZ schemes.

All required data to perform the simulation of the experimental sites are not available. For instance, the time evolution of the infiltrations and their nitrate concentrations are unknown. Therefore, to simulate these real cases, some approximations were made. The first nitrate concentration profile (1982 for Haussimont and 1990 for Thibie) was imposed as an initial condition and no additional nitrate input was assumed. And while the site experienced annual rotations of winter wheat, sugar beet, lucerne and winter barley, we considered only a generic crop type. Thus, it did not take the use of real land into account. The water percolation flux was subsequently determined with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007) that was already applied over the Seine basin. Daily precipitation and potential evaporation data for both sites were provided by the SAFRAN analysis of Météo-France (Quintana Segui *et al.*, 2008). A constant depth of the water table was assumed and was set equal to 25 m at Haussimont and

15 m at Thibie according to neighbouring piezometric wells. An initial profile along the nodes in Metis and the strata in NonsatSW and NonsatVG was extrapolated from the observed data (triangles in Figures 8 and 9).

Three simulations were performed: the first one was done with NonsatSW with the parameter calibrated by Gomez *et al.* (2003) for a chalk UZ. The two other ones were done with Metis and NonsatVG. Required parameters values for the three models are presented in Table IV. As these simulation tests had to be performed in the most similar conditions to those prevailing on the experimental sites, the defined parameters for each models had to be realistic. Thus, contrary to tests in the ideal case, no additional calibration was considered. Indeed, Van Genuchten's parameters and porosity in Metis and NonsatVG were determined from Brouyère *et al.* (2004). To avoid generating puddles in the physically based model, K_s in Metis was set to $9.00 \times 10^{-7} \text{ m s}^{-1}$. In NonsatVG, the value of τ defined by Gomez *et al.* (2003) was used. In Metis, the dispersivity was set according to the simulation of the LIXIM model (dispersivity = $1.25 \times 10^{-1} \text{ m}$, (Mary *et al.*, 1999)).

Haussimont site: From 1982 to 1999, total amount of nitrate in the UZ at Haussimont increases due to successive supplies from agricultural activities. Then from March 2001, a significant decrease in the total amount of nitrate in the UZ is observed. At the same time, the nitrate peak is not in evidence anymore (triangles in Figures 8). Therefore, we considered that the main peak was transferred through the UZ. Thus, the comparison between the observed and simulated profiles focussed only on the evolution of the nitrate peak observed in 1982 through 18 years. The nitrate peak was 5 m deep in May 1982, 7 m deep in March 1986 and 14 m deep in March 2000. The average transfer velocity (ATV) of this peak in this UZ is, therefore, 0.50 m year^{-1} , which is comparable to the results of other studies (Serhal *et al.*, 2006).

The results of the comparison are presented in Figure 8. Metis simulates an evolution of the concentration profiles that is close to the observed one. The depth of the peak for each given date and the diffusion are, however, slightly underestimated ($AVT = 0.40 \text{ m year}^{-1}$). NonsatSW is not able to reproduce the observed profiles: the modeled solute peak is transferred too quickly (almost 10 m in only 4 years, $AVT = 2.50 \text{ m year}^{-1}$). Compared to NonsatSW, the profiles simulated by NonsatVG are improved, with a longer solute time transfer. However, the transfer velocity is very slow, since the peak reaches only 13 m, instead of the observed 14 m, in 18 years ($AVT = 0.44 \text{ m year}^{-1}$). During all simulations, the peak simulated by Metis is shallower than the observed one. It is not the case in NonsatVG. In April 1991, the solute peak simulated by NonsatVG has an average depth close to the observed ones. However from March 1997, the peak simulated by NonsatVG remains shallower than the observed one. Then, it seems that the solute transfer simulated in NonsatVG is faster at the top

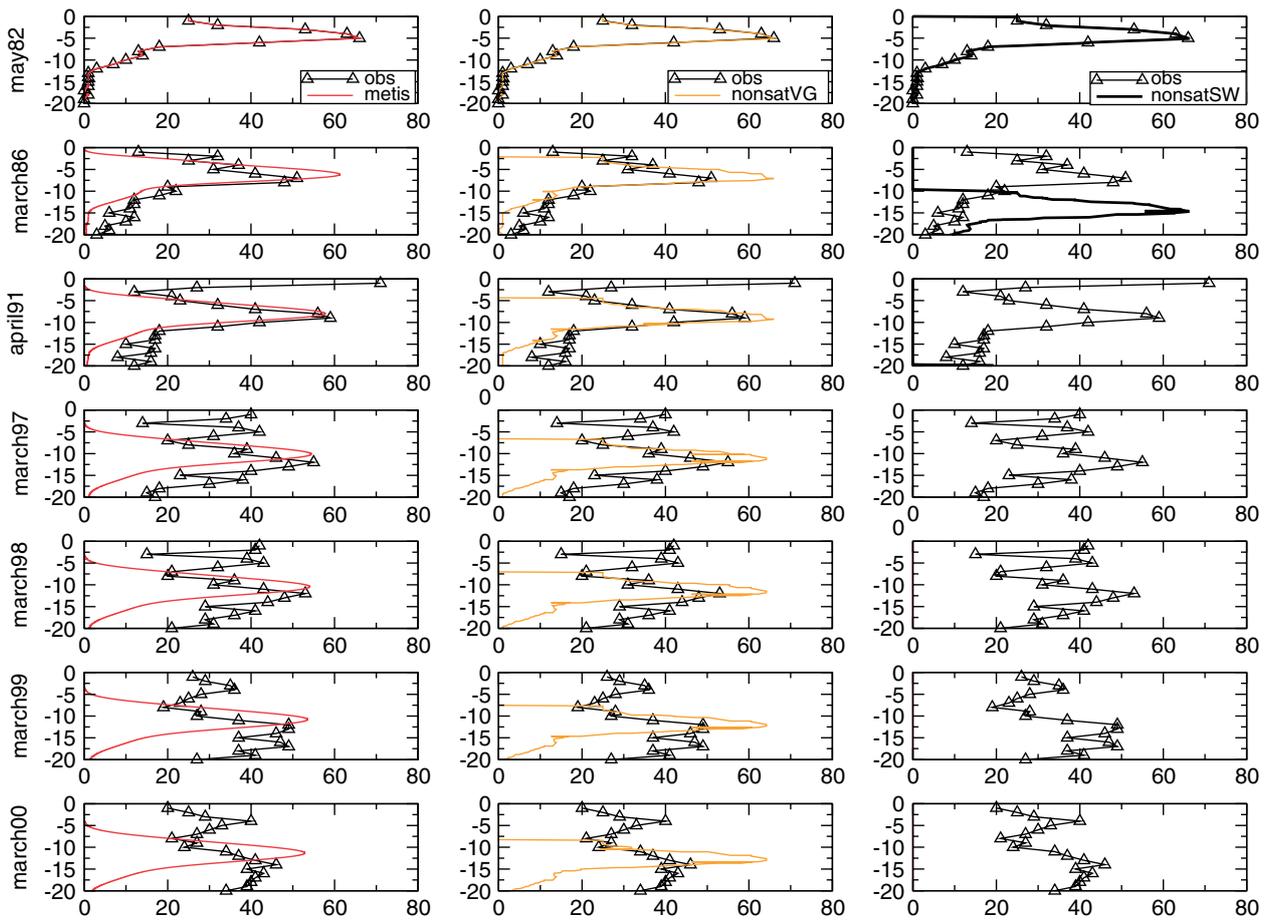


Figure 8. Nitrate concentration profile (x axis) in mg l^{-1} observed at Haussimont from 1982 to 2000 in a 25-m deep UZ (y axis) and simulated by Metis (left), NonsatVG (centre) and NonsatSW (right). The modelling is performed by considering the nitrate profile observed in May 1982 as initial conditions, with no additional solute input during the simulation. The water percolation flux is determined with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007)

of the UZ and slows down to the aquifer. These dynamics could also be seen in the ideal case (Figure 4). It is also noted that the dispersion simulated by NonsatVG does not compare well to the observed one. At Haussimont, the peak intensity decreases by 30% in 18 years. In Metis, this peak decreases by more than 20%, whereas in NonsatVG, the peak is almost identical at the beginning and at the end of the simulation.

Thibie site: The main peak observed in the first available profile in October 1990 is almost totally transferred through the UZ in October 2008. Thus, the comparison between the observed and simulated profiles focussed on the evolution of the nitrate peak from 1990 to 2003. The nitrate peak was 1.65 m deep in October 1990, 1.88 m in October 1993, 4.13 m in October 1999 and 5.88 m in October 2003. The ATV of this peak is, therefore, 0.32 m year^{-1} . The results of the comparison are presented in Figure 9. Contrary to Haussimont, the depths of the peaks are overestimated in NonsatVG and Metis. The AVT is 0.38 and 0.47 m year^{-1} for the new version of Nonsat and the physically based model, respectively. The closest simulated evolution of the concentration profiles is, therefore, performed by NonsatVG. However, it simulates almost no dispersivity. In Metis, the nitrate

peak intensity decreases by 35% through the simulated period, which is in good agreement with the observed peak (decrease by 40%).

None of the three models is able to accurately reproduce the observed profiles. A part of this inaccuracy is due to the physics of the models. However, it can also be due to the errors in the estimation of the infiltration or in the estimation of the parameters. It is assumed that with an improved physics, realistic parameters as those derived from available databases should lead to realistic results. Thus, several additional tests were performed by varying the infiltration and the parameters.

A first set of tests was done with an annual average infiltration value set according to the simulation of the LIXIM model (Mary *et al.*, 1999). The infiltration flux is 25% larger for Haussimont and 33% lower for Thibie. Instead of using parameters defined for the chalk, we used Van Genuchten's parameters from the Carsel and Parrish, (1988) database for the closest soil type, i.e., clay (Table II) in a second set of tests. For NonsatSW, several tests were done by increasing the minimal water volume V_{\min} to obtain closer realistic values or by increasing the percolation time τ (which is equivalent to decrease the hydraulic conductivity).

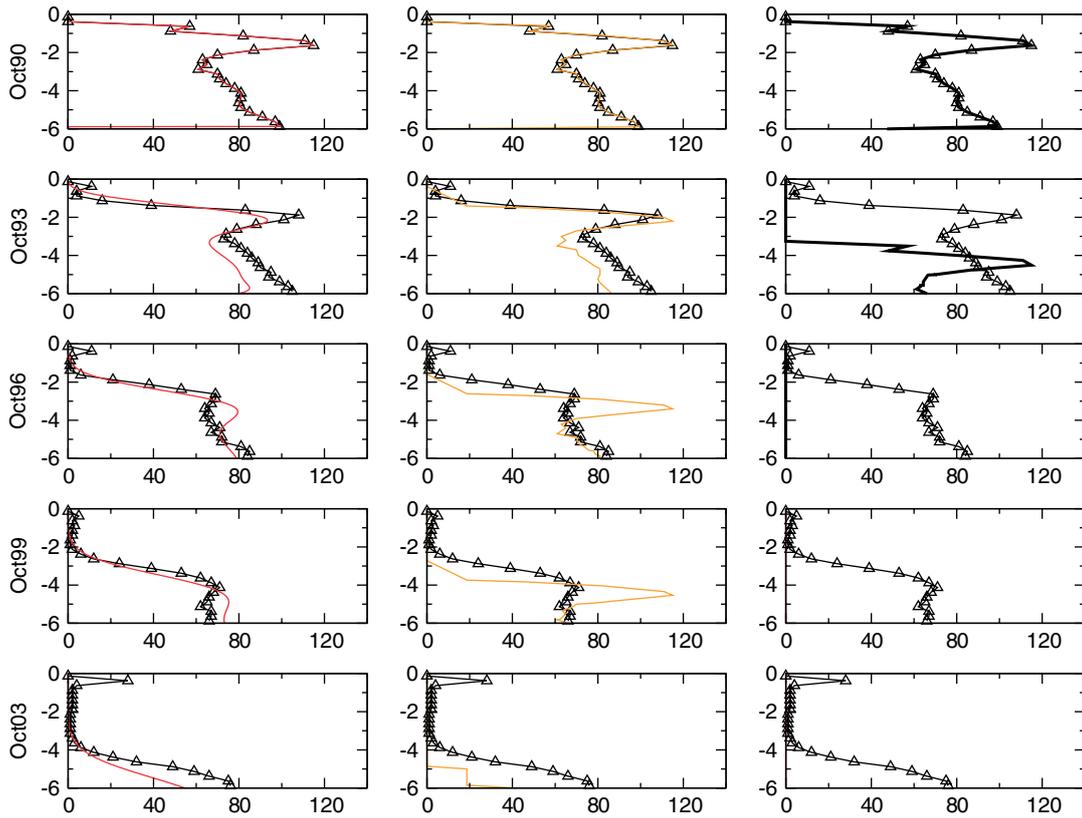


Figure 9. Nitrate concentration profile (x axis) in mg l^{-1} observed at Thibie from 1990 to 2003 in a 15-m deep UZ (y axis) and simulated by Metis (left), NonsatVG (centre) and NonsatSW (right). The modelling is performed by considering the nitrate profile observed in October 1990 as initial conditions, with no additional solute input during the simulation. The water percolation flux is determined with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007)

Table IV. Set of parameters used in NonsatSW, NonsatVG and Metis for comparison with observed data

NonsatSW	NonsatVG	Metis
$N = 5$	$N = 5$	$nqu = 5000$
thick = 25	thick = 25	thick = 25
$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 1.15 \times 10^{-5}$	$K_s = 9.00 \times 10^{-7}$
$V_{min} = 0.08$	por = 0.41	por = 0.41
	$n = 1.10$	$n = 1.10$
	$\alpha = 0.10$	$\alpha = 0.10$
		Dispersivity = 12.50

N is the number of reservoirs, thick is the thickness of the UZ (m) that is to say the product $N \times d$ with d the reservoir's thickness (5 m in this study), nqu is the number of nodes, τ is the percolation time (m s^{-1}), V_{min} is the minimal water volume in each reservoir (m m^{-1}), por is the porosity (m m^{-1}), n (-) and α (m^{-1}) are Van Genuchten's parameters, dispersivity is the solute dispersion (10^{-2}m) and K_s is the saturation permeability (m s^{-1}). K_s in NonsatSW and NonsatVG is determined from the percolation time τ (s) and the reservoir's thickness d by considering a unit gradient: $K_s = \frac{d}{\tau}$.

For each test, an error was computed as follows:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (D\text{peak}_i^{\text{obs}} - D\text{peak}_i^{\text{simu}})^2} \quad (10)$$

where n is the number of compared profiles, and $D\text{peak}_i^{\text{obs}}$ and $D\text{peak}_i^{\text{simu}}$ the depth of the observed and the simulated nitrate peaks, respectively, at the profile i . Figure 10

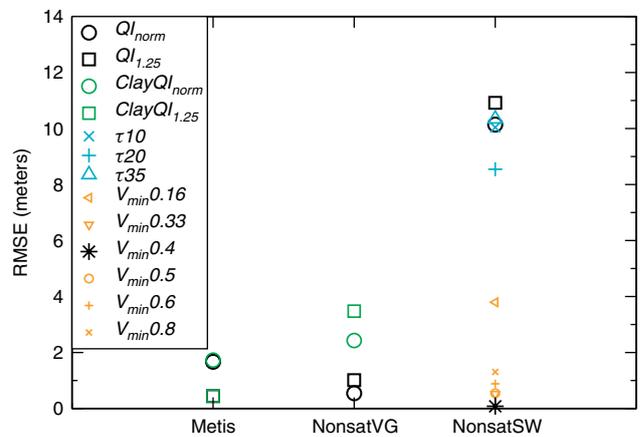


Figure 10. RMSE of the nitrate peak depth simulated by NonsatVG, NonsatSW and Metis (from 1982 to 2000) at Haussimont. The results are obtained with the parameters defined in Table IV. QI_{norm} are obtained with infiltration determined from the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007). $QI_{1.25}$ are obtained with a 25% larger infiltration flux. Clay are performed with clay class parameters (Table IV) with MODCOU infiltration (Clay QI_{norm}) and a 25% larger infiltration (Clay $QI_{1.25}$). With MODCOU infiltration, points $V_{min,x}$ are obtained with a minimal water volume value in each reservoir equal to x (m m^{-1}) and points τ_x are obtained with a $\tau = x$ days

presents the mean values of this root mean square error (RMSE) for the three models at Haussimont. For each model, a set of parameters allows to obtain good results (RMSE close to zero). Metis obtains almost similar

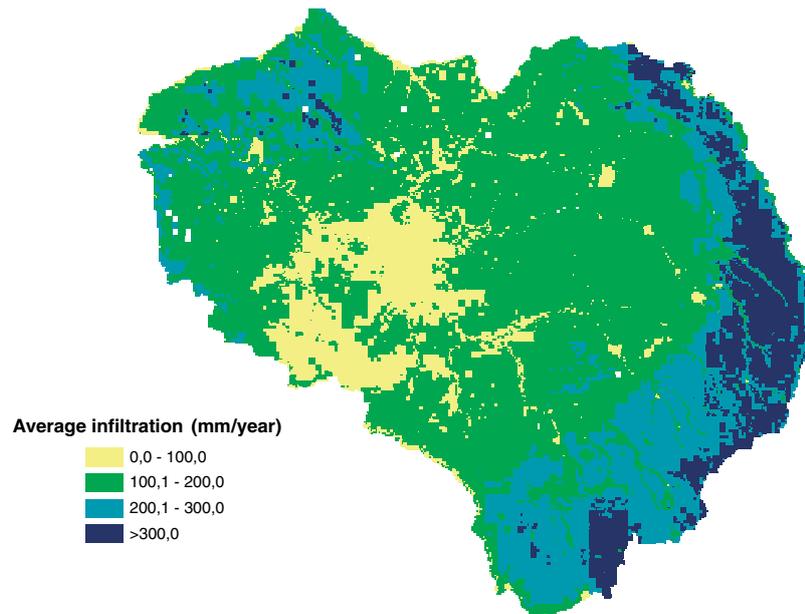


Figure 11. Average annual infiltration estimated from 1971 to 2006 over the Seine basin with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007)

RMSE with chalk and clay parameters. RMSE is, however, better with the LIXIM infiltration (RMSE = 0.40) than with the infiltration from MODCOU (RMSE = 0.90). Similar results are also observed at Thibie site for Metis. The parameters from NonsatSW have to be adjusted for both sites (V_{\min} multiplied by a factor of 5). With the default parameters, the RMSE is large (around 10 m). As the parameters from NonsatSW do not rely on classical physical parameters, they can not be set according to the available databases. With NonsatVG, chalk parameters allow to obtain better RMSE than clay parameters (RMSE around 1 and 4 m, respectively) for both sites. The minimum values of RMSE in NonsatVG are obtained with the infiltration from MODCOU at Haus-simont. On the contrary at Thibie, the solute transfer is improved with the LIXIM infiltration.

From these results, it is clear that without any additional calibration, the new version of Nonsat is in better agreement with the physically based model and the observed data. A good agreement between the former version of Nonsat and the observed data is obtained only after an appropriate calibration of the V_{\min} . We also demonstrate that application of NonsatVG is simple as the use of existing databases is conclusive. Furthermore, the NonsatVG model is still more time efficient than the physically based model.

IMPACT ON THE ESTIMATION OF THE SOLUTE TRANSFER TIME IN THE SEINE BASIN

The comparisons with local observations show that NonsatVG seems to simulate the solute transfer better than NonsatSW. It is interesting to see how these differences have an impact on the nitrate transfer to the aquifers of the Seine basin. Therefore, a 35-year simulation was

done, with a passive solute input imposed at the beginning of the simulation, and the real atmospheric forcing imposed from 1971 to 2006. The estimation of the infiltration in the UZ was computed by MODCOU (Ledoux *et al.*, 2007). The Seine basin is characterized by a weak infiltration at the centre of the basin (less than 100 mm year⁻¹) where the aquifers lie (Figure 11).

Figure 12 presents the nitrate transfer velocity for the cells located on chalky, clay and sandy soil types as a function of the accumulated annual infiltration simulated both by NonsatVG and NonsatSW. As expected, the velocity increases with the accumulated infiltration and can vary by a factor of 3. On average, it seems that the solute velocity for chalk, sand and clay is around 2 m year⁻¹ for NonsatSW. In NonsatVG, the solute velocity is around 1 m year⁻¹ in chalky and clay UZ and around 3 m year⁻¹ in sand. The solute time transfer in a sandy column with NonsatVG seems to be more scattered than in the chalk for a given average infiltration rate. This is due to the fact that the water volume in a sandy UZ varies according to the unsaturated depth. In chalk, such a variation is attenuated because the column is almost saturated along the whole column. The velocity value obtained with NonsatVG in the chalky UZ is closer than NonsatSW to the observed data for similar soil types: 0.80–0.90 m year⁻¹ (Jackson *et al.*, 2006) and 0.60–1.25 m year⁻¹ (Serhal *et al.*, 2006). It is also the case for the clay UZ type with 0.27–0.42 m year⁻¹ (Johnson *et al.*, 1989). Concerning the sandy UZ, the solute transfer velocity obtained with NonsatVG also seems to be in better agreement than NonsatSW with the literature (2 m year⁻¹, (Legout *et al.*, 2007)).

Figure 13 shows the distribution of the nitrate time transfer in the basin as simulated by NonsatSW and NonsatVG. There is a shift between the two simulations: in NonsatVG, a significant part of the UZ in the Seine basin

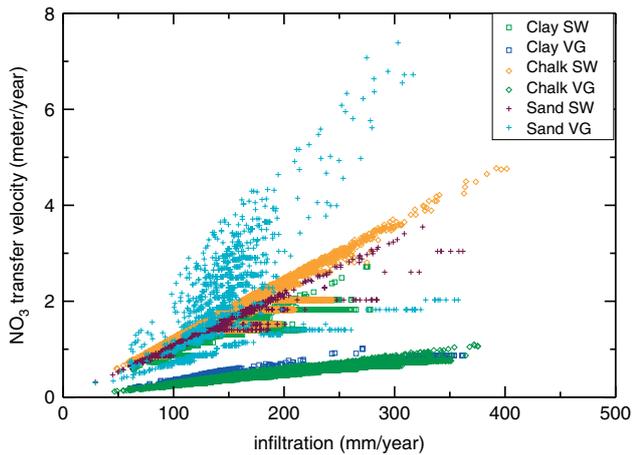


Figure 12. Comparison of the nitrate transfer velocity simulated by NonsatSW (SW) and NonsatVG (VG) for each cell located on chalk, clay and sandy soil types in the Seine basin, as a function of the average annual infiltration

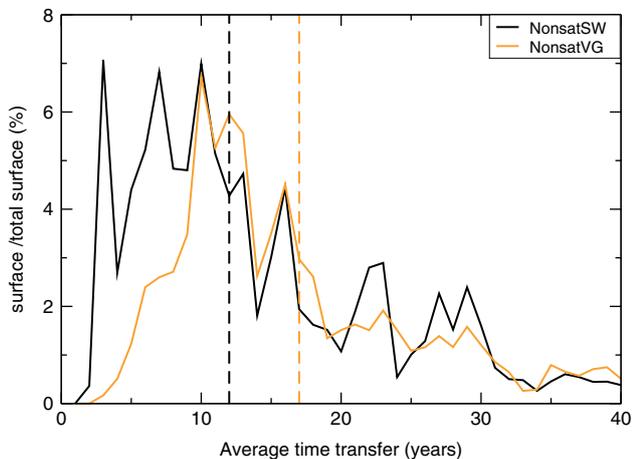


Figure 13. Surface repartition of the Seine basin depending on the average time required in years for an outflow of nitrate from the UZ to the saturated zone. The infiltration is determined with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007) from August 1971 to August 2006 and a nitrate input occurs from the 181th to the 196th day of the simulation. At the dashed line, 50% of the UZ in the Seine basin have transferred nitrate to the saturated zone

transfers the pollutant in about 10–15 years, whereas in NonsatSW, the most important transfer of pollutant to the saturated zone occurs before 10 years of simulation. In NonsatVG, the solute takes 17 years to reach the water table over 50% of the basin, while it takes only 12 years in NonsatSW.

Figure 14 presents the map of the nitrate time transfer in the Seine basin. It easily reaches 30 years and even more than 50 years where the aquifer is deep. This solute time transfer seems to be longer than the one obtained by Sohier *et al.* (2009) in a chalk basin in Belgium, where most of the solute reached the water table in 15 years. This might be due to a thicker UZ in the Seine basin.

CONCLUSION

An improvement to the simple scheme that simulates the transfers of solute and water in the UZ using a

cascade of reservoirs is proposed. Two modifications are made: (1) introduction of a saturation profile with depth, according to Van Genuchten's equations and (2) evolution of the drainage velocity of the reservoirs according to their saturation.

To assess such modifications, comparisons with the physically based model Metis are presented in both ideal and real cases. These comparisons show that the original version of the simple model NonsatSW is not able to properly represent the evolution of the solute transfer for different water table depths. The new version, NonsatVG, can reproduce these dynamics in a better way. Indeed, the results obtained with this new version compare fairly well with results of Metis. However, the definite advantage of NonsatVG compared to Metis is that the relevant code is more computationally efficient. This aspect makes NonsatVG easily applicable at regional scale as needed when modelling a full hydrological basin.

One critical aspect is the determination of three additional parameters. To define them at regional scale, we use the Carsel and Parrish, (1988) database that relates these parameters to 12 FAO soil types. An exception is made for the chalky UZ type. Indeed, this medium is characterized by a double porosity of matrix and fractures with a dominant matricial water transfer (Brouyère *et al.*, 2004; Normand *et al.*, 2004). The matrix is almost saturated and generates a water transfer through the UZ by a piston effect (Headworth HG, 1972). To take into account these particular unsaturated dynamics, Van Genuchten's parameters defined by Brouyère *et al.* (2004) for the UZ chalk matrix are, therefore, used. The sensitivity tests presented in this study show the relevance of using such parameters for this type of UZ.

As tests related to ideal and real cases demonstrate that NonsatVG obtains a better solute transfer through the UZ than NonsatSW, a comparison test was performed on the whole Seine basin from 1971 to 2006. The results show that, without significant modifications of the water table fluctuations, NonsatVG significantly modifies nitrate transfer dynamics at the Seine basin scale. The solute transfer through the UZ is globally slower with NonsatVG than with NonsatSW and is in better agreement with literature and *in situ* data.

Brouyère *et al.*, (2004) and Legout *et al.*, (2007) showed that the fluctuations of the piezometric level also significantly modify the contamination dynamics in the groundwater. Indeed, when it increases, the solute in the UZ is washed and when it drops, the contamination from the UZ to the saturated zone decreases. To improve the dynamics of the solute transfer at the interface unsaturated–saturated zones, the fluctuations of the water table should, therefore, be taken into account. The modifications provided in NonsatVG give a direct relationship between the depth of the water table and the saturation profile in the UZ. Therefore, we can explicitly take into account the water table fluctuations in the UZ. Details are presented by Philippe *et al.* (2009) and the work is underway to simulate this phenomenon on the Seine basin. As it will have a direct impact on the

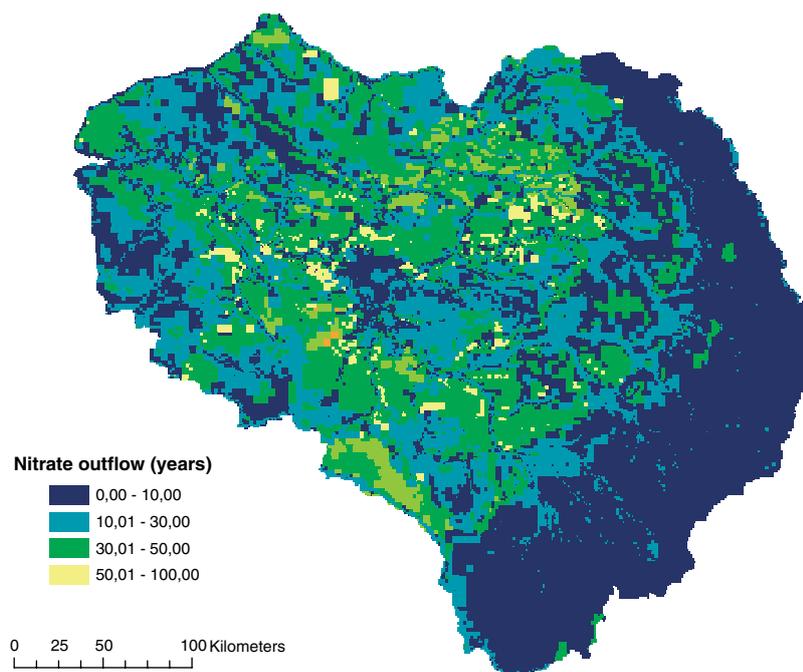


Figure 14. Average time required in years for a nitrate transfer through the UZ in the Seine basin with NonsatVG. The infiltration is determined with the water balance module of the MODCOU model (Ledoux *et al.*, 2007) from August 1971 to August 2006 and a nitrate input occurs from the 181th to the 196th day of the simulation

groundwater nitrate concentration modelling, we expect to improve the simulation quality of STICS–MODCOU in the Seine basin by reducing the large local errors that exist in the simulation of the groundwater contamination (Ledoux *et al.*, 2007).

ACKNOWLEDGEMENTS

This project is included in the programme INSU EC2CO Eau'dyssée. The authors thank R2DS Ile-de-France for financial support and the PIREN-Seine research programme. They also thank Mr Jean-Pol Prévost and Mr Pascal Foy, who collected the long-term data in Haussimont and Thibie sites.

REFERENCES

- Amraoui N, Machard de Gramont H, Robelin C, Wuilleumier A, Noyer ML, Feret MJ. 2008. Flow processes in the unsaturated Chalk of the Hallue Basin (France). In *Unsaturated Soils: Advances in Geo-Engineering*, Toll DG, Augarde CE, Gallipoli D, Wheeler SJ (eds). Published by Taylor & Francis Group: London, UK 959–965.
- Baran N, Richert J, Mouvet C. 2007. Field data and modelling of water and nitrate movement through deep unsaturated loess. *Journal of Hydrology* **345**: 27–37.
- Besbès M, De Marsily G. 1984. From infiltration to recharge: use of parametric transfer function. *Journal of Hydrology* **74**: 271–293.
- Birkinshaw SJ, Ewen J. 2000. Nitrogen transformation component for SHETRAN catchment nitrate transport modelling. *Journal of Hydrology* **230**: 1–17.
- Brisson N, Mary B, Ripoche D, Jeuffroy MH, Ruget F, Nicoulaud B, Gate P, Devienne-Barret F, Antonioletti R, Durr C, Richard G, Beaudoin N, Recous S, Tayot X, Plenet D, Cellier P, Machel JM, Meynard JM, Delecolle R. 1998. STICS: a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. I. Theory and parameterization applied to wheat and corn. *Agronomie* **18**: 311–346.
- Brooks RH, Corey AT. 1966. Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal of the Irrigation and Drainage Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers* **92**: 61–88.
- Brouyère S, Dassargues A, Hallet V. 2004. Migration of contaminants through the unsaturated zone overlying the Hesbaye chalky aquifer in Belgium: a field investigation. *Journal of Contaminant Hydrology* **72**: 135–164.
- Carsel RF, Parrish RS. 1988. Developing joint probability distributions of soil water retention characteristics. *Water Resources Research* **24**: 755–769.
- Castro MC, Goblet P. 2005. Calculation of ground water ages - a comparative analysis. *Ground Water* **43**: 368–380.
- Castro MC, Patriarche D, Goblet P. 2005. 2-D numerical simulations of groundwater flow, heat transfer and He transport - implications for the He terrestrial budget and the mantle helium-heat imbalance. *Earth and Planetary Science Letters* **237**: 893–910.
- Filipo N, Even S, Poulin M, Théry S, Ledoux E. 2007. Modeling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Science of the Total Environment* **375**: 69–79.
- Goblet P. 2007. Spécifications pour la simulation de l'écoulement en zone non saturée. Rapport final. IRSN/DSU/SSIAD.
- Goblet P. 2008. Estimation des vitesses de filtration de l'eau dans les sols de CNPE - identification de régime-types d'écoulement. Rapport technique No R080318PGOB, Centre de Geosciences, Ecole des Mines de Paris: Fontainebleau, France.
- Gomez E, Ledoux E, Viennot P, Mignolet C, Benoit M, Bornerand C, Schott C, Mary B, Billen G, Ducharme A, Brunstein D. 2003. Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique: application au bassin de la Seine. *La Houille Blanche* **3**: 38–45.
- Gutierrez A, Baran N. 2009. Long-term transfer of diffuse pollution at catchment scale: Respective roles of soil, and the unsaturated and saturated zones (Brévilles, France). *Journal of Hydrology* **369**: 381–391.
- Headworth HG. 1972. The analysis of natural groundwater level fluctuations in the chalk of Hampshire. *Journal of the Institute of Water Engineering* **26**: 107–124.
- Jackson BM, Wheeler H, Mathias SA, McIntyre N, Butler AP. 2006. A simple model of variable residence time flow and nutrient transport in the chalk. *Journal of Hydrology* **330**: 221–234.
- Johnson RL, Cherry JA, Pankow JF. 1989. Diffusive contaminant transport in natural clay: a field example and implications for clay-lined waste disposal sites. *Environmental Science and Technology* **23**: 340–349.
- Lacherez-Bastin S. 2005. Contribution à l'étude de la migration des nitrates dans le sol et la zone non saturée de la nappe de la Craie dans le Nord de la France. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique Universitaire de Lille.

- Larsson A. 1992. The international projects INTRACOIN, HYDROCOIN and INTRAVAL. *Advances in Water Resources* **15**: 85–87. n°1 (8 ref).
- Ledoux E, Gomez E, Monget JM, Viavattene C, Viennot P, Benoit M, Mignolet C, Schott C, Mary B. 2007. Agriculture and groundwater nitrate contamination in the Seine Basin. The STICS-MODCOU modelling chain. *Science of the Total Environment* **375**: 33–47.
- Legout C, Molenat J, Aquilina L, Gascuel-Oudou C, Fauchoux M, Fauvel Y, Bariac T. 2007. Solute transfer in the unsaturated zone-groundwater continuum of a headwater catchment. *Journal of Hydrology* **332**: 427–441.
- Mary B, Beaudoin N, Justes E, Machet JM. 1999. Calculation of nitrogen mineralization and leaching in fallow soil using a simple dynamic model. *European Journal of Soil Science* **50**: 549–566.
- Mignolet C, Schott C, Benoit M. 2007. Spatial dynamics of farming practices in the Seine basin: methods for agronomic approaches on a regional scale. *Science for the Total Environment* **375**: 13–32.
- Nash JE. 1960. A unit hydrograph study, with particular reference to British catchments. *Proceedings—Institution of Civil Engineers* **17**: 249–282.
- Neitsch SL, Arnold JG, Kiniry JR, Williams JR. 2005. Soil and water assessment tool theoretical documentation.
- Normand B, Mary B, Czernichowski I, Beaudoin N, Mouvet C, Bazerque MF, Groell F. 2004. Programme expérimental de suivi de la qualité de l'eau sur trois bassins versants de Picardie faisant l'objet de mesures agri-environnementales. Rapport de synthèse.
- O'Shea L, Wade A. 2009. Controlling nitrate pollution: an integrated approach. *Land Use Policy* **26**: 199–808.
- Philippe E, Habets F, Ledoux E, Goblet P, Viennot P. 2009. Improvement of nitrate transfer modelling in a drainage basin: consideration of water table fluctuations in the unsaturated zone. Proceedings of the 16th Nitrogen Workshop. Turin.
- Quintana Segui P, Le Moigne P, Durand Y, Martin E, Habets F, Baillon M, Canellas C, Franchisteguy L, Morel S. 2008. Analysis of near surface atmospheric variables: validation of the SAFRAN analysis over France. *Journal of Applied Meteorology and Climatology* **47**: 92–107.
- Refsgaard JC. 2002. Harmonising quality assurance in model based catchment and river basin management. State-of-the-art report on quality assurance in modelling related to river basin management. Contract EVK2-CT2001-00097. HarmoniQua project.
- Refsgaard JC, Storim B. 1995. *MIKE SHE. Computer Models of Watershed Hydrology*. Water Resources Publication; 809–846.
- Rivett OM, Buss SR, Morgan P, Smith JWN, Bemment CD. 2008. Nitrate attenuation in groundwater: a review of biogeochemical controlling processes. *Water Research* **42**: 4215–4232.
- Serhal H, Bastin-Lacherez S, Bernard D, El Khattabi J. 2006. Etude de la migration des nitrates dans la nappe à travers la zone non saturée: enjeux et impact sur la qualité de l'eau exploitée. Darcy 67. Colloque International - Gestion des Grands Aquifères - 30 mai-1er juin 2006. Dijon, France.
- Simunek J, Sejna M, Van Genuchten MTh. 1999. The Hydrus-2D software package for simulating two-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media. Version 2.0. IGWMC-TPS-53. International Ground Water Modeling Center, Colorado School of Mines: Golden, Colorado; 251 pp.
- Sohier C, Degré A, Dautrebande S. 2009. From root zone modelling to regional forecasting of nitrate concentration in recharge flows - the case of the Walloon Region (Belgium). *Journal of Hydrology* **369**: 350–359.
- Van Genuchten MTh. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of American Journal* **44**: 892–898.
- Vauclin M. 1993. Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. *Revue des Sciences de l'Eau* **7**: 81–102.
- Viennot P, Ledoux E, Monget JM, Schott C. 2006. Contamination nitrique des aquifères du bassin de la Seine. Document de synthèse PIREN Seine, 2006.

Bibliographie

- ABABOU, R. et AL-BITAR, A. (2008). *Overexploitation and Contamination of Shared Groundwater Resources*, chapitre Coupled Surface/Subsurface Flow Systems : Numerical Modeling, pages 105 – 117. Springer Science+Business Media B.V. [96](#)
- ABABOU, R. et TREGAROT, G. (2002). Coupled modeling of partially saturated flow : macro-porous media, interfaces, variability. *In Proc. XIVth Internat. Conf. CMWR.* [96](#)
- AESN (2007). Document d'accompagnement n°1.1 du projet de SDAGE version 7 Bassin Seine et cours d'eau côtiers Normands. Rapport technique, AESN. [xii](#), [21](#)
- AGRESTE (2009). L' utilisation du territoire en 2008. *In Chiffres et Données. Série Agriculture n°208.* [26](#), [153](#), [155](#)
- ALMASRI, M. N. et KALUARACHCHI, J. J. (2004). Assessment and management of long-term nitrate pollution of ground water in agriculture-dominated watersheds. *Journal of Hydrology*, 295(1-4):225 – 245. [xi](#), [xii](#), [8](#), [20](#), [21](#), [27](#), [29](#), [30](#), [38](#)
- AMINOT, A., GUILLAUD, J.-F., ANDRIEUX-LOYER, F., KÉROUEL, R. et CANN, P. (1998). Apports de nutriments et développement phytoplanctonique en baie de Seine. *Oceanologica Acta*, 21:923–935. [12](#)
- BARAN, N., RICHERT, J. et MOUVET, C. (2007). Field data and modelling of water and nitrate movement through deep unsaturated loess. *Journal of Hydrology*, 345(1-2):27–37. [25](#), [26](#), [28](#), [75](#)
- BARRACLOUGH, D., GARDNER, C. M. K., WELLINGS, S. R. et COOPER, J. D. (1994). A tracer investigation into the importance of fissure flow in the unsaturated zone of the British Upper Chalk. *Journal of Hydrology*, 156(1-4):459–469. [28](#)

- BEASLEY, D. B., HUGGINS, L. F. et MONKE, E. J. (1980). ANSWERS : A model for watershed planning. *Trans. of the ASAE*, 23(4):938 – 944. [37](#)
- BEESON, S. et COOK, M. C. (2004). Nitrate in groundwater : a water company perspective. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 37(4):261–270. [xi](#), [8](#), [9](#), [29](#)
- BELIN, C. et RAFFIN, B. (1998). Les espèces phytoplanctoniques toxiques et nuisibles sur le littoral français de 1984 à 1995, résultats du REPHY (réseau de surveillance du phytoplancton et des phycotoxines). *IFREMER*. [13](#)
- BERNHARDT, E. S., BAND, L. E., WALSH, C. J. et BERKE, P. E. (2008). Understanding, Managing, and Minimizing Urban Impacts on Surface Water Nitrogen Loading. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1134(1):61–96. [xii](#), [16](#), [17](#)
- BESBES, M. et MARSILY, G. (1984). From infiltration to recharge : use of parametric transfer function. *Journal of Hydrology*, 74:271 – 293. [52](#), [53](#), [118](#)
- BILLEN, G., GARNIER, J., FICHT, A. et CUN, C. (2001). Modeling the response of water quality in the Seine River estuary to human activity in its watershed over the last 50 years. *Estuaries and Coasts*, 24:977–993. 10.2307/1353011. [xi](#), [10](#), [11](#), [24](#), [157](#)
- BILLEN, G., GARNIER, J. et HANSET, P. (1994). Modelling phytoplankton development in whole drainage networks : the RIVERSTRAHLER model applied to the Seine river system. *Hydrobiologia*, 289:119 – 137. [35](#)
- BILLEN, G., GARNIER, J., MOUCHEL, J.-M. et SILVESTRE, M. (2007). The Seine system : Introduction to a multidisciplinary approach of the functioning of a regional river system. *Science of The Total Environment*, 375(1-3):1 – 12. Human activity and material fluxes in a regional river basin : the Seine River watershed - Seine Special Issue. [54](#)
- BILLEN, G., SILVESTRE, M., BARLES, S., MOUCHEL, J.-M., GARNIER, J., CURIE, F. et BOËT, P. (2009). Le bassin de la Seine : découvrir les fonctions et les services rendus par le système Seine. *In Les Fascicules du PIREN Seine*. PIREN Seine - Agence de l' Eau. [17](#)
- BINLEY, A., CASSIANI, G., MIDDLETON, R. et WINSHIP, P. (2002). Vadose zone flow model parameterisation using cross-borehole radar and resistivity imaging. *Journal of Hydrology*, 267(3-4):147–159. [28](#)

- BIRKINSHAW, S. J. et EWEN, J. (2000). Nitrogen transformation component for SHETRAN catchment nitrate transport modelling. *Journal of Hydrology*, 230(1-2):1 – 17. [34](#)
- BOYER, J., DAILEY, S., GIBSON, P., ROGERS, M. et MIR-GONZALEZ, D. (2006). The role of dissolved organic matter bioavailability in promoting phytoplankton blooms in Florida Bay. *Hydrobiologia*, 569:71–85. [10.1007/s10750-006-0123-2](#). [12](#)
- BRISSON, N., GARY, C., JUSTES, E., ROCHE, R., MARY, B., RIPOCHE, D., ZIMMER, D., SIERRA, J., BERTUZZI, P., BURGER, P., BUSSIÈRE, F., CABIDOCHÉ, Y. M., CELLIER, P., DEBAEKE, P., GAUDILLÈRE, J. P., HÉNAULT, C., MARAUX, F., SEGUIN, B. et SINOQUET, H. (2003). An overview of the crop model. *European Journal of Agronomy*, 18(3-4):309 – 332. Modelling Cropping Systems : Science, Software and Applications. [35](#), [51](#)
- BRISSON, N., MARY, B., RIPOCHE, D., JEUFFROY, M., RUGET, F., NICOUILLAUD, B., GATE, P., DEVIENNE-BARRET, F., ANTONIOLETTI, R., DURR, C., RICHARD, G., BEAUDOIN, N., RECOUS, S., TAYOT, X., PLENET, D., CELLIER, P., MACHET, J., MEYNARD, J. et DELECOLLE, R. (1998). STICS : a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. I. Theory and parameterization applied to wheat and corn. *Agronomie*, 18:311 – 346. [33](#)
- BROOKS, R. et COREY, A. (1966). Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal of the Irrigation and Drainage Division, Proceedings of the American Society of Civil Engineers*, 92:61 – 88. [77](#), [79](#), [127](#)
- BROUYÈRE, S. (2006). Modelling the migration of contaminants through variably saturated dual-porosity, dual-permeability chalk. *Journal of Contaminant Hydrology*, 82(3-4):195 – 219. [xxi](#), [xxii](#), [83](#), [84](#), [89](#), [102](#), [120](#), [121](#), [122](#), [137](#)
- BROUYÈRE, S., DASSARGUES, A. et HALLET, V. (2004). Migration of contaminants through the unsaturated zone overlying the Hesbaye chalky aquifer in Belgium : a field investigation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 72(1-4):135–164. [xvii](#), [74](#), [86](#), [96](#), [142](#)
- CABON, F., GIRARD, G. et LEDOUX, E. (1991). Modelling of the nitrogen cycle in farm land areas. *Fertilizer Research*, 27:161 – 169. [37](#)
- CALVET, R. (2003). *Le sol : propriétés et fonctions, Volume 2*. Dunod. [32](#)

- CARSEL, R. F. et PARRISH, R. S. (1988). Developing Joint Probability Distributions of Soil Water Retention Characteristics. *Water Resour. Res.*, 24:-. [xiv](#), [xxi](#), [xxii](#), [89](#), [91](#), [92](#), [94](#), [102](#), [120](#), [121](#), [122](#), [142](#), [164](#)
- CASTRO, M. et GOBLET, P. (2005). Calculation of Ground Water Ages - A comparative Analysis. *Ground Water*, 43:368 – 380. [78](#)
- CASTRO, M., PATRIARCHE, D. et GOBLET, P. (2005). 2-D numerical simulations of groundwater flow, heat transfer and He transport - implications for the He terrestrial budget and the mantle helium-heat imbalance. *Earth and Planetary Science Letters*, 237:893 – 910. [78](#)
- CAZAL, A. et LACAZEDIEU, G. (1974). Etude des transferts verticaux dans la zone non saturée et de l'emmagasinement d'une nappe libre (dans le cas d'un pompage, dans les conditions naturelles). *Journal of Hydrology*, 21(1):33 – 59. [97](#)
- COSTA, J. L., MASSONE, H., MARTINEZ, D., SUERO, E. E., VIDAL, C. M. et BEDMAR, F. (2002). Nitrate contamination of a rural aquifer and accumulation in the unsaturated zone. *Agricultural Water Management*, 57:33–47. [11](#), [20](#), [27](#), [29](#)
- CROLL, B. et HAYES, C. (1988). Nitrate and water supplies in the United Kingdom. *Environmental Pollution*, 50(1-2):163 – 187. Toxic Substance in the Environment. [xi](#), [8](#), [9](#), [14](#), [27](#), [28](#), [29](#), [38](#)
- DAVID, C., MAIDMENT, D. R., NIU, G.-Y., YANG, Z.-L. et HABETS, F. (2009). River network routing in th Guadalupe and San Antonio River Basins. *Submitted at WRR 2009WR008688*. [67](#)
- DE MARSILY, G. et MEYBECK, M. (2003). La qualité de l'eau et l'assainissement en France (rapport) - D. Les pollutions diffuses d'origine agricole. Rapport technique, Sénat. [25](#)
- DEVER, L. (1985). *Approches chimiques et isotopiques des interactions fluides-matrice en zone non saturée carbonatée*. Thèse de doctorat, Université de Paris Sud, centre d'Orsay. [171](#), [173](#), [174](#)
- DIENG, B., LEDOUX, E. et MARSILY, G. D. (1990). Palaeohydrogeology of the Senegal sedimentary basin : A tentative explanation of the piezometric depressions. *Journal of Hydrology*, 118(1-4):357 – 371. [47](#)
- DONNELLY, T., GRACE, M. et HART, B. (1997). Algal blooms in the Darling-Barwon River, Australia. *Water, Air, & Soil Pollution*, 99:487–496. 10.1007/BF02406888. [13](#)

- DOUSSAN, C., TOMA, A., PARIS, B., POITEVIN, G., LEDOUX, E. et DETAY, M. (1994). Coupled use of thermal and hydraulic head data to characterize river - groundwater exchanges. *Journal of Hydrology*, 153:215 – 229. [25](#)
- DUCHARNE, A., THERY, S., VIENNOT, P., LEDOUX, E., GOMEZ, E. et DÉQUÉ (2003). Influence du changement climatique sur l'hydrologie du bassin de la Seine. *VertigO - La revue en sciences de l'environnement*, 4, n°3. [106](#)
- DURAND, R. (1979). *La pédogénèse en pays calcaire dans le Nord-Est de la France*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur de Strasbourg, Institut de Géologie. [x](#), [171](#), [172](#)
- EISWIRTH, M. et HÖTZL, H. (1999). *Groundwater in the urban environment*, chapitre The impact of leaking sewers on urban groundwater, pages 399–404. [17](#)
- EVEN, S. (2008). Notice d'utilisation du logiciel ProSe. Un logiciel de simulation de l'hydrodynamique, du transport et du fonctionnement biogéochimique d'un réseau hydrographique. Version 4.1. Rapport technique, Centre de Géosciences - Mines ParisTech. [35](#)
- EWEN, J., PARKIN, G. et ENDA O'CONNELL, P. (2000). SHETRAN : Distributed river Basin Flow and Transport Modeling System. *Journal of Hydrologic Engineering*, July:250 – 258. [34](#)
- FAN, Y., MIGUEZ-MACHO, G., WEAVER, C. P., WALKO, R. et ROBOCK, A. (2007). Incorporating water table dynamics in climate modeling : 1. Water table observations and equilibrium water table simulations. *Journal of Geophysical Research*, 112:doi : 10.1029/2006JD008111. [97](#)
- FLIPO, N., EVEN, S., POULIN, M., THERY, S. et LEDOUX, E. (2007). Modeling nitrate fluxes at the catchment scale using the integrated tool CAWAQS. *Science of The Total Environment*, 375:69 – 79. [38](#)
- FOSTER, S. S. D. (2000). The Ninth Ineson Lecture : Assessing and Controlling the Impacts of Agriculture on Groundwater—from Barley Barons to Beef Bans. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 33(4):263–280. [20](#), [27](#), [29](#), [38](#), [71](#), [73](#)
- FRETWELL, B. A., BURGESS, W. G., BARKER, J. A. et JEFFERIES, N. L. (2005). Redistribution of contaminants by a fluctuating water table in a micro-porous, double-porosity aquifer : Field observations and model simulations. *Journal of Contaminant Hydrology*, 78:27 – 52. [96](#), [97](#)

- GANDOLFI, C., FACCHI, A. et MAGGI, D. (2006). Comparison of 1D models of water flow in unsaturated soils. *Environmental Modelling & Software*, 21(12):1759 – 1764. [75](#)
- GENG, Q. (1991). Modélisation du transfert des nitrates dans un système hydrologique. *La Houille Blanche*, 1:23 – 36. [37](#)
- GERMON, J. C. et COUTON, Y. (1999). La dénitrification dans les sols. Régulation de son fonctionnement et application à la dépollution. *Le Courrier de l'Environnement de l'INRA*, 38. [30](#)
- GILLE, E. (1985). *Contribution à l'étude hydrologique des bassins de la Meuse et de la Moselle : problématique de l'utilisation d'un modèle couplé à discrétisation spatiale*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris. [54](#)
- GIRARD, G., MORIN, G. et CHARBONNEAU, R. (1972). Modèle précipitations-débits à discrétisation spatiale. *Cahier ORSTOM, série Hydrologie*, IX, n°4. [43](#), [50](#)
- GOBLET, P. (2007). Spécifications pour la simulation de l'écoulement en zone non saturée. Rapport final. Rapport technique, IRSN/DSU/SSIAD. [32](#), [71](#), [78](#), [119](#)
- GOBLET, P. (2008). Estimation des vitesses de filtration de l'eau dans les sols de CNPE - Identification de régime-types d'écoulement. Rapport technique No 080318PBGOB. Rapport technique, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Fontainebleau, France. [32](#), [78](#)
- GOLAZ-CAVAZZI, C. (1999). *Modélisation hydrologique à l'échelle régionale appliquée au bassin du Rhône*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris. [54](#)
- GOMEZ, E. (2002). *Modélisation intégrée du transfert de nitrate à l'échelle régionale dans un système hydrologique. Application au bassin de la Seine*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris. [xiii](#), [xvi](#), [xvii](#), [xxii](#), [43](#), [51](#), [54](#), [55](#), [56](#), [65](#), [110](#), [119](#), [121](#), [122](#), [123](#), [130](#), [137](#), [144](#)
- GOMEZ, E., LEDOUX, E., VIENNOT, P., MIGNOLET, C., BENOIT, M., BORNERAND, C., SCHOTT, C., MARY, B., BILLEN, G., DUCHARNE, A. et BRUNSTEIN, D. (2003). Un outil de modélisation intégrée du transfert des nitrates sur un système hydrologique : application au bassin de la Seine. *La Houille Blanche*, 3. [110](#)
- GUILLAUD, J. F. et BOURIEL, L. (2007). Relation concentration-débit et évolution temporelle du nitrate dans les 25 rivières de la région Bretagne (France). *Revue des Sciences de l'Eau*, 20(2):213 – 226. [xi](#), [10](#)

- HABETS, F. (1998). *Modélisation du cycle continental de l' eau à l'échelle régionale. Application aux bassins versants de l' Adour et du Rhône*. Thèse de doctorat, Université Paul Sabatier - Toulouse 3. [54](#), [65](#)
- HABETS, F., FLIPO, N., GOBLET, P., LEDOUX, E., MONTEIL, C., PHILIPPE, E., QUEYREL, W., SALEH, F., SOUHAR, O., STOULS, A., VIENNOT, P., DAVID, C. ans Bacchi, A., BLANCHOU, H., MOREAU-GUIGON, E., LAUNAY, M., RIPOCHE, D., MARY, B., JAYET, P. A., MARTIN, E., MOREL, T. et TOURNEBIZE, J. (2010). Le développement du modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée. Rapport technique, Programme PIREN-Seine. [xiii](#), [65](#), [66](#), [67](#)
- HARIA, A. H., HODNETT, M. G. et JOHNSON, A. C. (2003). Mechanisms of groundwater recharge and pesticide penetration to a chalk aquifer in southern England. *Journal of Hydrology*, 275(1-2):122–137. [74](#)
- HEADWORTH, H. (1972). The analysis of natural groundwater level fluctuations in the chalk of Hampshire. *Journal of the Institute of Water Engineering*, 26:107 – 124. [72](#)
- HONISCH, M., HELLMEIER, C. et WEISS, K. (2002). Response of surface and subsurface water quality to land use changes. *Geoderma*, 105(3-4):277 – 298. [29](#)
- HOYOS, A., VIENNOT, P., LEDOUX, E., MATRAY, J., ROCHEZ, M. et CERTES, C. (2010). Thermo-haline Hydrogeological Modeling of the Paris Basin. *submitted to Journal of Hydrology*. [47](#)
- HYDRIAD (2000). Agriflux 2.0 : Logiciel d'évaluation des risques de contamination des eaux superficielles et souterraines reliés à l'épandage au champ d'engrais et de pesticides, Manuel d'utilisation. Rapport technique. [27](#), [33](#), [38](#)
- IGBINOSA, E. et OKOH, A. (2009). Impact of discharge wastewater effluents on the physico-chemical qualities of a receiving watershed in a typical rural community. *Int. J. Environ. Sci. Tech.*, 6 (2):175–182. [18](#)
- IRESON, A., WHEATER, H., BUTLER, A., MATHIAS, S., FINCH, J. et COOPER, J. (2006). Hydrological processes in the Chalk unsaturated zone - Insights from an intensive field monitoring programme. *Journal of Hydrology*, 330(1-2):29 – 43. Hydro-ecological functioning of the Pang and Lambourn catchments, UK - Results from the Lowland Catchment Research (LOCAR) initiative. [73](#), [74](#)

- JACKSON, B. M., WHEATER, H. S., MATHIAS, S. A., MCINTYRE, N. et BUTLER, A. P. (2006). A simple model of variable residence time flow and nutrient transport in the chalk. *Journal of Hydrology*, 330(1-2):221 – 234. Hydro-ecological functioning of the Pang and Lambourn catchments, UK - Results from the Lowland Catchment Research (LOCAR) initiative. 149
- JOHNSON, R. L., CHERRY, J. A. et PANKOW, J. F. (1989). Diffusive contaminant transport in natural clay : a field example and implications for clay-lined waste disposal sites. *Environmental Science & Technology*, 23(3):340–349. 149
- KORKMAZ, S. (2007). *Modeling of the flood regimes in coupled stream-aquifer systems*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris. 54
- LACHEREZ-BASTIN, S. (2005). *Contribution à l'étude de la migration des nitrates dans le sol et la zone non saturée de la nappe de la Craie dans le Nord de la France : modélisation intégrée des nitrates dans le bassin versant de l'Escrebieux*. Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille. 28, 74
- LANDREAU, A. et ROUX, J. C. (1984). Les nitrates dans les eaux souterraines : exemples de répartition et d'évolution des teneurs dans quelques aquifères français. Rapport technique, BRGM. xi, 9, 10, 28, 29, 153, 154, 155
- LARSSON, A. (1992). The international projects INTRACOIN, HYDROCOIN and INTRAVAL. *Advances in Water Resources*, 15:85–87. 78
- LASSERRE, F., RAZACK, M. et BANTON, O. (1999). A GIS-linked model for the assessment of nitrate contamination in groundwater. *Journal of Hydrology*, 224(3-4):81 – 90. 27
- LEDOUX, E. (1975). Programme NEWSAM : Principe et notice d'emploi LHM/RD/75/11. Rapport technique, Centre d' Information Géologique, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris. 43, 44
- LEDOUX, E. (1980). *Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique*. Thèse de doctorat, L' Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris et l' Université Pierre et Marie Curie-Paris VI. xii, 43, 47, 48, 53
- LEDOUX, E., GOMEZ, E., MONGET, J., VIAVATTENE, C., VIENNOT, P., DUCHARNE, A., BENOIT, M., MIGNOLET, C., SCHOTT, C. et MARY, B. (2007). Agriculture and groundwater nitrate

- contamination in the Seine basin. The STICS-MODCOU modelling chain. *Science of The Total Environment*, 375(1-3):33–47. [37](#)
- LEGOUT, C., MOLENAT, J., AQUILINA, L., GASCUEL-ODOUX, C., FAUCHEUX, M., FAUVEL, Y. et BARIAC, T. (2007). Solute transfer in the unsaturated zone-groundwater continuum of a headwater catchment. *Journal of Hydrology*, 332(3-4):427 – 441. [28](#), [72](#), [75](#), [96](#), [149](#)
- LERNER, D. N., YANG, Y., BARRETT, M. et TELLAM, J. (1999). Loadings of non-agricultural nitrogen in urban groundwater. In *Impacts of Urban Growth on Surface Water and Groundwater Quality*. [17](#)
- LEVASSOR, A. et LEDOUX, E. (1999). Notice d'utilisation NEWSAM : un programme général de simulation des écoulements et des transports de matière dans les systèmes aquifères. Rapport technique, Ecole des Mines de Paris. [47](#)
- LI, C., FARAHBAKSHAZAD, N., JAYNES, D. B., DINNES, D. L., SALAS, W. et MCLAUGHLIN, D. (2006). Modeling nitrate leaching with a biogeochemical model modified based on observations in a row-crop field in Iowa. *Ecological Modelling*, 196(1-2):116–130. [29](#)
- MARGAT, J. et CASTANY, G. (1977). *Dictionnaire Français d'Hydrogéologie*. [31](#)
- MARIOTTI, A. (1994). Dénitrification in situ dans les eaux souterraines : processus naturels ou provoqués : une revue. *Hydrogéol.*, 3:43 – 68. [31](#)
- MARY, B., BEAUDOIN, N., JUSTES, E. et MACHET, J. M. (1999). Calculation of nitrogen mineralization and leaching in fallow soil using a simple dynamic model. *European Journal of Soil Science*, 50(4):549–566. [33](#), [75](#), [84](#), [142](#)
- MATHIAS, S., BUTLER, A., JACKSON, B. et WHEATER, H. (2006). Transient simulations of flow and transport in the Chalk unsaturated zone. *Journal of Hydrology*, 330(1-2):10 – 28. Hydro-ecological functioning of the Pang and Lambourn catchments, UK - Results from the Lowland Catchment Research (LOCAR) initiative. [74](#)
- MATTERN, S. et VANCLOOSTER, M. (2009). Estimating travel time of recharge water through a deep vadose zone using a transfer function model. *Environmental Fluid Mechanics*, DOI 10.1007/s10652-009-9148-1. [33](#)

- MCMICHAEL, A. J. (2000). The urban environment and health in a world of increasing globalization : issues for developing countries. *Bulletin of the World Health Organization*, 78 (9):1117–1126. [18](#)
- MIGNOLET, C., SCHOTT, C. et BENOÎT, M. (2004). Spatial dynamics of agricultural practices on a basin territory : a retrospective study to implement models simulating nitrate flow. The case of the Seine basin. *Agronomie*, 24:219 – 236. [26](#)
- MONTEIL, C., FLIPO, N., POULIN, M., HABETS, F., KRIMISSA, M. et LEDOUX, E. (2010). Assessing the contribution of the main aquifer units of the Loire Basin to river discharge during low flow. *In Proceedings of XVIII International Conference on Water Resources, Barcelona*. [54](#)
- MONTESINOS-BARRIOS, P. et BEVEN, K. (2001). Evaluation of TOPMODEL. *In Agricultural non-point source water quality models : their use and applications*. [36](#)
- MORENO, F., CAYUELA, J. A., FERNÁNDEZ, J. E., FERNÁNDEZ-BOY, E., MURILLO, J. M. et CABRERA, F. (1996). Water balance and nitrate leaching in an irrigated maize crop in SW Spain. *Agricultural Water Management*, 32(1):71–83. [27](#), [38](#)
- MOULIN, M. (1990). *Genèse et évolution des minéraux secondaires en zone non saturée carbonatée : étude géochimique et isotopique de la zone non saturée de la Craie de Champagne*. Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay. [171](#), [172](#), [174](#), [175](#)
- NAGASOE, S., SHIKATA, T., YAMASAKI, Y., MATSUBARA, T., SHIMASAKI, Y., OSHIMA, Y. et HONJO, T. (2010). Effects of nutrients on growth of the red-tide dinoflagellate *Gyrodinium instriatum* Freudenthal et Lee and a possible link to blooms of this species. *Hydrobiologia*, 651:225–238. [10.1007/s10750-010-0301-0](#). [12](#)
- NASH, J. E. (1960). A Unit Hydrograph Study, with Particular Reference to British Catchments. *paper No.6433*. [52](#)
- NCCOS (2005). Economic Impacts of Harmful Algal Blooms. Rapport technique, NCCOS. [14](#)
- NEITSCH, S., ARNOLD, J., KINIRY, J., SRINIVASAN, R. et WILLIAMS, J. (2010). Soil and Water Assessment Tool. Input/Output File Documentation, Version 2009. Rapport technique, Texas Water Resources Institute. [52](#)
- NIXON, S., TRENT, Z., MARCUELLO, C. et LALLANA, C. (2003). Europe's water : An indicator-based assessment. Rapport technique, EEA. [15](#)

- NORMAND, B., MARY, B., CZERNICHOWSKI, I., BEAUDOIN, N., MOUVET, C., BAZERQUE, M. F. et GROELL, F. (2004). Programme expérimental de suivi de la qualité de l'eau sur trois bassins versants de Picardie faisant l'objet de mesures agri-environnementales. Rapport de synthèse. Rapport technique. [86](#)
- OMS (2004). Directives de qualité pour l'eau de boisson, troisième édition. Rapport technique, OMS. [15](#)
- ONSOY, Y. S., HARTER, T., GINN, T. R. et HORWATH, W. R. (2005). Spatial Variability and Transport of Nitrate in a Deep Alluvial Vadose Zone. *Vadose Zone J.*, 4(1):41–54. [75](#)
- O'SHEA, L. et WADE, A. (2009). Controlling nitrate pollution : An integrated approach. *Land Use Policy*, 26(3):799 – 808. [35](#), [39](#)
- PADMAKUMAR, K., SMITHA, B., THOMAS, L., FANIMOL, C., SREERENJIMA, G., MENON, N. et SANJEEVAN, V. (2010). Blooms of *Trichodesmium erythraeum* in the South Eastern Arabian Sea during the onset of 2009 summer monsoon. *Ocean Science Journal*, 45:151–157. 10.1007/s12601-010-0013-4. [12](#)
- PATYN, J., LEDOUX, E. et BONNE, A. (1989). Geohydrological research in relation to radioactive waste disposal in an argillaceous formation. *Journal of Hydrology*, 109(3-4):267 – 285. [47](#)
- PERRIN, J. (1991). *Modélisation mathématique du fonctionnement hydrologique des bassins versants de la Fecht et de la Weiss (Haut-Rhin)*. Thèse de doctorat, Université Louis Pasteur, C.E.R.E.G., Strasbourg. [54](#)
- PIACENTINI, A. et the PALM GROUP, T. P. (2003). *PALM : A Dynamic Parallel Coupler*, volume 2565, chapitre Lecture Notes in Computer Science, pages 355–367. Springer Berlin / Heidelberg. [65](#)
- PRICE, M., DOWNING, R. et EDMUNDS, W. (1993). *The Hydrogeology of the Chalk of North-West Europe*. Clarendon Press. [96](#)
- PRICE, M., LOW, R. G. et MCCANN, C. (2000). Mechanisms of water storage and flow in the unsaturated zone of the Chalk aquifer. *Journal of Hydrology*, 233(1-4):54 – 71. [72](#)
- QUINTANA-SEGUI, P., LE MOIGNE, P., DURAND, Y., MARTIN, E., HABETS, F., BAILLON, M., CANELLAS, C., FRANCHISTEGUY, L. et MOREL, S. (2008). Analysis of Near-Surface Atmospheric

- Variables : Validation of the SAFRAN Analysis over France. *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, 47(1):92–107. 57, 83
- RAHMEL, J., BÄTJE, M., MICHAELIS, H. et NOACK, U. (1995). Phaeocystis globosa and the phytoplankton succession in the East Frisian coastal waters. *Helgoland Marine Research*, 49:399–408. 10.1007/BF02368365. 12
- REFSGAARD, J. C., THORSEN, M., JENSEN, J. B., KLEESCHULTE, S. et HANSEN, S. (1999). Large scale modelling of groundwater contamination from nitrate leaching. *Journal of Hydrology*, 221(3-4):117 – 140. 36, 37
- RIVETT, M., SMITH, J., BUSS, S. et MORGAN, P. (2007). Nitrate occurrence and attenuation in the major aquifers of England and Wales. *Quarterly Journal of Engineering Geology and Hydrogeology*, 40(4):335–352. 30, 31
- RIVETT, M. O., BUSS, S. R., MORGAN, P., SMITH, J. W. et BEMMENT, C. D. (2008). Nitrate attenuation in groundwater : A review of biogeochemical controlling processes. *Water Research*, 42(16):4215 – 4232. 31
- ROSS, P. J. (2003). Modeling Soil Water and Solute Transport—Fast, Simplified Numerical Solutions. *Agron J*, 95(6):1352–1361. 79
- ROUX, J.-C. (1995). The evolution of groundwater quality in France : perspectives for enduring use for human consumption. *Science of The Total Environment*, 171(1-3):3 – 16. Environmental Toxicology : Hazards to the Environment and Man in the Mediterranean Region. 30
- SALEH, F., FLIPO, N., HABETS, F., DUCHARNE, A., OUDIN, L., POULIN, M., VIENNOT, P. et LEDOUX, E. (2010). Impact of in-stream water level fluctuations on interactions between streams and aquifer units at the regional scale. *Submitted to Journal of Hydrology*. 68
- SCHNEBELEN, N., LEDOUX, E. et CREUZOT, G. (1999). Stratification hydrogéochimique et écoulements verticaux dans l’aquifère des calcaires de Beauce (France) : un système anthropisé à forte variabilité spatiale et temporelle. *C. R. Académie des Sciences, Paris, Sciences de la terre et des planètes*, 329:421–428. 30
- SCORZA JUNIOR, R. P., JARVIS, N. J., BOESTEN, J. J., van der ZEE, S. E. et ROULIER, S. (2007). Testing MACRO (version 5.1) for pesticide leaching in a Dutch clay soil. *Pest. Manag. Sci.*, 63(10):1011–1025. 32, 51, 78

- SERHAL, H. (2006). *Influence des pressions anthropiques sur l'évolution des concentrations en nitrates dans la nappe de la craie du Nord de la France (Application au Cambrésis et au nord Audomarois)*. Thèse de doctorat, Université des Sciences et Technologies de Lille. [38](#)
- SERHAL, H., BASTIN-LACHEREZ, S., BERNARD, D. et EL KHATTABI, J. (2006). Etude de la migration des nitrates dans la nappe à travers la zone non saturée : enjeux et impact sur la qualité de l'eau exploitée. *In International symposium - Aquifers Systems Management - 30 may-1th june 2006, Dijon, France*. [25](#), [28](#), [38](#), [71](#), [72](#), [86](#)
- SIMUNEK, J., VAN GENUCHTEN, M. T. et M., S. (2006). The HYDRUS Software Package for Simulating the Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. Rapport technique, PC Progress. [32](#), [78](#)
- SOHIER, C., DEGRÉ, A. et DAUTREBANDE, S. (2009). From root zone modelling to regional forecasting of nitrate concentration in recharge flows - The case of the Walloon Region (Belgium). *Journal of Hydrology*, 369(3-4):350 – 359. Transfer of pollutants in soils, sediments and water systems : From small to large scale (AquaTerra). [52](#)
- THIERION, C., HABETS, F., LEDOUX, E., VIE, P., MARTIN, E., QUEGUINER, S., ACKERER, P., MADJALANI, S., LEBLOIS, E. et LECLUSE, S. (2010). Modelling the coupled surface water and groundwater system of the Upper Rhine Graben. *In Proceedings of XVIII International Conference on Water Resources, Barcelona*. [54](#)
- THIERY, D. (1982). Utilisation d'un modèle global pour identifier sur un niveau piézométrique des influences multiples dues à diverses activités humaines. *IAHS Publication*, 136:71 – 77. [38](#)
- THIERY, D. (1983). Description du modèle CREACHIM. Rapport technique, BRGM, Note Technique n°83/15, Orléans, 53 p. [38](#)
- THIEU, V., BILLEN, G., GARNIER, J. et BENOIT, M. (2010). Nitrogen cycling in a hypothetical scenario of generalised organic agriculture in the Seine, Somme and Scheldt watersheds. *Agriculture, Ecosystems & Environment*. [39](#), [154](#)
- TINDALL, J. A., PETRUSAK, R. L. et MCMAHON, P. B. (1995). Nitrate transport and transformation processes in unsaturated porous media. *Journal of Hydrology*, 169(1-4):51 – 94. [27](#)
- USEPA (2009). 2009 Edition of the Drinking Water Standards and Health Advisories. Rapport technique, U. S. EPA Washington, DC. [15](#)

- VACHIER, P. et DEVER, L. (1990). *Nitrates-Agriculture-Eau*, chapitre Qualité des eaux de recharge de la nappe et pratiques agricoles en pays de craie : cas de la Champagne. 83
- VAN DAM, J., HUYGEN, J., WESSELING, J. G., FEDDES, R. A., KABAT, P., VAN WALSUM, P. E. V., GROENENDIJK, P. et VAN DIEPEN, C. A. (1997). Theory of SWAP version 2.0 : Simulation of water flow, solute transport and plant growth in the Soil-Water-Atmosphere-Plant environment. Rapport technique, Department Water Resources, Wageningen Agricultural University. 32, 51, 78
- Van den DAELE, G. F., BARKER, J. A., CONNELL, L. D., ATKINSON, T. C., DARLING, W. et COOPER, J. (2007). Unsaturated flow and solute transport through the Chalk : Tracer test and dual permeability modelling. *Journal of Hydrology*, 342(1-2):157–172. 28, 74
- VAN GENUCHTEN, M. (1980). A closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. *Soil Science Society of America*, 44(3-4):892 – 898. 77, 78, 127
- VAUCLIN, M. (1994). Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. Revue - Etat de l'art. *Revue des Sciences de l' Eau*, 7:81–102. 25, 29, 75
- VIAVATTENE, C. (2006). *Exploitation socio-économique de la modélisation souterraine du transfert des nitrates à l'échelle du bassin de la Seine*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris. xiii, 39, 54, 57, 58, 59
- VIENNOT, P. (2008). La pollution du bassin de la Seine par les nitrates. Rapport technique, PIREN Seine. xi, xii, xiii, 10, 11, 28, 54, 57, 58, 59, 60, 61, 62, 63
- VIENNOT, P. et LEDOUX, E. (2004). Modélisation du fonctionnement hydrologique du bassin de la Seine - Prévision des étiages. Rapport technique, Centre d' Informatique Géologique. 57
- VIENNOT, P., LEDOUX, E., MONGET, J. et SCHOTT, C. (2006). Contamination nitrique des aquifères du bassin de la Seine. *In Document de synthèse PIREN Seine*. 10, 151, 152
- WAKIDA, F. T. et LERNER, D. N. (2005). Non-agricultural sources of groundwater nitrate : a review and case study. *Water Research*, 39(1):3 – 16. 17
- WEI, H. (1990). *Modélisation tridimensionnelle du transfert d'eau, de chaleur et de masse dans l'aquifère géothermique du Dogger dans le bassin de Paris*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris. 47

- WHITEHEAD, P. G., WILSON, E. J. et BUTTERFIELD, D. (1998). A semi-distributed Integrated Nitrogen model for multiple source assessment in Catchments (INCA) : Part I - model structure and process equations. *The Science of The Total Environment*, 210/211:547 – 558. [33](#), [35](#), [39](#)
- WÖSTEN, J. H. M., LILLY, A., NEMES, A. et BAS, C. L. (1999). Development and use of a database of hydraulic properties of European soils. *Geoderma*, 90(3-4):169 – 185. [164](#)
- ZEBARTH, B. J., HUI, B., LIEBSCHER, H., CHIPPERFIELD, K., PAUL, J. W., GROVE, G. et SZETO, S. Y. (1998). Agricultural land use practices and nitrate contamination in the Abbotsford Aquifer, British Columbia, Canada. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 69(2):99 – 112. [28](#)
- ZHU, Z. et CHEN, D. (2002). Nitrogen fertilizer use in China - Contributions to food production, impacts on the environment and best management strategies. *Nutrient Cycling in Agroecosystems*, 63:117–127. 10.1023/A :1021107026067. [xii](#), [11](#), [19](#)

Contribution à la modélisation du transfert des nitrates au travers de la zone non saturée à l'échelle régionale : application au bassin de la Seine

Résumé : Les contaminations en nitrates observées depuis les années 1950 dans les hydrosystèmes constituent un enjeu environnemental important. Pour respecter les normes de qualité fixées (Directive Cadre sur l'Eau), une bonne connaissance de leur dynamique est donc nécessaire et passe par un travail de modélisation.

Nous nous focalisons ici sur la modélisation des transferts à travers la zone non saturée située entre le sol et la nappe. Ce milieu peut en effet générer des délais importants entre une contamination en surface et un impact sur la qualité des ressources en eau souterraines. Nous avons donc en premier lieu étudié précisément ces transferts via des tests effectués avec un modèle numérique à bases physiques. Nous avons également évalué avec ces tests l'impact du battement de nappe sur ces transferts.

Dans le modèle intégré des hydrosystèmes Eau-dyssée, l'approche utilisée pour simuler ces transferts est volontairement simplifiée pour limiter les temps de calcul et le nombre de paramètres requis. Nous proposons alors une évaluation et une amélioration de cette approche. Nous obtenons ainsi une dynamique de transfert des solutés se comparant mieux à ce qui est observé sur le terrain.

Une application du modèle à l'échelle régionale, sur le bassin de la Seine, a permis également de mettre en exergue les problèmes posés par l'initialisation des teneurs en nitrates dans le milieu souterrain avant les débuts de l'agriculture intensive. Nous proposons donc une méthode permettant de restituer l'évolution de la médiane des teneurs souterraines en nitrates dans les trois principaux aquifères de ce bassin (Oligocène, Eocène, Craie).

Mots-clés : Zone non saturée, contamination azotée, nitrates, modèle conceptuel, modèle à bases physiques, évaluation numérique

Contribution to modelling of the nitrate transfer through the unsaturated zone at the regional scale: application to the Seine basin

Abstract: Nitrate contaminations observed since the 1950s in hydrosystems are an important environmental issue. To meet the quality standards (Water Framework Directive), an understanding of their dynamics is thus necessary and requires modelling work.

We focus on transfer modelling through the unsaturated zone between the soil and groundwater. This medium can indeed generate significant delays between surface contamination and impact on the quality of groundwater resources. We therefore firstly studied precisely these transfers through sensitivity analyses with a physically-based model. We have also assessed the impact of water table fluctuations on these transfers within this model.

In the integrated model of hydrosystems Eau-dyssée, the approach used to simulate these transfers is deliberately simplified to reduce computation time and the number of required parameters. We propose an evaluation and an improvement of this approach that permitted us to obtain a better solute transfer dynamics compared to field observations.

An application of the model at the regional scale of the Seine basin, has also highlight the problems with the initialization of groundwater nitrate concentrations before the beginnings of intensive agriculture. We therefore developed a method to obtain the evolution of the median groundwater nitrate concentrations in the three main aquifers of this basin (Oligocene, Eocene, Chalk).

Keywords: Unsaturated zone, nitrogen contamination, nitrate, conceptual model, physically-based model, computational assessment

