

Développements numériques au sein de la plateforme de modélisation des hydrosystèmes CaWaQS : Introduction des premières fonctionnalités de transport conservatif

Nicolas Gallois^{1*}, Agnès Rivière², Nicolas Flipo²

¹ ARMINES/MINES ParisTech, Centre de Géosciences, PSL Université, Fontainebleau

² MINES ParisTech, Centre de Géosciences, PSL Université, Fontainebleau

* nicolas.gallois@minesparistech.psl.eu

Résumé

La plateforme de modélisation des hydrosystèmes CaWaQS, actuellement développée au Centre de Géosciences de MINES ParisTech, permet de simuler la dynamique des différents termes du cycle de l'eau au sein d'un système. Cet outil a été conçu, et est continuellement maintenu et amélioré, au sein et en marge des travaux du programme PIREN-Seine, et ce, depuis le début des années 2000. Des développements récents ont, entre autres, permis d'intégrer à la dernière version CaWaQS2.88 de nouvelles fonctionnalités permettant la simulation du transport de soluté conservatif en régime transitoire dans les compartiments de surface, de sub-surface et de la zone non-saturée. Outre le détail technique de ces avancées, ce document fait état des conceptualisations introduites ainsi que des formulations mathématiques et algorithmes associés. Une fois finalisés, ces développements permettront de modéliser le transfert simultané d'espèces multiples dissoutes et/ou de chaleur dans l'ensemble des compartiments d'un hydrosystème, en parallèle de la simulation des écoulements des eaux. Une fois l'ensemble des vérifications numériques nécessaires réalisées, la plateforme sera alors mobilisable dans le cadre de problématiques de transfert de matière et de chaleur à diverses échelles d'espace et de temps.

Points clefs

- ✓ *CaWaQS2.88 permet le transport conservatif simultané d'espèces dissoutes multiples dans les compartiments de surface et non-saturé.*
- ✓ *Plusieurs options de forçages de la plateforme par des flux exogènes (combinaisons de flux d'eau, de matière et/ou de chaleur) sont d'ores et déjà possibles.*
- ✓ *Ces fonctionnalités offrent de multiples perspectives de couplage avec d'autres modèles (SVAT, modèles agronomiques, etc.).*

Abstract

The CaWaQS hydrosystem modeling platform, currently being developed at the MINES ParisTech Geosciences Centre, simulates the dynamics of the different terms of the water cycle within a hydrosystem. This platform has been designed, and is continuously maintained and improved within and outside the PIREN-Seine program since the early 2000s. As a result of recent code enhancements, its newest 2.88 release version offers new functionalities allowing transient passive solute transport in both surface and unsaturated zones. This report provides technical details on how new concepts, mathematical formulations and associated algorithms have been implemented so far. Developments still underway, will allow once finalized, simultaneous transport of several

passive solute species and/or heat, coupled with water fluxes modeling within all compartments of a system. The platform will, then, be applied as part of studies dealing with heat and/or solute transport at various time and space scales.

Key points

- ✓ CaWaQS2.88 allows transient passive transport of several species in both sub-surface and vadose zones.
- ✓ Several forcing options and functionalities using exogenous fluxes (combining water, matter and/or heat fluxes) are operational.
- ✓ Transport-related options offer new coupling possibilities with other applications such as SVATs or agronomic models.

Introduction

La caractérisation quantifiée de l'évolution de la ressource en eau du bassin de la Seine, ainsi que sa vulnérabilité aux changements globaux, occupe désormais les chercheurs du programme PIREN-Seine depuis plus de deux décennies. D'un point de vue technique, la complexité d'un tel problème, étant donné les échelles de temps et d'espace qui lui sont associées, demandent, entre autres, d'être à même de pouvoir comprendre et représenter, du mieux possible, la manière avec laquelle les flux qui en émanent transitent au sein de ce système. Afin d'apporter des réponses à cette problématique, des modèles mathématiques ont été développés et mobilisés afin de permettre l'étude finement spatialisée du comportement hydrodynamique du bassin et de l'impact de ces transferts sur tous les compartiments du sol et sous-sol.

Si certaines études de modélisation précédemment réalisées dans le cadre et en marge du programme PIREN-Seine (Gallois and Viennot, 2018; Gallois, Puech and Viennot, 2018) avaient permis de telles caractérisations (exemples ici appliqués à la caractérisation de l'impact de pollutions diffuses d'origine agricole sur la qualité des eaux souterraines), une mise à jour constante de la plateforme de modélisation des hydrosystèmes utilisée dans le cadre du programme est essentielle, afin d'en assurer un développement, un maintien et une exploitation continue. Dans l'optique, d'une part, de poursuivre l'étude, d'affiner, voire d'étendre ce type de problématiques et, d'autre part, de mobiliser les forces vives actuelles de développement, une migration depuis les outils numériques historiquement utilisés (suite logicielle MODCOU-NEWSAM) vers la plateforme de modélisation CaWaQS, conçue, développée et maintenue par le Centre de Géosciences de MINES ParisTech, a été initiée.

L'outil CaWaQS ayant jusqu'ici été utilisé pour simuler le comportement hydrodynamique de tout ou partie du système Seine, il est nécessaire d'intégrer de nouvelles fonctionnalités relatives au transport de matière afin de répondre à ce type de problématiques. Après un bref rappel de la structure actuelle de cet outil numérique, ce document détaille les récentes avancées techniques centrées autour de la thématique de transport de flux de soluté et de chaleur au sein d'un hydrosystème.

1. La plateforme de modélisation des hydrosystèmes CaWaQS2.88

La plateforme CaWaQS (*CAtchment WAter Quality Simulator*) est un outil numérique permettant, à diverses échelles, la simulation spatio-temporelle des flux d'eau en transit au sein d'un hydrosystème. Historiquement héritée de la structure de la suite MODCOU-NEWSAM (Ledoux, 1980) et majoritairement développée dans le cadre du programme PIREN-Seine (Flipo *et al.*, 2005; Labarthe, 2016; Flipo, Rivière, *et al.*, 2019), sa structure actuelle fait l'objet de développements continus, dans l'optique, à la fois **(i)** d'élargir constamment le panel d'environnements géologiques modélisables (Wang *et al.*, 2016; Gallois, Ledoux and Flipo, 2020) et **(ii)** d'en étendre les problématiques d'application (Maillot, 2019).

L'architecture modulaire proposée par les versions CaWaQS2.x (Labarthe, 2016; Gallois, Ledoux and Flipo, 2020), s'articule autour de combinaisons de bibliothèques de calcul dites « dédiées », chacune d'entre elles visant à la modélisation du comportement dynamique d'un compartiment ciblé du système. Le mode d'association des bibliothèques disponibles est laissé libre à l'utilisateur, selon la structure géologique du système à modéliser. Dans la majorité des applications actuelles (Flipo *et al.*, 2012; Gallois *et al.*, 2019; Flipo, Gallois, *et al.*, 2020), trois compartiments principaux sont recensés : surface, non saturé et saturé, en communication *via* des interfaces. Dans une telle configuration, quatre bibliothèques principales sont requises :

- *libfp* (Figure 1A), chargée de calculer le bilan hydrique de surface. Elle calcule l'évapotranspiration réelle, évalue le stock d'eau dans le sol, et quantifie les lames d'eau infiltrées et ruisselées à partir de données de précipitations et d'évapotranspiration potentielle. Le ruissellement est transféré jusqu'au réseau hydrographique de manière directe. Cette conceptualisation tend à négliger le temps de transfert entre le point de production du ruissellement et le tronçon du réseau hydrographique le plus proche. Pour ce faire, le maillage de surface, support du transfert d'eau de surface correspond à celui de bassins versants unitaires dont le temps de transfert est supposé inférieur au pas de temps de calcul (traditionnellement journalier),

- *libhyd* (Figure 1B) simule les écoulements en rivière selon la méthode de routage hydraulique de Muskingum (Cunge, 1969). La hauteur d'eau en rivière est calculée à chaque élément rivière en fonction du débit simulé suivant l'équation de Manning-Strickler,
- *libnsat* (Figure 1C) transfère verticalement, dans la zone non saturée, les flux d'eau infiltrés calculés par le module de surface. Le transfert vertical est conceptualisé par une succession de réservoirs, de volumes et de coefficients de vidange renseignés par l'utilisateur. Cette conceptualisation introduit un retard des flux d'eau s'infiltrant depuis la surface,
- *libaq* (Figure 1E) simule les hauteurs piézométriques d'un système aquifère mono ou multicouches par la résolution de l'équation de diffusivité selon une configuration pseudo-3D. L'équation est résolue par différences finies selon un schéma semi-implicite sur un maillage gigogne.

Outre des ajustements annexes mineurs opérés **(i)** dans la communication entre le compartiment aquifère et les autres modules sus-jacents¹ et **(ii)** dans l'interface homme/machine², cette structure (Flipo, Gallois, *et al.*, 2019) a récemment été augmentée de nouvelles fonctionnalités hydrodynamiques (Gallois, Ledoux and Flipo, 2020) dont, entres autres :

- l'ajout d'un module optionnel référencé sous le nom de « module d'écoulements endodermiques » (Figure 1D), permettant d'introduire un routage des lames d'eau infiltrées simulées en sortie de la zone non saturée, avant que celles-ci n'atteignent la zone saturée. A titre d'exemple, ce module est actuellement sollicité pour simuler des phénomènes de ruissellement sur socle cristallin profond imperméable dans un contexte d'hydrosystème volcanique (Gallois, Ledoux and Flipo, 2020). Ce type d'écoulement est résolu *via* un second emploi de la méthode de routage hydraulique de Muskingum,
- la gestion de flux d'eau spécifiques, s'apparentant à un 'court-circuit' d'un fonctionnement plus classique d'un hydrosystème, sous la forme de mailles dites « gouffres », dont l'utilité est de rediriger tout ou partie du ruissellement produit sur une sous-zone prédéfinie de surface en infiltration à destination de la zone non saturée (gouffres dits « en ruissellement pur ») ou bien encore d'y infiltrer une fraction d'un débit simulé au sein du réseau hydrographique superficiel (gouffres d'« infiltration rivière »),
- l'introduction de l'objet de calcul « sous-bassin versant » permettant de gérer une géométrie de surface structurée selon plusieurs sous-bassins, chacun d'entre eux étant caractérisés par leur propre temps de concentration.

Stricto sensu, l'applicatif CaWaQS a pour objectif de coupler ces bibliothèques et modules mais également de procéder au calcul des échanges nappe-rivière (Figure 1F). Ceux-ci sont simulés par un modèle de conductance. Afin de tenir compte d'éventuels états de déconnexion du système, un débit limite d'infiltration est introduit. Cette configuration induit un débit d'infiltration constant, indépendant du gradient hydraulique entre la nappe et la rivière. La quantification de ces flux se fonde sur l'utilisation d'une procédure itérative dite « de Picard ». Cette boucle permet de conserver le schéma semi-implicite utilisé pour le calcul de ces échanges tout en assurant la prise en compte du débit limite et l'assèchement du réseau hydrographique.

Dans l'ensemble de la plateforme, outre l'utilisation de bibliothèques complémentaires dites « transversales » (Flipo, Rivière, *et al.*, 2019), nécessaires au bon déroulement de la simulation, la communication entre ces bibliothèques et modules est assurée par la bibliothèque *libspa* (cf. §. 2.2) permettant la connexion spatiale et la transmission des flux entre les différents compartiments et leurs topologies respectives associées.

Dans l'optique de mobiliser la plateforme dans le cadre de problématiques liées à la caractérisation de l'état qualitatif de la ressource en eau (surface et souterraine), ces compartiments font actuellement l'objet de nouveaux développements informatiques visant à modéliser, parallèlement aux flux d'eau, les transferts de matière et de chaleur. A ce titre, les paragraphes suivants détaillent, pour les ajouts d'ores et déjà fonctionnels, les concepts et fonctionnalités élémentaires requis pour ce type de modélisation dans les compartiments de surface, sub-surface et de zone non saturée.

¹ Amélioration des modalités du calcul de la recharge aquifère dans le cas de composantes multiples d'alimentation, par exemple.

² Flexibilité accrue dans la gestion et l'écriture des sorties de la plateforme.

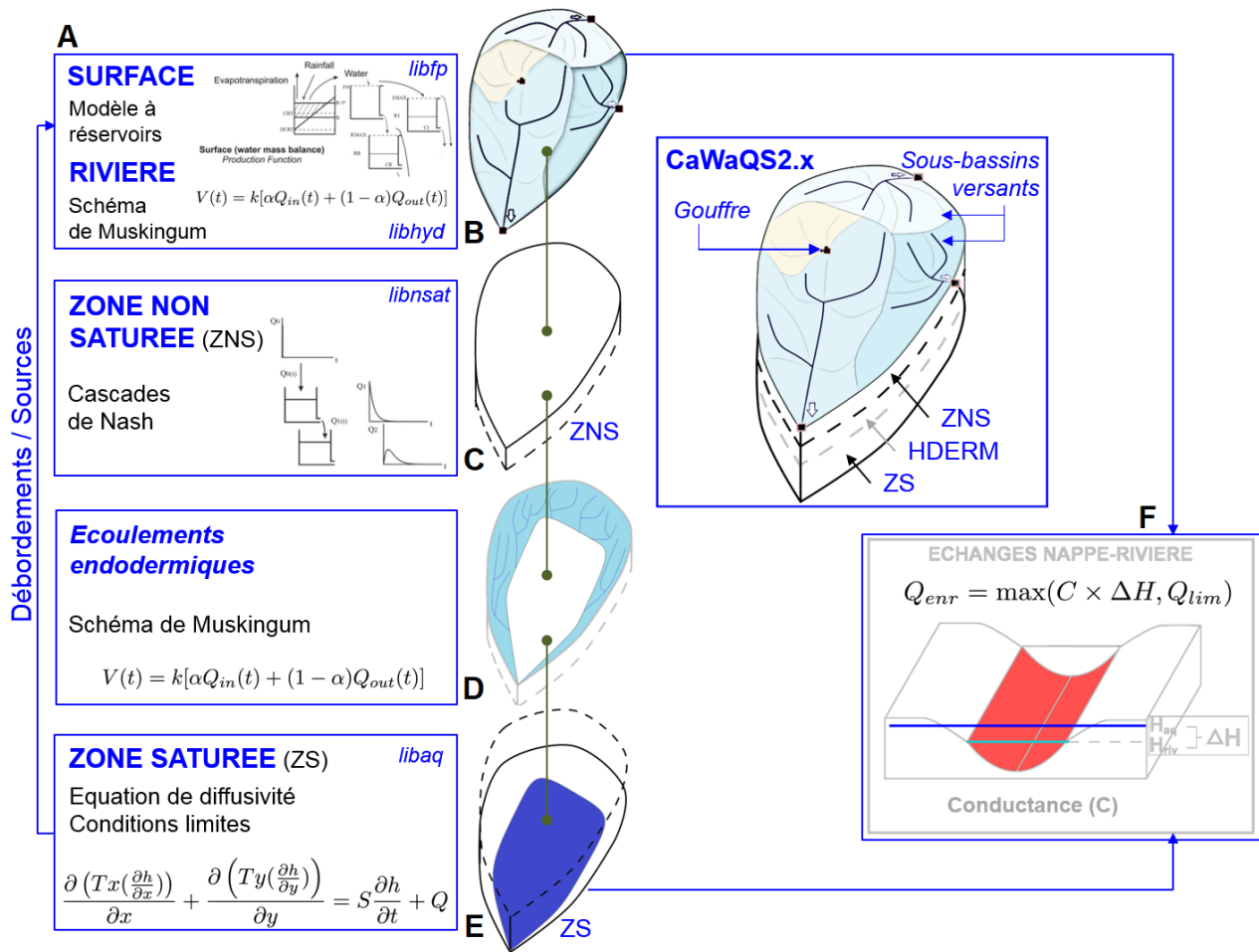


Figure 1 : Schématisation de la structure complète de la plateforme CaWaQS2.88 de modélisation des flux d'eau au sein d'un hydrosystème (Gallois, Ledoux and Flipo, 2020).

2. Implémentation des fonctionnalités de transport dans CaWaQS2.88

Il paraît utile, à ce stade, de faire état de certaines caractéristiques générales proposées par la plateforme, liées aux options de transport. Ces aspects sont communs à l'ensemble des modules, et ne seront pas repris dans la suite de ce document :

- **Description de la conceptualisation des processus de transfert de solutés et de chaleur** : Le même formalisme pour le transfert de solutés et le transport de chaleur est résolu par CaWaQS (Equation 6 – cf. page 17) dans les modules B et E (Figure 1). CaWaQS permettra donc, à terme, de simuler le transport de ces deux types de flux, en parallèle si souhaité, dans l'ensemble du système.
- **Approche en « multi-espèces »** : Dans le cas de la modélisation de transport de soluté, la plateforme permet le transport simultané dans les différents modules de n espèces dissoutes. Cette fonctionnalité est essentielle, notamment, dans une optique future d'intégration d'un transport réactif.
- **Généricité des concepts, algorithmes et objets de calcul** : Dans le souci d'une modularité et d'une flexibilité d'utilisation de la plateforme de calcul, les conceptualisations introduites le sont de manière générique. De ce fait, le terme plus générique de « réseau hydraulique » est utilisé dans le reste du document. Celui-ci englobe les réseaux hydrographiques ainsi que les réseaux d'écoulements profonds endodermiques. La conceptualisation des processus physiques de ces objets de calcul y est similaire, pour l'hydrodynamique et le transport, dans la plateforme CaWaQS (Figure 1D).

Les paragraphes 2.1 à 2.3 suivants détaillent les fonctionnalités majeures opérationnelles dans CaWaQS2.88, déclinées et illustrées dans le cadre d'un problème de transport de soluté conservatif.

2.1. Forçage de la plateforme CaWaQS2.88 : illustration d’options de couplage

2.1.1. Description technique de modalités de forçages externes de surface

Au sein de la plateforme, la description du domaine de surface est fondée sur deux principaux niveaux de découpage spatial (Flipo, Rivière, *et al.*, 2019), chacun d’eux étant associé à un objet de calcul dédié :

- **l’élément de calcul de bilans** (Figure 2C), par la suite référencé *via* l’acronyme « BU ». Il s’agit de la maille élémentaire à l’échelle de laquelle sont réalisés les calculs de bilan **(i)** hydrique (*i.e.* calcul de l’évapotranspiration réelle, fractionnement de la pluie efficace en lames d’eau infiltrées et ruisselées) et **(ii)** de matière (calculs des flux de solutés infiltrés et ruisselés). Cette spatialisation résulte de l’intersection entre une grille de forçage climatique (Figure 2B) et celui de *fonctions-productions*³ (Figure 2A).
- **le bassin d’alimentation élémentaire** (Figure 2D), défini pour chaque portion (ou tronçon rivière) d’un réseau hydraulique, encadrée par deux singularités (confluence ou diffluence par exemple). Par intersection avec le maillage *BU*, la délimitation de ces aires d’alimentation permet de diriger les flux ruisselés qui y sont produits vers le tronçon associé (Figure 2F).

Dans le cas où l’on considère le transport, et, dans la mesure où la plateforme n’a pas vocation à générer elle-même les solutés à faire transiter dans le système, ceux-ci doivent être apportés sous formes de flux, le plus couramment générés depuis un autre modèle. Cette fonctionnalité s’inscrit dans l’optique de mises en œuvre de couplages directs entre CaWaQS et d’autres types de modèles (SVAT ou « *Soil-Vegetation-Atmosphere-Transfer* » par exemple - Séraphin *et al.* 2018). Afin d’opérer un couplage avec n’importe quel modèle, la plateforme permet une certaine souplesse quant à la description de la topologie associée à ces forçages. En effet, d’une part, CaWaQS2.88 permet d’intégrer autant de maillages différents que d’espèces à transporter, et d’autre part, ceux-ci peuvent couvrir intégralement ou partiellement le domaine de surface (Figure 2E). De fait, plusieurs types de conditions aux limites sont disponibles : condition de *Dirichlet* (concentrations imposées) et condition de *Neumann* (flux massique). Ces conditions sont imposées à l’échelle spatiale des BU. Ces conditions peuvent être constantes ou variables dans le temps. D’une manière générale, quelles que soient la ou les géométries de forçage utilisées, les flux associés sont automatiquement transformés à l’échelle spatiale élémentaire *BU* (Figure 2C). CaWaQS2.88 prévoit actuellement deux principales options par le biais de l’utilisation de son module de surface⁴ :

- Flux de matière totaux (ou ‘*total matter option*’) : Il est ici considéré que l’utilisateur dispose d’un seul et unique type de flux de matière. Le code de calcul est alors chargé, à chaque pas de temps, de procéder à son fractionnement, afin de calculer les concentrations ruisselées et infiltrées, à destination du réseau hydraulique et de la zone non saturée respectivement. Dans cette configuration, le fractionnement utilisé correspond à celui calculé pour la lame d’eau efficace⁵. Le flux de forçage est alors scindé, *via* les fonctions de la librairie *libspa*, selon la formulation⁶ 1 suivante :

$$F_{tot}^{BU_i} = (F_{ruis}^{BU_i} + F_{inf}^{BU_i}) = \beta \sum_{k=0}^{N_{SU}} \left[\left(\frac{S_{BU_i \cap SU_k}}{S_{BU_i}} \right) \times f^{SU_k} \right] + (1 - \beta) \sum_{k=0}^{N_{SU}} \left[\left(\frac{S_{BU_i \cap SU_k}}{S_{BU_i}} \right) \times f^{SU_k} \right] \quad (1)$$

- $F_{ruis}^{BU_i}$ et $F_{inf}^{BU_i}$ [$M.L^{-2}$] représentent respectivement les flux de matières ruisselés et infiltrés calculés à chaque pas de temps sur un élément de calcul de bilan i ,
 - β [–] est le coefficient local de fractionnement de la lame d’eau efficace rapidement ruisselée (Flipo, Gallois and Schuite, 2020b, 2020a),
 - N_{SU} , représente le nombre de cellules de forçage juxtaposant l’élément de calcul de bilan i ,
 - $S_{BU_i \cap SU_k}$ [m^2] est l’aire d’intersection entre l’élément de bilan i et la cellule de forçage k ,
 - f^{SU_k} [$M.L^{-2}$] est le flux de forçage associé à la cellule de forçage k .
- Flux totaux couplés de matière et d’eau (ou ‘*total matter and water option*’) : L’utilisateur doit ici disposer, en plus des flux totaux de matière, de flux de drainage sur l’ensemble du maillage de forçage. Cette option permet, entre autres, de conserver le synchronisme des deux types de flux, tel que simulé par le modèle initial.

³ Une *fonction-production* est spatialement définie, sur une extension modélisée, comme l’ensemble des secteurs de surface caractérisés par une même association “matériau géologique dominant / type de couvert végétal”.

⁴ Il sera illustré, par la suite, qu’il ne s’agit pas là du seul mode de forçage de la plateforme.

⁵ Il est donc fait l’hypothèse que lames d’eau infiltrées et ruisselées sont, pour un pas de temps donné, à concentrations égales.

⁶ Bien qu’appliqué à une autre interface, ce type général d’interfaçage de flux est illustré schématiquement, si besoin, en Figure 4.

Des options complémentaires sont en cours de développement de manière à ne pouvoir forcer qu'une seule des deux composantes, en infiltration ou ruissellement, selon des flux de matière ou d'associations synchrones de flux d'eau et de matière.

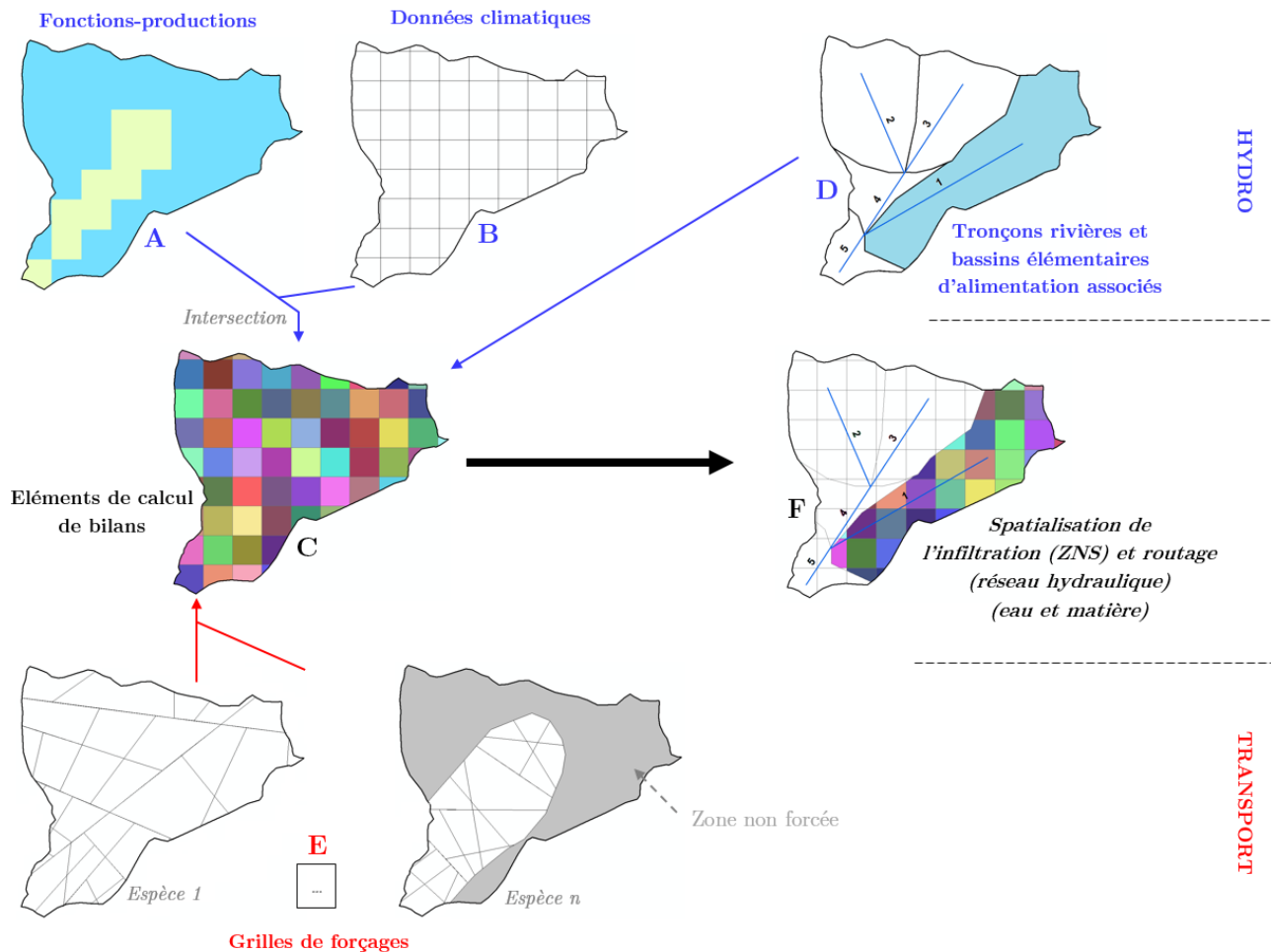


Figure 2 : Illustration schématique des différents niveaux de description géométrique utilisés dans le module de surface de la plateforme CaWaQS2.88 dans le cas d'une simulation de transfert de flux d'eau et de soluté. Les niveaux A, B et D d'une part et E d'autre part sont propres à la simulation hydrodynamique et du transport, respectivement. C et F sont des niveaux communs.

Dans la continuité des options développées pour la simulation des transferts de flux d'eau (Flipo, Rivière, *et al.*, 2019), CaWaQS2.88 prévoit également des options de redirection automatique du flux de matière en l'absence de déclaration d'un compartiment aquifère. Dans cette configuration, les flux infiltrés d'eau et de matière sont redirigés en intégralité à destination du réseau hydraulique. A l'inverse, dans le cas de déclaration en surface de bassins d'alimentation de type « gouffres » (cf. page 4), le flux de matière associé à la lame d'eau ruisselée est alors redirigé vers la zone non-saturée.

2.1.2. Cas d'application à large échelle des fonctionnalités de forçage

L'application détaillée ici l'est majoritairement à des fins de vérifications techniques. Il ne sera donc pas ici question de s'attarder sur le fond des résultats obtenus. Si nécessaire, il est conseillé de se diriger vers les références détaillées suivantes : (Gallois and Viennot, 2018) et (Flipo, Gallois and Schuite, 2020b). En effet, outre les divers tests, vérifications et validations réalisées par ailleurs, *via* l'élaboration d'un *cas test* simplifié, une mise en œuvre à large échelle des nouvelles options offertes présente plusieurs avantages, dont :

- la mobilisation, au travers d'un cas réaliste, d'un maximum de fonctionnalités, afin d'évaluer leur bon fonctionnement simultané,
- l'évaluation du degré de praticité lié à l'élaboration des fichiers d'entrée nécessaires dans le cas d'une simulation finement spatialisée et de grande superficie (~ 95 000 km²),

- la vérification de la bonne gestion spatio-temporelle, intégration dans les calculs des données d'entrées et écriture des nouvelles sorties du modèle (*i.e.* exploitations et post-traitements des résultats de l'application).

L'application utilisée est dérivée de celle de (Flipo, Gallois and Schuite, 2020b, 2020a) utilisée pour simuler le comportement hydrodynamique couplé du système Seine. Compte tenu de l'état d'avancement actuel des développements autour du transport, la version utilisée se restreint au couplage des modules de surface (bilan hydrique et calculs hydrauliques en rivière) et de zone non saturée.

Les données mobilisées pour le forçage du domaine de surface sont des flux journaliers synchrones de drainage et de lixiviation azotée, simulés à l'aide du modèle agronomique STICS (Brisson *et al.*, 2009) spatialisé sur le bassin (Gallois and Viennot, 2018). Ces flux sont associés à une grille (*Figure 3A*) résultant de l'intersection du maillage SAFRAN, des sectorisations géographiques respectives des sols de France à 1/1 000 000^{ème} (King *et al.*, 1995) et des petites régions agricoles (Puech, Schott and Mignolet, 2018). L'utilisation d'un tel maillage est ici intéressante dans le sens où celui-ci **(i)** n'intègre pas l'occupation réelle du sol (l'extension couverte par le maillage STICS est initialement considérée comme entièrement agricole), **(ii)** ne couvre pas la totalité du domaine de surface de l'application CaWaQS-Seine et **(iii)** n'est pas continu (*Figure 3C*).

Après une étape de formatage de ces flux au format de lecture requis par CaWaQS (fichiers binaires), l'intersection brute du maillage de forçage (*Figure 3A*) avec le maillage *BU* créé par ailleurs pour les besoins de la simulation hydrodynamique (*Figure 3B*) permet d'aisément d'identifier et d'exclure les secteurs non agricoles (l'occupation du sol étant, pour mémoire, déjà intégrée dans la procédure de constitution du maillage *BU*). Les fonctions permettant la configuration de conditions limites complémentaires sur les secteurs hors maillage STICS et hors zones agricoles sont mobilisées pour définir des concentrations imposées en nitrates lessivés sur ces secteurs⁷ (*Figure 3C*).

Les illustrations proposées en *Figure 3D* et *Figure 3E*, directement issues de l'exploitation des nouvelles sorties⁸ du modèle présentent les répartitions spatiales, à l'échelle du maillage élémentaire *BU*, des deux types de flux d'entrée de système (flux de forçage d'une part et flux associés aux conditions imposées d'autre part) en moyenne interannuelle sur la période de simulation 2008-2016. Elles permettent en particulier de s'assurer de leur complémentarité spatiale cohérente en termes de flux d'azote.

Les *Figure 3F* et *Figure 3G* illustrent, les répartitions du fractionnement local (Equation 2) en flux infiltrés (Illustration F) et ruisselés (Illustration G) des flux totaux d'azote, calculées par le module de surface, exprimées en valeurs moyennes interannuelles sur la période 2008-2016. Ces figures sont respectivement proposées à l'échelle du maillage *BU* dans le cas des flux infiltrés (grain spatial utilisé dans l'interfaçage vers la zone non saturée – cf. §. 2.2 - *Figure 4*) et des bassins d'alimentation des tronçons rivières pour la composante de ruissellement. Ces illustrations permettent de s'assurer d'une spatialisation du fractionnement de flux cohérent avec celui obtenu dans le cas d'une simulation hydrodynamique à l'échelle du bassin (Flipo, Gallois and Schuite, 2020b).

⁷ A titre informatif, et pour aider à la lecture des *Figure 3D* et *Figure 3E*, les valeurs de concentrations sélectionnées sont les suivantes (*Figure 3C*) : zones agricoles hors maillage STICS : 25 mgNO₃.L⁻¹, zones de socle cristallin : 5 mgNO₃.L⁻¹, eau libre : 0 mgNO₃.L⁻¹, territoires urbanisés : 10 mgNO₃.L⁻¹, zones forestières et humides : 8 mgNO₃.L⁻¹.

⁸ Pour ce module en particulier, ces fichiers de sortie font état pour chaque maille, pas de temps et espèce simulée, de l'ensemble des composantes du bilan de flux de matière : flux forcés et en conditions limites pour les termes d'entrée d'une part, et, d'autre part, des valeurs de lames d'eau, flux de matière et concentrations associées pour les composantes en ruissellement, infiltration (dans le cas d'une déclaration d'un compartiment aquifère) et/ou de 'court-circuit' d'une composante à l'autre dans le cas contraire (cf. §. 2.1.1- page 5).

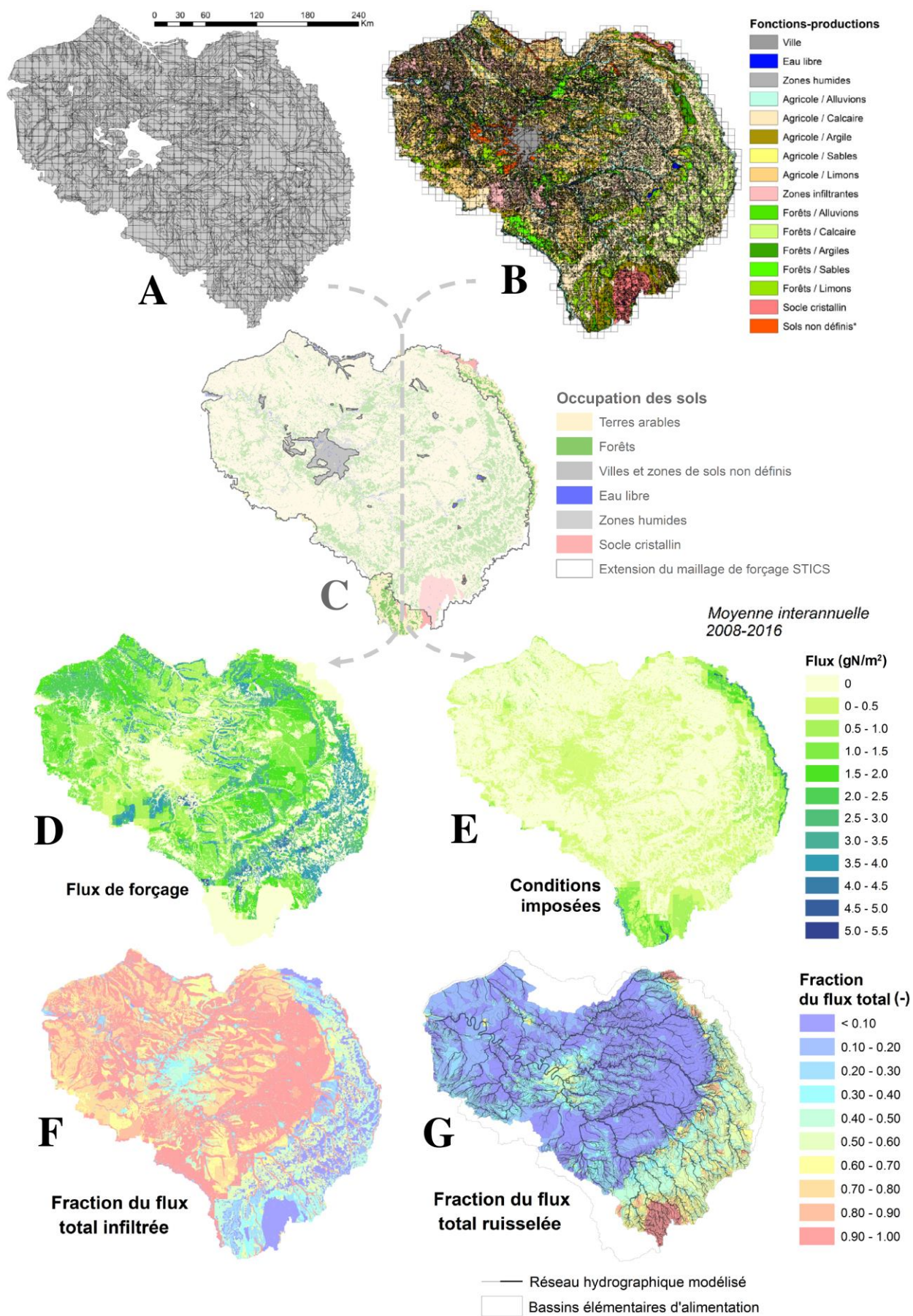


Figure 3 : Mise en œuvre d'un forçage 'test' de la plateforme CaWaQS2.88 via les sorties du modèle agronomique STICS : Application à la lixiviation de l'azote à l'échelle du bassin versant de la Seine. Les significations des illustrations A à G sont précisées en paragraphe 2.1.2.

2.2. Transport couplé de flux d'eau et de matière au sein de la zone non saturée

Tel que précité, les géométries respectivement associées à deux modules en interaction peuvent être différentes. Ainsi, à nouveau, le recours à la librairie *libsqa* permet d'assurer cette transition de flux (Figure 4).

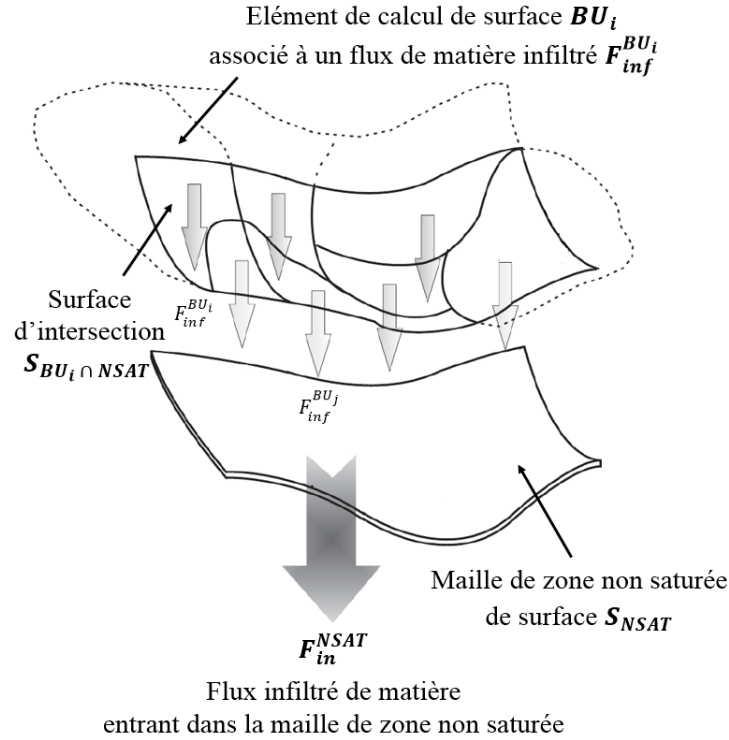


Figure 4 : Procédure de passage de flux de matière du module de surface vers la zone non saturée, dans le cas de topologies respectives différentes.

D'une manière analogue aux opérations réalisées pour les flux d'eau infiltrés (Labarthe, 2016; Flipo, Rivière, *et al.*, 2019), le changement de topologie, dans le cas de flux de matière à destination de la zone non saturée depuis la surface, est réalisé selon l'équation 2 dans laquelle :

- F_{in}^{NSAT} [$M \cdot L^{-2}$] représente le flux de matière entrant dans une maille de zone non saturée,
- $S_{BU_i \cap NSAT}$ [m^2] est la surface d'intersection entre l'élément de calcul de surface BU_i (grain spatial auquel sont calculés les flux infiltrés d'eau et de matière) et la maille de zone non saturée,
- $F_{inf}^{BU_i}$ [$M \cdot L^{-2}$] est le flux infiltré de matière, calculé pour l'élément de calcul de surface BU_i ,
- S_{NSAT} [m^2] est la surface de la maille de zone non saturée,
- N_{BU} [-] est le nombre d'éléments de calcul du bilan de surface, en intersection avec la maille de zone non saturée.

$$F_{in}^{NSAT} = \sum_{i=0}^{N_{BU}} \left[\left(\frac{S_{BU_i \cap NSAT}}{S_{NSAT}} \right) \times F_{inf}^{BU_i} \right] \quad \text{avec} \quad \sum_{i=0}^{N_{BU}} \left(\frac{S_{BU_i \cap NSAT}}{S_{NSAT}} \right) = 1 \quad (2)$$

2.2.1. Conceptualisation

Les paragraphes suivants détaillent la conceptualisation utilisée pour modéliser le transfert de solutés dans le compartiment non-saturé au sein de la plateforme CaWaQS2.88. La conceptualisation des transferts d'eau à travers la zone non saturée repose sur l'approche de (Besbes et de Marsily, 1984), estimant que ces écoulements souterrains à l'échelle du bassin versant peuvent être décrits par l'approche de (Nash et Sutcliffe, 1970), qui assimile les écoulements de la zone non saturée à une cascade, appelée cascade de Nash. La zone non saturée est alors associée à une série de réservoirs, tous de même épaisseur se déversant les uns dans les autres selon une loi exponentielle.

Héritée des travaux de (Gomez *et al.*, 2002), l'approche ici employée considère un transfert de soluté conservatif couplé à un écoulement vertical d'eau. Il est convenu que les concepts ici exposés ne peuvent être applicables pour la modélisation de transferts de chaleur. Dans ce seul cas précis, ce type de transport devra donner lieu à des développements ultérieurs, fondés sur une conceptualisation spécifique.

L'algorithme de transfert intégré à ce compartiment se résume comme suit : Pour une maille donnée, le nombre de réservoirs constitutifs de la chaîne est déterminé selon l'épaisseur de la zone au point considéré. Chaque réservoir de la colonne est caractérisé par deux principaux paramètres :

- une hauteur⁹ H_{res} [mm], ajustable par l'utilisateur en fonction de l'épaisseur totale de la zone non saturée,
- un coefficient de vidange k_q [-], liée à un temps de percolation τ [j] (Equation 3), fonction de la nature du matériau géologique traversé, tel que, pour un pas de temps de calcul Δt [s] :

$$k_q = 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau}\right) \quad (3)$$

Un paramètre supplémentaire est introduit sous forme d'une hauteur minimale seuil d'eau résiduelle H_{min} [mm] dans chaque réservoir de la colonne, dans l'optique de traduire d'une capacité de stockage du compartiment, et donc de soluté. La forme de la fonction de retard de bassins introduite est ainsi définie, au pas de temps journalier, par la relation paramétrique suivante :

$$H_{in,i+1}^t = H_{out,i}^t = k_q(H_i^t - H_{min}) \quad (4)$$

Avec :

- $H_{in,i+1}^t$, la lame d'eau d'infiltration dans le réservoir $i + 1$,
- $H_{out,i}^t$, la lame d'eau sortant du réservoir i ,
- H_i^t , la lame d'eau dans le réservoir i au pas de temps t ,
- H_{min} la lame d'eau critique,
- i , l'index des réservoirs variant de 1 à N ,
- t , l'indice du pas de temps courant.

A chaque pas de temps de calcul, la structure stratifiée de chaque réservoir est évolutive et se modifie de la manière suivante : une lame d'eau infiltrante H_{inf}^t , à un pas de temps de calcul t , et de concentration en soluté C_{inf}^t , engendre l'empilement d'une nouvelle strate dans le réservoir de tête de colonne (*Figure 5*). Celle-ci est ajoutée au sommet de la structure courante du réservoir, déterminée à l'issue du pas de temps précédent $t - 1$. A l'issue de cet ajout, dans le cas où la hauteur d'eau courante du réservoir est supérieure à la hauteur seuil de stockage H_{min} , une vidange, représentative d'un écoulement gravitaire, est alors permise et une certaine lame d'eau $H_{out,i}^t$ est instantanément vidangée selon l'expression 4, lame d'eau à laquelle peut éventuellement s'ajouter une surverse¹⁰ supplémentaire du réservoir, si $H_i^t > H_{res}$.

Si cette vidange a lieu, elle entraîne le mélange d'un certain nombre de strates du réservoir; strates pouvant entièrement ou partiellement participer à la vidange. La hauteur d'eau à vidanger $H_{out,i}^t$ permet de dénombrer un nombre N_s de strates, depuis la plus profonde de réservoir, contribuant à la fourniture de la lame à vidanger. En l'absence d'infiltration, les réservoirs se vidangent jusqu'au niveau seuil H_{min} fixé par le modélisateur. Une fois cette limite atteinte, plus aucun transfert ne se produit et une certaine quantité d'eau et de soluté est alors stockée dans la colonne. La concentration en soluté, associée à la vidange, est calculée selon l'équation 5 dans laquelle $C_{out,i}^t$ représente la concentration de la lame d'eau vidangée en sortie du réservoir i à la fin du pas de temps t . Ce processus est alors réitéré à chaque pas de temps pour l'ensemble des réservoirs de la colonne.

⁹ Valeur commune à l'ensemble des réservoirs de la colonne.

¹⁰ Ce débit de surverse est, *de facto*, associé à la concentration infiltrée C_{inf} au pas de temps courant.

Contribution à la vidange des strates
intégralement prélevées

Contribution à la vidange
d'une strate partiellement prélevée

$$C_{out,i}^t = \frac{\left(\sum_{k=1}^{k=N_s-1} C_{i,k}^t H_{i,k}^t\right) + C_i^{N_s} h_i^{N_s}}{H_{out,i}^t} \text{ avec } h_i^{N_s} < H_i^{N_s} \quad (5)$$

En conditions initiales, si l'utilisateur le souhaite, les niveaux d'eau H^0 dans les réservoirs d'une colonne peuvent être initialisés. Si $H^0 < H_{min}$, plusieurs pas de temps de calcul seront nécessaires afin d'atteindre cette hauteur seuil, durée pendant laquelle sera constitué le stock en soluté au sein de la colonne et aucune vidange n'aura lieu (Figure 6 et Figure 7).

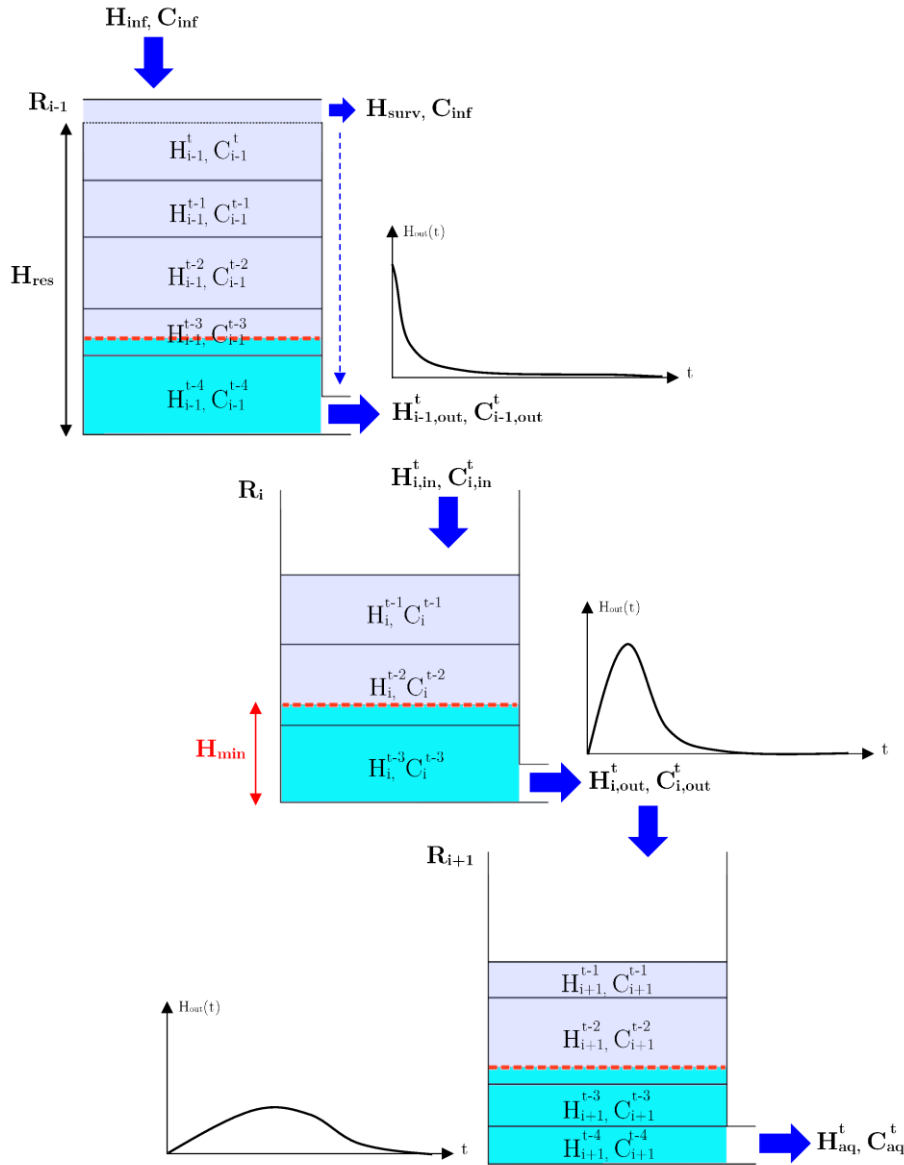


Figure 5 : Schématisation du transfert couplé d'eau et de solutés dans une chaîne de réservoirs stratifiés tel qu'intégré à la plateforme CaWaQS2.88. H_{inf} et C_{inf} représentent respectivement la lame d'eau infiltrée au pas de temps de calcul t et sa concentration en soluté associée. H_{aq} (resp. C_{aq}) désigne la lame d'eau (resp. concentration) d'alimentation aquifère calculée au pas de temps t , en base de colonne.

2.2.2. Vérifications numériques

Afin de s'assurer du bon fonctionnement des nouvelles fonctions ajoutées au code de calcul, une simulation est réalisée sur 730 jours, via une application *test* simple, couplant un module de surface et un

module de zone non saturée. 900 mailles environ discrétisent le compartiment non-saturé¹¹. La conceptualisation ici employée ne considérant pas de flux entre mailles adjacentes, les vérifications suivantes ne portent que sur une unique maille sélectionnée au hasard associée à une cascade de Nash constituée de 4 réservoirs de hauteur $H_{res} = 5 \text{ m}$ et de constante de vidange $k_q = 0.40$. A l'initialisation, les réservoirs sont considérés vides. Le couplage de ces fonctions avec celles assurant le calcul de l'infiltration et des concentrations en sub-surface (§. 2.2) génère sur la durée de simulation une chronique d'intrants servant ici d'entrée au premier réservoir de la colonne.

L'appel à la fonction *mère* régissant le transport de soluté sera conditionné par l'activation ou non de l'option générale de transport dans le fichier de commande. Dans la négative, une autre fonction, indépendante, réalise uniquement le transfert d'eau, et ce, sans emploi de réservoirs stratifiés (Labarthe, 2016). Il convient donc, en premier lieu, de s'assurer de part et d'autre de la cohérence de la dynamique de transfert des flux d'eau. Cet aspect est validé sur la *Figure 6* ci-dessous, matérialisant, de manière synchrone, d'une part, la chronique¹² de débits d'eau en entrée de colonne (*Figure 6a*) et, d'autre part, les débits de sortie simulés en base de colonne (*Figure 6b, c et d*) dans le cas **(i)** d'une activation ou non des fonctionnalités de transport, et ce, **(ii)** pour différentes valeurs de hauteurs seuils de stockage H_{min} . Outre la déformation cohérente du signal d'entrée, ces résultats permettent notamment de mettre en exergue, tel que précédemment évoqué, la durée pendant laquelle se constitue le stock, de plus en plus significative (cf. encadré gris), au fur et à mesure de l'augmentation de la valeur de hauteur de stockage, et au cours de laquelle aucune vidange n'intervient (*Figure 6d* en particulier).

¹¹ A ce stade, l'intérêt de l'aspect spatial réside essentiellement dans la vérification de la bonne distribution et lecture des paramètres d'entrée et de l'écriture des bilans de masse en sortie de modèle.

¹² Dans cette configuration *test*, les valeurs d'infiltrations simulées sont bornées par la capacité maximale d'infiltration journalière du compartiment sol, imposée dans le module de surface (valeur arbitraire de 3 mm.j^{-1}).

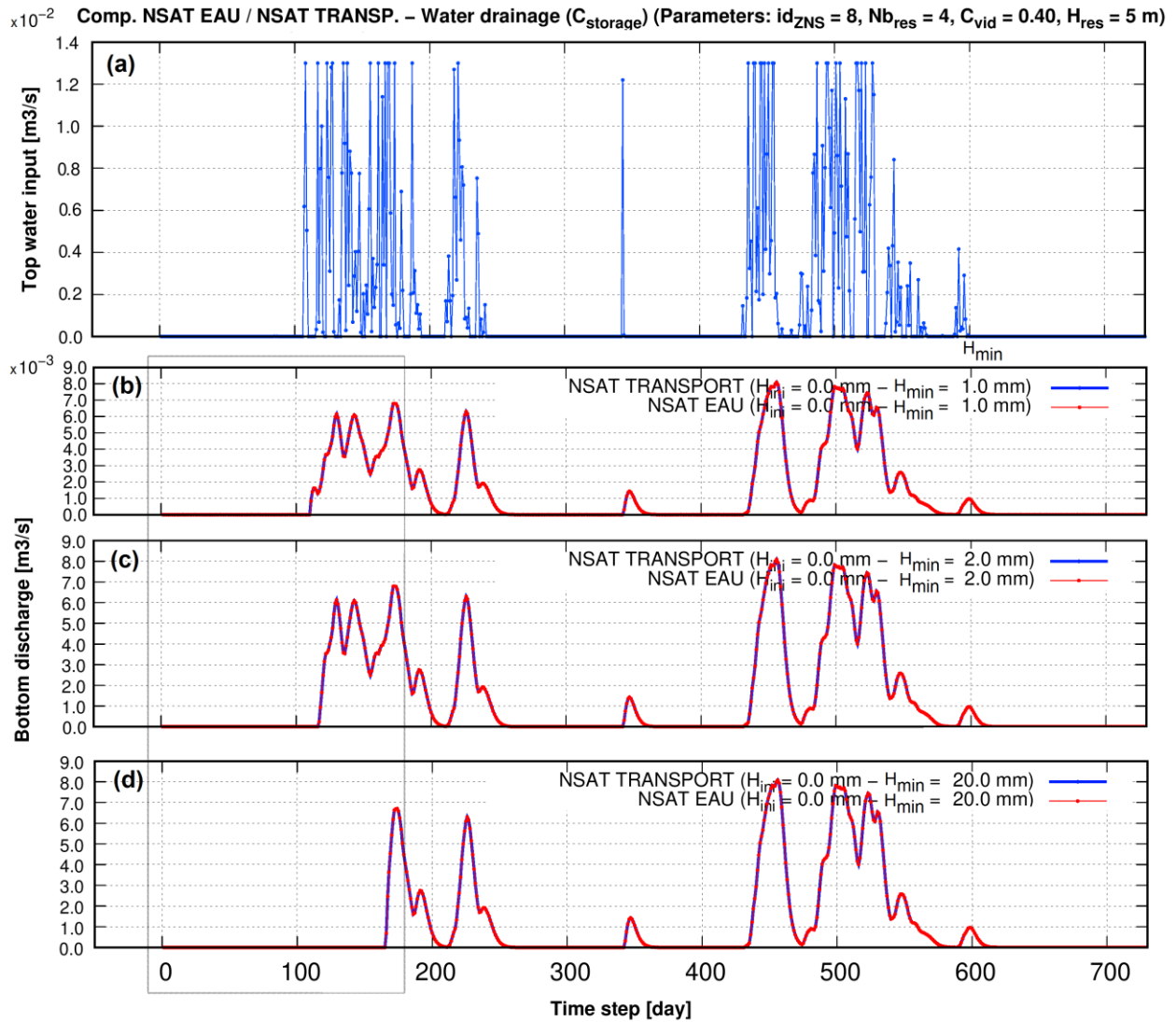


Figure 6 : Comparaisons des évolutions journalières synchrones des débits d'eau simulés, exprimés en $m^3.s^{-1}$, en entrée et sortie de colonne non-saturée dans le cas de l'activation ou non du module de transport. Cas tests pour différentes valeurs seuils de lame stockées.

Ce résultat est présenté d'une manière différente sur la Figure 7, illustrant l'évolution journalière de la variation de stock en eau au sein de la colonne pour différentes valeurs de hauteur seuil de stockage. Une variation positive (resp. négative) traduit un stockage (resp. déstockage) dans la colonne. La période associée aux remplissages initiaux des réservoirs jusqu'à atteindre ce seuil est effectivement marquée par un stockage continu (variations positives - cf. encadré gris).

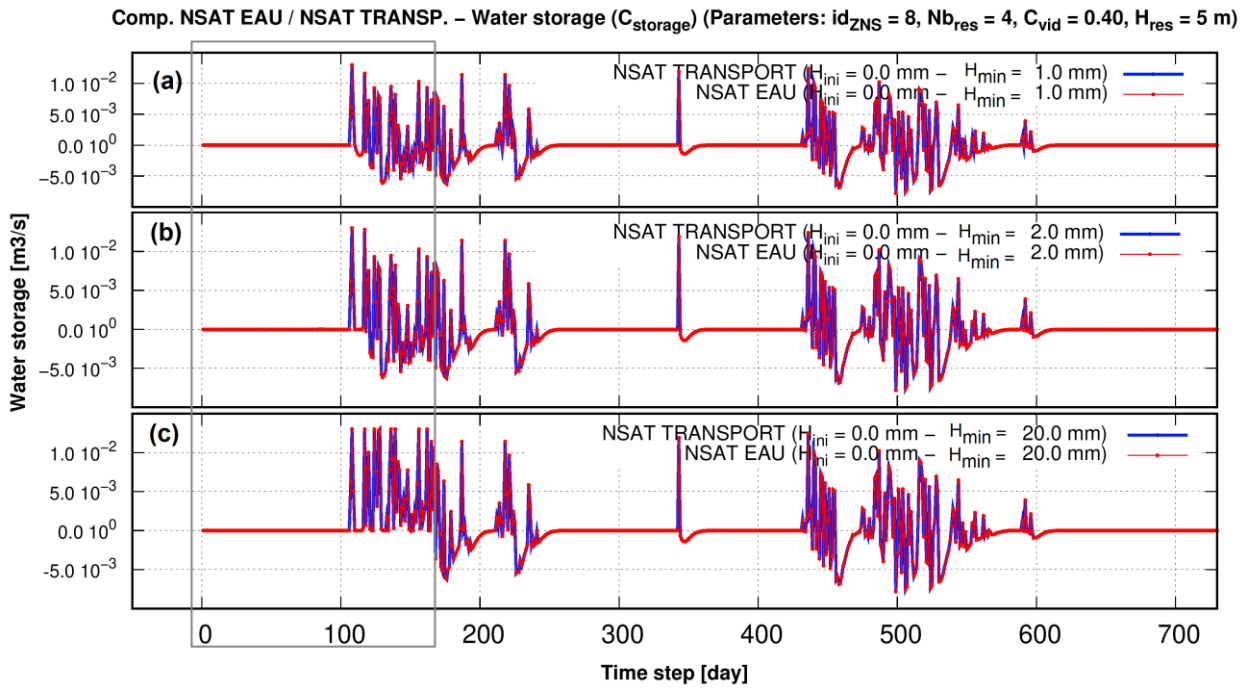


Figure 7 : Comparaisons des évolutions journalières synchrones de variations de stock en eau, exprimées en $\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, au sein d'une colonne non-saturée dans le cas de l'activation ou non du module de transport. Cas tests pour différentes valeurs seuils de lame stockées.

De manière analogue à la Figure 7, la Figure 8 illustre ces mêmes variations de stock, cette fois-ci, en termes de flux de matière stocké dans la colonne pour différentes valeurs seuils de stockage.

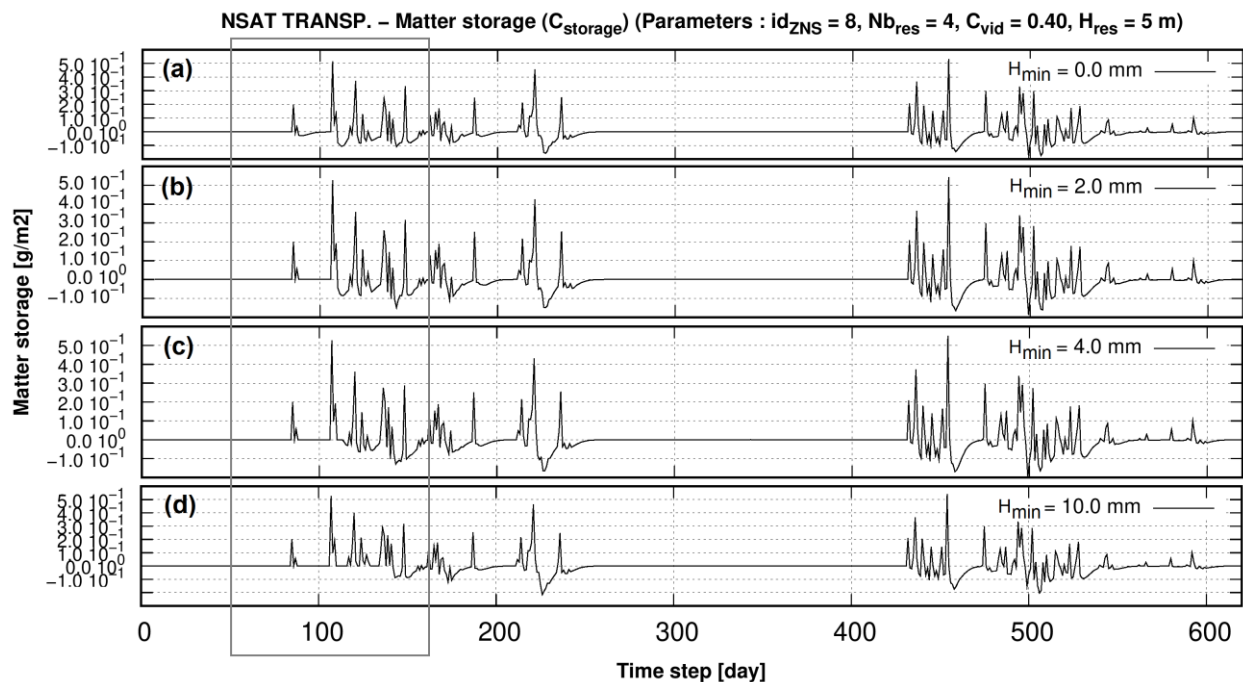


Figure 8 : Comparaisons des évolutions journalières synchrones de variations de stock en soluté, exprimées en $\text{g} \cdot \text{m}^{-2}$, au sein d'une colonne non-saturée dans le cas de l'activation ou non du module de transport. Cas tests pour différentes valeurs seuils de stock.

En parallèle de la Figure 6, la Figure 9 illustre la déformation de la dynamique des flux d'entrée de matière (Figure 9a) par transit au travers de la colonne de réservoirs, pour différentes valeurs de stockage seuil (Figure 9c). En écho au schéma de fonctionnement fourni en Figure 5, la Figure 9b illustre progressivement les étapes de cette déformation, au cours du parcours de chaque réservoir de la colonne.

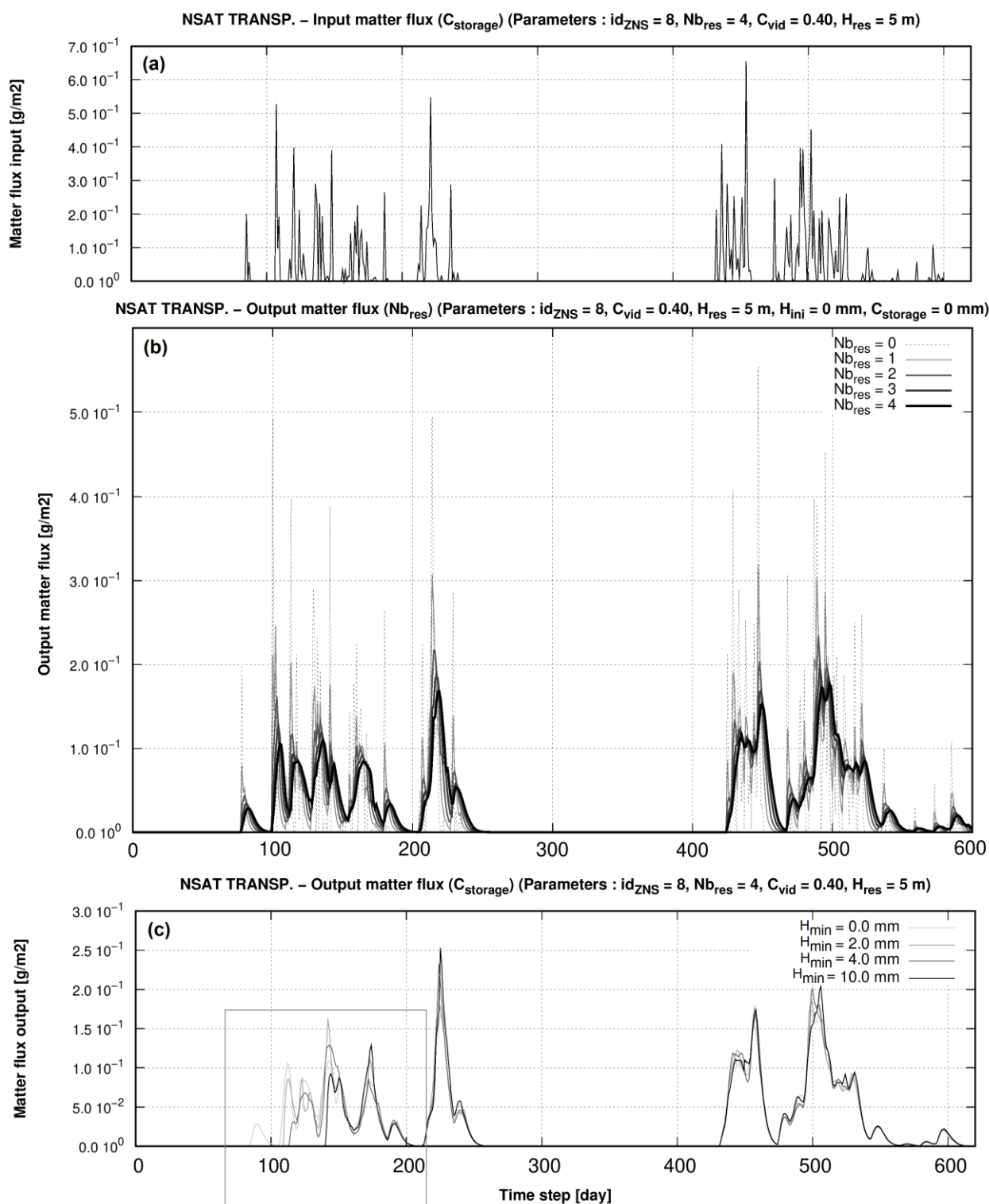


Figure 9 : (a) Chronique journalière de flux de matière, exprimé en $g.m^{-2}$, en entrée de colonne de réservoirs. (b) Chronique journalière de flux de matière en sortie de chaque réservoir de la colonne. (c) Chronique journalière de flux de matière ($g.m^{-2}$) en sortie de la colonne de réservoir pour différentes valeurs seuil de stockage.

Enfin, la Figure 10 illustre le bouclage correct du bilan de masse, à la fois en eau (Figure 10a) et en flux de matière (Figure 10b) simulé par le module de transport en zone non-saturée. Cette erreur est simplement calculée à chaque pas de temps, comme la différence, d'une part, entre la somme des flux entrants et sortants, et, d'autre part, les variations de flux stockés dans les différents réservoirs.

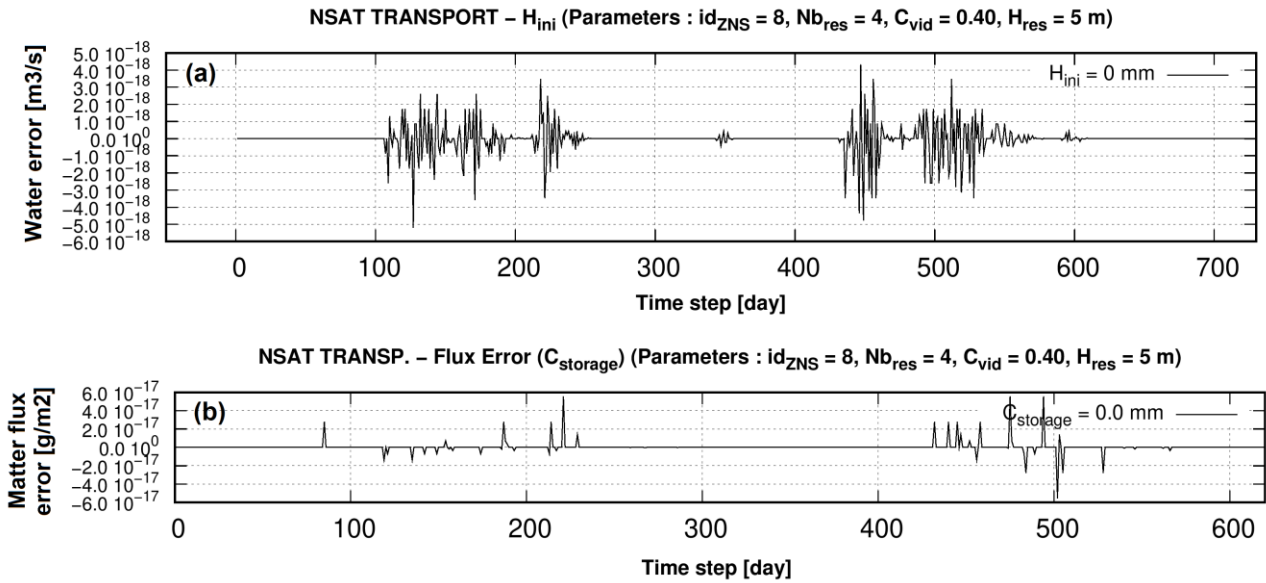


Figure 10 : Exemples de chroniques d’erreur de bilan de masse en eau et flux de matière, à l’issue de la simulation du transport dans une colonne de réservoirs stratifiés.

2.3. CaWaQS et la librairie de transport *libttc*

Trois processus physiques sont à prendre en compte dans un cas de transport de solutés : la convection liée au mouvement du fluide, la diffusion moléculaire liée à l’agitation moléculaire et la dispersion cinématique, qui est un phénomène de mélange lié à l’hétérogénéité du champ de vitesses, et ce, quelle qu’en soit l’échelle d’observation. Le transport de chaleur, lui, doit obéir à deux mécanismes : la conduction dans la matrice solide, d’une part, et l’advection par la phase fluide, analogue à celle des éléments en solution, d’autre part. L’hétérogénéité de vitesse engendre une conduction *fictive*, comparable à la dispersion cinématique. Pour ces deux types de problèmes, l’équation du transport peut s’écrire, de manière générique :

$$\vec{v} \cdot [A\vec{v}X] - \vec{v} \cdot \vec{v}X = B \frac{\partial X}{\partial t} + f \quad (6)$$

Où :

- X désigne la variable d’intérêt du problème (*i.e.* T pour la température ou c pour la concentration en soluté),
- \vec{v} [$\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$] est le vecteur de vitesses de Darcy,
- A et B sont des coefficients dont les définitions respectives dépendent de la nature du transport,
- f , représente un terme source.

Dans le cas d’un transport de soluté, A désigne le coefficient de dispersion alors que dans le transport de chaleur, il est égal à $\lambda_m/\rho_w c_w$ avec λ_m la conductivité thermique du milieu poreux. En parallèle, B fait référence, dans le cas d’un transport de soluté, à la porosité utile du milieu et est égal à $\rho c/\rho_w c_w$ dans un problème de transport de chaleur.

Outre le cas du compartiment de zone non-saturée, la modélisation du transport est réalisée au sein de la plateforme par couplage entre la librairie de calcul *libttc* (Transport Thermique et Concentration) et les librairies des calculs des écoulements :

- *libhyd* pour les écoulements en rivière (dont les développements, opérationnels, sont détaillés dans le paragraphe suivant),
- *libaq* pour les écoulements souterrains. Ce couplage sera réalisé dans une phase de développement ultérieure.

C’est également ce même couplage *CaWaQS-libttc* qui sera sollicité pour modéliser le transport de soluté et/ou de chaleur en système aquifère.

Dans la continuité des exemples précédents, le paragraphe 2.3.1 détaille les principales formulations mathématiques mises en jeu dans ce couplage, appliquées au problème de transport de soluté conservatif dans un réseau hydraulique.

2.3.1. Transport de soluté conservatif en rivière : Couplage *libhyd-libttc*

Dans ce contexte, l'équation générale régissant l'évolution du champ de concentrations volumiques en soluté, par la suite noté \vec{c} [g.m^{-3}], s'exprime selon la formulation 7, dans laquelle :

- D [$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$] est le coefficient de dispersion de l'espèce transportée dans l'eau
- \vec{v} [m.s^{-1}] est le champ de vitesses de l'eau
- f [$\text{g.s}^{-1}.\text{m}^{-1}$] symbolise un flux source latéral d'apport ou de prélèvement au réseau.

$$\vec{\nabla} \cdot [D\vec{\nabla}c] - \vec{v} \cdot \vec{\nabla}c = \frac{\partial c}{\partial t} + f \quad (7)$$

Pour rappel, le réseau hydraulique est discrétisé en tronçons rivière, séparés par des singularités (confluences, diffuences) (Flipo, Rivière, *et al.*, 2020). Les échanges entre un tronçon et l'aquifère sous-jacent sont calculés à l'échelle de l'intersection avec le maillage des formations affleurantes, définissant des éléments rivière (Figure 11), lesquels constituent ici l'échelle élémentaire de la résolution numérique.

Pour une application à un réseau hydraulique, tel que représenté dans la plateforme CaWaQS, les hypothèses considérées pour la résolution sont les suivantes :

- le transport est plan, monodimensionnel : le transport latéral ainsi que les variations du vecteur vitesse au sein d'une section de rivière sont négligés. La seule dimension considérée est orientée le long de l'élément de calcul, dans le sens de l'écoulement,
- le régime est transitoire, *i.e.* $\frac{\partial c}{\partial t} \neq 0$,
- le coefficient de dispersion D du soluté dans l'eau est considéré constant et sa valeur, homogène sur l'ensemble du réseau,
- le transport est passif (*i.e.* non-réactif, conservatif en soluté),
- la valeur de la variable d'intérêt (concentration) est homogène au sein d'un tronçon de rivière,
- les conditions limites sont imposées aux faces des éléments.

Afin de s'affranchir de la variation de vitesse entre la section amont et la section aval d'un élément, l'équation est résolue en débit. Les valeurs de débits Q [$\text{m}^3.\text{s}^{-1}$] aux sections amont et aval de chaque élément ainsi que les sections mouillées S [m^2] (calculées, elles, au centre de chaque élément) sont déterminées par la librairie hydraulique *libhyd*¹³, à chaque itération de calcul. Compte tenu de l'ensemble de ces conditions et hypothèses, l'équation 7 est reformulée de la manière suivante :

$$\frac{\partial(Qc)}{\partial x} - SD \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial(Sc)}{\partial t} + f_x \quad (8)$$

Dans la suite du document, les indices n et i font respectivement référence aux discrétisations en temps et en espace de l'équation 8. On notera ainsi $c_i^n = c(t_n, x_i)$, la concentration calculée au centre de l'élément i , au pas de temps n . Δt et Δx désignent respectivement le pas de temps de calcul et la distance, de centre à centre, entre deux éléments de calculs adjacents.

L'équation est résolue par l'emploi de la méthode des différences finies, selon un schéma semi-implicite en temps. L'objectif est de substituer les dérivées partielles de l'équation 8 par des différences divisées ou des combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction pour chacun les éléments de calcul du réseau. Un facteur d'implicité $\theta \in [0; 1]$ est introduit, permettant de tenir compte d'une pondération de cette approximation discrète aux pas de temps $n + 1$ (courant) et n (précédent), selon les quantités θ et $(1 - \theta)$ respectivement.

Ainsi, la discrétisation de l'équation 8 est rendue possible par approximation, d'une part, des deux dérivées premières par différences décentrées à droite, selon les expressions 9, et, d'autre part, de la dérivée seconde par différence centrée, comme précisé en formule 10.

¹³ Pour rappel, la librairie hydraulique *libhyd* a recours à l'emploi du schéma de Muskingum pour le routage des débits en rivière et de la formulation de Manning-Strickler pour le calcul des hauteurs d'eau.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(t_n, x_i) \approx \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t} \quad (9)$$

$$\frac{\partial c}{\partial x}(t_n, x_i) \approx \frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{\Delta x}$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(t_n, x_i) \approx \frac{c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n}{\Delta x^2} \quad (10)$$

Compte tenu du choix d'un schéma de résolution semi-implicite, les dérivées selon la variable d'espace x sont évaluées au temps $(\theta t^{n+1} + (1 - \theta)t^n)$. Chaque membre de l'équation 8 est ainsi respectivement transformé, sous forme discrétisée, pour un élément i de calcul, tel que :

$$\frac{\partial(Sc)}{\partial t} \approx \frac{S_i^{n+1}c_i^{n+1} - S_i^n c_i^n}{\Delta t} \quad (11)$$

$$\frac{\partial(Qc)}{\partial x} \approx \theta \frac{Q_i^{n+1}c_i^{n+1} - Q_{i-1}^{n+1}c_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} + (1 - \theta) \frac{Q_i^n c_i^n - Q_{i-1}^n c_{i-1}^n}{\Delta x} \quad (12)$$

$$-SD \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \approx -D \left[\theta S_i^{n+1} \frac{c_{i+1}^{n+1} - 2c_i^{n+1} + c_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} + (1 - \theta) S_i^n \frac{c_{i+1}^n - 2c_i^n + c_{i-1}^n}{\Delta x^2} \right] \quad (13)$$

$$f_x = \theta f_x^{n+1} + (1 - \theta) f_x^n \quad (14)$$

Une refactorisation des termes 11 à 14 aboutit à :

$$\begin{aligned} & \frac{S_i^{n+1}c_i^{n+1} - S_i^n c_i^n}{\Delta t} + \theta \left[\left(-\frac{DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \right) c_{i+1}^{n+1} + \left(\frac{Q_i^{n+1}}{\Delta x} + \frac{2DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \right) c_i^{n+1} + \left(-\frac{Q_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \right) c_{i-1}^{n+1} \right] + \dots \\ & \dots + (1 - \theta) \left[\left(\frac{S_i^n}{\Delta x^2} \right) c_{i+1}^n + \left(\frac{Q_i^n}{\Delta x} + \frac{2S_i^n}{\Delta x^2} \right) c_i^n + \left(\frac{S_i^n}{\Delta x^2} - \frac{Q_{i-1}^n}{\Delta x} \right) c_{i-1}^n \right] = \theta f_x^{n+1} + (1 - \theta) f_x^n \end{aligned} \quad (15)$$

L'équation 15 se synthétise alors sous forme vectorielle générale 16.

$$\frac{\overrightarrow{S^{n+1}c^{n+1}} - \overrightarrow{S^n c^n}}{\Delta t} + \theta \overrightarrow{\bar{A}c^{n+1}} = -(1 - \theta) \overrightarrow{\bar{B}c^n} + \overrightarrow{\bar{\theta}F^{n+1}} + (1 - \theta) \overrightarrow{\bar{F}^n} \quad (16)$$

Dans cette expression, les matrices \bar{A} et \bar{B} , toutes deux carrées d'ordre M (nombre total d'éléments de calculs), sont respectivement définies par les coefficients non nuls ci-dessous.

$$\bar{A}: \begin{cases} A_{i,i-1} = -\frac{Q_{i-1}^{n+1}}{\Delta x} - \frac{DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \\ A_{i,i} = \frac{Q_i^{n+1}}{\Delta x} + \frac{2DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \\ A_{i,i+1} = -\frac{DS_i^{n+1}}{\Delta x^2} \end{cases} \quad \text{et} \quad \bar{B}: \begin{cases} B_{i,i-1} = \frac{S_i^n}{\Delta x^2} - \frac{Q_{i-1}^n}{\Delta x} \\ B_{i,i} = \frac{Q_i^n}{\Delta x} + \frac{2S_i^n}{\Delta x^2} \\ B_{i,i+1} = \frac{S_i^n}{\Delta x^2} \end{cases} \quad (17)$$

Dans le cas de la sélection d'un schéma purement implicite (*i.e.* $\theta = 1$), l'équation 16 se simplifie tel que :

$$\frac{\overrightarrow{S^{n+1}c^{n+1}} - \overrightarrow{S^n c^n}}{\Delta t} + \overrightarrow{\bar{A}c^{n+1}} = \overrightarrow{\bar{F}^{n+1}} \quad (18)$$

Dans cette formulation 18, \vec{F}_i désigne le vecteur contenant les valeurs de flux de matière totaux F_i apportés au réseau hydraulique, pour chaque élément de calcul i . Ces flux désignent, dans l'état des développements actuels, les flux de matières associés aux lames d'eau de ruissellement de sub-surface, calculé par le module de transport de surface, et routés vers la rivière.

Dans la version finalisée du transport, tenant compte du transport en aquifère, ces flux intégreront également les apports par les échanges nappe-rivière ainsi que les apports associés aux zones de débordements de nappe simulés par les autres modules. Cependant, des options complémentaires ont d'ores et déjà été intégrées à l'outil dans l'optique de tenir compte d'apports exogènes, ponctuels ou diffus, au réseau hydraulique.

2.3.2. Options complémentaires de définition des apports d'eau et/ou de matière à un réseau hydraulique

Rassemblés sous le terme général d'*inflows*, CaWaQS2.88 permet l'introduction d'apports externes à un réseau hydraulique sous forme de combinaisons de chroniques, constantes ou variables dans le temps, de débits, de concentrations en solutés et/ou de température. Cette nouvelle option pourra, par exemple, être mobilisée pour tenir compte, dans un cas réel, de chroniques de rejets provenant de stations d'épuration, ou encore, plus généralement, de flux de forçages directs au réseau, issus d'autres modèles. La suite de ce paragraphe présentera, en particulier, un exemple d'application sur cet aspect.

Ces apports peuvent être définis de manière ponctuelle ou diffuse, choix laissé libre à l'utilisateur, selon l'apport à modéliser et le type de données à disposition. Dans le cas d'apports ponctuels, outre les chroniques associées, seules les localisations respectives de ces *inflows* sont requises, exprimées selon la distance ($x_{upstream}$ - Figure 11) au point de confluence amont du bief de rivière ciblé.

Pour des apports diffus, la longueur sur laquelle s'étale l'apport est également à préciser. Le code est alors chargé de déterminer l'ensemble des éléments de calcul impactés et d'y distribuer spatialement, si nécessaire les intrants, à chaque pas de temps.

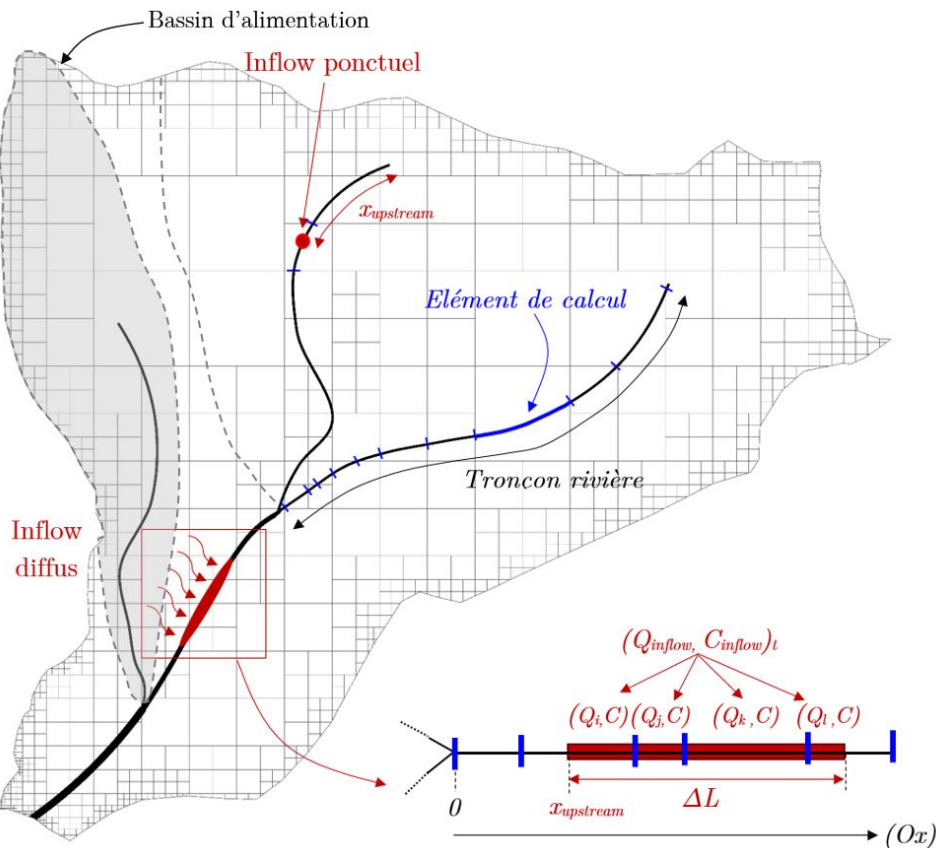


Figure 11 : Illustration schématique du découpage géométrique d'un réseau hydraulique dans la plateforme CaWaQS2.88. Distribution spatiale d'un apport diffus à un tronçon de réseau hydraulique.

A titre d'exemple, comme illustré sur la *Figure 11*, pour un apport diffus caractérisé, à un pas de temps de calcul donné n , par un débit global Q_{inflow}^n et une concentration C_{inflow}^n , sur une distance ΔL , ce débit est distribué selon l'égalité 19 dans laquelle :

- N_E désigne le nombre total d'éléments de calcul impactés par l'*inflow* diffus,
- y_k est la longueur d'*inflow* en juxtaposition avec l'élément de calcul k .

$$Q_{inflow}^n = \sum_{k=1}^{N_E} \left(\frac{y_k}{\Delta L} Q_k^n \right) \quad \text{avec} \quad \sum_{k=1}^{N_E} \frac{y_k}{\Delta L} = 1 \quad (19)$$

Afin d'évaluer le bon fonctionnement de cette optionnalité¹⁴, l'exemple suivant proposé reprend comme support le cas de l'application Seine, précédemment utilisée en paragraphe 2.1.2 et fixe pour objectif, dans un premier temps, d'évaluer le réalisme de la simulation des débits d'eau de la Seine à la station hydrométrique de Vernon (point de mesure situé le plus en aval de la Seine), *via* des forçages en flux d'eau provenant d'autres modèles.

Pour ce faire, il est choisi de conjointement mettre en application, **(i)** les fonctionnalités de forçage de surface, évoquées en paragraphes 2.1.1 et 2.1.2, qui permettront de simuler la composante d'eau ruisselée en subsurface, routée vers le réseau superficiel (par forçage distribué en eau du module de surface *via* le recours au drainage simulé par STICS sous zones agricoles¹⁵), et, d'autre part, **(ii)** les options de forçages diffus directs au réseau pour tenir compte de la composante de base des débits.

Ainsi, en complément des données précédemment mobilisées pour modéliser les flux de matière en subsurface, les flux d'eau journaliers tels que simulés par les applications régionales MODCOU (Viennot et Abasq, 2013; Gallois, Viennot et Verjus, 2017; Gallois et Viennot, 2018) sur le bassin, fournis au réseau depuis le système aquifère modélisé ont été utilisés pour injection au réseau par *inflows*. Ces flux d'eau journaliers intègrent à la fois la composante phréatique (alimentation des rivières par les formations aquifères) et la composante de débordement de nappe¹⁶.

Cette méthodologie particulière est ici choisie dans l'optique d'étendre ces tests au transport d'azote dans le réseau hydrographique, par la suite évoqués en paragraphe 2.3.3, et afin d'intégrer une composante d'apport de flux de nitrates depuis le système souterrain, et ce, dans l'attente de la finalisation du couplage CaWaQS-*libttc* pour ce compartiment.

L'ensemble de ces flux de forçage sont ici utilisés sous format préagrégé à l'échelle de chacun des 7 400 bassins élémentaires d'alimentation du bassin (Figure 12a). Les données de flux d'eau sont ainsi disponibles sous forme de volumes d'eau journaliers, intégrés sur chaque bassin d'alimentation. De fait, l'option d'apports par *inflows* diffus est alors mobilisée pour distribuer latéralement ces volumes de façon automatique, sur l'ensemble des quelques 21 800 éléments constitutifs du réseau modélisé.

Les débits de la Seine à Vernon, simulés dans ce contexte atypique sont proposés en Figure 13, sur la période 2008-2016. Sous ces conditions particulières de calcul (courbe bleue), la comparaison entre les courbes proposées (simulation couplée classique CaWaQS – courbe noire) ou avec les valeurs observées ne constituent pas ici une finalité en soi, mais permet d'attester de la simulation cohérente des débits en rivières, en ayant recours intégralement aux nouvelles fonctionnalités de CaWaQS.

¹⁴ ... applicable donc, simultanément si nécessaire, pour les deux types de réseaux hydrauliques proposés par la plateforme (Figure 1).

¹⁵ Hors zone agricole, et d'une manière plus générale, hors zones de forçage externe en eau, le bilan initialement simulé par CaWaQS est automatiquement utilisé.

¹⁶ Dans ce contexte, il n'est donc, bien évidemment pas ici question, de vérifier d'un quelconque bilan de flux d'eau simulé du système.

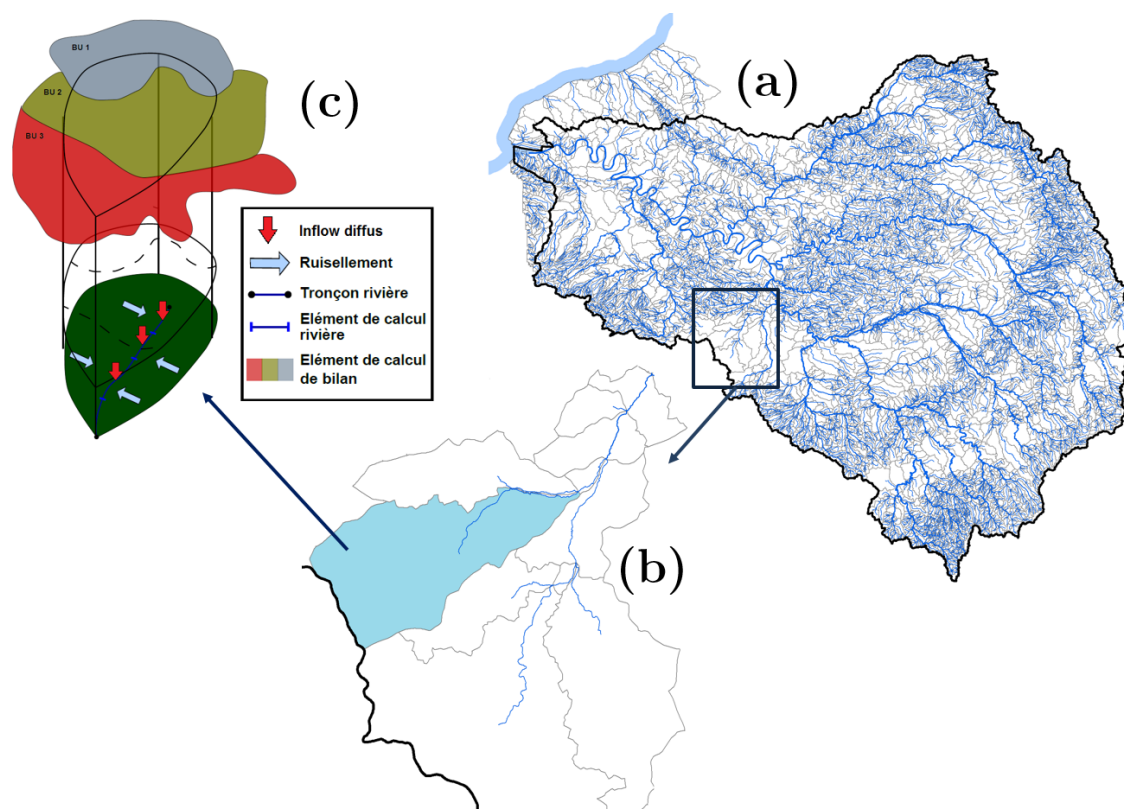


Figure 12 : (a,b) Cartographies des bassins élémentaires d'alimentation des tronçons rivières du réseau hydrographique de la Seine. (c) Rappel schématique des relations entre éléments de calcul de surface, du réseau hydrographique et des inflows dans le cadre de simulation proposé.

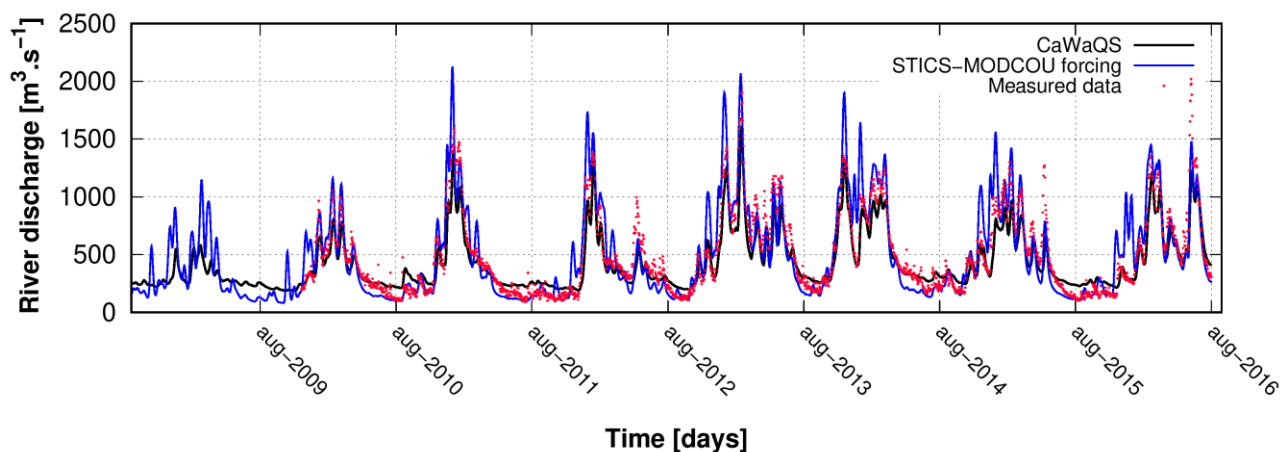


Figure 13 : Illustration des nouvelles fonctionnalités de forçage de la plateforme CaWaQS2.88 par des flux d'eau externes (issus de la chaîne de modèles STICS-MODCOU) : chronique de débits reconstitués au niveau de la station hydrométrique de la Seine à Vernon.

2.3.3. Application test au transport de nitrates dans le réseau hydrographique

Dans la continuité du paragraphe 2.3.2, outre l'ajout des flux azotés STICS à la configuration du forçage du module de surface CaWaQS, la configuration des *inflows* diffus a ici été amendée des chroniques de concentrations en nitrates telles que simulées par MODCOU ; chroniques ainsi en phase avec les débits d'origine aquifère évoqués précédemment¹⁷. L'intégration de ces apports diffus dans le couplage avec la

¹⁷ L'agrégation des flux (eau et concentrations en nitrates) à l'échelle spatiale des bassins versants d'alimentation CaWaQS à partir des flux bruts simulés par la chaîne STICS-MODCOU sur l'ensemble du bassin de la Seine est le résultat d'une lourde chaîne de traitement dont les détails techniques, disponibles dans Passy *et al.*, 2018 ne seront pas repris ici.

librairie *libttc*, permet, à chaque pas de temps, le calcul d'un apport massique total de matière à l'échelle de chaque élément de rivière, cumulant donc les apports depuis la surface et ceux représentatifs d'une contribution aquifère.

Un premier résultat intégrateur de l'ensemble des nouvelles fonctionnalités de transport de la plateforme est proposé en *Figure 14*, illustrant la spatialisation des niveaux moyens de contamination nitrique du réseau principal du bassin de la Seine, simulé dans ces conditions par l'outil CaWaQS2.88, sur la période de calcul 2008-2016.

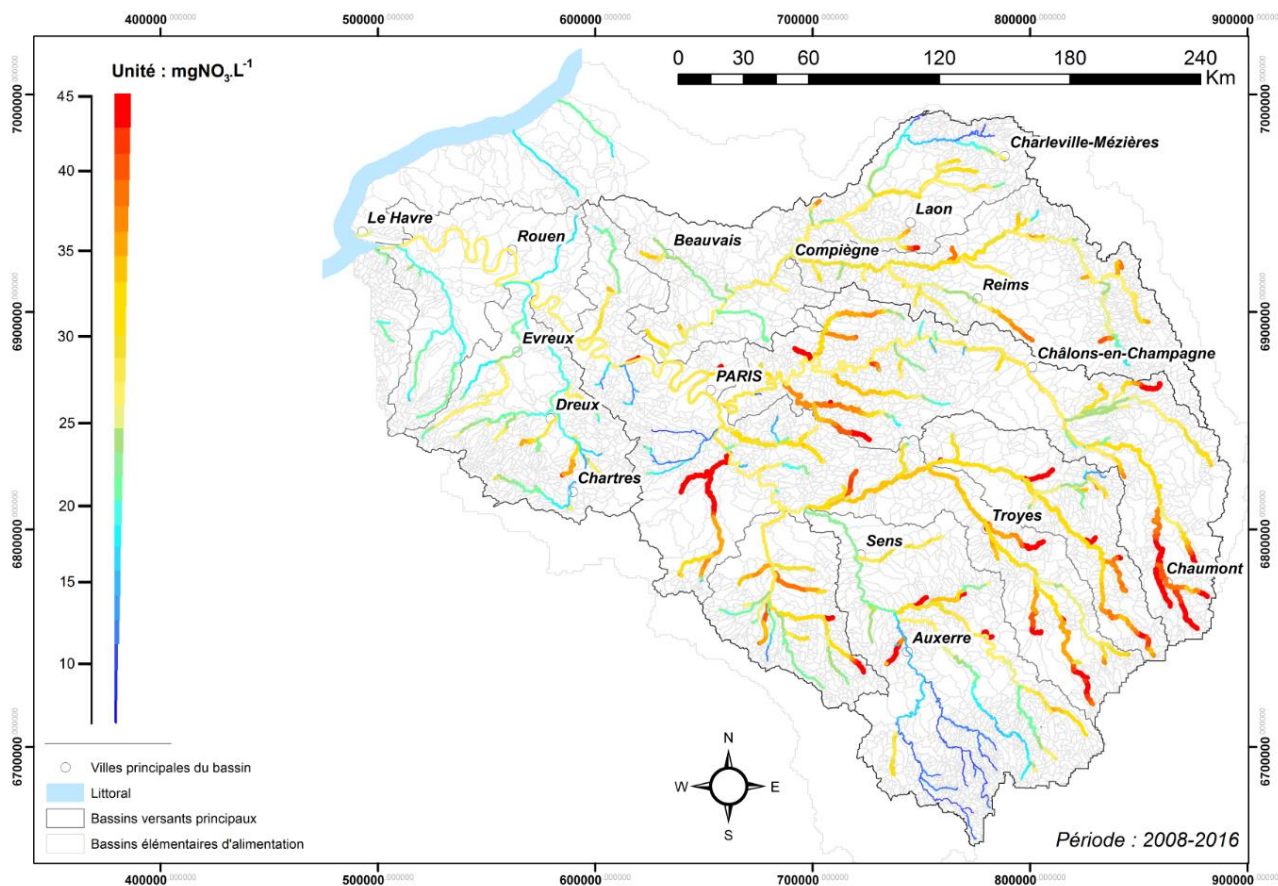


Figure 14 : Niveaux moyens de pollution nitrique dans le réseau hydrographique principal simulé par CaWaQS2.88 sur la période 2008-2016

Il est nécessaire ici de rappeler que la nature du couplage CaWaQS-*libttc* ne rend compte, au stade actuel des développements informatiques, que de processus purement hydrauliques. Bien que composantes primaires essentielles au transport de nutriments en rivière, ceux-ci n'intègrent donc pas de facteurs bio-géochimiques intervenant, en particulier, aux niveaux des zones humides riveraines, contrôlant significativement les flux (par dénitrification riparienne) et parvenant effectivement au réseau hydrographique (Passy *et al.*, 2018).

Conclusion

Pris dans leur ensemble, les avancées techniques centrées autour de la thématique de transport, illustrées dans ce rapport, laissent entrevoir de nombreuses opportunités quant à l'extension des champs d'application de la plateforme CaWaQS2.x, outil de modélisation des hydrosystèmes du PIREN-Seine. Les développements actuels permettent le transport de multiples solutés passifs dans les domaines superficiels et non-saturés. A terme, ces fonctionnalités seront étendues de manière à permettre les transferts de flux de matière et de chaleur au sein du système aquifère. A titre d'exemple, il est prévu d'initier début 2021, dans le cadre du PIREN-Seine, des travaux visant à étendre à l'échelle régionale une précédente étude exploratoire menée localement, fondée sur une association couplant modèles hydrogéologiques et agronomiques (Gallois, Puech and Viennot, 2018) afin de caractériser l'impact de la qualité des eaux du système par certains produits phytosanitaires.

La gestion durable des ressources en eau, tant du point de vue de sa disponibilité, que de sa qualité physico-chimique et écologique, en passant par son potentiel de production d'énergie, sera sous-tendue dans le futur par notre capacité à anticiper les effets du changement climatique, l'évolution des demandes, et les nouveaux systèmes de gouvernance relatifs à la gestion des milieux anthropisés (gestion des infrastructures, politiques de développement territorial). Il sera ainsi impératif de décrire aussi précisément que possible les évolutions temporelles et spatiales des transferts de solutés, de chaleur et d'eau dans les différents compartiments, tout en tenant compte des changements globaux. Dans ce cadre, les équipes du programme PIREN-Seine développent un outil de modélisation intégrée visant à simuler des échanges thermiques entre l'atmosphère et la surface (sol, rivière et lac) et les systèmes aquifères. Un premier couplage lâche entre la plateforme ORCHIDEE (développée par l'IPSL) et la plateforme CaWaQS, fondé sur la résolution au pas de temps horaire d'un bilan énergétique est actuellement en développement. Celui-ci sera appliqué au bassin de la Seine (75 000 km²). Afin d'atteindre ces objectifs, des développements conceptuels complémentaires seront nécessaires, tels que la représentation des transferts entre aquifères, ou encore, la réactivité de l'interface nappe-rivière à l'échelle régionale.

La simulation conjointe des flux d'eau, de solutés et de chaleur rendra alors possible l'évaluation des impacts directs et des effets induits par les changements globaux. Cette chaîne de modèles dits « d'impact » servira de base pour étudier la résilience du socio-écosystème Seine en période de crise face aux événements extrêmes hydro-climatiques. Ces outils serviront également de socle à une réflexion prospective sur la gestion et l'exploitation de la ressource. Cette réflexion portera à la fois sur les aspects quantitatifs (usages, disponibilité, potentialité, renouvellement, recharges) et qualitatifs (fonctionnement biogéochimique des réservoirs et impacts sur les secteurs aval durant les étiages).

Bibliographie

- Besbes, M. et de Marsily, G. (1984). *From infiltration to recharge: use of parametric transferfunction*. Journal of Hydrology, 74:271 – 293.52,53,118.
- Brisson, N. *et al.* (2009) *Conceptual basis, formalisations and parametrization of the STICS crop model*. Edited by Quae. Update Sciences and Technologies.
- Cunge, J. A. (1969) 'Au sujet d'une méthode de calcul de propagation de crues (méthode Muskingum)', *J. Res. in Hydrology*, 7(2), pp. 205–230.
- Flipo, N. *et al.* (2005) 'Hydrological part of CaWaQS (CAtachment WATER Quality Simulator): fitting on a small sedimentary basin', *Verh. Internat. Verein. Limnol.*, 29(2), pp. 768–772.
- Flipo, N. *et al.* (2012) 'Hybrid fitting of a hydrosystem model: long term insight into the Beauce aquifer functioning (France)', *Water Resources Research*, 48, p. W05509. doi: 10.1029/2011WR011092.
- Flipo, N., Rivière, A., *et al.* (2019) *Catchment Water Quality Simulator : CaWaQS*. Rapport de fin de phase VII du programme PIREN-Seine. doi: [10.26047/PIREN.rapp.synth.2019.vol4](https://doi.org/10.26047/PIREN.rapp.synth.2019.vol4).
- Flipo, N., Gallois, N., *et al.* (2019) 'Pluri-annual water budget on the Seine basin: past, current and future trends', in: Flipo N., Labadie P., and Lestel L. (eds.), *The Seine river basin, Handbook of Environmental Chemistry*, Springer, Chapter 2, Berlin, Heidelberg, doi : [10.1007/978-3-642-01939-2_392](https://doi.org/10.1007/978-3-642-01939-2_392)
- Flipo, N., Rivière, A., *et al.* (2020) *CaWaQS2.77 : Notice technique*. Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris.
- Flipo, N., Gallois, N. and Schuite, J. (2020a) *Recalibration du bilan hydrologique de surface du bassin de la Seine à l'aide de la méthode HYMIT*. Rapport d'avancement PIREN-Seine, phase VIII.
- Flipo, N., Gallois, N. and Schuite, J. (2020b) *Transformations des précipitations par le bassin de la Seine - Projet AQUIVAR : Rapport intermédiaire*. Rapport technique d'étude, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Agence de l'eau Seine-Normandie, 93 p.
- Gallois, N. *et al.* (2019) *Stratégie de calibration et modélisation de l'hydrosystème du bassin versant des Avenelles*. Rapport de fin de phase VII PIREN-Seine, In : *Fonctionnement hydrogéophysique des interfaces nappe-rivière et conséquences sur la ressource en eau*, doi: [10.26047/PIREN.rapp.synth.2019.vol4](https://doi.org/10.26047/PIREN.rapp.synth.2019.vol4).
- Gallois, N., Ledoux, E. and Flipo, N. (2020) *Mise à jour du modèle mathématique de l'hydrosystème de Volvic - Phase I : Migration de l'application numérique MODCOU-NEWSAM vers la plateforme de modélisation CaWaQS*. Rapport technique d'étude R310320NGAL, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Société des Eaux de Volvic/Danone Waters France, 90 p.
- Gallois, N. and Viennot, P. (2018) *Modélisation de la pollution diffuse d'origine agricole des grands aquifères du bassin Seine-Normandie : Actualisation des modélisations couplées STICS-MODCOU – Modélisation de scénarios agricoles sous changement climatique*. Rapport technique d'étude, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Agence de l'eau Seine-Normandie, 260 p.
- Gallois, N., Puech, T. and Viennot, P. (2018) *Modélisation des transferts de produits phytosanitaires vers les eaux souterraines : Cas de l'atrazine et de ses métabolites sur le bassin amont de la Vesle (Marne)*. Rapport technique d'étude, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, INRA, Agence de l'eau Seine-Normandie, 141 p.
- Gallois, N., Viennot, P. and Verjus, P. (2017) *Modélisation mathématique du comportement hydrogéologique des formations tertiaires du bassin parisien*. Rapport technique d'étude, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Agence de l'eau Seine-Normandie - DRIEE Île-de-France, 166 p.
- Gomez, E. *et al.* (2002) *Modélisation intégrée du transfert de nitrates à l'échelle d'un hydrosystème régional : Application du bassin de la Seine*. Thèse de doctorat, Ecole des Mines de Paris.
- King, D. *et al.* (1995) *Base de données géographique des sols de France à l'échelle du 1/1000000. Notice générale d'utilisation*.
- Labarthe, B. (2016) *Quantification des échanges nappe-rivière au sein de l'hydrosystème Seine par modélisation multi-échelle*. Thèse de doctorat, MINES ParisTech, PSL Research University.
- Ledoux, E. (1980) *Modélisation intégrée des écoulements de surface et des écoulements souterrains sur un bassin hydrologique*. Thèse de doctorat, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris.

- Maillot, M. (2019) *Étude des remontées de nappe de Paris et de la Petite Couronne lors des épisodes de crue de la Seine et de la Marne*. Thèse de doctorat, PSL Research University. [\(NNT : 2019PSLEM057\)](#). [\(tel-02510302\)](#)
- Nash, J. E. and Sutcliffe, J. V (1970) 'River flow forecasting through conceptual models. Part I, a discussion of principles', *Journal of Hydrology*, 10, pp. 282–290.
- Passy, P. et al. (2018) *Modélisation des apports diffus d'azote et de phosphore aux masses d'eau de surface du bassin Seine-Normandie*. Rapport technique d'étude, Collaboration FIRE, UMR METIS Sorbonne Université, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Agence de l'eau Seine-Normandie, 50 p.
- Puech, T., Schott, C. and Mignolet, C. (2018) *Modélisation des pollutions diffuses d'origine agricole sur le bassin Seine-Normandie : Evolution des bases de données pour caractériser les dynamiques des systèmes de cultures sur le bassin Seine-Normandie*. Rapport technique d'étude, INRA, Agence de l'eau Seine-Normandie, 228 p.
- Séraphin, P. et al. (2018) *Comparaison d'un modèle SVAT ('Soil-Vegetation-Atmosphere-Transfer') avec un modèle réservoir pour l'estimation du bilan d'eau de surface du bassin des Avenelles*. Rapport PIREN-Seine phase VII.
- Viennot, P. and Abasq, L. (2013) *Modélisation de la pollution nitrique des grands aquifères du bassin de Seine-Normandie à l'échelle des masses d'eau*. Rapport technique d'étude, Centre de Géosciences, Ecole des Mines de Paris, Agence de l'eau Seine-Normandie, 173 p.
- Wang, S. et al. (2016) *Création du module Libwet de simulation des interactions gravières-aquifères*. Rapport PIREN-Seine phase VII.