

# Modélisation du lessivage des bromures dans des cases lysimétriques par la méthode numérique des lignes

Simulation of bromide leaching in pan lysimeters using the numerical method of lines

R. MAJDOUB<sup>1</sup>, J. GALLICHAND<sup>2\*</sup>, J. CARON<sup>3</sup>

Reçu le 27 janvier 2000, accepté le 18 juin 2001\*\*.

## SUMMARY

Simulation of solute transport under transient unsaturated conditions is generally based on the dispersion-advection equation (DAE); a partial differential equation of the parabolic type under unsaturated conditions. The DAE has been solved by various numerical methods, such as finite elements and finite differences. However, these methods require advanced knowledge in mathematics and computer programming, in addition to specific adaptations to each problem in order to avoid numerical difficulties such as stability and convergence. The numerical method of lines (NML) can solve complex problems while keeping programming to a level accessible to a large number of engineers and scientists. The purposes of this article are:

- to develop and evaluate the numerical performance of a NML model (TSOL) that solves the DAE coupled with RICHARD'S equation under unsaturated conditions;
- to compare results of the TSOL model with those of a recognized finite elements model (HYDRUS);
- and to validate the TSOL model with experimental data collected during 195 days under a potato field.

The experimental setup was installed on September 1994 in a potato field located at Saint-Pierre, Île d'Orléans, near Québec City. It consisted of three pan lysimeters (A, B, and C) with a surface area of 0.48 m<sup>2</sup> and a depth of

1. Étudiant gradué, Département des sols et de génie agroalimentaire, FSAA, Université Laval, Québec (QC), Canada, G1K 7P4.
2. Professeur titulaire, Département des sols et de génie agroalimentaire, FSAA, Université Laval, Québec (QC), Canada, G1K 7P4.
3. Professeur agrégé, Département des sols et de génie agroalimentaire, FSAA, Université Laval, Québec (QC), Canada, G1K 7P4.

\* Correspondance. E-mail : jgall@grr.ulaval.ca

\*\* Les commentaires seront reçus jusqu'au 30 décembre 2002.

1.00 m, installed in an undisturbed sandy soil. On May 12, 1995, 15 g of KBr, dissolved in 60 mL of water, were applied uniformly over the surface of each pan lysimeter. The applied bromide was monitored until November 23, 1995. The monitoring period was divided into a first phase of 49 days, during which the soil was not cultivated and measures taken daily at 4 pm, and a second phase of 146 days during which measures were taken every Wednesday at 4 pm. The three pan lysimeters were sown with potatoes on July 5 and harvested on September 5. Monitoring of the pan lysimeters included:

- the drained water volume;
- the water volume sampled by the pan lysimeter;
- and the Br<sup>-</sup> concentration of all samples.

Numerical solution of the governing equations was obtained by the NML which belongs to the semi-discrete methods consisting in discretising all independent variables except time, which is considered continuous for initial conditions problems. The discretisation of the DAE spatial variables was done by finite differences and resulted in a system of ordinary differential equations solved by LSODES (Livermore solver for ordinary differential equations sparse); a solver used for systems with a sparse jacobian. The sparse nature of the jacobian results from our numerical procedure which solves simultaneously the DAE and RICHARD'S equation.

The initial simulation time was fixed to May 12, 1995 at 4 pm and final time to November 23, 1995 at 4 pm with an hourly time step. The total depth of the pan lysimeter was simulated with a uniform internodal space of 1.0 cm. For each pan lysimeter, the initial pressure profile was measured by five pairs of tensiometers at depths of 7.5, 22.5, 45.0, 70.0 and 100.0 cm. The total mass of bromide applied was distributed equally over the first three upper nodes, and converted to concentration using the water content. At the soil surface, boundary condition for RICHARD'S equation was taken as the hourly amount of rain fall (from planting to harvest), and as the net hourly water flux (from harvest until the end of the monitoring period). For the DAE, the boundary condition at the soil surface was of the third type. At the bottom of the pan lysimeters, a constant pressure head was assigned, which was the mean pressure measured by the deepest tensiometer; for concentration, a boundary condition of zero gradient was assigned.

For the two simulated variables (soil water bromide concentration and recovered mass of bromide), results of TSOL and HYDRUS were similar, showing an over-estimation of bromide concentration profiles but similar drained masses of bromide except lysimeter A, for which a large over-estimation was observed. This over-estimation may be explained by the presence of cracks between the soil and the plastic film surrounding the lysimeter. These cracks may allow a quick surface water flow along the sides during heavy rainfall. Because the solute was initially applied over all of the surface area of the lysimeters, a fraction of the solute might have migrated with the flowing water, and the remaining fraction by the soil matrix. The water flowing through cracks will quickly reach the bottom of the lysimeters. For all pan lysimeters and soil depths, the mean absolute error for weekly soil solution concentration profiles was 96 mg·L<sup>-1</sup> and the mean bias error 80 mg·L<sup>-1</sup>. For the mass of bromide recovered in lysimeters B and C, the weekly absolute mean error was 7 mg/week and the mean bias error 5 mg/week. For lysimeter A, the weekly absolute mean error and the mean bias error were the same, that is 39 mg/week.

For the simulation period, the numerical mass balance was negligible for the two models. However, the simulation time was longer for TSOL than for HYDRUS (18 versus 13 min). This difference is explained by the completely implicit differentiation scheme used by HYDRUS compared to the Backward Differentiation Formula used by LODES which is more complex, but frees

the user from checking timestep precision. Considering the ease of programming and the resulting numerical precision, the NML has proven very effective in solving the solute transport equations in unsaturated conditions.

**Key-words:** *numerical model, solute transport equation, numerical method of lines, pan lysimeter, leaching.*

## RÉSUMÉ

La modélisation du transport des solutés dans un milieu non-saturé repose habituellement sur l'équation de dispersion-advection (EDA). Un modèle numérique (TSOL) a été développé en couplant l'EDA avec l'équation de RICHARDS et en incluant le prélèvement de l'eau par les plantes. La résolution numérique a été effectuée par la méthode numérique des lignes (MNL) qui présente une grande simplicité de programmation et résulte en une très bonne précision numérique. La précision de TSOL a été testée avec les résultats d'un modèle d'éléments finis (HYDRUS), et avec des données expérimentales (profils de concentration et masses de bromures récupérés) collectées pendant 195 jours dans trois cases lysimétriques installées sur un sol non remanié cultivé en pommes de terre. La comparaison entre TSOL et HYDRUS montre que la solution de la MNL est similaire à celle des éléments finis. Toutefois, pour l'ensemble des cases et des profondeurs, les modèles ont montré une surestimation des valeurs de concentration avec un écart moyen entre les concentrations mesurées et simulées par TSOL variant de 22 à 112 mg·L<sup>-1</sup>. Pour les cases B et C, l'erreur moyenne de biais hebdomadaire entre TSOL et les masses de bromures récupérés, était d'environ 5 mg/semaine. Dans le cas de la case A, l'erreur moyenne de biais hebdomadaire de TSOL était de 39 mg/semaine.

**Mots clés :** *modèle numérique, équation de transport des solutés, méthode numérique des lignes, case lysimétrique, lessivage.*

## 1 – INTRODUCTION

D'importantes quantités de contaminants agricoles sont susceptibles de migrer annuellement vers la nappe phréatique, suite à l'utilisation excessive des fertilisants et des pesticides. Pour évaluer l'effet des pratiques agricoles sur la qualité des eaux souterraines, la connaissance des processus de transport des contaminants est nécessaire (VAN GENUCHTEN, 1982 ; SULEKHA *et al.*, 1998). Les modèles numériques peuvent être utiles pour approfondir nos connaissances des mécanismes physiques impliqués dans les processus de transport, et pour quantifier les impacts des activités agricoles sur l'environnement (CAUSSADE et PRAT, 1984). Le transport des solutés dans les sols agricoles se produit habituellement sous des conditions non-saturées et est modélisé par l'équation de dispersion-advection (EDA) ; une équation différentielle aux dérivées partielles, de type parabolique en milieu non-saturé (ADDISCOTT et WAGENET, 1985).

L'utilisation des méthodes numériques pour résoudre l'EDA a été appliquée pour une large gamme de sols (FEDDES *et al.*, 1988 ; HAYHOE et DE JONG, 1988). Plusieurs modèles numériques ont été développés pour résoudre l'EDA (PAR-

KER et VAN GENUCHTEN, 1984 ; ADDISCOTT et WAGENET, 1985). Certains utilisent les éléments finis (HYDRUS, SIMUNEK *et al.*, 1998), d'autres les différences finies (LEACHM, WAGENET *et al.*, 1989 ; TRANSMIT, HUTSON et WAGENET, 1995). Les éléments finis et les différences finies nécessitent des connaissances approfondies en mathématique et en programmation (PRASHER et MADRAMOOTOO, 1987 ; ROGERS, 1994), ainsi que des adaptations spécifiques à chaque problème pour éviter des difficultés numériques reliées à la stabilité et la convergence. La méthode numérique des lignes (MNL) peut résoudre des problèmes complexes tout en maintenant un niveau de programmation simple, rendant ainsi cette méthode à la portée d'un grand nombre d'ingénieurs et de scientifiques (PRASHER *et al.*, 1988 ; SCHIESSER, 1991).

La MNL fait partie des méthodes numériques semi-discrètes, qui consistent à discrétiser toutes les variables indépendantes sauf une, le temps, que l'on considère continu pour les problèmes à conditions initiales (SCHIESSER, 1994). La discrétisation des variables spatiales est généralement faite par différences finies, mais d'autres méthodes peuvent être utilisées telles les éléments finis, les volumes finis, et les résidus pondérés (CARVER et HINDS, 1978). La discrétisation spatiale résulte en un système d'équations différentielles ordinaires ou algébriques (WILLIAMS *et al.*, 1996). Les équations différentielles ainsi obtenues peuvent être résolues en utilisant des intégrateurs numériques de haute qualité, tels DDRIV (KAHANER *et al.*, 1989), LSODES (HINDMARSH, 1983), et DASPK (BRENAN *et al.*, 1996). La MNL a été utilisée efficacement pour résoudre les équations de BOUSSINESQ (PRASHER et MADRAMOOTOO, 1987 ; PRASHER *et al.*, 1997), de NAVIER-STOKES (BERZINS *et al.*, 1998) et de RICHARDS (TOCCI *et al.*, 1997 ; MAJDOUB *et al.*, 2000). PRASHER *et al.* (1988) ont utilisé la MNL pour résoudre l'EDA pour un cas simple et n'ont trouvé aucune différence significative avec les solutions obtenues analytiquement et par éléments finis. Les travaux de PRASHER *et al.* (1988) et de TOCCI *et al.* (1997) n'ont porté que sur les aspects numériques de la MNL. Il ne semble pas y avoir d'études où une solution à l'EDA ait été obtenue avec la MNL pour une situation complexe comprenant des conditions climatiques variables et la présence d'une culture en croissance.

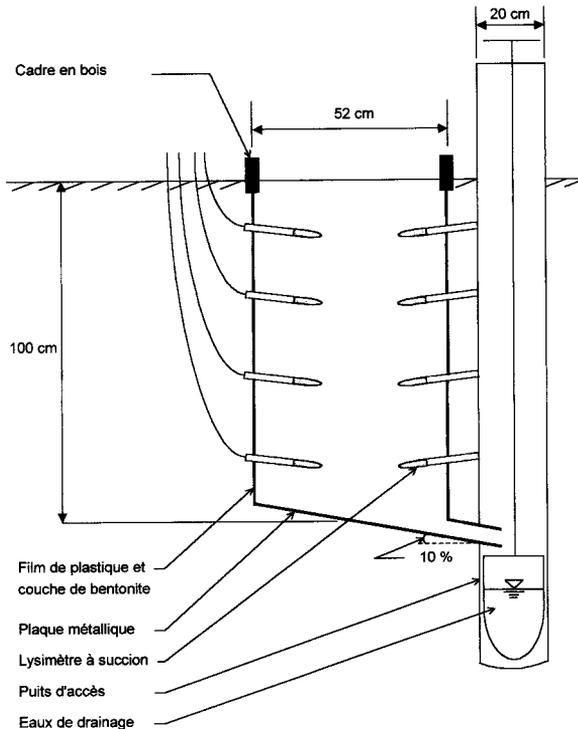
Les objectifs de cet article sont :

- 1) de développer et d'évaluer la performance numérique d'un modèle de MNL utilisant l'intégrateur LSODES, résolvant l'EDA en milieu non-saturé ;
- 2) de comparer les résultats du modèle de MNL avec ceux d'un modèle d'éléments finis reconnu ;
- 3) de valider le modèle de MNL avec des données obtenues dans trois lysimètres drainants sous culture de pommes de terre.

## 2 – MATÉRIELS ET MÉTHODES

### 2.1 Dispositif et suivi expérimental

Le dispositif expérimental a été aménagé en septembre 1994 dans un champ de pommes de terre situé à Saint-Pierre de l'Île d'Orléans près de Québec. Il consistait en trois cases lysimétriques de 0,48 m<sup>2</sup> de surface (0,915 m × 0,520 m) et de 1,00 m de profondeur (figure 1). Les trois cases, espacées de 4,00 m les unes des autres, ont été installées dans un sol sableux non remanié, de la série l'Atrée (MARCoux, 1981). Une plaque métallique a été insérée avec un angle de 10 % à l'aide d'un piston hydraulique pour former le fond de la case. Les quatre côtés de la case ont été isolés du sol extérieur par une couche de bentonite et un film de plastique pour éviter un écoulement préférentiel le long des parois. Le fond incliné de la case était relié par un conduit à un puits d'accès de 20,0 cm de diamètre, servant à collecter les eaux de drainage. Deux lysimètres à succion ont été installés à chacune des profondeurs suivantes : 11,5 ; 33,0 ; 60,0 ; et 87,5 cm. Chaque lysimètre à succion était composé d'une capsule poreuse cylindrique de 5,6 cm de longueur et de 2,4 cm de diamètre, raccordée à un tube de PVC de même diamètre et de 28,0 cm de longueur. Les lysimètres à succion ont été installés avec une légère pente pour pouvoir récupérer la solution du sol par pompage.



**Figure 1** Coupe verticale d'une case lysimétrique.  
Elevation view of a pan lysimeter.

Le 12 mai 1995, 15 g de KBr (10 g de Br<sup>-</sup>) dissous dans 60 mL d'eau ont été uniformément appliqués à la surface de chaque case. Les mesures ont montré que les cases ne contenaient pas de bromures initialement. Le suivi des bromures a commencé le 12 mai 1995 et s'est terminé le 23 novembre 1995. Cette période était constituée d'une première phase de 49 jours durant laquelle le sol n'était pas cultivé et où les mesures ont été prises quotidiennement à 16 h, et d'une deuxième phase de 146 jours, du 30 juin au 23 novembre, durant laquelle les mesures ont été effectuées chaque mercredi à 16 h. La fréquence des mesures a été réduite de journalière à hebdomadaire le 30 juin étant donné les faibles variations de teneur en eau. Les trois cases ont été ensemencées en pommes de terre le 5 juillet, et récoltées le 5 septembre. Le suivi des cases comprenait :

- 1) le volume d'eau drainé ;
- 2) le volume d'eau échantillonné par les lysimètres à succion ;
- 3) la concentration en Br<sup>-</sup> de tous les échantillons prélevés en 1) et 2).

L'analyse des concentrations en Br<sup>-</sup>, dans les volumes d'eau récupérés par les lysimètres à succion, et dans ceux récupérés par drainage a été effectuée par chromatographie ionique (Dionex 4000i). Des analyses avec des solutions témoins ont été effectuées, avant et après l'expérience, pour s'assurer de la validité des résultats du chromatographe. Puisque certains lysimètres à succion n'ont pas fonctionné correctement durant toute la période de mesure, probablement à cause des fortes succions auxquelles est soumise l'eau du sol pendant cette période sèche de l'été, les valeurs de concentration utilisées ont été constituées des concentrations du lysimètre droit uniquement, gauche uniquement, ou de la moyenne des deux lorsque les deux valeurs étaient disponibles. Les valeurs journalières de concentration ont été regroupées pour donner un ensemble de données hebdomadaires. Ces dernières ont servi pour tester la précision du modèle développé puisque les valeurs journalières ne permettent pas de distinguer une grande variation de la concentration.

## 2.2 Formulation mathématique

L'équation d'advection-dispersion unidimensionnelle peut être formulée comme suit (ADDISCOTT et WAGENET, 1985) :

$$\theta(z,t) \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( D \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right) - q(z,t) \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \pm P(z,t) \quad (1)$$

où :  $\theta(z, t)$  : teneur en eau volumique ( $L^3 L^{-3}$ ) ;  $c(z, t)$  : concentration du soluté dans la phase liquide du sol ( $M L^{-3}$ ) ;  $t$  : temps (T) ;  $z$  : profondeur du sol, positive vers le bas (L) ;  $D$  : coefficient de dispersion hydrodynamique ( $L^2 T^{-1}$ ) ;  $q(z, t)$  : vitesse darcienne de l'eau ( $L T^{-1}$ ) ; et  $P(z, t)$  : terme source ou puits du soluté ( $M L^{-3} T^{-1}$ ).

Dans cette étude, le terme  $P(z, t)$  n'a pas été considéré puisqu'au moment du semis (5 juillet 1995), le front de soluté avait déjà dépassé la profondeur maximale d'enracinement (CARON *et al.*, 1999). Les quantités de bromures qui ont pu être prélevées sont négligeables compte tenu que la plus grande partie de bromures avait déjà dépassé la profondeur des racines. Cependant, tel que montré ci-dessous, le prélèvement de l'eau par les racines a été considéré.

Les valeurs de  $\theta(z, t)$  et de  $q(z, t)$  requises par (1) sont obtenues en solutionnant l'équation unidimensionnelle de RICHARDS (RICHARDS, 1931) :

$$C(h) \frac{\partial h(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( K(h) \frac{\partial h(z, t)}{\partial z} - K(h) \right) - S(z, t) \quad (2)$$

où :  $C(h)$  : capacité hydrique du sol,  $C(h) = d\theta(z, t)/dh(z, t)$  ( $L^{-1}$ ) ;  $h(z, t)$  : potentiel de pression (L) ;  $K(h)$  : fonction de conductivité hydraulique ; et  $S(z, t)$  : extraction de l'eau par les racines ( $L^3 L^{-3} T^{-1}$ ).

L'extraction de l'eau par les racines est définie par KOOL et VAN GENUCHTEN (1991) :

$$S(z, t) = ET_0(t) \xi'(z) \sigma(h) \quad (3)$$

où :  $ET_0(t)$  : évapotranspiration de référence ( $LT^{-1}$ ) ;  $\xi'(z)$  : distribution normalisée du prélèvement ( $L^{-1}$ ) ; et  $\sigma(h)$  : fonction de réponse au stress hydrique.

La fonction  $\xi'(z)$  décrivant la variation verticale du prélèvement dans la zone racinaire, ainsi que la fonction  $\sigma(h)$  représentant l'effet de la concentration des solutés et du potentiel de pression sur le prélèvement, sont définies par (4) et (5), respectivement :

$$\xi'(z) = \frac{\xi(z)}{\int_0^r \xi(z) dz} \quad (4)$$

$$\sigma(h) = \frac{1}{1 + \left[ \frac{h + ac}{h_{50}} \right]^p} \quad (5)$$

où :  $\xi(z)$  : distribution des racines ( $L^{-1}$ ) ;  $r$  : profondeur de la zone racinaire (L) ;  $a$  : coefficient empirique de conversion de la concentration en potentiel osmotique ( $L^4 M$ ) ;  $h_{50}$  : potentiel de pression pour lequel la transpiration est réduite de 50 % (L) ; et  $p$  : constante empirique.

La teneur en eau  $\theta(z, t)$  est obtenue à partir de la courbe de rétention  $\theta(h)$ , alors que  $q(z, t)$  est calculé à partir des résultats de (2) par :

$$q(z, t) = K(h) \left( - \frac{\partial h(z, t)}{\partial z} - 1 \right) \quad (6)$$

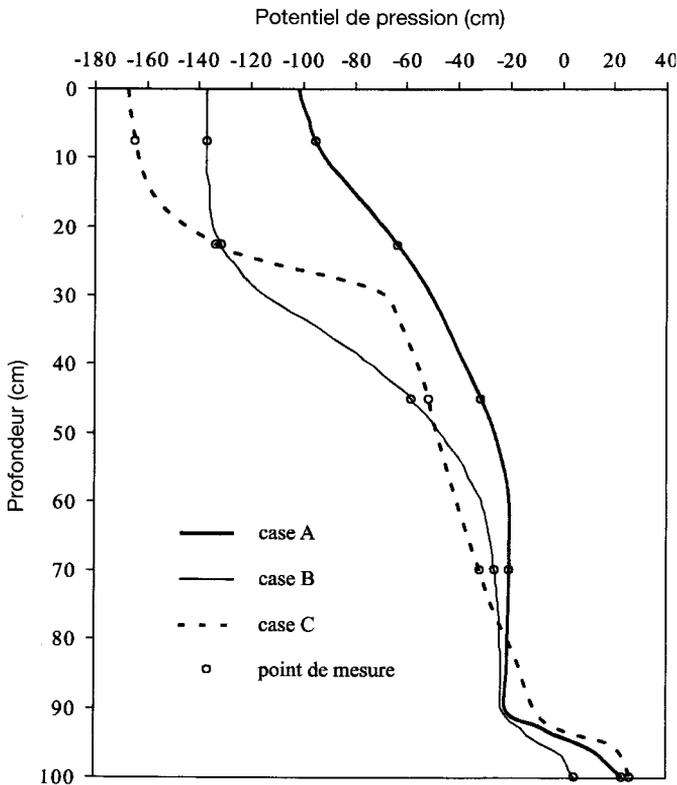
Le coefficient de dispersion hydrodynamique,  $D$ , tient compte de la dispersivité et de la diffusion moléculaire :

$$D = \varepsilon |v| + D^0 \tau \quad (7)$$

où :  $\varepsilon$  : dispersivité (L) ;  $v$  : vitesse moyenne de l'eau ( $L T^{-1}$ ),  $v = q(z, t)/\theta(z, t)$  ;  $D^0$  : coefficient de diffusion moléculaire dans l'eau pure ( $L^2 T^{-1}$ ) ;  $\tau$  : facteur de tortuosité,  $\tau = \theta(z, t)^{10/3}/\theta_s^2$  (MILLINGTON et QUIRK, 1961) ; et  $\theta_s$  : teneur en eau à saturation ( $L^3 L^{-3}$ ).

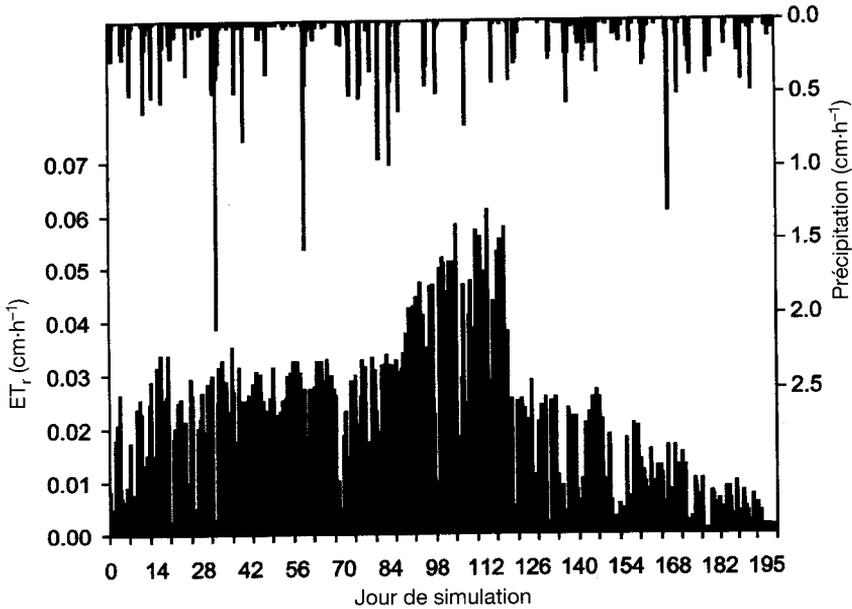
### 2.3 Conditions initiales et conditions aux limites

Le temps initial de simulation ( $t = 0$ ) a été fixé au 12 mai 1995 à 16 h et le temps final ( $t = 4\ 656$  heures) au 23 novembre 1995 à 16 h avec un pas de simulation horaire. La profondeur de 100 cm a été simulée avec un espace internodal uniforme de 1,0 cm. Pour chaque case lysimétrique, le profil initial de pression a été mesuré par cinq paires de tensiomètres, aux profondeurs 7,5 ; 22,5 ; 45,0 ; 70,0 ; et 100,0 cm (*figure 1* de MAJDOUB *et al.*, 2000) et est présenté à la *figure 2*. La masse totale de bromures appliquée a été distribuée également sur les trois premiers nœuds de discrétisation, et convertie en concentration connaissant la teneur en eau. La concentration initiale des trois premiers nœuds était de : 18 000, 14 020, et 12 000  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case A ; 18 500, 16 210, et 14 000  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case B ; et 20 000, 17 910, et 15 000  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case C.



**Figure 2** Profil initial de pression de chaque case lysimétrique.  
*Initial pressure profile for each lysimeter.*

À la surface des cases, la condition aux limites pour l'équation de RICHARDS a été stipulée comme étant la quantité horaire de pluie pour la période allant du semis de la culture à la récolte, et comme le flux net horaire d'eau infiltrant la surface pour le reste de la période de simulation. Le flux net a été calculé à partir des valeurs horaires de précipitation et d'évapotranspiration réelle ( $ET_r$ ).



**Figure 3** Précipitation et évapotranspiration journalière durant la période de simulation.

*Daily rainfall and evapotranspiration during the simulation period.*

Les valeurs de  $ET_r$  ont été calculées à partir de l'évapotranspiration de référence,  $ET_0$ , par la méthode de PENMAN-MONTEITH (ALLEN *et al.*, 1989) et en utilisant les coefficients d'assèchement de sol de DOORENBOS et PRUITT (1977). Les valeurs horaires de l' $ET_r$  et de la précipitation sont présentées à la *figure 3*. Les données climatiques ont été recueillies par une station météorologique automatisée située à 6,0 m des trois cases. Les données du 1<sup>er</sup> juin au 18 juillet 1995, perdues à cause d'un bris d'origine électrique, ont été obtenues de la station automatique du ministère de l'Environnement du Québec à Saint-François, Île d'Orléans, à environ 20 km du site et sur le même versant de l'île. Pour les périodes où les données des deux sites étaient disponibles, les coefficients de corrélation ont été de 0,92 ; 0,98 ; 0,94 ; 0,97 ; et 0,88 pour les valeurs horaires de vitesse du vent, radiation solaire, température de l'air, humidité relative, et précipitation respectivement. La condition aux limites à la surface du sol, pour l'EDA, est une condition de troisième type :

$$-\theta(z=0,t)D \frac{\partial c(z=0,t)}{\partial z} + q(z=0,t)c(z=0,t) = 0 \quad (8)$$

Au fond des cases, un potentiel de pression constant a été assigné, soit 22,0 cm (case A) ; 3,5 cm (case B) ; et 24,0 cm (case C), ce qui correspond à la pression moyenne mesurée par le tensiomètre le plus profond ( $z = 100,0$  cm). Ces valeurs positives du potentiel peuvent être expliquées par la résistance hydraulique résultant d'une convergence des lignes de courant vers la sortie du lysimètre, mais surtout à la résistance capillaire du matériel filtrant recouvrant l'exutoire ; deux facteurs augmentant la pression requise pour permettre un

écoulement à pression atmosphérique dans la zone de collecte. Pour la concentration, une condition aux limites de gradient nul a été assignée pour les trois cas :

$$\frac{\partial c(z=100, t)}{\partial z} = 0 \quad (9)$$

## 2.4 Solution numérique

La solution d'une équation différentielle partielle avec la MNL nécessite une forme standard où le membre de gauche est constitué uniquement de la dérivée temporelle de la variable dépendante (SHAMPINE, 1994). Les équations (1) et (2) s'expriment donc comme :

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = \frac{1}{\theta(z, t)} \left[ \frac{\partial}{\partial z} \left( D\theta(z, t) \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \right) - q(z, t) \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \right] \quad (10)$$

$$\frac{\partial h(z, t)}{\partial t} = \frac{1}{C(h)} \left[ \frac{\partial}{\partial z} \left( K(h) \frac{\partial h(z, t)}{\partial z} - K(h) \right) - S(z, t) \right] \quad (11)$$

La discrétisation spatiale de (10) par différences finies, en tenant compte des conditions aux limites, résulte en (12) pour le nœud supérieur, en (13) pour un nœud interne, et en (14) pour le nœud inférieur.

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_1 = \frac{1}{\theta_1} \left[ \frac{2}{\Delta z} \left[ \left( \frac{D_1 + D_2}{2} \right) \left( \frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \left( \frac{c_2 - c_1}{\Delta z} \right) - D_1 \theta_1 \frac{\partial c}{\partial z} \right] - q_1 \frac{\partial c}{\partial z} \right]_1 \quad (12)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_i = \frac{1}{\theta_i} \left[ \frac{1}{\Delta z} \left[ \left( \frac{D_i + D_{i+1}}{2} \right) \left( \frac{\theta_i + \theta_{i+1}}{2} \right) \left( \frac{c_{i+1} - c_i}{\Delta z} \right) - \left( \frac{D_i + D_{i-1}}{2} \right) \left( \frac{\theta_i + \theta_{i-1}}{2} \right) \left( \frac{c_i - c_{i-1}}{\Delta z} \right) \right] - q_i \left( \frac{c_{i+1} - c_{i-1}}{2\Delta z} \right) \right] \quad (13)$$

$$\left. \frac{\partial c}{\partial t} \right|_n = \frac{1}{\theta_n} \left[ -\frac{2}{\Delta z} \left( \frac{D_n + D_{n-1}}{2} \right) \left( \frac{\theta_n + \theta_{n-1}}{2} \right) \left( \frac{c_n - c_{n-1}}{\Delta z} \right) \right] \quad (14)$$

où :  $c$  : concentration du soluté dans la phase liquide du sol ;  $\theta$  : teneur en eau volumique ;  $\Delta z$  : espace internodal ; et 1, 2,  $i$ , et  $n$  : indice de discrétisation pour le nœud supérieur, le deuxième nœud, un nœud interne, et le nœud inférieur, respectivement.

La discrétisation spatiale de (11) résulte en (15) et (16) pour le nœud supérieur et un nœud interne, respectivement. Aucune discrétisation n'est requise au nœud inférieur étant donné la condition de potentiel constant en ce point.

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_1 = \frac{1}{C_1} \left[ \frac{1}{(\Delta z)^2} \left[ (K_2 + K_1)h_2 - (K_2 + K_1)h_1 \right] - \frac{2}{\Delta z} K_1 \frac{\partial h}{\partial z} \right]_1 - \frac{K_2 - K_1}{\Delta z} - S_1 \quad (15)$$

$$\left. \frac{\partial h}{\partial t} \right|_i = \frac{1}{C_i} \left[ \frac{1}{2(\Delta z)^2} \left[ (K_{i+1} + K_i)h_{i+1} - (K_{i+1} + 2K_i + K_{i-1})h_i + \right. \right.$$

$$(K_i + K_{i-1})h_{i-1} - \frac{K_{i+1} - K_{i-1}}{2\Delta z} - S_i \quad (16)$$

où :  $h$  : potentiel de pression ;  $C$  : capacité hydrique ;  $K$  : conductivité hydraulique ;  $\partial h/\partial z$  : gradient hydraulique,  $= 1 - q/K$  ;  $q$  : flux net à la surface ; et  $S$  : terme de prélèvement de l'eau.

La discrétisation spatiale de (6) résulte en (17) pour le nœud supérieur, en (18) pour un nœud interne, et en (19) pour le nœud inférieur.

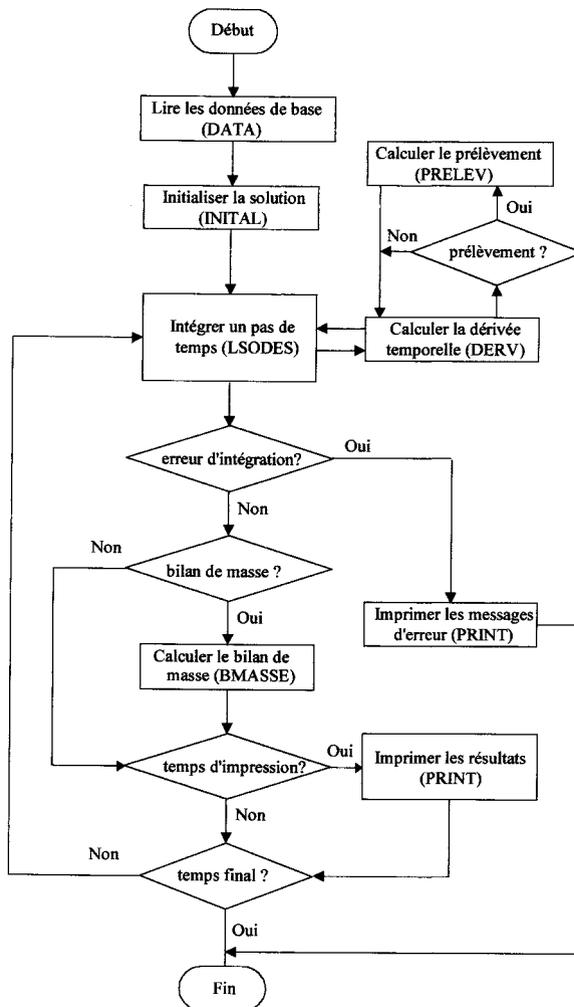
$$q_1 = \left( \frac{K_1 + K_2}{2} \right) \left[ - \left( \frac{h_2 - h_1}{\Delta z} \right) + 1 \right] \quad (17)$$

$$q_i = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{K_i + K_{i-1}}{2} \right) \left[ - \left( \frac{h_i - h_{i-1}}{\Delta z} \right) + 1 \right] + \left( \frac{K_i + K_{i+1}}{2} \right) \left[ - \left( \frac{h_{i+1} - h_i}{\Delta z} \right) + 1 \right] \right] \quad (18)$$

$$q_n = \left( \frac{K_{n-1} + K_n}{2} \right) \left[ - \left( \frac{h_n - h_{n-1}}{\Delta z} \right) + 1 \right] \quad (19)$$

## 2.5 Description du modèle

La figure 4 présente l'organigramme du modèle TSOL, développé dans la présente étude. Cet organigramme est similaire à celui de NONSAT développé par MAJDOUB *et al.* (2000) pour résoudre l'équation de RICHARDS. Le programme principal, qui dimensionne l'espace de travail nécessaire et définit les paramètres de l'algorithme d'intégration, lit dans un fichier DATA les paramètres géométriques du domaine (longueur, espace internodal), les temps initial, final et d'impression, les erreurs relative ( $10^{-4}$ ) et absolue ( $10^{-4}$  cm et  $10^{-4}$  mg.L $^{-1}$ ) devant être respectées par l'intégrateur pour chacune des variables dépendantes  $h$  et  $c$ , les paramètres hydrauliques et de transport relatifs à chaque couche, les paramètres de prélèvement d'eau par les racines, et les conditions initiales et aux limites de chaque variable. Ensuite, il appelle la sous-routine INITAL pour définir le nombre et la position des nœuds de discrétisation, initialiser la solution, et préparer les tables définissant les fonctions hydrauliques  $\theta(h)$  et  $K(h)$ . L'intégration numérique est effectuée par LSOODES (*Livermore solver for ordinary differential equations sparse* ; HINDMARSH, 1983), un solveur pour les problèmes rigides et non-rigides, utilisé dans le cas de jacobiens épars. La nature éparse du jacobien résulte du fait que la procédure numérique utilisée résout simultanément l'EDA et l'équation de RICHARDS. Dans ces conditions, le jacobien ne montre pas une structure en bande, et un solveur travaillant avec des structures éparées, déterminées numériquement, doit être utilisé. L'intégrateur LSOODES utilise donc, pour les deux variables ( $h$  et  $c$ ), un seul vecteur de solution initial et fait avancer la solution d'un pas de temps. Durant un appel à LSOODES, celui-ci passe le vecteur solution à la sous-routine DERV qui calcule les dérivées spatiales à chaque nœud et les retourne à LSOODES au temps demandé. Pour la période où la culture était présente dans les lysimètres, DERV appelle la sous-routine PRELEV pour le calcul du terme de prélèvement d'eau par les racines. À chaque pas d'intégration, la sous-routine BMASSE calcule la balance de masse de la concentration. À chaque



**Figure 4** Organigramme du modèle TSOL.  
TSOL flowchart.

temps d'impression, TSOL appelle la sous-routine PRINT pour l'écriture des résultats.

## 2.6 Données de base

Les propriétés hydrauliques du sol ont été modélisées par les équations de VAN GENUCHTEN (1980) qui incorporent les paramètres  $\theta_r$ ,  $\theta_s$ ,  $K_s$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ , utilisés par TSOL, et qui ont été déterminées par MAJDOUB *et al.* (2000) pour trois sites situés à environ 3,0 m de chaque case lysimétrique. La teneur en eau résiduelle ( $\theta_r$ ) était de zéro pour les trois cases,  $\theta_s$  variait de 0,22 à 0,43  $\text{cm}^3/\text{cm}^3$ , la conductivité hydraulique saturée ( $K_s$ ) de 25,92 à 388,80  $\text{cm}/\text{j}$ , le facteur empirique ( $\alpha$ ) de 0,0166 à 0,0488  $\text{cm}^{-1}$ , et le coefficient  $\beta$  de 1,4296 à 6,4313.

La distribution des racines,  $\xi(z)$ , a été mesurée pour un sol de texture similaire à celui du site expérimental, et correspond à 40, 35, 20, et 5 % de la masse totale des racines pour les couches de sol 0-6, 6-10, 10-13, et 13-18 cm, respectivement. À la constante  $p$  (équation 5) a été assignée la valeur 3,0, tel que suggéré par KOOL et VAN GENUCHTEN (1991), alors qu'à la constante  $a$  (équation 5), la valeur 0,0 a été attribuée puisque le front de soluté avait dépassé la zone racinaire au début de la période de mesure. Le paramètre  $h_{50}$  a été optimisé en utilisant le logiciel d'estimation de paramètres PEST (DOHERTY, 1994) minimisant la différence de la somme des carrés entre les valeurs de drainage hebdomadaire simulés et observés ; la valeur optimale a été établie à - 51,0 cm.

Le coefficient de diffusion moléculaire est négligeable par rapport à celui de la dispersion hydrodynamique (BEVEN *et al.*, 1993). Une valeur égale à 0,025 cm<sup>2</sup>/h a été attribuée au coefficient de diffusion moléculaire (JAYNES *et al.*, 1988). Le coefficient de dispersion hydrodynamique, linéairement relié à la vitesse moyenne d'écoulement par la dispersivité (équation 7), est une caractéristique de la structure du milieu. L'étude du profil de sol des trois cases montre que le sol est sablolimoneux, pour les trente premiers cm, alors qu'il est limonosableux, sableux, et sablolimoneux pour le reste du profil des cases A, B, et C, respectivement. La littérature montre que la dispersivité moyenne est de 17,3 cm pour un sol sablolimoneux (JURY et SPOSITO, 1985), 16,5 cm pour un sol limonosableux (RICE *et al.*, 1986), et 5,5 cm pour un sol sableux (WIENGA et VAN GENUCHTEN, 1989). Ces valeurs de dispersivité obtenues de la littérature sont désignées par  $\varepsilon$  et ont été utilisées sans modification. Deux autres ensembles de valeurs de dispersivité ont été obtenus par deux types de fonctions objectives. Pour la première fonction objective, 1/3 du poids de la somme des carrés des écarts entre les valeurs hebdomadaires simulées et mesurées a été attribué aux profils de concentration, et 2/3 du poids aux masses de bromures drainées. Les valeurs de dispersivité obtenues de cette façon ont été désignées par  $\varepsilon^*$ . Pour la deuxième fonction objective seules les valeurs simulées et observées hebdomadaires du profil de concentration ont été utilisées et les valeurs de dispersivité obtenues ont été désignées par  $\varepsilon^{**}$ .

## 2.7 Évaluation du modèle

Le modèle TSOL a été testé d'abord en comparant les résultats obtenus à ceux du modèle HYDRUS (SIMUNEK *et al.*, 1998) qui utilise la méthode des éléments finis, puis en calculant, à chaque pas de temps, le bilan massique défini par :

$$BMS = 100 \left( \frac{\Delta VSI - VSF}{\Delta VSI} \right) \quad (20)$$

où : BMS : bilan massique du soluté (%) ;  $\Delta VSI$  : variation du volume initial de

bromures,  $\Delta VSI = VSI - VL$  ; VSF : volume final de bromures  $\left( \int_{z=0}^{z=L} c_f \theta_f dz \right)$  ;

VSI : volume initial de bromures  $\left( \int_{z=0}^{z=L} c_i \theta_i dz \right)$  ; VL : volume de bromures les-

sivés ;  $VL = c_N d$  ;  $\theta_i$  : teneur en eau initiale ;  $\theta_f$  : teneur en eau finale ; L : profondeur de la case ;  $c_N$  : concentration en bromures pour  $z = L$  ; et d : volume d'eau drainé durant l'intervalle de temps et évalué en utilisant (19).

Les valeurs de concentration et les masses de bromures lessivés, simulés par les deux modèles, ont été comparées avec celles mesurées au champ, à l'aide de deux paramètres statistiques, soit l'erreur moyenne de biais (EMB), et l'erreur moyenne absolue (EMA) :

$$EMB = \frac{\sum_{i=1}^n (U_s - U_m)}{n} \quad (21)$$

$$EMA = \frac{\sum_{i=1}^n |U_s - U_m|}{n} \quad (22)$$

où :  $U_s$  : valeur simulée ;  $U_m$  : valeur mesurée ;  $n$  : nombre de valeurs ; et  $i$  : indice pour le nombre de mesures.

### 3 – RÉSULTATS ET DISCUSSION

#### 3.1 Optimisation de la dispersivité

Les valeurs de la dispersivité obtenues de la littérature,  $\varepsilon$ , et celles optimisées  $\varepsilon^*$  et  $\varepsilon^{**}$  sont présentées dans le *tableau 1*. Ce dernier montre que les valeurs de dispersivité optimisées sont fortement affectées par la fonction objective employée. On remarque aussi que les valeurs de  $\varepsilon^*$  et  $\varepsilon^{**}$  sont toujours inférieures aux valeurs de  $\varepsilon$ . Pour chaque couche, on observe une assez bonne concordance entre les valeurs de  $\varepsilon$  et de  $\varepsilon^*$ , sauf pour la case C, où  $\varepsilon^*$  est d'environ les deux tiers de  $\varepsilon$ . Les valeurs de  $\varepsilon^{**}$  sont environ trois fois plus faibles que celles de  $\varepsilon$  pour les cases A et B, et deux fois plus faibles pour la case C. COSTA (1991) a signalé que la dispersivité ne peut être estimée qu'à partir de données expérimentales de transport de solutés. Il n'y a toutefois pas de consensus sur le type de mesures expérimentales devant servir pour la détermination de la dispersivité. BEVEN *et al.* (1993) ont précisé que les mesures expérimentales peuvent être :

- la concentration moyenne des volumes d'eau drainés (concentrations de flux) ;
- les masses de solutés lessivés ;
- ou les profils de concentration (concentrations résidentes).

La majorité des auteurs utilisent les profils de concentration pour l'obtention de la dispersivité. Cependant, connaissant l'importance d'une bonne estimation des masses de solutés lessivés du profil de sol et qui peuvent atteindre la nappe, la première méthode d'optimisation ( $\varepsilon^*$ ) semble être plus appropriée étant donné qu'elle tient compte à la fois des profils de concentration et des masses de bromures lessivés. Pour cette raison, les valeurs de  $\varepsilon^*$  ont été utilisées dans le reste de cet article pour la comparaison des résultats du modèle TSOL avec ceux d'HYDRUS ainsi qu'avec les valeurs mesurées au champ.

**Tableau 1** Dispersivités obtenues par optimisation.**Table 1** Optimized dispersivities.

Case	Profondeur (cm)	Littérature $\epsilon$ (cm)	Optimisation	
			$\epsilon^*$ (cm)	$\epsilon^{**}$ (cm)
A	0-40	17,3	17,17	6,13
	40-100	16,5	16,27	5,64
B	0-40	17,3	17,19	5,21
	40-100	5,5	5,40	3,16
C	0-100	17,3	10,44	8,34

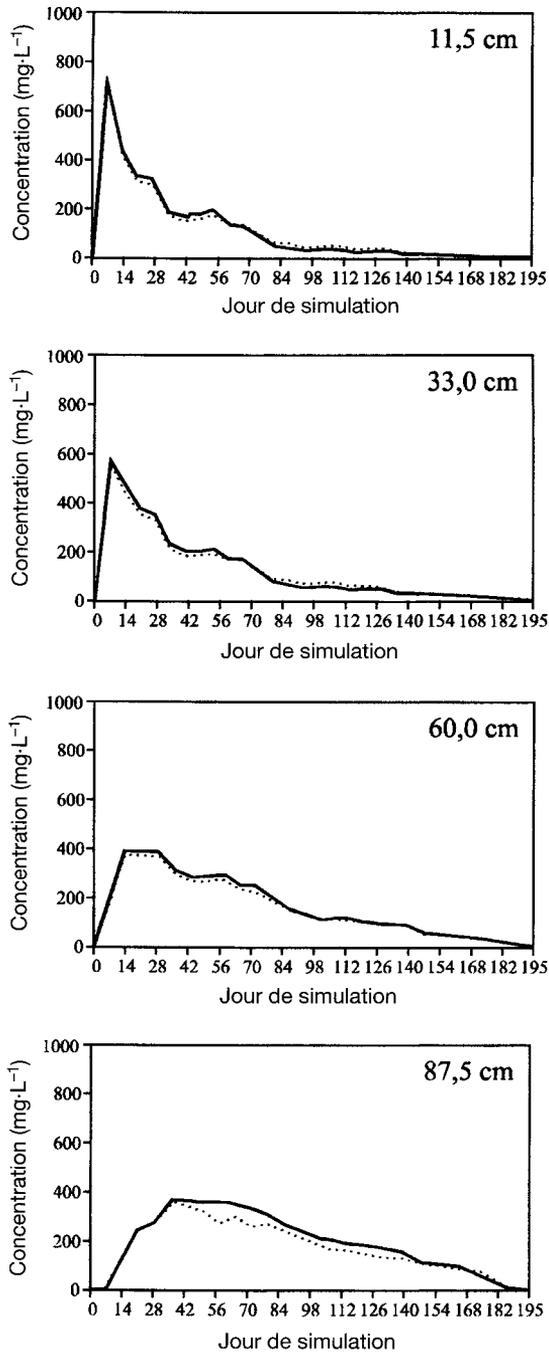
\*Optimisation utilisant les profils de concentration (1/3) et les masses de bromures récupérées (2/3) ;

\*\*Optimisation utilisant les profils de concentration uniquement.

### 3.2 Comparaison entre TSOL et HYDRUS

La comparaison des résultats obtenus par les modèles TSOL et HYDRUS a porté sur les valeurs simulées de la concentration dans le profil et des masses de bromures récupérés au fond des cases. Un exemple représentatif de la variation des profils de concentration simulés par les deux modèles est présenté à la *figure 5* pour la case A. Les deux modèles présentent des profils de concentration similaires pour les profondeurs de 11,5 ; 33,0 ; et 60,0 cm, alors que pour la profondeur 87,5 cm on remarque une différence plus grande durant la période allant du jour 40 au jour 80. Le même comportement est observé pour les cases B et C. On observe que dans tous les cas les valeurs simulées par TSOL sont légèrement supérieures à celles simulées par HYDRUS.

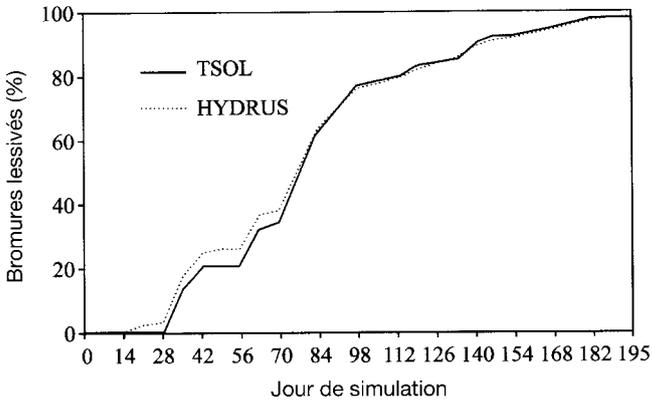
Un exemple des courbes du pourcentage cumulatif des bromures récupérés et simulés est présenté à la *figure 6* pour la case B. Le pourcentage de récupération simulé par HYDRUS est supérieur à celui simulé par TSOL jusqu'au jour 84. Par la suite, ces valeurs deviennent très proches les unes des autres. Les masses totales des bromures lessivés et simulés par TSOL ont été de 9 388  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case A, 9 851  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case B, et 9 586  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour la case C, alors que pour HYDRUS les valeurs obtenues ont été de 9 364, 9 826, et 9 557  $\text{mg}\cdot\text{L}^{-1}$ , respectivement, ce qui correspond à une différence de 2,6 % ; 2,5 % ; et 3,0 % pour les cases A, B, et C, respectivement. Les masses totales de bromures lessivés et simulés par TSOL ont été légèrement supérieures à celles simulés par HYDRUS, dû au fait que les flux d'eau drainante simulés par TSOL ont été supérieurs à ceux d'HYDRUS (MAJDOUB *et al.*, 2000). La comparaison entre les deux modèles montre que la solution par la MNL se compare très bien à la solution par éléments finis. Comme les résultats obtenus avec TSOL et HYDRUS sont pratiquement égaux nous référerons dans le reste de cet article aux résultats de TSOL et de HYDRUS comme les résultats du modèle numérique.



**Figure 5**

Profils de concentration simulés par TSOL (—) et HYDRUS (·····) pour la case A à quatre profondeurs.

*Simulated concentration profiles from TSOL (—) and HYDRUS (·····) for lysimeter A at four depths.*



**Figure 6** Pourcentages de récupération simulés par TSOL et HYDRUS pour la case B.

*Simulated recovery percentages from TSOL and HYDRUS for lysimeter B.*

### 3.3 Comparaison entre les données simulées et mesurées

La variation des profils de concentration mesurés au champ et simulés par le modèle numérique, est présentée à la *figure 7* pour les trois cases. Pour les profondeurs 11,5 et 33,0 cm, les valeurs de concentration simulées suivent l'allure de celles mesurées. Toutefois, on note des écarts assez importants pour les profondeurs 60,0 et 87,5 cm. D'une façon générale, il y a une surestimation des concentrations de bromures simulées par le modèle numérique. Le *tableau 2* montre les statistiques, EMB et EMA, utilisées pour vérifier la concordance entre les valeurs observées et simulées. Pour l'ensemble des cases et des profondeurs, on observe une valeur moyenne de 80 mg·L<sup>-1</sup> pour l'EMB et de 96 mg·L<sup>-1</sup> pour l'EMA, pour une valeur moyenne observée de 450 mg·L<sup>-1</sup> durant la période de simulation. Cette valeur positive de l'EMB et les graphiques de la *figure 7* indiquent une surestimation des valeurs de concentration simulées par le modèle numérique. Toutefois, cette surestimation est plus faible pour la case C (*tableau 2*).

Les masses de bromures récupérés au fond des cases durant la période totale de simulation, ont été de 5 578, 9 600, et 9 330 mg·L<sup>-1</sup> pour les cases A, B, et C, respectivement. Les quantités de bromures simulées dépassent de loin celles mesurées pour la case A (9 388 mg·L<sup>-1</sup>), mais sont seulement légèrement supérieures pour les cases B et C (9 851 et 9 586 mg·L<sup>-1</sup>), ce qui correspond à une surestimation de 40,6 % ; 2,6 % ; et 2,7 %, respectivement. Les courbes de pourcentage de bromures récupérés mesurées et simulées sont présentées à la *figure 8* pour les trois cases. Le comportement de la case A est différent des deux autres cases puisque le pourcentage de récupération simulé est supérieur à celui mesuré et que cet écart s'accroît avec le temps. Pour la case B, du début de l'expérience jusqu'au jour 70, le pourcentage de récupération est inférieur à celui mesuré contrairement aux deux autres cases. Pour la case C, l'écart entre le pourcentage simulé et mesuré de récupération cumulative des bromures est relativement important durant les premiers jours de l'ex-

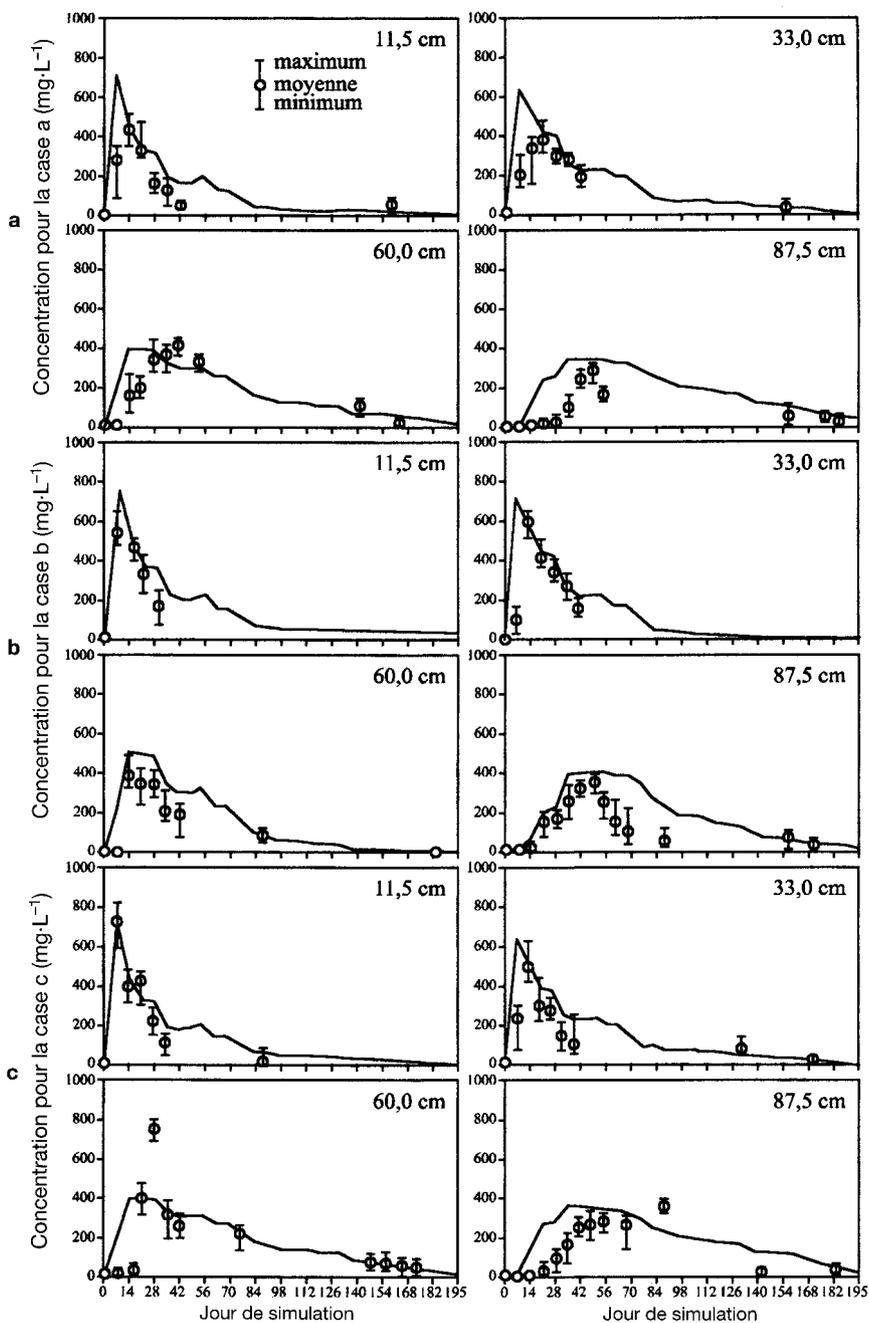


Figure 7

Profils de concentration simulée (—) et mesurée (o) pour les trois cases à quatre profondeurs.

*Simulated (—) and measured (o) concentration profiles for the three pan lysimeters at four depths.*

**Tableau 2** Statistiques des profils de concentration.**Table 2** Concentration profile statistics.

Case	Profondeur (cm)	n*	$\epsilon^*$		$\epsilon^{**}$	
			EMB (mg·L <sup>-1</sup> )	EMA (mg·L <sup>-1</sup> )	EMB (mg·L <sup>-1</sup> )	EMA (mg·L <sup>-1</sup> )
A	11,5	8	89,68	98,13	78,31	88,63
	33,0	8	95,35	99,65	38,95	90,16
	60,0	10	51,45	94,18	41,45	63,94
	87,5	12	98,54	98,54	80,13	80,13
B	11,5	5	91,12	91,12	80,16	80,16
	33,0	7	111,81	117,86	103,67	107,29
	60,0	9	97,71	99,12	84,33	86,52
	87,5	14	97,41	99,32	82,51	85,07
C	11,5	7	22,16	55,01	11,31	43,07
	33,0	9	97,07	103,07	81,79	89,51
	60,0	12	26,53	90,61	16,42	76,37
	87,5	13	81,82	100,06	75,09	91,74

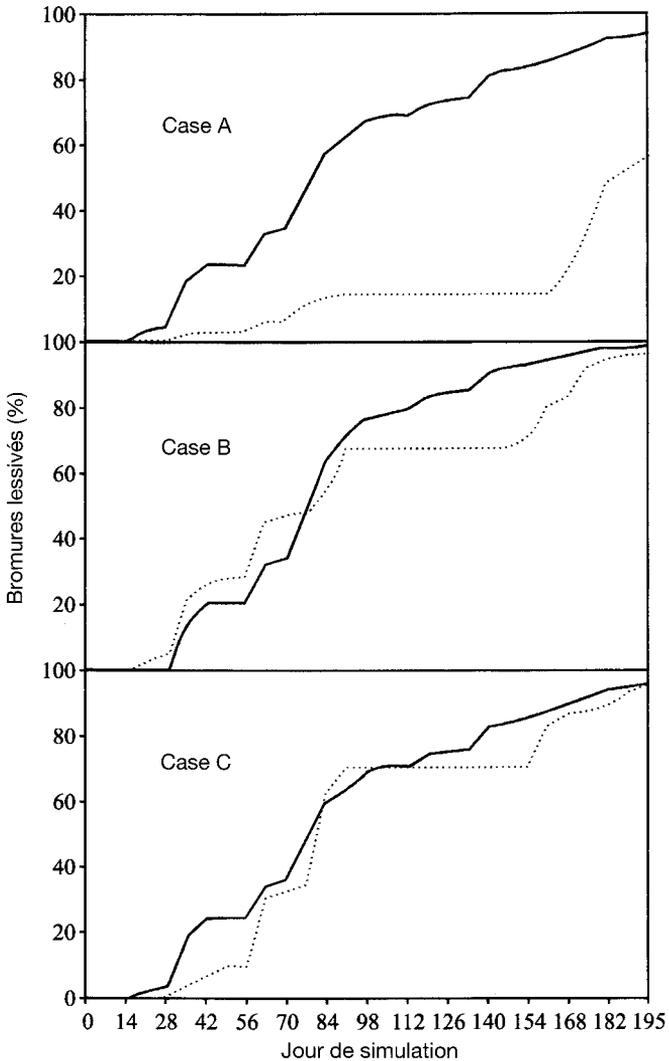
\*n : nombre d'observations durant la période de mesure.

piérence, mais à partir du jour 56, qui correspond au début du prélèvement de l'eau par les plantes, cet écart est réduit, possiblement à cause de la diminution du drainage au bas des cases. Il est à noter que, pour les trois cases, une augmentation rapide de la quantité de bromures lessivés est observée suite aux fortes pluies. Les valeurs hebdomadaires de l'EMB, pour les quantités de bromures lessivés, sont de 39, 5, et 5 mg/semaine pour les cases A, B et C (tableau 3). Toutefois, pour les cases B et C, la précision hebdomadaire du modèle développé était d'environ 7 mg/semaine, soit en moyenne 3,5 % des quantités hebdomadaires moyennes de bromures récupérés pour les trois cases.

**Tableau 3** Statistiques des masses de bromures récupérés.**Table 3** Recovery masses of bromide statistics.

Case	$\epsilon^*$		$\epsilon^{**}$	
	EMB	EMA (mg/semaine)	EMB	EMA
A	38,64	38,64	49,73	49,73
B	4,80	9,40	7,33	9,22
C	4,63	5,53	11,29	11,91

Les résultats de la comparaison entre les données simulées et mesurées restent très similaires même en utilisant les valeurs de  $\epsilon^{**}$  (tableaux 2 et 3). La variation des résultats d'une case à l'autre peut être due à l'hétérogénéité natu-



**Figure 8** Pourcentages de récupération simulés (—) et mesurés (.....) pour les trois cases.

*Simulated (—) and measured (.....) recovery percentages for the three lysimeters.*

relle du sol, et par conséquent à la variabilité spatiale des paramètres hydrauliques utilisés par le modèle. En particulier, pour le pourcentage de récupération, le comportement de la case A est largement différent des deux autres cases. Étant donné qu'il n'y a pas eu de surestimation des eaux de drainage (MAJDOUB *et al.*, 2000), on peut penser à la présence de fentes de retrait entre le sol et le film de plastique entourant la case. Ces fentes de retrait permettraient un écoulement rapide de l'eau de surface par les côtés durant les fortes pluies. Comme le soluté a été appliqué initialement sur toute la surface des

cases, une partie du soluté aurait pu migrer avec l'eau de ruissellement et une autre *via* la matrice de sol. La partie ayant migré avec l'eau de ruissellement aurait été récupérée avec les eaux de drainage dans les jours suivant l'application du soluté. Cette hypothèse est supportée par les données sur la même case (CARON *et al.*, 1999), où l'échantillonnage en profondeur sur l'ensemble de la case, à l'aide d'un réflectromètre métallique, a détecté une arrivée très rapide du soluté à 87,5 cm (après 10 jours), alors que les concentrations au lysimètre à succion à la même profondeur, plus caractéristiques des pores plus fins de la matrice, n'avaient rien détecté.

La surestimation des profils de concentration peut aussi être expliquée par la présence d'un écoulement préférentiel sur le côté des cases, une hypothèse compatible avec les résultats de la récupération de bromures et non considéré par l'EDA (LUXMOORE, 1991). En effet, les eaux de drainage rapide ont des concentrations différentes de l'eau stockée dans les pores du sol échantillonnées par les lysimètres à succion. De plus, la surestimation des profils de concentration de bromures peut être due au fait qu'un lysimètre à succion échantillonne un volume de sol équivalent à un rayon d'environ 2,5 cm (CARON *et al.*, 1999), alors qu'un seul nœud de discrétisation a été utilisé dans les comparaisons, soit un rayon de 0,5 cm. Pour vérifier cette hypothèse, les analyses ont été refaites en utilisant une moyenne mobile centrée de 5 points pour obtenir les valeurs simulées. Cette procédure a résulté en des différences négligeables pour les statistiques de comparaison EMB et EMA, ce qui exclu cette hypothèse.

### 3.4 Précision numérique

La précision numérique de la solution des deux modèles TSOL et HYDRUS a été testée en se basant d'une part sur l'évaluation numérique du bilan massique des solutés (BMS) calculé par l'équation 20, et d'autre part sur le temps de simulation. La variation du BMS journalier, durant la période de simulation, a été négligeable pour les deux modèles. En effet, pour les trois cases lysimétriques, le BMS a varié de 0,0000 % à 0,0030 % (moyenne de 0,0005 %) pour le modèle TSOL. Dans le cas du modèle HYDRUS, le BMS a fluctué de - 0,0010 % à + 0,0020 % avec une moyenne de 0,0010 %. Pour les trois cases, le temps de simulation s'est étalé de 15 à 20 min pour TSOL et de 10 à 15 min pour HYDRUS ; dans les deux cas une tolérance absolue de  $10^{-4}$  cm et  $10^{-4}$  mg·L<sup>-1</sup> a été utilisée pour chacune des variables dépendantes *h* et *c* respectivement. Cette différence du temps de simulation s'explique par le fait que HYDRUS utilise une différentiation temporelle complètement implicite (Euler), alors que TSOL (LSODES) utilise la méthode BDF (Backward Differentiation Formula) qui est plus complexe mais qui permet de libérer l'utilisateur des tracés liés à la précision de la discrétisation temporelle. Les valeurs du BMS obtenues par TSOL sont, d'une façon générale, très faibles ce qui confirme la précision numérique de la solution du modèle malgré les temps de simulation légèrement plus élevés, qui sont toutefois largement balancés par une programmation beaucoup plus simple.

## 4 – CONCLUSIONS

Un modèle unidimensionnel de méthode numérique des lignes résolvant l'EDA couplée avec l'équation de RICHARDS (TSOL) a été développé, et les résultats comparés à des mesures effectuées sur trois cases lysimétriques ainsi qu'à un autre modèle numérique utilisant la méthode des éléments finis, HYDRUS. Pour les deux variables simulées (concentration et masse de bromures récupérés), les résultats de TSOL et d'HYDRUS ont été similaires, montrant une surestimation des profils de concentration de bromures mais une bonne corrélation pour les masses de bromures récupérés sauf pour la case A. Le comportement différent de la case A, par rapport aux cases B et C, peut être expliqué par la présence de fentes de retrait entre le sol et le film de plastique entourant cette case. Pour l'ensemble des cases et des profondeurs, l'erreur moyenne absolue des profils de concentrations hebdomadaires de la solution du sol était de  $96 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$  pour une valeur moyenne observée de  $450 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ . Pour les masses de bromures récupérés, dans les cases B et C, l'erreur moyenne absolue hebdomadaire était d'environ 7 mg/semaine. Dans le cas de la case A, l'erreur moyenne absolue hebdomadaire était de 39 mg/semaine. Le bilan de masse des solutés obtenu par TSOL montre une grande précision numérique. Compte-tenu de sa facilité de programmation, et de sa précision numérique similaire à celle obtenue avec les éléments finis, la méthode numérique des lignes s'avère un outil très intéressant pour résoudre numériquement les phénomènes de transport des solutés en milieu non-saturé.

## RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- ADDISCOTT T.M., WAGENET R.J., 1985. Concepts of solute leaching in soils: a review of modelling approaches. *Journal of Soil Science.*, 36, 411-424.
- ALLEN R.G., JENSEN M.E., WRIGHT J.L., BURMAN R.D., 1989. Operational estimates of reference evapotranspiration. *Agron. J.*, 81, 650-662.
- BERZINS M., CAPON P.J., JIMACK P.K., 1998. On spatial adaptivity and interpolation when using the method of lines. *Applied numerical mathematics.*, 26, 117-133.
- BEVEN K.J., HENDERSON D.E., REEVES A.D., 1993. Dispersion parameters for undisturbed partially saturated soil. *J. Hydrol.*, 143, 19-43.
- BRENAN K.E., CAMPBELL S.L., PETZOLD L.R., 1996. Numerical solution of initial-value problems in differential-algebraic equations. IAH, Philadelphia, PA.
- CARON J., BEN JEMIA S., GALLICHAND J., TRÉPANIÉ L., 1999. Field bromide transport under transient-state: Monitoring with time domain reflectometry and porous cup. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 63, 1544-1553.
- CARVER M.B., HINDS H.W., 1978. The method of lines and the advective equation. *Simulation*, 31, 59-69.
- CAUSSADE B., PRAT M., 1984. Simulation de l'impact de produits réactifs dans les sols-cas de l'azote. *J. Hydrol.*, 73, 89-104.
- COSTA J.L., 1991. Solute velocity and dispersion in a field plot. Ph.D. diss. North Dakota State Univ., Fargo, ND.
- DOHERTY J., 1994. PEST: Model-independent parameter estimation. User's guide, Watermark Computing, Oxley, Australia, 120 p.
- DOORENBOS J., PRUITT W.O., 1977. Crop water requirements. F.A.O., Rome, Italy, *Irrigation and Drainage Paper n° 24*.

- FEDDES R.A., KABAT P., VAN BAKEL P.J.T., BONSWIJK J.J.B., HALBERSTMA J., 1988. Modeling soil water dynamics in the unsaturated zone-state of the art. *J. Hydrol.*, 100, 69-111.
- HAYHOE H.N., DE JONG R., 1988. Comparison of two soil water models for soybeans. *Can. Agric. Eng.*, 30, 5-11.
- HINDMARSH A.C., 1983. ODEPACK: A systematized collection of ODE solvers. In: R. S. Stepleman *et al.* (éds.), *Scientific Computing: Applications of Mathematics and Computing to the Physical Sciences*, North Holland Publishing Co, Amsterdam, The Netherlands, 55-64.
- HUTSON J.L., WAGENET R.J., 1995. A multiregion model describing water flow and solute transport in heterogeneous soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 59, 743-751.
- JAYNES D.B., BOWMAN R.S., RICE R.C., 1988. Transport of a conservative tracer in the field under continuous flood irrigation. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 52, 618-624.
- JURY W.A., SPOSITO G., 1985. Field calibration and validation of solute transport models for the unsaturated zone. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 49, 1331-1341.
- KAHANER D., MOLER C., NASH S., 1989. Numerical methods and software. Prentice Hall Inc., New Jersey, NJ.
- KOOL J.B., VAN GENUCHTEN M.Th., 1991. HYDRUS: One-dimensional variably saturated flow and transport model, including hysteresis and root water uptake. Version 3.31. U.S. Salinity Laboratory, Riverside, CA. 101 p.
- LUXMOORE R.J., 1991. On preferential flow and its measurement. In: Gish T.J., Shirmohammadi A. (éds.), *Preferential flow*, *Am. Soc. of Agric. Eng.*, St. Joseph, MI.
- MAJDOUB R., GALLICHAND J., CARON J., 2000. Modélisation du drainage non-saturé au champ par la méthode numérique des lignes. *Can. Agric. Eng.*, 42, 65-73.
- MARCOUX R., 1981. Étude pédologique des îles d'Orléans, aux Coudres et aux Grues. Ministère de l'Agriculture, des Pêcheries et de l'Alimentation, Québec, Canada.
- MILLINGTON R.J., QUIRK J.M., 1961. Permeability of porous solids. *Trans. Faraday Soc.*, 57, 1200-1207.
- PARKER J.C., VAN GENUCHTEN M.Th., 1984. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. Virginia Agric. Exp. Stn., Blacksburg, VA. *Bull. n° 84-3*.
- PRASHER S.O., MADRAMOOTOO C., 1987. Applications of the numerical method of lines (NMOL) in soil hydrology. *Trans. ASAE*, 30, 198-200.
- PRASHER S.O., BARRINGTON S., CLEMENTE R., 1988. Simulation of contaminant transport using NMOL technique, Planning now for irrigation and drainage in the 21st century. Irrigation and drainage division of the American Society of Civil Engineers, Lincoln, Nebraska. *Proc. of Conference*, 263-271.
- PRASHER S.O., SINGH M., MAHESHWARI A.K., CLEMENTE R.S., 1997. Effect of spatial variability in hydraulic conductivity on water table drawdown. *Trans. ASAE*, 40, 371-375.
- RICHARDS L.A., 1931. Capillary conduction of liquids in porous media. *Physics*, 1, 318-333.
- RICE R.C., BOWMAN R.S., JAYNES D.B., 1986. Percolation of water below an irrigated field. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 50, 855-859.
- ROGERS J.S., 1994. Capacitance and initial time step effects on numerical solutions of Richards' equation. *Trans. ASAE*, 37, 807-813.
- SCHIESSER W.E., 1991. The numerical method of lines. Integration of partial differential equations. Academic Press Inc., San Diego, CA.
- SCHIESSER W.E., 1994. Computational mathematics in engineering and applied science: ODEs, DAEs, and PDEs. CRC Press Inc., Boca Raton, FL. 17-153.
- SHAMPINE L.F., 1994. Numerical solution of ordinary differential equations. Chapman et Hall, New York, NY.
- SIMUNEK J., HUANG K., VAN GENUCHTEN M.Th., 1998. The HYDRUS code for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media, Version 6.0. U.S. Salinity Laboratory, Riverside, CA, *Research Report n° 144*, 162 p.
- SULEKHA B., KASHYAP D., DUIJNISVELD W.H.M., 1998. Two-phase-reactive solute-transport simulation in unsaturated zone. *J. Irrigation Drainage Eng.*, 124, 140-147.

- TOCCI M.D., KELLY C.T., MILLER C.T., 1997. Accurate and economical solution of the pressure-head form of Richards' equation by the method of lines. *Adv. Water Resources*, 20, 1-14.
- VAN GENUCHTEN, M.Th., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 44, 892-898.
- VAN GENUCHTEN M.Th., 1982. A comparison of numerical solutions of the one-dimensional unsaturated-saturated flow and mass transport equations. *Adv. Water Resources*, 5, 47-55.
- WAGENET R.J., HUTSON J.L., BIGGAR J.W., 1989. Simulating the fate of a volatile pesticide in unsaturated soil: A case study with DBCP. *J. Environ. Qual.*, 18, 78-83.
- WIERENGA P.J., VAN GENUCHTEN M.Th., 1989. Solute transport through small and large unsaturated soil columns. *Ground Water*, 27, 35-42.
- WILLIAMS G.A., MILLER C.T., KELLEY C.T., TOCCI M.D., 1996. Approaches to modeling Richards' equation. Center for multiphase research, Department of environmental sciences and engineering, University of North Carolina at Chapel Hill, *Research Report n° 2*, 18-24.