

Thèse de Doctorat

**MODELISATION STOCHASTIQUE
DES PESTICIDES
DANS LA ZONE VADOSE**

Présentée à

L'UNIVERSITE DU QUEBEC

INSTITUT NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

INRS-EAU

par

DENIS ISABEL

Mars 1988

RESUME

La contamination des eaux souterraines par les pesticides employés en agriculture constitue un problème environnemental de plus en plus sérieux. Etant donné la complexité des processus en cause, de nombreux modèles déterministes comme PESTAN et PRZM ont été proposés pour guider la gestion de l'utilisation des pesticides. Cependant, les découvertes récentes concernant la variabilité spatiale des propriétés des sols jettent un doute sur la validité de ces modèles et nous incitent à proposer de nouveaux modèles stochastiques. Le but de cette étude est donc de développer de nouveaux modèles de gestion tenant compte de la variabilité spatiale des propriétés des sols.

La modélisation stochastique est toujours basée sur un modèle déterministe. C'est pourquoi nous commençons par une révision des principaux éléments habituellement rencontrés dans les modèles déterministes du destin des polluants organiques, dont les pesticides, dans la zone vadose. Cette revue sert également à présenter les concepts et les paramètres utilisés dans la suite de la thèse.

Par la suite, nous abordons la caractérisation de la variabilité spatiale des propriétés des sols. Nous voyons d'abord comment cette variabilité limite la représentativité des modèles déterministes, justifiant ainsi l'emploi de modèles stochastiques. Nous voyons ensuite comment la variabilité spatiale peut être caractérisée pour en arriver à une revue des études de caractérisation publiées. Cette revue nous dresse un portrait de la grandeur de la variabilité de plusieurs des propriétés importantes des sols.

Nous présentons ensuite les principes de la modélisation stochastique en montrant comment elle permet de représenter la variabilité spatiale. Cette

présentation débute par la démonstration numérique de l'inutilité du coefficient de dispersion, ce qui nous amène au modèle de convection-adsorption-dégradation stochastique que nous proposons.

Nous pouvons ensuite présenter quelques solutions analytiques de ce modèle stochastique, obtenues en supposant des conditions hydriques stationnaires et verticalement homogènes. Ces solutions décrivent l'évolution des concentrations moyennes à une profondeur donnée suite à l'application d'une dose connue de pesticide à la surface du sol. Nous présentons également une relation permettant d'estimer la moyenne et la variance de la fraction totale lessivée à long terme passé une profondeur donnée. Ces statistiques peuvent servir d'indice de la vulnérabilité des eaux souterraines à la contamination par les pesticides.

Finalement, nous présentons un modèle numérique stochastique permettant de simuler, sur une base journalière, le destin des pesticides, ou de toute contamination organique de la zone vadose, dans des conditions non-stationnaires et verticalement hétérogènes. Ce modèle stochastique numérique constitue un outil souple permettant de vérifier rapidement plusieurs hypothèses d'utilisation des pesticides dans des conditions climatiques et pédologiques complexes.

REMERCIEMENTS

Je veux d'abord remercier mes parents, à qui je dois tout, et ensuite tous les payeurs de taxes qui ont subventionné mes études pendant une si longue période.

Je veux également remercier tous ceux qui m'ont enseigné, pour leur patience et leurs encouragements. Ces remerciements s'adressent tout particulièrement au professeur Jean-Pierre Villeneuve, qui peut être assuré de ma reconnaissance et de mon amitié sincère.

Finalement, je veux remercier tous les membres de l'INRS-Eau car leur travail a facilité, de bien des façons, la réalisation de cette thèse.

TABLE DES MATIERES

RESUME	ii
REMERCIEMENTS	iv
TABLE DES MATIERES	v
1. INTRODUCTION	1
1.1 Problématique des pesticides	1
1.2 Etat de la recherche	2
1.3 Objectifs et méthodologie	4
2. ELEMENTS DE MODELISATION DETERMINISTE	6
2.1 Partie hydrique	7
2.1.1 L'infiltration	7
2.1.2 L'évapotranspiration	8
2.1.3 La percolation	9
2.2 Partie pesticide	11
2.2.1 La convection	12
2.2.2 La dispersion	12
2.2.3 L'adsorption-désorption	14
2.2.4 La dégradation	17
3. LA VARIABILITE SPATIALE	20
3.1 Modèles déterministes et variabilité spatiale	20
3.2 Caractérisation de la variabilité	22
3.2.1 Revue des études statistiques	24
3.2.2 Revue des études géostatistiques	34

4. MODELISATION STOCHASTIQUE	36
4.1 Principes des modèles stochastiques	36
4.2 Modèles stochastiques existants	42
4.3 Modèle proposé	45
4.3.1 Elimination du coefficient de dispersion	45
4.3.2 Modèle de convection-adsorption-dégradation stochastique	53
4.3.3 Combinaison des paramètres aléatoires	55
5. SOLUTIONS ANALYTIQUES	62
5.1 Concentration moyenne	62
5.2 Exemple d'utilisation	64
5.3 Evaluation de la vulnérabilité	66
6. MODELE NUMERIQUE (modèle PESTE)	71
6.1 Partie déterministe	72
6.1.1 Partie hydrique	72
6.1.2 Partie pesticide	76
6.2 Partie stochastique	78
6.3 Logiciel interactif	80
7. CONCLUSION	87
TABLE DES NOTATIONS	89
LISTE DES FIGURES	92
LISTE DES TABLEAUX	93
BIBLIOGRAPHIE	94
ANNEXES	102

1. INTRODUCTION

1.1 Problématique des pesticides

En 1981, plus de 6.2 millions de Canadiens, soit 26 % de la population, dépendaient des eaux souterraines pour leur approvisionnement en eau potable (Hess, 1986). Cette proportion était de 17 % au Québec. Au même moment, le secteur agricole de l'économie canadienne comptait sur l'eau souterraine pour satisfaire 13 % de sa consommation, alors qu'au Québec, cette dépendance s'élevait à 78 %. L'eau souterraine est donc une ressource importante, surtout en agriculture.

Ce secteur de l'économie connaît depuis plusieurs années une croissance soutenue de sa production totale annuelle. Parallèlement, le total des superficies cultivées ne cesse de décroître. On se dirige en fait vers une agriculture de plus en plus intensive et industrialisée, où l'utilisation des pesticides chimiques augmente constamment.

Par exemple, en 1978, les ventes de pesticides ont atteint au Québec 1341 tonnes de matières actives, pour ensuite passer à 1701 tonnes en 1982 (Godon et al., 1987). On observe donc une progression, ce qui signifie qu'à chaque année, de plus en plus de ces produits toxiques sont volontairement répandus dans notre environnement.

Comme beaucoup d'autres technologies, l'emploi des pesticides comporte des risques. Dans ce cas, il y a le danger que la substance toxique affecte une

composante de l'environnement autre que la nuisance à combattre. Ceci peut être causé par une trop grande mobilité du pesticide dans l'environnement.

Malgré toutes les précautions entourant l'approbation des pesticides en usage, des cas de contamination des eaux souterraines ont progressivement émergé. Ainsi, des produits tel que l'aldicarbe, qui sont supposés se dégrader rapidement dans le sol, ont quand même été retrouvés dans des puits parfois éloignés des champs d'application (Jones, 1986; Harkin et al., 1986). Il semble que tous les processus susceptibles de mobiliser et de disperser les pesticides dans l'environnement n'ont pas été complètement pris en compte initialement.

En 1980, quelques cas de contamination des eaux souterraines par les pesticides étaient déjà confirmés aux U.S.A.. Il s'en est suivi une vérification plus poussée qui a conduit à la détection de problèmes similaires dans une douzaine d'états (Holden, 1986). Le Ministère de l'Environnement du Québec y est également allé d'une campagne d'échantillonnage restreinte qui a permis d'identifier la présence de pesticides dans les eaux souterraines de quelques régions agricoles du Québec (Fréchette, 1985).

1.2 Etat de la recherche

La découverte de ces cas de contamination a provoqué l'amorçage de travaux de recherche de plus en plus nombreux. Ces travaux peuvent être séparés en deux catégories.

Il y a d'abord les recherches qui contribuent à l'analyse du problème selon une approche réductionniste. Plusieurs travaux visent à préciser les détails de

fonctionnement de chacun des processus pertinents au destin des pesticides dans le sol. Ces processus sont nombreux et complexes, et ce champ de recherche est loin d'être épuisé.

Il y a ensuite les recherches qui procèdent à la synthèse du problème. Plusieurs travaux ont donc pour objectif de rassembler les connaissances acquises afin de composer des modèles du comportement des pesticides dans le sol. Ces efforts de modélisation ont deux buts. Certains de ces modèles servent en effet à vérifier la justesse des hypothèses concernant les processus. D'autres modèles servent plutôt d'outils de gestion et permettent la prédiction du destin d'un pesticide particulier dans un sol donné. Wagenet et Rao (1985) ont fait une revue générale des concepts propres à ces deux types de modélisation.

Les principaux processus gouvernant le destin des pesticides dans le sol sont actuellement connus avec suffisamment de détails pour permettre l'assemblage de modèles de prédiction complexes. La qualité des prédictions obtenues est cependant limitée par la quantité et la précision des données de terrain disponibles. De plus, les recherches récentes démontrant que les propriétés du sol sont sujettes à une forte variabilité spatiale, nous pouvons alors douter de la pertinence d'utiliser un modèle déterministe ponctuel sophistiqué pour évaluer le destin d'un pesticide à l'échelle d'un champ ou d'une région.

De fait, la variabilité spatiale des propriétés du sol est devenue plus récemment un des principaux domaines de recherche. Les études actuellement publiées sur le sujet vont de la caractérisation de la variabilité spatiale (Rao et Wagenet, 1985; Rao et al., 1985; Elabd, Jury et Cliath, 1986) jusqu'à la modélisation stochastique résultante (Simmons, 1982; Sposito, Jury et Gupta, 1986; Bresler et Dagan, 1983). Les travaux présentés ici s'inscrivent dans ce dernier courant.

1.3 Objectifs et méthodologie

L'objectif de cette étude est le développement de modèles de gestion tenant compte de la variabilité spatiale des propriétés des sols. Dans ce but, nous allons tenter de réduire la complexité de la partie déterministe du modèle puisque, de toute façon, la partie stochastique va passablement noyer l'effet des processus les moins significatifs (Dagan et Bresler, 1983). Un modèle de gestion simple, ne comportant qu'un nombre limité de paramètres, présente en plus l'avantage d'être opérationnel beaucoup plus rapidement et facilement.

Plus spécifiquement, nous projetons d'abandonner le coefficient de dispersion hydrodynamique comme l'ont fait Simmons (1982) et Jury (1982). Nous tenterons de justifier cet abandon au moyen d'une expérience numérique, bien qu'il existe déjà des indications de l'inutilité de ce coefficient.

Les modèles stochastiques actuels ne tiennent compte que de la variabilité spatiale du transport. Nous allons donc tenter de représenter également la variabilité spatiale des processus d'adsorption-désorption et de dégradation. Des données de terrain commencent déjà à être publiées à ce sujet (Rao et al., 1986; Elabd et al., 1986) et, à notre connaissance, il n'existe pas encore de modèle permettant de les exploiter.

Enfin, nous avons également comme objectif le développement de deux types de solutions au modèle proposé. D'abord, une série de solutions analytiques applicables à des conditions stationnaires simplifiées. Ces solutions analytiques

vont composer une série d'outils applicables à la gestion quotidienne de l'environnement ou à la cartographie automatique de la vulnérabilité des sols et des eaux souterraines. En deuxième lieu, nous voulons développer un programme permettant une résolution numérique du modèle. Il sera alors possible d'utiliser ce programme pour simuler des conditions transitoires plus complexes.

2. ELEMENTS DE MODELISATION DETERMINISTE

Le destin des pesticides dans la zone vadose est contrôlé par un très grand nombre de processus physiques, chimiques et biologiques. Certains sont plus déterminants ou plus variables que d'autres et, par conséquent, expliquent une plus grande partie du comportement des pesticides à l'échelle d'un champ. Il faut donc identifier les processus clefs, les analyser, et en tirer des modèles mathématiques simples qui seront à la base de notre modèle stochastique.

En effet, l'approche de modélisation stochastique que nous utilisons requiert, à la base, un modèle déterministe incluant chacun de ces processus clefs. La variabilité spatiale y est introduite en considérant les paramètres de ce modèle comme des variables aléatoires ayant des distributions connues. Le résultat du modèle stochastique est donc la distribution des résultats obtenus par l'application du modèle déterministe avec plusieurs combinaisons équiprobables des valeurs des paramètres variables. Ce principe sera exposé en détail au chapitre 4.

Donc, dans un premier temps, nous rassemblons des modèles déterministes de tous les processus importants. Pour chaque processus, ces modèles sont nombreux mais nous ne retenons que les plus simples ou les plus performants. Notre revue est donc sommaire et ne vise qu'à établir une terminologie minimum pour la suite de la thèse. Pour une revue plus exhaustive, le lecteur peut consulter les travaux de Nielsen et al. (1986) ou de Wagenet (1986).

2.1 Partie hydrique

L'eau est le principal agent responsable du transport des pesticides dans le sol. La modélisation du destin des pesticides passe donc nécessairement par la modélisation du destin de l'eau dans le sol.

Heureusement, les concentrations de pesticides susceptibles d'être rencontrées dans l'eau du sol sont trop faibles pour en modifier, de façon sensible, les propriétés physiques du fluide. Le mouvement de l'eau peut donc être modélisé indépendamment de son contenu en pesticides. C'est pourquoi notre modèle, comme beaucoup d'autres, comporte une partie hydrique indépendante de la partie contaminant.

Nous savons que la zone vadose fait partie du cycle hydrologique en tant que réservoir temporaire pour l'eau qui y pénètre par infiltration, et s'en échappe par évapotranspiration ou par percolation vers la nappe souterraine. Ces trois processus contrôlent donc le destin de l'eau dans la zone non-saturée.

2.1.1 L'infiltration

L'eau disponible pour l'infiltration provient de la pluie et de la fonte de la neige. A la surface du sol, cette eau est séparée en infiltration et en ruissellement, et plusieurs méthodes permettent de prédire les proportions respectives de chacune de ces parties.

La méthode utilisée varie en fonction de l'échelle temporelle des calculs. Pour des calculs annuels ou saisonniers, la séparation entre infiltration et

ruissellement peut s'évaluer à partir du bilan hydrologique régional. Pour des calculs journaliers ou horaires, il est plus courant d'utiliser un modèle conceptuel d'infiltration. Ces modèles permettent de calculer un taux maximum d'infiltration et les apports excédentaires sont convertis en ruissellement. Ce taux d'infiltration n'est cependant pas fixe car il peut varier en cours d'averse, et sa valeur initiale dépend des conditions climatiques antécédentes.

En terrain agricole, le sol nu a une capacité d'infiltration principalement contrôlée par son coefficient de perméabilité. La signification de ce coefficient est exposée à la section 2.1.3 portant sur la percolation. Le modèle d'infiltration de Holtan utilise ce coefficient de la façon suivante:

$$f = K_{sat} + a(n-\theta)^b \quad (1)$$

où f est le taux d'infiltration maximum (m/s), K_{sat} est le coefficient de perméabilité à saturation (m/s), n est la porosité du sol (m^3/m^3), θ est la teneur volumétrique en eau (m^3/m^3), et a et b sont des coefficients empiriques.

2.1.2 L'évapotranspiration

L'évapotranspiration est la somme de l'eau qui retourne à l'atmosphère par l'évaporation directe et par la transpiration des plantes. Le taux d'évapotranspiration dépend de plusieurs facteurs dont la température, l'humidité relative, la vitesse du vent, l'ensoleillement et l'état des plantes. Il dépend aussi de la quantité d'eau disponible dans le sol. C'est pourquoi on distingue l'évapo-transpiration potentielle,

qui est fonction des seules conditions météorologiques, de l'évapotranspiration réelle, qui est fonction également des conditions hydriques du sol.

L'évapotranspiration annuelle ou saisonnière peut être évaluée au moyen d'un bilan hydrologique régional. Cependant, l'évapotranspiration journalière ou horaire est plus difficile à modéliser. Il en existe des modèles conceptuels relativement complexes qui sont basés sur le bilan énergétique du sol. Ces derniers ont toutefois une utilité limitée car ils dépendent d'une foule de paramètres dont les mesures ne sont pas toujours disponibles.

Pour la modélisation à court terme de l'évapotranspiration, il existe également des modèles empiriques. Le coefficient de bac, par exemple, permet des estimations journalières de l'évapotranspiration potentielle. Ce coefficient de bac C_{bac} est le rapport entre l'évapotranspiration potentielle ET_p (m/s) et l'évaporation réelle E_{bac} (m/s) mesurée dans un bac d'eau libre de dimensions normalisées, et dont sont munies certaines stations météorologiques.

$$ET_p = C_{bac} \times E_{bac} \quad (2)$$

2.1.3 La percolation

La percolation, c'est l'écoulement de l'eau en milieu non-saturé. Nous savons que dans les milieux saturés, l'écoulement est régi par la loi de Darcy qui stipule que le flux hydrique est proportionnel au gradient de la charge hydraulique. Dans les milieux non-saturés, une loi similaire, la loi de Buckingham, gouverne la

percolation. Pour un système unidimensionnel vertical, la loi de Buckingham s'écrit:

$$q = - K(\theta) \frac{dH}{dz} \quad (3)$$

où q est le flux (m/s), $K(\theta)$ est la conductivité hydraulique (m/s), θ est la teneur volumétrique en eau (m^3/m^3), H est la charge hydraulique (m) et z est l'altitude (m). A la différence de la loi de Darcy, la conductivité hydraulique n'est pas constante dans la loi de Buckingham et elle varie en fonction du contenu en eau. En condition de saturation, la teneur volumétrique en eau est égale à la porosité du matériel et la conductivité hydraulique est alors la même selon les deux lois.

La charge hydraulique est une mesure de l'énergie totale de l'eau. Cependant, plusieurs formes de cette énergie sont négligeables dans la zone vadose et on ne considère que l'énergie de position z et l'énergie de pression $h(\theta)$, toutes deux exprimées en unités équivalentes de hauteur d'eau. L'équation de Bernouilli, décrivant la somme de ces énergies, se simplifie donc à:

$$H = h(\theta) + z \quad (4)$$

En milieu non-saturé, h est négatif et dépend de la teneur volumétrique en eau. Cette pression négative est appelée "tension capillaire".

Si on écrit le bilan de masse du flux hydrique dans un volume élémentaire de sol à partir de la loi de Buckingham, on obtient l'équation de Richards. Dans un système unidimensionnel vertical, cette équation s'écrit:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \frac{\partial H}{\partial z} \right] \quad (5)$$

où t est le temps (s). En y incluant (4), on peut donc également écrire:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\theta) \frac{\partial h(\theta)}{\partial z} + K(\theta) \right] \quad (6)$$

Pour résoudre cette équation, les fonctions $K(\theta)$ et $h(\theta)$ doivent être connues. Elles sont généralement déterminées expérimentalement et représentées par des formules empiriques comme celles proposées par Campbell (1974):

$$K(\theta) = K_{\text{sat}} \left[\frac{\theta}{n} \right]^{\beta} \quad (7)$$

$$h(\theta) = h_0 \left[\frac{\theta}{n} \right]^{((3-\beta)/2)} \quad (8)$$

où h_0 est la pression capillaire minimale à saturation (m) et β est un coefficient empirique.

2.2 Partie pesticide

Les nombreux processus qui contrôlent le destin des pesticides dans la zone vadose peuvent être classés en processus de transport, processus de retardement et processus d'élimination.

2.2.1 La convection

La convection, c'est le déplacement, par le flux hydrique, du pesticide en solution dans l'eau. A la section 2.1, nous avons évoqué le cheminement de l'eau dans le sol. Les pesticides dissous dans l'eau suivent donc le même cheminement.

La percolation entraîne donc les pesticides en profondeur et l'intensité de ce transport est proportionnel au flux de la percolation. Ceci peut s'écrire:

$$u_C = qC \quad (9)$$

où u_C est le flux convectif de pesticide ($\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$) et C est la concentration de pesticide (kg/m^3).

Si la percolation est le seul processus de transport à l'oeuvre, le bilan de masse des pesticides permet alors d'écrire:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} = - \frac{\partial qC}{\partial z} \quad (10)$$

2.2.2 La dispersion

Il existe d'autres mécanismes de transport que la convection. Par exemple, la diffusion moléculaire peut déplacer les pesticides en l'absence de déplacement de l'eau. Egalement, lorsqu'il y a déplacement de l'eau dans le sol, les vitesses d'écoulement dans les pores sont variables et distribuées aléatoirement. Il en

résulte un éparpillement de la masse de pesticide.

Ces deux processus de dispersion ne peuvent pas être modélisés en détail au niveau microscopique. C'est pourquoi, macroscopiquement, on les représente par un processus équivalent similaire à la diffusion moléculaire qui est gouvernée par la loi de Fick. On considère donc que le flux de pesticide causé par la dispersion u_D (kg/m²s) est proportionnel au gradient de concentration selon:

$$u_D = - D \frac{\partial C}{\partial z} \quad (11)$$

où D est le coefficient de dispersion (m²/s).

Ce coefficient de dispersion est composé de la diffusion moléculaire, indépendante de la vitesse, et de la dispersion hydrodynamique qui est, elle, dépendante de la vitesse. C'est pourquoi on écrit:

$$D = D_m + \alpha v \quad (12)$$

où D_m est le coefficient de diffusion moléculaire (m²/s), α est la dispersivité (m) et v est la vitesse moyenne de l'eau dans les pores (m/s) et peut être calculée par:

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (13)$$

En pratique, la diffusion moléculaire est négligeable, sauf si les vitesses de percolation sont très lentes. La dispersivité, elle, est sensée être une propriété intrinsèque du milieu poreux. Cependant, il a récemment été démontré que la valeur de la dispersivité mesurée dépend fortement de l'échelle de l'expérience. Elle peut

être de 0.005 m à l'échelle du laboratoire pour dépasser 0.1 m à l'échelle d'un champ (Nielsen et al.;1986). Pour une colonne de sol, des dispersivités de l'ordre de 0.03 m sont généralement observées (Biggar et Nielsen, 1976; Bresler et Dagan, 1983).

Néanmoins, si on utilise quand même le modèle de dispersion Fickien de concert avec le modèle de transport par convection, on aboutit à l'équation de convection-dispersion classique:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} \quad (14)$$

Cette équation se simplifie si on la divise par θ et qu'on suppose θ , D et q constants. On obtient alors:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (15)$$

qui s'applique à une colonne de sol homogène soumise à un flux hydrique constant.

2.2.3 L'adsorption-désorption

Lors de leur circulation dans la zone vadose, les pesticides sont sujets à de nombreuses interactions avec les particules du sol. Nous regroupons ces interactions sous le terme général d'adsorption-désorption. Il s'agit en fait de liens temporaires qui s'établissent entre les molécules de pesticides et la surface interne

des pores. Ces liaisons retiennent provisoirement les molécules et ont pour effet de retarder le transport du pesticide.

Ces mécanismes d'adsorption sont nombreux et dépendent autant des propriétés chimiques du pesticide que de celles des surfaces des particules du sol. Une modélisation détaillée de ces processus est actuellement impossible. Cependant, plusieurs modèles généraux englobant tous les mécanismes d'adsorption dans une seule équation empirique ont été proposés. Rao et Jessup (1982) en donnent une liste exhaustive.

Le modèle le plus simple et le plus utilisé est sans doute l'isotherme d'adsorption linéaire instantanée et réversible qui s'écrit:

$$S = K_D C \quad (16)$$

où S est la concentration adsorbée (kg/kg) et K_D est le coefficient de partition (m^3/kg). Ce coefficient de partition peut être déterminé en laboratoire à l'aide d'essais d'adsorption en lots ou en colonnes. Il dépend de la nature du pesticide et de la nature du sol.

On a toutefois remarqué que, pour un même pesticide, la tendance à l'adsorption est proportionnelle au contenu en matières organiques du sol (Karickhoff et al., 1979; Jury et al., 1983; Green et Karickhoff, 1986; Rao et al., 1986). Cette relation permet d'écrire:

$$K_D = K_{OC} F_{OC} \quad (17)$$

où K_{OC} est le coefficient de partition avec le carbone organique (m^3/kg) et F_{OC} est la proportion de carbone organique contenue dans le sol (kg/kg). Remarquons

que la fraction de carbone organique peut être reliée approximativement à la fraction de matière organique F_{MO} (kg/kg) par la relation:

$$F_{OC} = 0.58 F_{MO} \quad (18)$$

Le coefficient de partition du pesticide avec le carbone organique dépend de la nature des composés organiques présents dans le sol. Il est cependant relativement stable et il est possible de l'estimer à partir du coefficient de partition avec un solvant organique pur. Ce dernier peut être plus facilement déterminé en laboratoire. C'est ainsi que Rao et Davidson (1980) ont trouvé:

$$\log K_{OC} = 1.029 \log K_{OW} - 0.18 \quad (19)$$

tandis que Karickhoff et al. (1979) avaient trouvé:

$$\log K_{OC} = 1.000 \log K_{OW} - 0.21 \quad (20)$$

Dans les deux cas, K_{OW} est le coefficient de partition entre l'eau et l'octanol (m^3/kg) et les deux équations peuvent se simplifier approximativement à:

$$K_{OC} = 0.63 K_{OW} \quad (21)$$

Remarquons que les pesticides adsorbés ne sont plus en solution et sont donc soustraits à la convection et à la dispersion. Pour en tenir compte, il faut modifier l'équation de convection-dispersion de la façon suivante:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} \quad (22)$$

où ρ est la densité brute du sol (kg/m^3). Si on substitue (16), on obtient alors:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho K_D C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial qC}{\partial z} \quad (23)$$

Ou, plus simplement, si on divise par θ et qu'on suppose θ , D , ρ , K_D et q constants (conditions homogènes et stationnaires), on obtient:

$$\left(1 + \frac{\rho K_D}{\theta} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} \quad (24)$$

Le terme entre parenthèses est aussi connu sous le nom de coefficient de retard. Ce paramètre adimensionnel est égal à:

$$R = 1 + \frac{\rho K_D}{\theta} \quad (25)$$

2.2.4 La dégradation

De nombreux processus ont pour effet l'élimination ou la transformation des pesticides dans la zone vadose. Il y a les processus physico-chimiques comme la photodécomposition, l'hydrolyse et l'oxydation. Il y a également les processus biologiques comme la biodégradation et l'assimilation par les plantes. En fait, ces processus sont tellement nombreux et variés que leur modélisation complète et détaillée est impossible.

A l'heure actuelle, l'approche la plus valable consiste à supposer un modèle de cinétique du premier ordre dont l'unique coefficient englobe tous les processus à l'oeuvre. Ce coefficient ne peut donc être déterminé qu'expérimentalement et sa valeur est influencée par une foule d'autres paramètres tels que le pH, la température, la teneur en eau, l'activité microbienne et bien d'autres.

Ce modèle s'écrit:

$$w = - \lambda (\theta C + \rho S) \quad (26)$$

où w est le taux de perte du pesticide ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$) et λ est le coefficient de dégradation ($1/\text{s}$). Ce coefficient est parfois exprimé en terme de durée de demi-vie $t_{1/2}$ et la relation est:

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (27)$$

Pour le cas particulier de la biodégradation, il existe des modèles plus sophistiqués basés sur l'équation de Monod qui relie le coefficient de biodégradation à la concentration du substrat et à la concentration de biomasse (Simkins et Alexander, 1984; Bouwer et McCarty, 1984; McCarty et al., 1985). Cependant, les données nécessaires à l'utilisation de ces modèles sont rarement disponibles. De plus, des études récentes montrent qu'ils ne sont pas directement applicables aux très faibles concentrations (Wang et al., 1984; Scow et al., 1986).

Le modèle de cinétique du premier ordre demeure donc un choix valable pour représenter l'ensemble des processus de dégradation. Lorsque les processus physico-chimiques sont prépondérants, il est de plus possible de corriger le

coefficient de dégradation pour tenir compte de l'effet de la température. Cette correction obéit alors à l'équation d'Arrhénius:

$$\lambda(T) = \lambda(T_0) \exp \left[\frac{E_A(T_0 - T)}{R_G T_0 T} \right] \quad (28)$$

où T est la température ($^{\circ}\text{K}$), T_0 est la température de référence ($^{\circ}\text{K}$), E_A est l'énergie d'activation de la réaction (J/mole) et R_G est la constante universelle des gaz ($R_G = 8.3 \text{ J/mole}^{\circ}\text{K}$).

Finalement, lorsqu'on inclut la dégradation dans le modèle de convection-dispersion-adsorption, on obtient:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho K_D C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[\theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right] - \frac{\partial q C}{\partial z} - \lambda C (\theta + \rho K_D) \quad (29)$$

et encore une fois, en divisant par θ et en supposant θ , D , ρ , K_D , et λ constants, on obtient:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda R C \quad (30)$$

3. LA VARIABILITE SPATIALE

3.1 Modèles déterministes et variabilité spatiale

Tous les éléments du chapitre précédent, et bien d'autres, peuvent être combinés pour produire des modèles déterministes du comportement des pesticides dans la zone vadose. Ces modèles diffèrent par l'emploi de formulations plus ou moins complexes pour modéliser les différents processus pris en compte. Les diverses solutions numériques ou analytiques qu'on en obtient peuvent être utilisées pour la simulation du destin des pesticides dans le sol.

Plusieurs modèles de ce genre ont déjà été proposés. Il y a par exemple le modèle PRZM (Carsel et al., 1984), qui est bien connu, qui inclut la représentation de nombreux processus bio-physico-chimiques et qui est solutionné numériquement. Le modèle CIMS (Nofziger et Hornsby, 1984), le modèle MOUSE (Placinka et Steenhuis, 1984), le modèle LEACHMP (Wagenet et Hutson, 1986), le modèle SESOIL (Bonazountas et Wagner, 1984) et le modèle PESTAN (Enfield et al., 1982) sont d'autres exemples d'outils plus ou moins complexes également destinés à la simulation du destin des pesticides.

Lorsque les conditions sont simples et stationnaires, des solutions analytiques du modèle de convection-dispersion classique (équation 15) sont disponibles. Van Genuchten et Alves (1982) en ont publié une collection exhaustive. Plusieurs des modèles cités plus haut utilisent d'ailleurs des solutions analytiques. A titre d'exemple, le modèle de convection-dispersion-adsorption-dégradation, dans

une colonne de sol soumise à un flux hydrique constant (équation 30) et à un apport subit de pesticide à une concentration constante, possède la solution analytique suivante:

$$\begin{aligned} \frac{C}{C_0} = & \frac{v}{v+U} \exp \left[\frac{z(v-U)}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{Rz-Ut}{2(DRt)^{1/2}} \right] \\ & + \frac{v}{v-U} \exp \left[\frac{z(v+U)}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{Rz+Ut}{2(DRt)^{1/2}} \right] \\ & + \frac{v^2}{2DR\lambda} \exp \left[\frac{vz-D\lambda t}{D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{Rz+vt}{2(DRt)^{1/2}} \right] \end{aligned} \quad (31)$$

avec

$$U = (v^2 + 4DR\lambda)^{1/2} \quad (32)$$

et où C_0 est la concentration de l'apport (kg/m^3).

Chacun des éléments des modèles déterministes ont été développés par des expériences contrôlées en laboratoire, et les modèles résultants ont également été vérifiés sur des colonnes de sol en laboratoire. Cependant, l'application de ces modèles déterministes à des conditions de champ naturelles s'est heurté au problème de la variabilité spatiale des propriétés des sols. Cette variabilité est connue depuis longtemps (Nielsen et al., 1973) et elle est d'une amplitude suffisante pour jeter un doute sur la capacité d'un modèle déterministe à bien représenter le comportement d'un pesticide sur l'ensemble d'un champ (Nielsen et al., 1986; Van Genuchten et Jury, 1987; Sposito et al., 1986; Dagan et Bresler, 1979). L'emploi des valeurs moyennes des paramètres ne procure pas nécessairement des résultats

représentatifs de la moyenne du comportement des pesticides, car les processus modélisés ne sont pas tous linéaires et les distributions des valeurs des paramètres sont souvent asymétriques.

En conséquence, la variabilité spatiale limite l'utilité des modèles de convection-dispersion déterministes à la simulation du destin des pesticides dans une colonne de sol d'étendue limitée. Par contre, ces modèles peuvent être utiles pour comparer les risques de mobilisation de divers pesticides soumis à des conditions de terrain normalisées (Jury et al., 1983).

3.2 Caractérisation de la variabilité

La variabilité spatiale des propriétés hydrauliques des sols est un phénomène connu depuis plusieurs années. Déjà, en 1973, Nielsen et al. publiaient les résultats d'une importante étude sur le sujet. Les études de ce genre se sont multipliées depuis, et la réalisation récente de l'importance de ce phénomène dans la modélisation du destin des pesticides dans les sols a accéléré le rythme de ces travaux.

Les premières études étaient axées sur la caractérisation de la variabilité des propriétés physiques et hydrauliques des sols. Tout récemment, la variation des propriétés chimiques influençant le destin des pesticides a commencé à être également étudiée.

Rao et Wagenet (1985) ont abordé les implications théoriques des diverses méthodologies utilisées dans l'analyse des campagnes de caractérisation de la

variabilité spatiale. Ils font observer que les résultats publiés étaient trop souvent analysés avec les méthodes statistiques classiques seulement. Selon eux, l'analyse géostatistique doit également être utilisée car la dépendance spatiale des caractéristiques des sols est un phénomène important, et on doit en tenir compte dans la conception et dans l'analyse des campagnes d'échantillonnage. Un résumé des méthodes de l'analyse classique et de l'analyse géostatistique est fourni à l'annexe A.

Ces deux auteurs ont également discuté brièvement de l'intensification ou de l'atténuation de la variabilité spatiale du destin des pesticides qui peut résulter de la superposition des divers processus. Ils soulignent le manque de données pertinentes à l'analyse de ce problème.

L'étude de la corrélation entre les paramètres variables a également été négligée jusqu'à présent. On peut penser que lorsque deux paramètres variables, ayant un effet synergique sur le destin des pesticides, sont corrélés, la variabilité totale résultante peut être intensifiée ou amortie dans des proportions importantes. Malheureusement, ici encore, les données pertinentes sont quasi inexistantes. Les quelques études de corrélation que nous avons relevées dans la littérature (Wagenet et al., 1984; Bresler et al., 1984; Rawls et Brakensiek, 1985) sont plutôt axées sur l'estimation des propriétés hydrauliques des sols par corrélation avec des paramètres texturaux faciles à mesurer.

Néanmoins, de nombreuses études de caractérisation de la variabilité spatiale des propriétés contrôlant le destin des pesticides dans la zone vadose ont été publiées. La plupart offrent une analyse statistique classique et les paramètres physiques sont ceux qui ont été le plus étudiés. Jury (1985) a publié récemment

une revue où sont synthétisés les résultats de plusieurs études de caractérisation de la variabilité spatiale dans les sols. Nous allons utiliser cette revue, augmentée de nouvelles références, pour dresser un tableau général de la situation observée.

3.2.1 Revue des études statistiques

Les tableaux (1) à (9) rassemblent donc les résultats de plusieurs études de la variabilité spatiale des propriétés des sols. La nature des sols et des climats propres à chaque étude varie énormément et les valeurs moyennes de chaque paramètre ne sont par conséquent données qu'à titre indicatif. Elles sont même omises dans le cas du coefficient de partition et de la demi-vie.

L'élément important de ces tableaux est le coefficient de variation cv qui est un paramètre statistique représentatif du degré de variabilité spatiale observé dans chaque cas. Ce coefficient est calculé par:

$$cv = \frac{s}{u} \quad (33)$$

La plupart des paramètres étudiés ont été décrits au chapitre 2. Dans le cas des paramètres décrivant les propriétés hydrauliques des sols, nous n'avons pas répertorié les coefficients empiriques utilisés pour décrire les courbes caractéristiques des sols, car ils dépendent de l'équation utilisée. Il est donc impossible de comparer les coefficients de plusieurs études lorsque celles-ci utilisent des formulations différentes.

La courbe de tension caractéristique peut cependant être partiellement connue par deux points particuliers. Il y a d'abord la capacité de rétention θ_r (ou capacité au champ) qui correspond à la teneur en eau finale d'un sol initialement saturé qu'on laisse se drainer par gravité seulement. Par convention, la capacité de rétention est désignée comme étant la teneur en eau correspondant à une tension capillaire de 10 kPa ou 33 kPa. Il y a ensuite le point de flétrissement θ_f qui correspond, lui, à la teneur en eau résiduelle que les racines des plantes ne peuvent extraire. Par convention, le point de flétrissement est désignée comme étant la teneur en eau correspondant à une tension capillaire de 1.5 MPa. Les tableaux (4) et (5) contiennent des résultats sur la variabilité spatiale de ces deux paramètres.

Tableau 1 Variabilité spatiale de la densité brute ρ observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Densité moyenne (kg/m^3)	Coefficient de variation
Stockton et Warrick (1971)	40	36	1200	0.15
Nielsen et al. (1973)	150	120	1356	0.07
Coelho (1974)		36	1420	0.11
Cassel et Bauer (1975)	1.3	192	1470	0.09
Cassel et Bauer (1975)	0.5	144	1260	0.06
Gumaa (1978)	15	320	1300	0.07
Babalola (1978)	0.34	5	1650	0.03
Babalola (1978)	91.6	5	1590	0.06
Wagenet (1981)	0.18	133	1470	0.07
Courtin et al. (1983)	3.8	30	1200	0.26
Elabd et al. (1986)	0.6	36	1380	0.06
Smith et al. (1987)	3.9	84	1600	0.04

Tableau 2 Variabilité spatiale de la porosité n observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Porosité moyenne (m^3/m^3)	Coefficient de variation
Nielsen et al. (1973)	150	120	0.454	0.11
Coelho (1974)		36	0.464	0.13
Cameron (1978)	0.023	20	0.530	0.07
Russo et Bresler (1981)	0.8	120	0.367	0.11
Wagenet (1981)	0.18	133	0.447	0.08
Cassel (1983)	0.4	12	0.430	0.10
Smith et al. (1987)	3.9	28	0.410	0.06

Tableau 3 Variabilité spatiale du coefficient de perméabilité à saturation K_{sat} observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Perméabilité moyenne (mm/s)	Coefficient de variation
Nielsen et al. (1973)	150	120	0.0041	0.86
Coelho (1974)		36	0.0048	1.47
Gumaa (1978)	15	320	0.039	1.90
Babalola (1978)	91.6	5	0.011	0.81
Babalola (1978)	91.6	5	0.0028	1.78
Simmons et al. (1979)	0.66	24	0.00046	0.46
Sharma et al. (1980)	9.6	26	0.024	0.50
Libardi et al. (1980)	150	20	0.0026	3.43
Russo et Bresler (1981)	0.8	120	0.037	0.69
Wagenet (1981)	0.18	133	0.0037	0.52
Cassel (1983)	0.4	12	0.0097	0.69
Wagenet et Rao (1983)		611	0.0011	0.76
Wagenet et al. (1984)	0.2	265	0.0011	0.59
Lee et al. (1985)	0.01	20	0.038	0.75
Lee et al. (1985)	0.01	20	0.0013	0.82
Lee et al. (1985)	0.01	20	0.0013	0.58
Lee et al. (1985)	0.01	20	0.000084	6.27

Tableau 4 Variabilité spatiale de la capacité de rétention θ_r , observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Capacité de rétention (m^3/m^3)	Coefficient de variation
Stockton et Warrick (1971)	40	36	0.450	0.15
Nielsen et al. (1973)	150	120	0.351	0.13
Gumaa (1978)	15	320	0.230	0.40
Russo et Bresler (1981)	0.8	120	0.078	0.54
Gajem et al. (1981)	85	900	0.370	0.04

Tableau 5 Variabilité spatiale du point de flétrissement θ_f , observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Point de flétrissement (m^3/m^3)	Coefficient de variation
Cassel et Bauer (1975)	1.3	192	0.041	0.45
Cassel et Bauer (1975)	0.5	144	0.193	0.14
Cassel et Bauer (1975)	3.3	192	0.074	0.19
Gumaa (1978)	15	320	0.075	0.51
Gajem et al. (1981)	85	900	0.166	0.14

Tableau 6 Variabilité spatiale de la teneur en matières organiques f_{mo} observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Nombre de mesures	Teneur en matières organiques (kg/kg)	Coefficient de variation
Elabd et al. (1986)	0.6	36	0.012	0.28
Wood et al. (1987)	2.52	135	0.014	0.38
Smith et al. (1987)	3.9	100	0.410	0.53

Tableau 7 Variabilité spatiale du coefficient de partition K_D observée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Pesticide	Nombre de mesures	Coefficient de variation
Elabd et al. (1984)	0.64		36	0.31
Elabd et al. (1986)	0.6	Napropamide	36	0.29
Wood et al. (1987)	2.52	Métolachlor	135	0.45

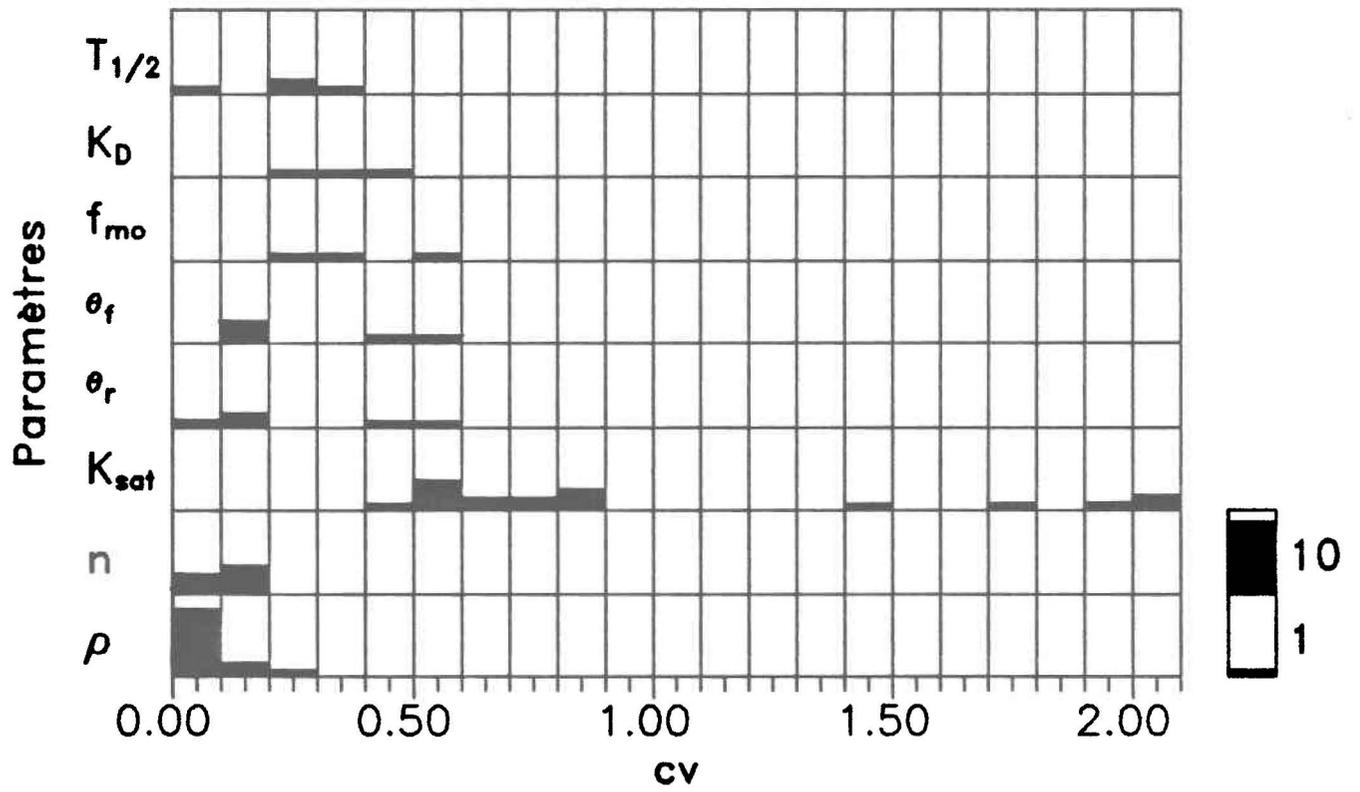
Tableau 8 Variabilité spatiale de la demi-vie des pesticides mesurée dans plusieurs études

Référence	Superficie du champ (ha)	Pesticide	Nombre de mesures	Coefficient de variation
Rao et al. (1986)	3.9	Aldicarbe	40	0.31
Rao et al. (1986)	3.9	Métolachlor	18	0.22
Ou et al. (1982)	0.64	Métribuzine	10	0.21
Ou et al. (1982)	0.64	Simazine	10	0.07

Tableau 9 Synthèse des études de la variabilité spatiale

Paramètre	Nombre d'études	Gamme des moyennes	Gamme des coefficients de variation
Densité brute ρ (kg/m ³)	12	1200-1650	0.03-0.26
Porosité n (m ³ /m ³)	7	0.367-0.530	0.06-0.13
Coefficient de perméabilité K_{sat} (mm/s)	17	0.000084-0.038	0.46-6.27
Capacité de rétention θ_r (m ³ /m ³)	5	0.078-0.450	0.04-0.54
Point de flétrissement θ_f (m ³ /m ³)	5	0.041-0.193	0.14-0.51
Teneur en matières organiques F_{MO} (kg/kg)	3	0.012-0.410	0.28-0.53
Coefficient de partition K_D	3		0.29-0.45
Demi-vie $T_{1/2}$	4		0.07-0.31

Figure 1 Distribution des coefficients de variation observés pour les différents paramètres



L'ensemble des études de la variabilité spatiale revues est synthétisé au tableau (9). La figure (1), qui complète cette synthèse, illustre la distribution des coefficients de variation observés pour chacun des paramètres. Ces paramètres peuvent être classés en trois groupes, selon leur variabilité:

- Paramètres peu variables ($cv < 0.20$)
 - densité brute
 - porosité

- Paramètres moyennement variables ($cv < 0.50$)
 - capacité de rétention
 - point de flétrissement
 - teneur en matières organiques
 - coefficient de partition
 - demi-vie

- Paramètres très variables ($cv > 0.50$)
 - coefficient de perméabilité

Warrick et Nielsen (1980) ont proposé un regroupement similaire et plusieurs auteurs confirment que les paramètres les plus variables sont le coefficient de perméabilité K et la vitesse v qui en est directement dépendante (Nielsen et al., 1973; Dagan et Bresler, 1983).

Le même regroupement se retrouve au niveau des distributions statistiques. Les paramètres peu variables et moyennement variables suivent généralement une distribution conforme à la loi normale. La perméabilité et la vitesse suivent plutôt une loi log-normale (Jury et al., 1982; Warrick et Nielsen, 1980; Biggar et Nielsen, 1973; Warrick et al., 1977). Cependant, il est peut-être plus approprié de dire que les premiers ont des distributions symétriques, tandis que les seconds ont des distributions asymétriques.

La figure (2) permet de comparer la loi log-normale avec les lois de distribution exponentielle et gamma simple, lorsqu'on les utilise pour modéliser les données de Bresler et al. (1984). Ces courbes de distribution ont été ajustées par la méthode des moments. Nous avons donc supposé que les paramètres des distributions étaient estimés par les paramètres de l'échantillon.

$$\mu \approx u \quad (34)$$

$$\sigma \approx s \quad (35)$$

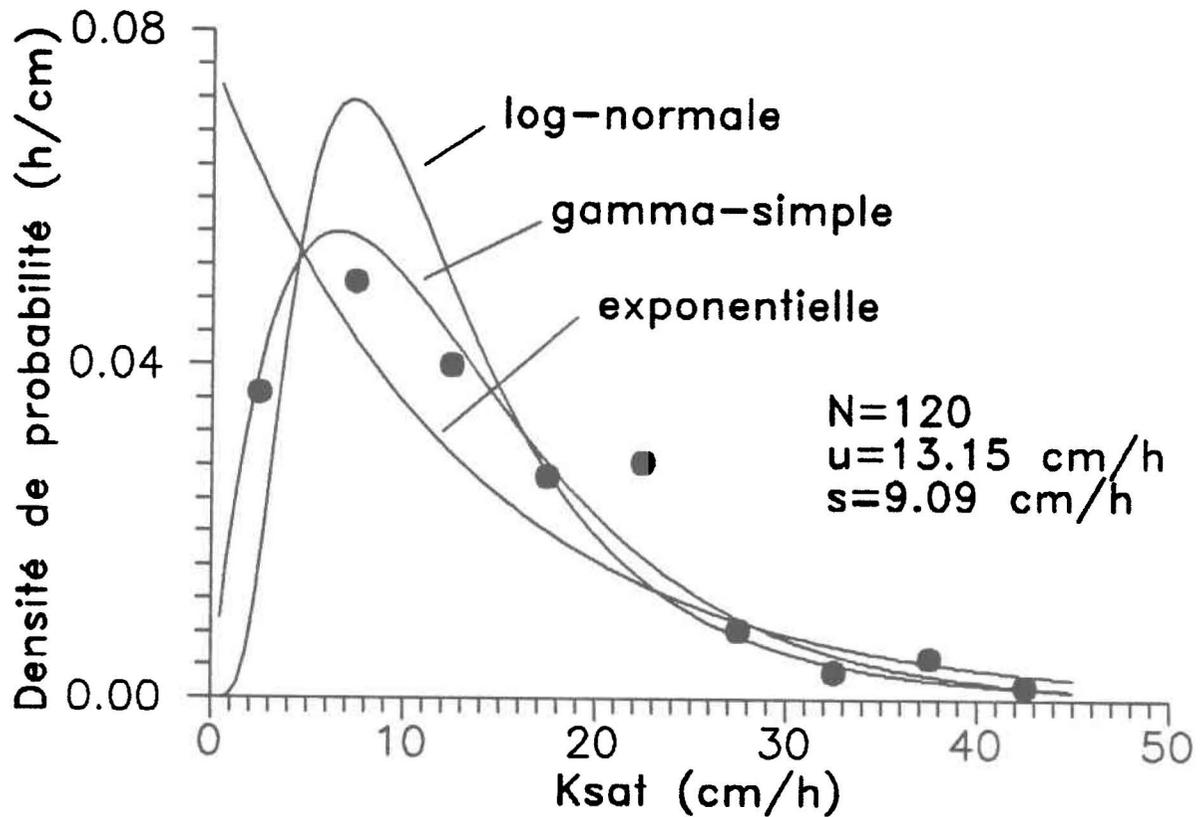
Dans le cas de la loi log-normale, nous avons plutôt:

$$\mu_L \approx \ln \left[\frac{u^2}{(s^2+u^2)^{1/2}} \right] \quad (36)$$

$$\sigma_L \approx \left[\ln \left[\frac{u^2+s^2}{u^2} \right] \right]^{1/2} \quad (37)$$

où μ_L et σ_L sont les paramètres de la distribution normale parente dans le domaine transformé.

Figure 2 Ajustement de trois distributions asymétriques aux données de Bresler et al. (1984)



Cette figure nous démontre que les autres distributions proposées peuvent très bien remplacer la loi log-normale dans l'analyse des paramètres distribués asymétriquement.

3.2.2 Revue des études géostatistiques

Peu d'études géostatistiques de la variabilité spatiale des propriétés des sols ont été publiées à date. Nous avons rassemblé au tableau (10) les résultats des quelques cas que nous avons trouvés. Il n'est malheureusement pas possible d'identifier une tendance à partir d'un échantillon si restreint.

Tableau 10 Analyses géostatistiques publiées

Référence	Russo et Bresler (1981)	Wood et al. (1987)	Springer et Cundy (1987)	Vauclin et al. (1983)
Superficie (ha)	0.8	2.52	0.19	
Taille de l'échantillon	120	135	133	
Distance moyenne (m)	15	15	4	
Distance de corrélation (m)				
Porosité	55			
Capacité de rétention	27			
Coefficient de perméabilité	27			
Coefficient de partition		110		
Teneur en matières organiques		110		
log K_{sat}			0.5	
θ_r				26

Cependant, cette lacune ne gêne pas la modélisation stochastique des pesticides dans la zone vadose. En effet, l'analyse géostatistique ne sert ultimement qu'à optimiser les travaux d'échantillonnage et à interpoler spatialement.

4. MODELISATION STOCHASTIQUE

4.1 Principes des modèles stochastiques

La variabilité spatiale des propriétés des sols est une réalité reconnue et, comme nous l'avons vu à la section 3.1, elle limite l'utilité des modèles déterministes. Cette variabilité peut cependant être modélisée. Des modèles imitant le caractère aléatoire des processus, appelés modèles stochastiques, permettent de simuler le comportement statistique des pesticides à l'échelle d'un champ.

Ces modèles stochastiques sont basés sur les hypothèses suivantes. Soit une variable X dont les mesures dans un champ démontrent la variabilité spatiale. Nous pouvons supposer que X est une variable aléatoire régionalisée et que le champ à l'étude en est une réalisation. Nous pouvons également supposer que cette variable est stationnaire, c'est-à-dire que ses propriétés statistiques sont indépendantes de la position dans le champ. Finalement, nous pouvons aussi supposer qu'elle est ergodique. Soit que chaque réalisation contient toutes les valeurs possibles de X , de telle sorte que les propriétés statistiques de l'ensemble peuvent être entièrement connues à partir de l'analyse d'une de ses réalisations. Cette dernière hypothèse est bien utile puisque nous ne disposons évidemment que d'une seule réalisation.

A partir de ces hypothèses et des mesures de X effectuées dans le champ, on peut en analyser la distribution de probabilité. Les paramètres statistiques de la distribution sont alors déterminés par les paramètres statistiques de l'échantillon, \bar{u} et s , car on considère qu'ils sont de bons estimateurs de μ et σ .

Supposons maintenant qu'on ait identifié une relation déterministe entre un processus p et une variable aléatoire régionalisée X , tel que:

$$p = p(X) \quad (38)$$

est vérifié en tout point du champ. Le processus p est donc également une variable aléatoire régionalisée dont la distribution peut être reliée à celle de X par:

$$f(p) dp = f(X) dX \quad (39)$$

et dont les paramètres sont:

$$\mu(p) = \int_{-\infty}^{\infty} p(X) f(X) dX \quad (40)$$

$$\sigma^2(p) = \int_{-\infty}^{\infty} (p(X) - \mu(p))^2 f(X) dX \quad (41)$$

Dans les problèmes qui nous intéressent, les processus à modéliser sont dépendants de plusieurs variables aléatoires:

$$p = p(X_1, X_2, \dots, X_m) \quad (42)$$

qui sont distribuées selon $f(X_1, X_2, \dots, X_m)$, de telle sorte que:

$$\mu(p) = \int \int \dots \int p(X_1 \dots X_m) f(X_1 \dots X_m) dX_1 \dots dX_m \quad (43)$$

et

$$\sigma^2(p) = \int \int \dots \int (p(X_1 \dots X_m) - \mu(p))^2 f(X_1 \dots X_m) dX_1 \dots dX_m \quad (44)$$

Ainsi, un modèle déterministe permettant de prédire de façon ponctuelle le destin d'un pesticide dans le sol peut être utilisé, de concert avec la fonction de distribution de l'ensemble de ses paramètres variables, afin d'estimer les propriétés statistiques du destin des pesticides pour l'ensemble d'un champ. C'est ce principe qui est utilisé dans l'élaboration des modèles stochastiques.

La partie déterministe du modèle est facile à obtenir, mais la distribution conjointe des paramètres variables l'est moins. En effet, les relations de dépendance entre ces variables peuvent compliquer la détermination de la fonction de distribution conjointe qui est alors formée, selon le théorème de Bayes, par le produit des distributions marginales conditionnelles suivantes:

$$f(X_1, X_2 \dots X_m) = f(X_1) f(X_2 | X_1) \dots f(X_m | X_1 \dots X_{m-1}) \quad (45)$$

Mais, si les variables sont indépendantes, cette distribution peut se simplifier au produit des distributions marginales:

$$f(X_1, X_2 \dots X_m) = f(X_1) f(X_2) \dots f(X_m) \quad (46)$$

Il est alors possible, si les distributions et le modèle sont représentés par des équations simples, d'en arriver à intégrer directement (43) et (44). On obtient alors un modèle stochastique analytique.

Souvent, l'intégrale (43) sera cependant difficile à évaluer si les distributions et le modèle sont représentés par des équations complexes. On pourra alors contourner ce problème de deux façons. Premièrement, en remplaçant la fonction par une série de Taylor développée autour des moyennes. Cette fonction approximative s'écrit:

$$\begin{aligned}
p(X_1, X_2 \dots X_m) &\approx p(\mu(X_1), \mu(X_2) \dots \mu(X_m)) \\
&+ \sum_{i=1}^m (X_i - \mu(X_i)) \frac{\partial p}{\partial X_i} \Big|_{X_i = \mu(X_i)} \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m (X_i - \mu(X_i))^2 \frac{\partial^2 p}{\partial X_i \partial X_j} \Big|_{\substack{X_i = \mu(X_i) \\ X_j = \mu(X_j)}} \quad (47)
\end{aligned}$$

Les paramètres statistiques d'ensemble du processus modélisé peuvent alors être approximés analytiquement (Eadie et al., 1971). Pour la moyenne, on a:

$$\begin{aligned}
\mu_p &\approx p(\mu(X_1), \mu(X_2) \dots \mu(X_m)) \\
&+ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \frac{\partial^2 p}{\partial X_i \partial X_j} \Big|_{\substack{X_i = \mu(X_i) \\ X_j = \mu(X_j)}} \sigma^2(X_i, X_j) \quad (48)
\end{aligned}$$

où $\sigma^2(X_i, X_j)$ est la covariance de X_i et X_j , et elle est définie par:

$$\sigma^2(X_i, X_j) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left[(X_i - \mu(X_i)) (X_j - \mu(X_j)) f(X_i, X_j) dX_i dX_j \right] \quad (49)$$

Remarquons que lorsque $i=j$, la covariance est identique à la variance.

La variance peut également être approximée analytiquement en se limitant aux termes de premier ordre. On obtient ainsi:

$$\sigma_p^2 \approx \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \left[\frac{\partial p}{\partial X_i} \Big|_{X_i = \mu(X_i)} \frac{\partial p}{\partial X_j} \Big|_{X_j = \mu(X_j)} \sigma^2(X_i, X_j) \right] \quad (50)$$

Dans le cas où les variables sont distribuées indépendamment, les covariances sont nulles et les paramètres d'ensemble se simplifient à:

$$\mu_p \approx p(\mu(X_1), \mu(X_2) \dots \mu(X_m)) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m \frac{\partial^2 p}{\partial X_i^2} \Big|_{X_i = \mu(X_i)} \sigma^2(X_i) \quad (51)$$

et

$$\sigma_p^2 \approx \sum_{i=1}^m \left[\frac{\partial p}{\partial X_i} \Big|_{X_i = \mu(X_i)} \right]^2 \sigma^2(X_i) \quad (52)$$

Une autre façon de résoudre les intégrales (43) et (44) est d'utiliser une méthode d'intégration numérique. La plus populaire, dans ces modèles stochastiques, est la méthode de Monte-Carlo. Elle consiste à générer numériquement de nombreuses réalisations aléatoires de l'ensemble des variables aléatoires du modèle en respectant leurs distributions observées dans le champ. Les résultats du modèle déterministe, pour chacune de ces réalisations, ont alors une distribution qui modélise la distribution aléatoire du processus dans le champ. Les paramètres de cette distribution sont donc estimés par:

$$\mu(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(X_1(i), X_2(i) \dots X_m(i)) \quad (53)$$

et

$$\sigma^2(p) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (p(X_1(i) \dots X_m(i)) - \mu(p))^2 \quad (54)$$

où l'indice entre parenthèses désigne les N différentes réalisations pseudo-aléatoires générées numériquement. Pour chaque réalisation, les valeurs des variables sont alors obtenues par des tirages successifs dans les distributions marginales conditionnelles de l'équation (45).

Malheureusement, dans les analyses des résultats de terrain actuellement publiées, les covariances entre les différentes variables aléatoires ne sont pas disponibles. Les modèles stochastiques utilisant la méthode de Monte-Carlo présentement disponibles font donc l'hypothèse que les variables aléatoires sont distribuées indépendamment. Les valeurs utilisées dans chaque réalisation sont alors tirées des distributions marginales de l'équation (46).

Notons, au passage, que les intégrations effectuées par la méthode de Monte-Carlo convergent très lentement. Il faut donc utiliser un nombre de réalisations assez considérable si la précision du résultat a une grande importance (Bakhvalov, 1976).

D'autres méthodes d'intégration numérique peuvent être utilisées pour résoudre les équations (43) et (44). Les formules de quadrature de Newton-Cotes ou celles de Gauss permettent des intégrations numériques aussi précises que l'on veut. Elles sont basées sur une somme pondérée du genre:

$$\mu(p) = \sum_{i=1}^N w_{(i)} p(X_{1(i)} \dots X_{m(i)}) f(X_{1(i)} \dots X_{m(i)}) \quad (55)$$

où les poids $w_{(i)}$ associés aux réalisations sont déterminés selon des règles précises qui sont décrites dans les manuels d'analyse numérique (Bakhvalov, 1976). La précision de ces méthodes dépend de la densité de ces réalisations, comme dans la méthode de Monte-Carlo.

Ces méthodes d'intégration numérique classiques sont toutefois peu efficaces pour intégrer des fonctions présentant un pic étroit, comme une distribution avec un petit coefficient de variation. Une dernière méthode d'intégration numérique des équations (43) et (44) a été proposée pour régler ce problème. Elle consiste à subdiviser les fonctions de répartition $F(x)$ en incréments égaux, et à évaluer p pour chacune des réalisations formées par les combinaisons des valeurs médianes de ces classes équiprobables. Les paramètres d'ensemble sont alors approximés par:

$$\mu(p) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N p(X_{1(i)}, X_{2(i)} \dots X_{m(i)}) \quad (56)$$

et

$$\sigma^2(p) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (p(X_{1(i)} \dots X_{m(i)}) - \mu(p))^2 \quad (57)$$

Cette méthode converge plus rapidement que la méthode de Monte-Carlo, c'est-à-dire que le nombre de réalisations à calculer N est moindre pour un résultat de précision équivalente (Bakhvalov, 1976).

4.2 Modèles stochastiques existants

Plusieurs modèles stochastiques ont déjà été publiés. Comme nous allons le voir, les approches diffèrent beaucoup, et plusieurs avenues n'ont pas encore été

explorées.

Dès 1979, Dagan et Bresler proposaient un modèle stochastique pour représenter le transport dans les sols non-saturés hétérogènes. Leur modèle est composé d'une partie déterministe où le transport est représenté par l'équation de convection (10). La dispersion n'est pas modélisée car elle est jugée non-significative. Dans la partie stochastique, seule la perméabilité est supposée variable par le biais d'un paramètre adimensionnel pour lequel on assume une distribution log-normale. L'équation de base de la modélisation stochastique (équation 43) est solutionnée analytiquement pour obtenir une équation explicite permettant de calculer la concentration moyenne à une profondeur donnée dans un champ soumis à une percolation constante et à un apport constant en soluté.

Amoozegar-Fard et al. (1982) ont présenté un modèle stochastique permettant de calculer les concentrations moyennes en fonction de la profondeur ou en fonction du temps dans un champ. La partie déterministe de leur modèle est basée sur l'équation de convection-dispersion classique (15) pour laquelle ils utilisent une solution analytique valide en régime de percolation stationnaire. Ce modèle déterministe s'apparente à l'équation (31). Dans la partie stochastique, trois paramètres sont supposés variables selon diverses combinaisons. Leurs distributions, qui sont indépendantes, sont respectivement log-normale pour la vitesse dans les pores, log-normale pour le coefficient de dispersion et normale pour la porosité. Les concentrations moyennes d'ensemble sont obtenues par l'intégration numérique de l'équation (43) par la méthode de Monte-Carlo avec 2000 réalisations pseudo-aléatoires.

Simmons (1982) propose un modèle stochastique convectif où la partie déterministe se résume à l'équation de convection, et où la partie stochastique

consiste en une distribution des temps de parcours. Deux distributions de ces temps de parcours sont utilisées: une distribution log-normale et une distribution dite "fickienne". Les équations stochastiques sont solutionnées analytiquement pour obtenir des formulations explicites de la concentration moyenne à différentes profondeurs et à différentes périodes. Comme dans le cas du modèle de Dagan et Bresler (1976), c'est la simplicité du modèle déterministe de transport convectif qui permet d'obtenir des solutions analytiques pour l'équation (43).

Jury, dans une série d'articles publiés de 1982 à 1986 (Jury, 1982; Jury et al., 1982; Jury et Sposito, 1985; Jury et al., 1986; White et al., 1986; Sposito et al., 1986), propose un modèle stochastique de type "boîte noire" où la concentration moyenne à une profondeur donnée est calculée par une intégrale de convolution entre une fonction de transfert et une fonction d'entrée du soluté à la surface. Dans le cas d'une percolation en régime permanent, la fonction de transfert peut être assimilée à une fonction de distribution des temps de parcours, et l'intégrale de convolution devient alors similaire à l'intégrale du modèle de Simmons (1982). Jury propose également l'emploi d'une distribution log-normale des temps de parcours.

Ce modèle peut cependant simuler un modèle de convection-dispersion classique par l'emploi d'une distribution spéciale de temps de parcours, soit la distribution fickienne de Simmons (1982). Il peut aussi simuler, par l'emploi de fonctions de transfert plus complexes, des modèles déterministes incluant l'adsorption-désorption, de même qu'une distribution aléatoire des vitesses de percolation. Ces modèles plus élaborés ne peuvent cependant pas être résolus analytiquement et on a alors recours à des transformations de Laplace numériques. Bresler et Dagan, dans un rapport publié en trois parties (Dagan et Bresler, 1983;

Bresler et Dagan, 1983; Bresler et Dagan, 1983), ont amélioré leur modèle de 1979 en incluant l'équation de convection-dispersion complète dans sa partie déterministe. Ils utilisent des solutions approximatives des modèles hydrauliques et de transport pour formuler un modèle stochastique où l'élément aléatoire est toujours un paramètre adimensionnel (scaling factor) distribué log-normalement. L'intégrale stochastique (équation 43) y est calculée par la méthode de Monte-Carlo ou par la méthode des classes équiprobables.

4.3 Modèle proposé

4.3.1 Elimination du coefficient de dispersion

Plusieurs auteurs rapportent que le coefficient de dispersion peut être considéré comme un paramètre superflu dans le cadre de la modélisation stochastique des pesticides dans la zone vadose (Jury, 1982; Simmons, 1982; Dagan et Bresler, 1979; Sposito et al., 1986). En effet, la variabilité spatiale des perméabilités et des vitesses de percolation est la principale responsable de la dispersion observée à l'échelle d'un champ. Les coefficients de dispersion valables pour des colonnes peu étendues ont un effet négligeable dans une modélisation stochastique à grande échelle.

L'abandon du coefficient de dispersion a deux avantages. Premièrement, il en résulte une simplification importante de la partie déterministe des modèles car on y élimine ainsi les termes de deuxième ordre. Deuxièmement, il n'est plus nécessaire d'évaluer ce coefficient, ce qui n'a jamais été une tâche facile.

Il est possible de vérifier numériquement que le coefficient de dispersion est bien un paramètre superflu au moyen de simulations stochastiques comparées. Les deux modèles stochastiques comparés sont basés sur deux modèles déterministes différents.

Le modèle déterministe incluant la dispersion est décrit par l'équation (30) et sa solution est une version simplifiée de l'équation (31) proposée par Ogata et Banks (1961). En réponse à une injection subite et continue de soluté à une concentration de C_0 (kg/m³) dans une colonne de sol soumise à une percolation constante, les concentrations vont s'y distribuer selon:

$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{z-vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] + \exp \left[\frac{vz}{D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{z+vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] \right\} \quad (58)$$

Si on ne tient plus compte de la dispersion, la distribution des concentrations obéit plutôt à:

$$\begin{aligned} C &= C_0 & \text{si } z < vt \\ C &= C_0/2 & \text{si } z = vt \\ C &= 0 & \text{si } z > vt \end{aligned} \quad (59)$$

Pour donner une certaine généralité aux résultats de cette comparaison, les modèles utilisés sont d'abord adimensionnalisés grâce aux paramètres suivants:

$$\tau = tv/z \quad (60)$$

$$P_e = zv/D \quad \text{Nombre de Péclet} \quad (61)$$

$$C^* = C/C_0 \quad (62)$$

Les deux modèles déterministes deviennent donc, pour le modèle de convection-dispersion:

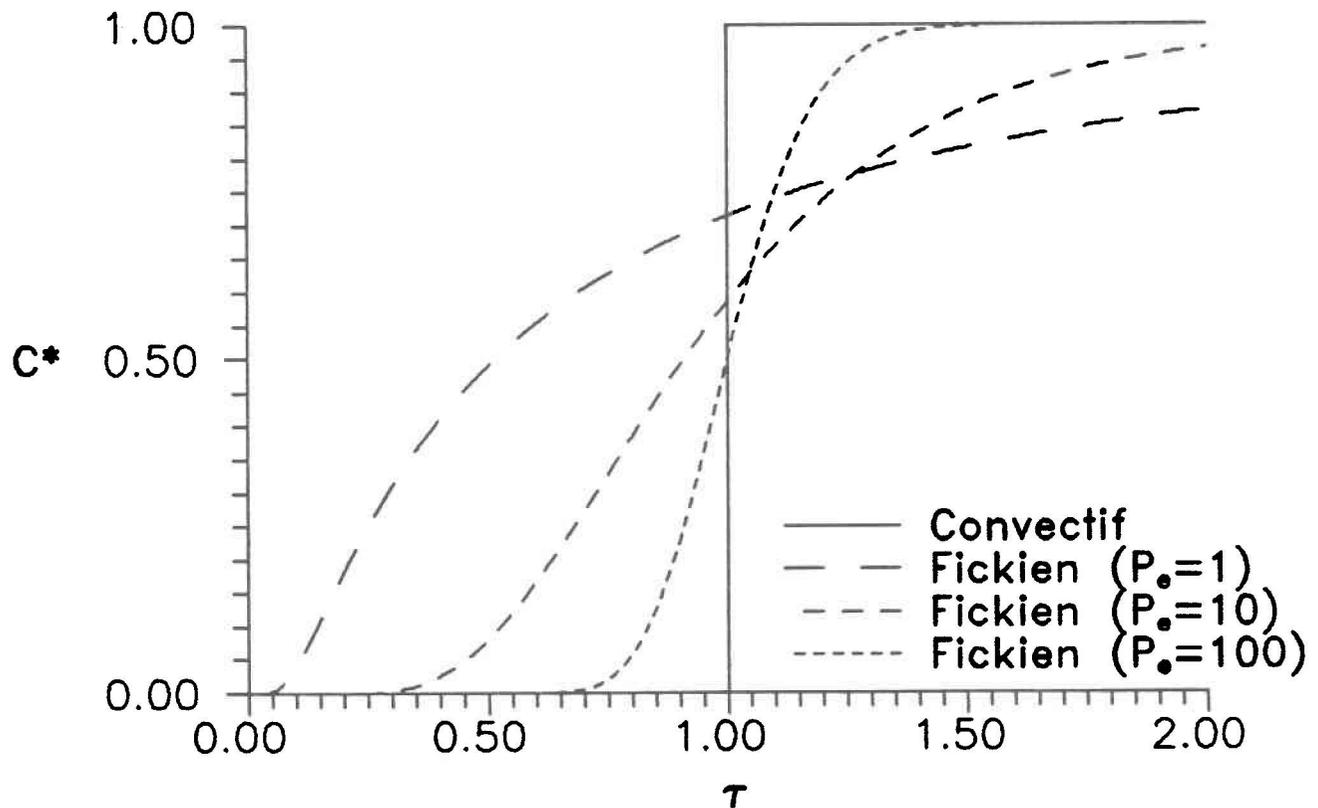
$$C^* = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left[\frac{1-\tau}{2(\tau/P_e)^{1/2}} \right] + \exp(P_e) \operatorname{erfc} \left[\frac{1+\tau}{2(\tau/P_e)^{1/2}} \right] \right] \quad (63)$$

et pour le modèle de convection pure:

$$\begin{aligned} C^* &= 1 && \text{si } \tau > 1 \\ C^* &= 1/2 && \text{si } \tau = 1 \\ C^* &= 0 && \text{si } \tau < 1 \end{aligned} \quad (64)$$

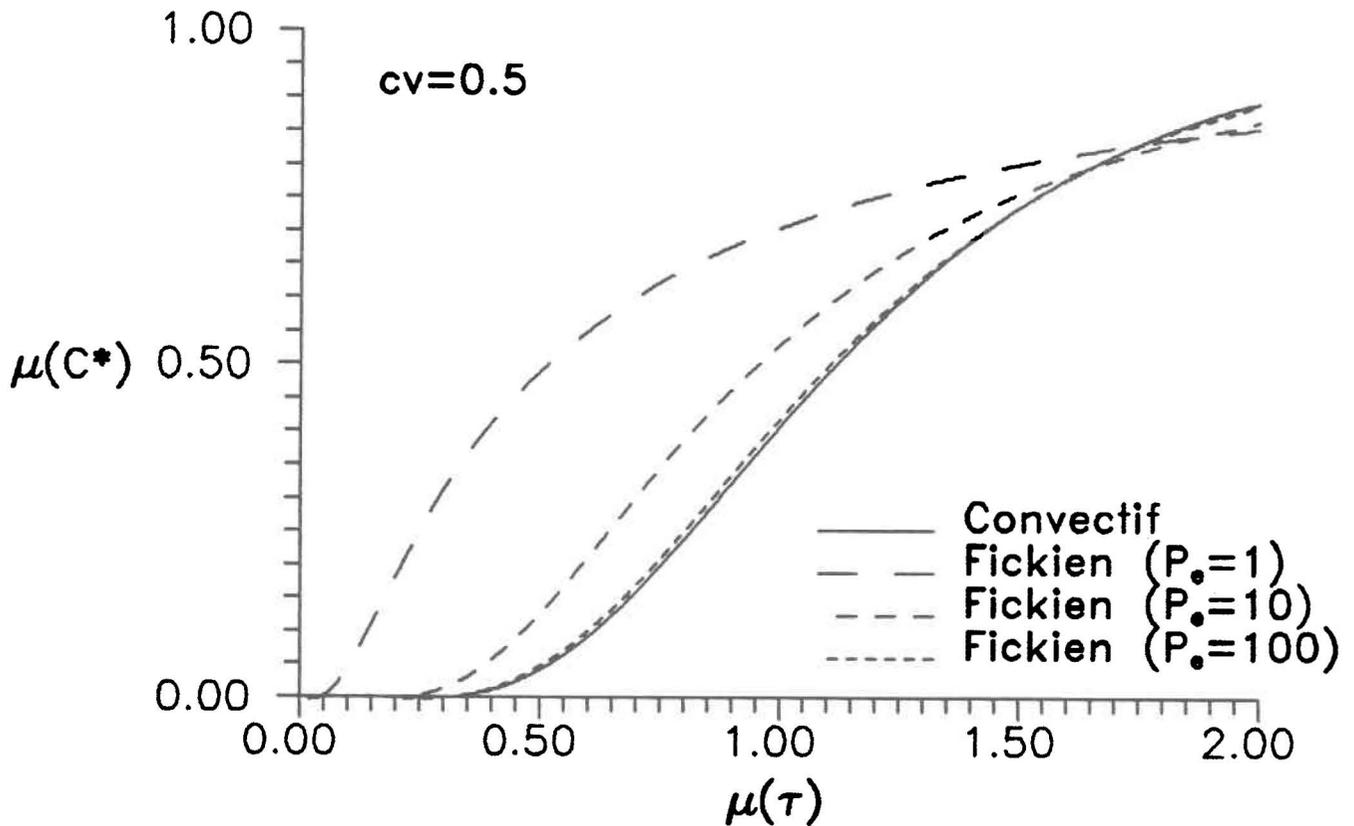
La figure (3) illustre les résultats typiques de ces deux modèles déterministes.

Figure 3 Comparaison du modèle convectif déterministe avec le modèle convectif-dispersif déterministe



D'autre part, les deux modèles stochastiques ont la même partie aléatoire où les vitesses de percolation sont distribuées log-normalement avec une moyenne $\mu(v)$ et une variance $\sigma^2(v)$ connues. Les paramètres adimensionnels deviennent donc aussi des variables aléatoires log-normales. L'intégrale stochastique (équation 43) est calculée numériquement par la méthode des classes équiprobables avec 100 classes (équation 56, $N=100$).

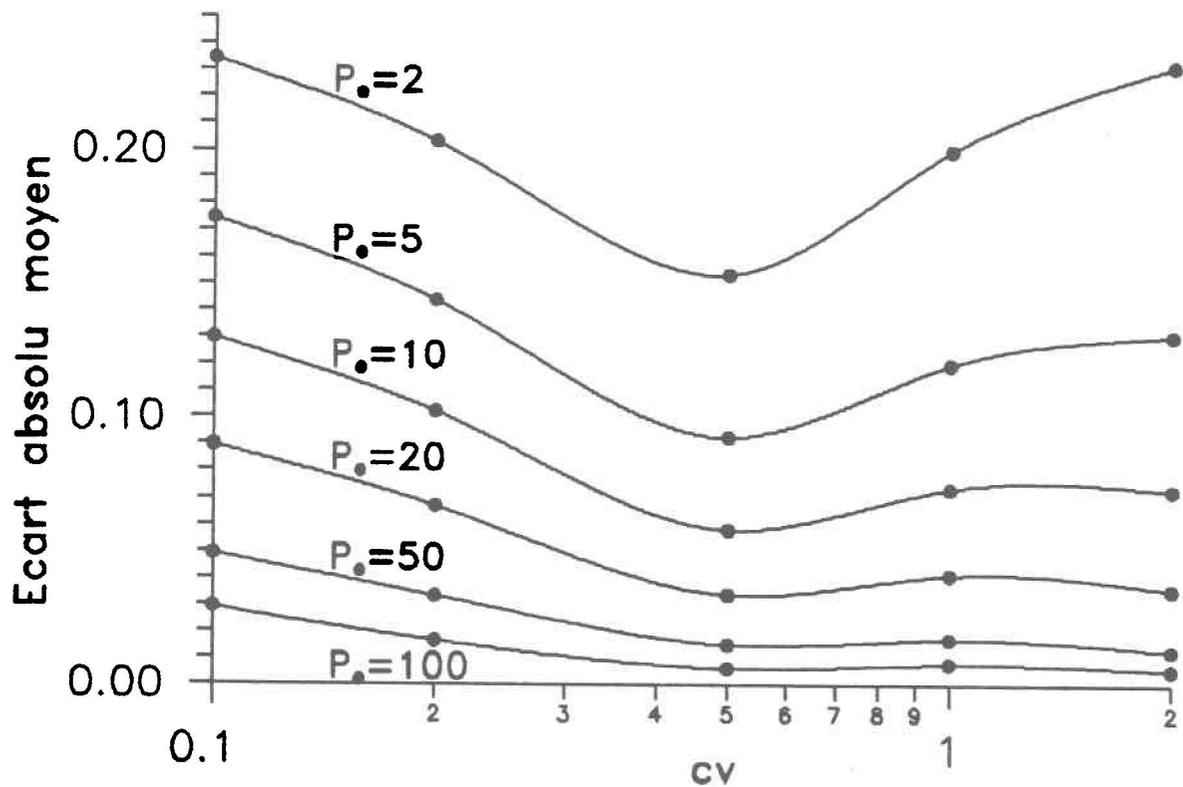
Figure 4 Comparaison du modèle convectif stochastique avec le modèle convectif-dispersif stochastique



La figure (4) présente quelques résultats des deux modèles stochastiques. On y observe que les deux modèles produisent des résultats similaires lorsque la valeur du nombre de Péclet est grande. Ceci confirme que le coefficient de dispersion peut être superflu dans certaines conditions. Ces simulations comparées peuvent être répétées pour diverses valeurs du coefficient de variation des vitesses de percolation et diverses valeurs du nombre de Péclet. Ces comparaisons

permettent de déterminer dans quelles conditions les deux modèles stochastiques donnent des résultats numériquement équivalents.

Figure 5 Ecart absolu moyen entre les modèles pour différentes valeurs du nombre de Péclet et du coefficient de variation

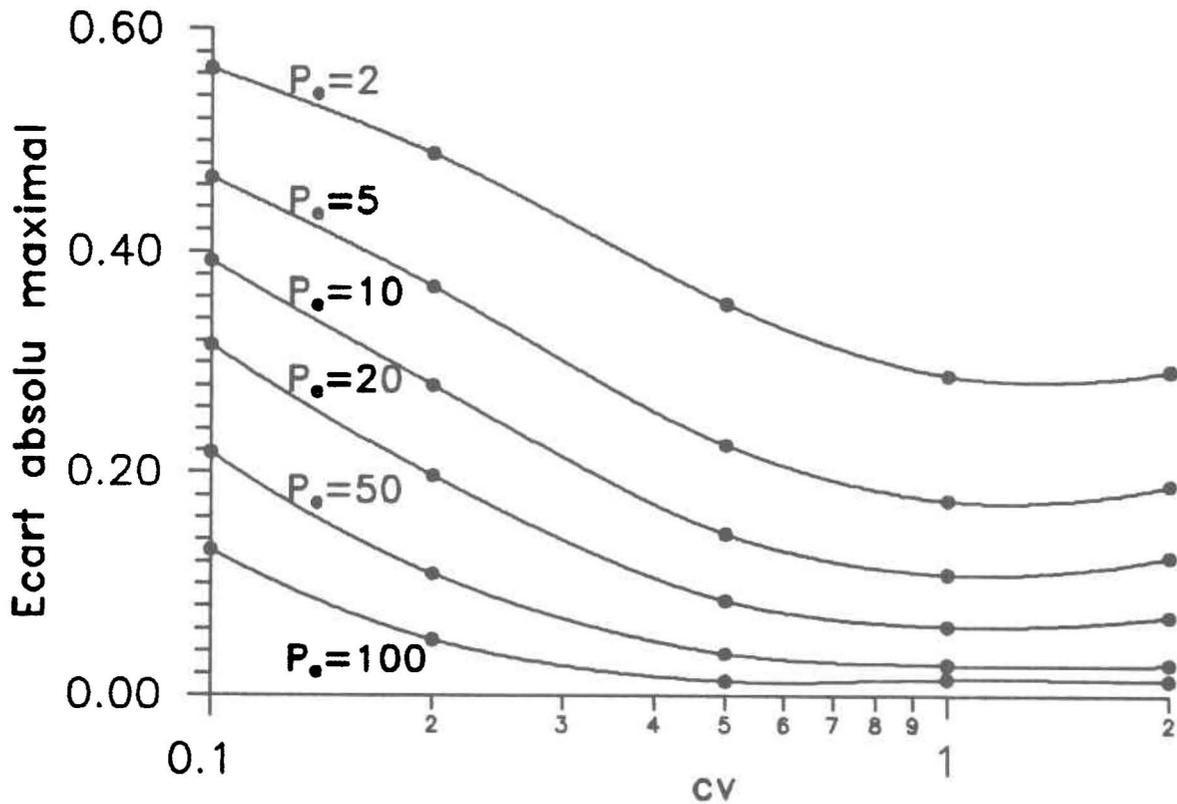


Dans chaque cas, la similitude entre les résultats des modèles a été quantifiée en calculant l'écart absolu moyen, de même que l'écart absolu maximal entre les

courbes de $\mu(C^*)$ dans l'intervalle $0 < \mu(\tau) < 2$. Les résultats de ces calculs sont illustrés aux figures (5) et (6).

Un écart absolu maximal de 0.05 entre les courbes de $\mu(C^*)$ des deux modèles stochastiques a été arbitrairement choisi comme critère de similitude. Ce critère est relativement sévère compte tenu de la précision des données usuellement disponibles pour simuler le comportement des pesticides dans la zone vadose. On peut donc considérer que le modèle de convection stochastique est équivalent au modèle de convection-dispersion stochastique lorsque le coefficient de variation des vitesses de percolation (cv) et que le nombre de Péclet ($\mu(P_e)$) sont tels que le critère de similitude n'est pas excédé.

Figure 6 Ecart absolu maximal entre les modèles pour différentes valeurs du nombre de Péclet et du coefficient de variation



Selon la figure (5), cette condition est rencontrée quand:

$$\mu(P_e) > \frac{20}{cv} \quad (65)$$

Vérifions si cette inégalité est respectée dans les conditions normales de la modélisation stochastique des pesticides dans un champ. Nous avons d'abord vu,

au paragraphe 2.2.2, que les dispersivités dans les colonnes de sol excèdent rarement 0.03 m (Bresler et Dagan, 1983) d'une part. Nous avons également vu, au paragraphe 3.2.1, que les coefficients de perméabilité ont des coefficients de variation excédant 0.5, qui peuvent également être observés pour les vitesses de percolation. Il s'ensuit qu'avec l'aide des équations (12) et (33) et de ces chiffres, l'inéquation (65) devient:

$$z > 1.2 \text{ m} \quad (66)$$

Donc, dans les conditions extrêmes citées, le coefficient de dispersion devient numériquement inutile quand la profondeur de percolation dépasse 1.2 m. Comme la zone vadose a souvent une épaisseur supérieure à 1.2 m en terrain agricole, comme la dispersivité est souvent inférieure à 0.03 m en début de percolation et comme le coefficient de variation des vitesses est souvent supérieur à 0.5, on peut en conclure que, dans la majorité des cas, le coefficient de dispersion est numériquement inutile pour simuler le transport stochastique des pesticides dans la zone vadose.

4.3.2 Modèle de convection-adsorption-dégradation stochastique

Rappelons que les objectifs de cette étude sont de développer un modèle stochastique simple tenant compte de la variabilité spatiale de plusieurs des propriétés du sol. Donc, si on rassemble les éléments de modélisation déterministe présentés au chapitre 2, excluant la dispersion, on peut construire le modèle de

convection-adsorption-dégradation suivant:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho K_D C}{\partial t} = - \frac{\partial q C}{\partial z} - \lambda C (\theta - \rho K_D) \quad (67)$$

qui est plus simple à résoudre que le modèle de convection-dispersion-adsorption classique (équation 23). Ce modèle sera utilisé comme partie déterministe du modèle stochastique proposé ici. Notons que q et θ y sont déterminés par les équations (6), (7) et (8).

La solution de l'équation (67) en régime de percolation transitoire n'est possible que par des méthodes numériques approximatives. La difficulté vient alors de l'impossibilité de trouver une solution analytique à l'équation de Richards (équation 6). La solution analytique du modèle proposé ici n'est donc possible que dans des conditions de percolation stationnaires.

Ces conditions stationnaires sont sans doute peu représentatives de ce qui peut être observé dans les champs, mais les solutions directes en découlant peuvent être très utiles pour une évaluation rapide du destin probable des pesticides. Les modèles déterministes stationnaires comme l'équation (31) et l'équation (58) sont d'ailleurs déjà utilisés à cette fin (Enfield et al., 1982; Van Genuchten et Alves, 1982; De Smedt et Wierenga, 1978; Placinka et Steenhuis, 1984; Nofziger et Hornsby, 1984).

Des solutions analytiques du modèle stochastique proposé, obtenues pour des conditions stationnaires, peuvent également servir d'outil de gestion de première main. Elles présentent l'avantage de tenir compte de la variabilité spatiale et évitent ainsi les désavantages des modèles déterministes décrits à la section 3.1.

4.3.3 Combinaison des paramètres aléatoires

Si on suppose des conditions de percolation stationnaires et si on suppose que les colonnes de sol sont verticalement homogènes, le modèle de convection-adsorption-dégradation peut alors s'écrire:

$$(\theta + \rho K_D) \frac{\partial C}{\partial t} = -q \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda C (\theta + \rho K_D) \quad (68)$$

qui peut se simplifier à:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\nu \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda C \quad (69)$$

où:

$$\nu = \frac{q}{\theta + \rho K_D} \quad (70)$$

est un paramètre qui englobe tous les processus affectant le transport des pesticides, tandis que λ permet de tenir compte de la dégradation. Le destin des pesticides dans la zone vadose est donc contrôlé par ces deux paramètres clefs. Notons que ν correspond à la vitesse de migration des pesticides (m/s).

La méthode de partition de Addiscott et Wagenet (1985) peut être utilisée pour déterminer la distribution de ν , si la distribution des paramètres qui le

compose est connue. Dans le cas d'un champ soumis à un flux hydrique gravitaire homogène et constant q , la combinaison des équations (70), (3) et (7) nous indique que ν est déterminé par:

$$\nu = \frac{q}{n(q/K_{sat})^{1/\beta} + \rho K_D} \quad (71)$$

où tous les paramètres sauf q sont variables.

A titre d'exemple, les données publiées par Nielsen et al. (1973) et par Wood et al. (1987) sont utilisées pour composer un champ fictif où on peut déterminer la distribution de ν . Le tableau (11) présente les distributions des paramètres variables de l'équation (71) dans le champ fictif. La loi gamma a été utilisée pour représenter les distributions asymétriques, tandis que la loi normale a été utilisée pour les distributions symétriques ou ayant un cv faible. Les données concernant β ont été calculées à partir des courbes $K(\theta)$ en fonction de (θ/n) à une profondeur de 30 cm dans un loam argileux décrit par les données de Nielsen et al. (1973). Les données concernant K_{sat} , n et ρ ont la même origine. Quant à la distribution de K_D , elle correspond à ce que Wood et al. (1983) ont observé pour le Métachlore dans l'horizon supérieur remanié (horizon A_p) d'un loam silteux. Nous supposons de plus que le champ fictif est soumis à un flux hydrique uniforme et constant de 30 nm/s, soit l'équivalent d'une infiltration annuelle de 95 cm.

Tableau 11 Distribution des paramètres de l'exemple

Paramètre	Distribution	Statistiques	
K_{sat}	Gamma	$u=2.35 \mu\text{m/s}$	$s=2.50 \mu\text{m/s}$
β	Gamma	$u=64.5$	$s=32.1$
n	Normale	$u=0.402$	$s=0.045$
ρ	Normale	$u=1468 \text{ kg/m}^3$	$s=148 \text{ kg/m}^3$
K_D	Gamma	$u=1.75 \text{ L/kg}$	$s=0.79 \text{ L/kg}$

Nous avons donc cinq paramètres variables dont les distributions sont subdivisées en dix classes équiprobables dont les médianes correspondent à:

$$P_i = \frac{i-0.5}{N} \quad (72)$$

où P_i est la probabilité au non-dépassement de la valeur médiane de la $i^{\text{ème}}$ des N classes. Les valeurs des paramètres correspondant à ces médianes X_i sont déterminées numériquement par la méthode de recherche séquentielle dichotomique, et respectent l'intégrale suivante, également évaluée numériquement par la méthode de Romberg (Bakhvalov, 1976).

$$P(X_i) = \int_{-\infty}^{X_i} f(t) dt \quad (73)$$

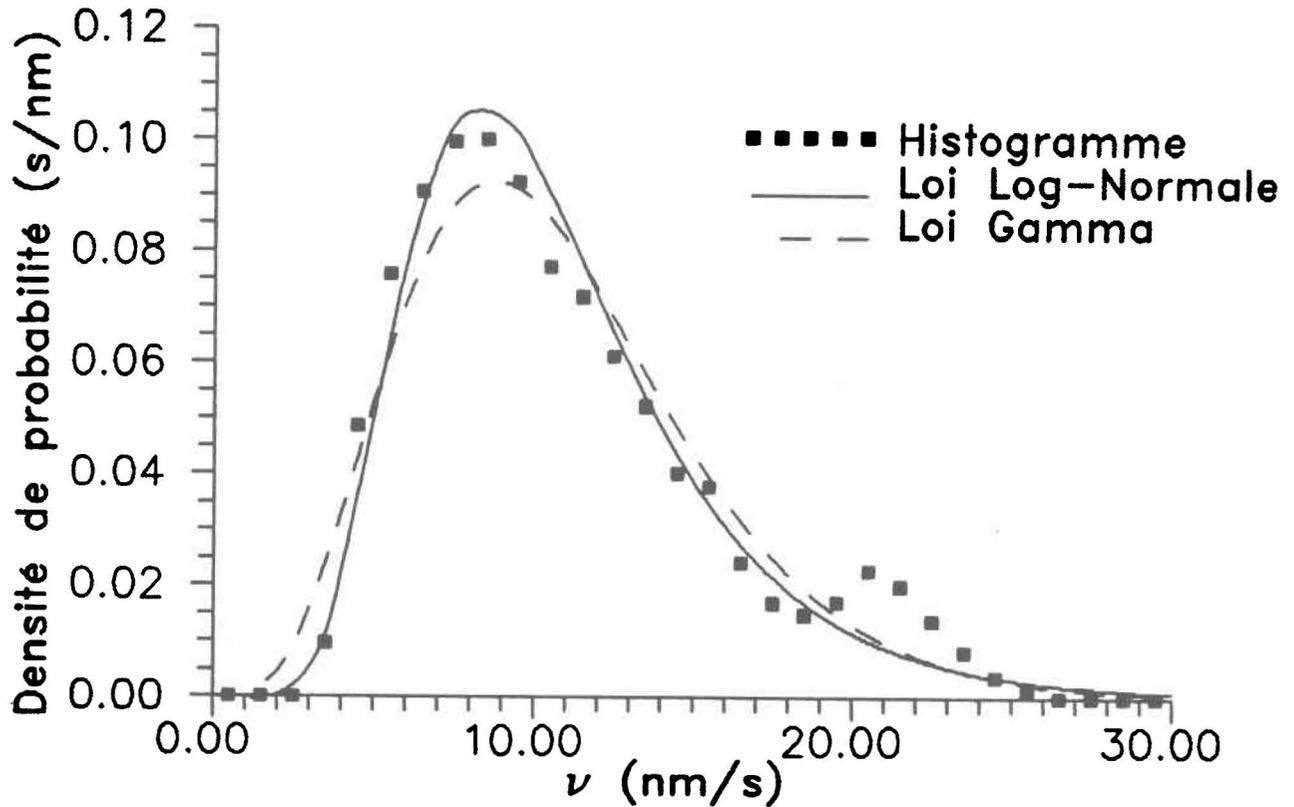
où $P(X)$ est la probabilité au non-dépassement de X_i , et $f(t)$ est la fonction de densité de probabilité de la variable X .

Tableau 12 Valeurs médianes de dix classes équiprobables de chacune des variates composant ν

Classe	P_i	K_{sat} ($\mu\text{m/s}$)	β	n	ρ (kg/m^3)	K_D (L/kg)
1	0.05	0.09	22.2	0.328	1225	0.68
2	0.15	0.32	33.0	0.355	1315	0.97
3	0.25	0.59	41.0	0.372	1368	1.17
4	0.35	0.92	48.3	0.385	1411	1.36
5	0.45	1.32	55.5	0.396	1449	1.54
6	0.55	1.80	63.2	0.408	1487	1.75
7	0.65	2.42	71.9	0.419	1525	1.94
8	0.75	3.26	82.4	0.432	1568	2.20
9	0.85	4.55	96.8	0.449	1621	2.55
10	0.95	7.36	124.7	0.476	1711	3.22

Le tableau (12) présente les valeurs médianes des 10 classes équiprobables de chacune des variations de l'équation (71). Les combinaisons possibles de ces valeurs permettent de calculer un échantillon de 100000 valeurs de ν dont l'histogramme est présenté à la figure (7). L'analyse de cet histogramme nous apprend que ν est distribué asymétriquement avec une moyenne de 10.8 nm/s et un écart-type de 4.7 nm/s.

Figure 7 Histogramme des valeurs de ν



Ces statistiques peuvent également être estimées par la méthode basée sur le développement en série de Taylor, soit par les équations (51) et (52). Les dérivées partielles de premier et deuxième ordres de l'équation (71) ont donc été approximées numériquement par différences finies centrées (tableau 13). Cette méthode permet alors d'estimer, pour la distribution de ν , une moyenne de 11.8 nm/s et un écart-type de 4.1 nm/s, qui sont assez proches de ce qui a été obtenu avec la méthode de partition.

A la figure (7), les courbes de distributions théoriques basées sur les statistiques obtenues avec la méthode de partition sont également représentées. On y voit que la distribution de ν est asymétrique et qu'elle peut être décrite assez fidèlement par une loi log-normale ou par une loi gamma.

Tableau 13 Dérivées partielles des paramètres variables pour les calculs par la méthode du développement en série de Taylor

Variable dépendante	Premier ordre	Deuxième ordre
K_{sat}	8.57×10^{-6}	-3.80 s/m
β	$-1.36 \times 10^{-12} \text{ m/s}$	$4.12 \times 10^{-14} \text{ m/s}$
n	$-3.23 \times 10^{-9} \text{ m/s}$	$2.05 \times 10^{-9} \text{ m/s}$
ρ	$-6.06 \times 10^{-12} \text{ m}^4/(\text{kg s})$	$7.21 \times 10^{-15} \text{ m}^5/(\text{kg}^2 \text{ s})$
K_D	$-5.08 \times 10^{-6} \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$	$5.07 \times 10^{-3} \text{ kg}^2/(\text{m}^5 \text{ s})$

En plus de nous faire découvrir le caractère asymétrique de la variable ν , cet exemple nous révèle également que la variabilité de ν est surtout causée par la variabilité de K_D . Dans les calculs avec la méthode du développement en série de Taylor, la contribution de la variance de K_D était en effet d'un ordre de grandeur plus importante que la contribution des variances des autres paramètres. Des essais subséquents avec la méthode de partition ont d'ailleurs démontré que seule la réduction de la variance de K_D produit une réduction marquée de la variance de ν . On peut en conclure que l'hypothèse souvent admise, qui veut que la variabilité de K_{sat} soit la principale cause de la variabilité du transport dans la zone vadose (Sposito et al., 1986), n'est pas toujours valide.

Les mesures de la variabilité spatiale de K_D sont encore rares et, par conséquent, il faudra dorénavant les inclure systématiquement dans les travaux de caractérisation de la variabilité spatiale.

Finalement, il faut aussi rappeler que l'exemple donné ici ne tient compte que des phénomènes de variabilité intrinsèque dans le sol. La variabilité extrinsèque, représentée par un flux hydrique q variable, pourrait changer l'allure de la distribution de ν . Il est cependant difficile d'évaluer la variabilité des facteurs extrinsèques.

5. SOLUTIONS ANALYTIQUES

5.1 Concentration moyenne

Dans les solutions analytiques simples proposées ici, nous supposons que la percolation est constante et uniforme dans des colonnes de sol verticalement homogènes. La partie déterministe du modèle peut donc être modélisée à partir de l'équation (69).

Les solutions analytiques de cette équation différentielle déterministe sont faciles à obtenir pour diverses conditions limites. Prenons le cas de l'application instantanée d'une quantité M (kg/m^2) de pesticide. Cette condition décrit assez bien le mode d'emploi habituel des pesticides et elle conduit à la solution analytique suivante:

$$C(z, t) = \frac{M}{\nu} \delta(t - z/\nu) \exp(-\lambda \cdot z/\nu) \quad (74)$$

où $\delta(t)$ est la fonction delta de Dirac. Les détails de l'intégration de cette équation sont donnés à l'annexe B.

Cette équation déterministe, lorsque intégrée selon (43) avec des distributions connues de ν et λ , procure un modèle stochastique permettant d'évaluer la concentration moyenne. Comme ν et λ peuvent avoir des distributions asymétriques, et qu'ils doivent toujours être positifs, il est commode de les représenter par des distributions gamma. La distribution log-normale, bien que plus simple à calculer, conduit à des intégrales non-résolvables et n'est donc pas

utilisée ici.

Donc, avec des distributions gamma de ν et λ , on aboutit au modèle stochastique suivant:

$$\mu(C) = \left\{ \frac{M}{z \Gamma(\mu^2(\nu)/\sigma^2(\nu))} \left[\frac{\mu(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \frac{z}{t} \right] \left[\frac{\mu^2(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \right] \cdot \exp \left[\frac{-\mu(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \frac{z}{t} \right] \left[1 + \frac{\sigma^2(\lambda)t}{\mu(\lambda)} \right] \left[-\frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \right] \right\} \quad (75)$$

Les détails de son intégration sont donnés à l'annexe B. Ce modèle, d'utilisation assez facile, est cependant en défaut lorsque le coefficient de variation de ν est faible car l'argument de la fonction gamma devient alors trop grand. Heureusement, pour les faibles cv , la distribution gamma peut être remplacée par la distribution normale. Le modèle devient alors, pour des distributions normales de ν et λ :

$$\mu(C) = \frac{M}{t\sigma(\nu)(2\pi)^{1/2}} \exp \left[-\frac{(z/t - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)} - \mu(\lambda)t + \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} t^2 \right] \quad (76)$$

Les détails de l'intégration de ce modèle sont également donnés à l'annexe B.

5.2 Exemple d'utilisation

Malgré leurs limites, ces modèles peuvent être utilisés à profit lors de l'évaluation sommaire du risque associé avec l'utilisation d'un pesticide donné. Prenons par exemple le cas bien documenté (Villeneuve, Banton et Lafrance, 1987) de l'utilisation de l'aldicarbe dans la région de Portneuf au Québec.

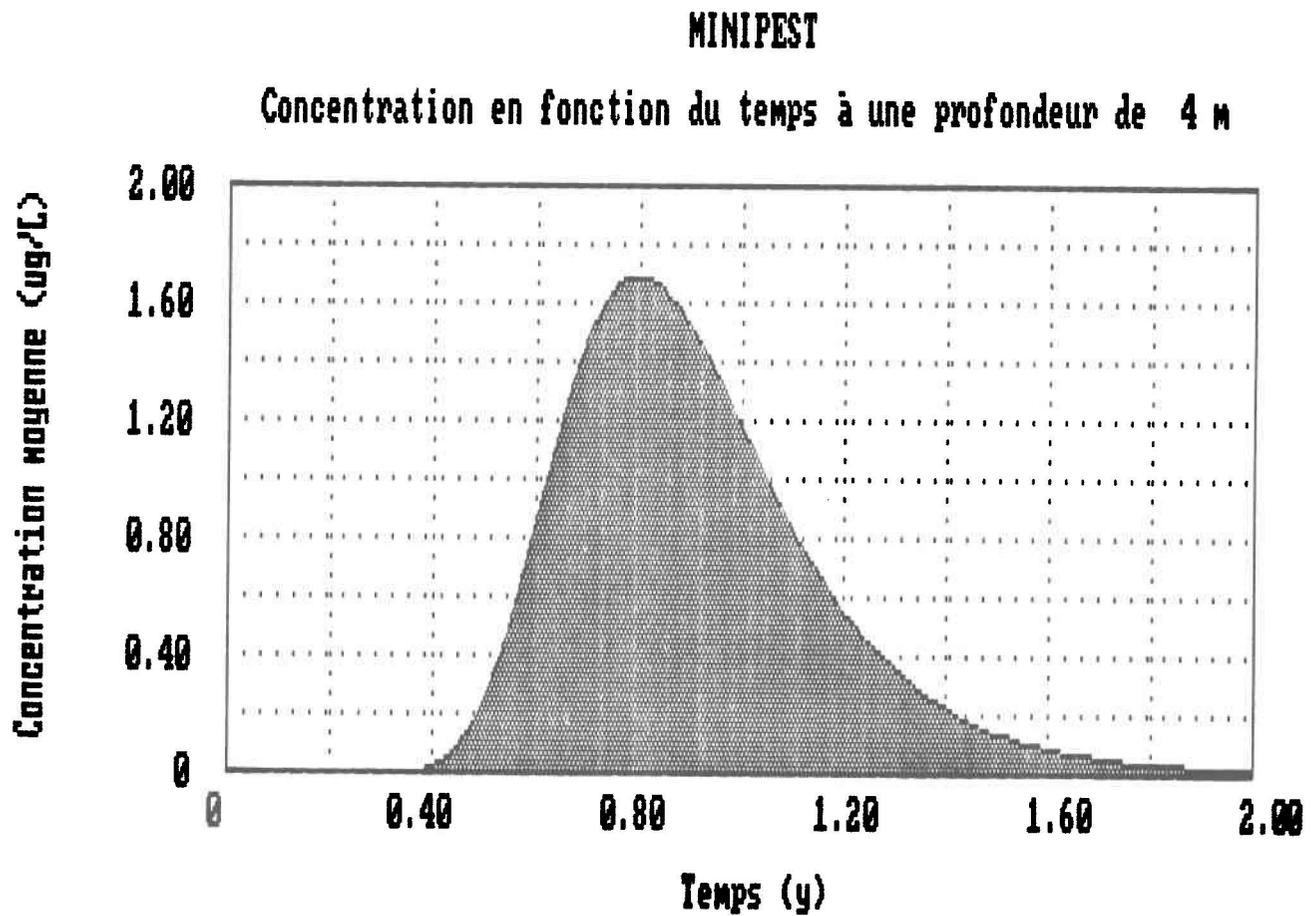
A l'aide du logiciel MINIPEST, développé pour faciliter l'utilisation rapide des formules (75) et (76), nous pouvons calculer la courbe d'arrivée du pesticide à la surface de la zone saturée. Les figures 8 et 9 sont des exemples d'entrées-sorties générées par MINIPEST dans ce cas particulier. On y voit que la concentration moyenne peut atteindre près de $2 \mu\text{g/L}$ après un an. Malheureusement, dans sa version actuelle, le modèle ne permet pas de calculer analytiquement la variance des concentrations car celle-ci n'a pas de solution analytique. Toutefois, étant donné que la moyenne calculée est du même ordre de grandeur que la norme de $10 \mu\text{g/L}$, on peut craindre que la variabilité des concentrations cause plusieurs dépassements de ce critère de qualité.

L'annexe C présente la liste complète du code du programme MINIPEST, de même qu'un petit manuel de l'utilisateur.

Figure 8 Exemple de l'écran interactif du logiciel MINIPEST

MINIPEST							
Version I - Février 1988 - Par Denis Isabel - INRS-Eau							
Fichier: EXEMPLE		Pesticide: Aldicarbe		Site: Region de Portneuf			
Titre: Exemple d'application des equations analytiques							
Paramètres de transport				Paramètres de réaction			
Nom	Moyenne	Ecart-type	Unités	Nom	Moyenne	Ecart-type	Unités
q	60.0000		cm/y	m	2.2400		kg/ha
n	0.2000	0.1000	m ³ /m ³	Koc	3.1000		mL/g
rho	1.5000	0.2500	g/cm ³	Foc	1.5100	0.2500	%
Ksat	10.0000	10.0000	um/s	lambda	0.0200	0.0100	1/d
beta	7.0000	1.0000					
CALCULS							
Distributions: Gamma		Profondeur: 4.0000 m		Temps: 1.0000 y			
Concentration moyenne:		1.1822 ug/L					
Fichiers Noms Paramètres Graphiques Sortie							
Modification des paramètres et execution de la simulation							

Figure 9 Exemple de graphique produit par le logiciel MINIPEST



5.3 Evaluation de la vulnérabilité

Le calcul des concentrations moyennes permet de visualiser le mouvement des pesticides dans le sol. Il permet également d'évaluer le risque de contamination des eaux souterraines. Cependant, une telle évaluation essentiellement fondée sur

les concentrations peut être trompeuse. Principalement parce que la quantité, ou le flux, de pesticide atteignant la nappe dépend également de leur vitesse de migration.

Ce flux de pesticide u_p (exprimé en $\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$) est le produit de la vitesse de migration des pesticides par leur concentration. Soit:

$$u_p = \nu C(z, t) \quad (77)$$

Il est alors intéressant de déterminer quel est, à long terme, la quantité de pesticide M' qui est lessivée plus en profondeur à un niveau donné. Ce lessivage à long terme peut être évalué par l'intégrale suivante:

$$M' = \int_0^{\infty} u_p dt \quad (78)$$

qui, lorsqu'appliquée aux équations (77) et (74), donne:

$$\gamma = \frac{M'}{M} = \exp\left(-\frac{\lambda}{\nu} z\right) \quad (79)$$

où γ est la fraction lessivée à long terme.

Ici encore, la variabilité spatiale entre en jeu et les paramètres statistiques de γ peuvent être évalués par la méthode utilisant le développement en série de Taylor (équations 51 et 52) pour obtenir:

$$\mu(\gamma) \approx \exp\left[-\frac{\mu(\lambda)}{\mu(\nu)} z\right] \left[1 + \frac{z^2 \sigma^2(\lambda)}{2 \mu^2(\nu)} + \frac{\mu^2(\lambda) \sigma^2(\nu) z^2}{2 \mu^4(\nu)} - \frac{\mu(\lambda) \sigma^2(\nu) z}{\mu^3(\nu)}\right] \quad (80)$$

et

$$\sigma(\gamma) = \exp \left[- \frac{\mu(\lambda)}{\mu(\nu)} z \right] \frac{z}{\mu(\nu)} \left[\sigma^2(\lambda) + \frac{\mu^2(\lambda)}{\mu^2(\nu)} \sigma^2(\nu) \right]^{1/2} \quad (81)$$

La distribution de γ est asymétrique puisque les valeurs de γ ne peuvent être négatives et que, comme nous le verrons dans l'exemple, le coefficient de variation peut être assez élevé. On peut donc utiliser la loi log-normale et préparer une courbe de la distribution cumulative des valeurs de γ . Cette courbe représente la probabilité au non-dépassement des différentes valeurs de γ et permet une meilleure évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines.

En effet, en se fixant un niveau de risque acceptable, on peut déterminer la fraction maximale lessivée à long terme (γ). Celle-ci peut être utilisée comme indice de la vulnérabilité de la nappe. Cet indice a l'avantage d'intégrer la variabilité des propriétés du sol. Il intègre également les effets synergiques entre les différents paramètres puisqu'il est basé sur un modèle physique. Comme l'ont démontré Banton et Villeneuve (1987), ce genre d'indice est plus sensible et significatif qu'un indice basé sur des tableaux de pondération comme DRASTIC (Aller et al., 1985).

Pour illustrer l'emploi de la courbe de distribution cumulative de γ , nous allons poursuivre l'exemple de la région de Portneuf. Les paramètres statistiques de ν et λ sont:

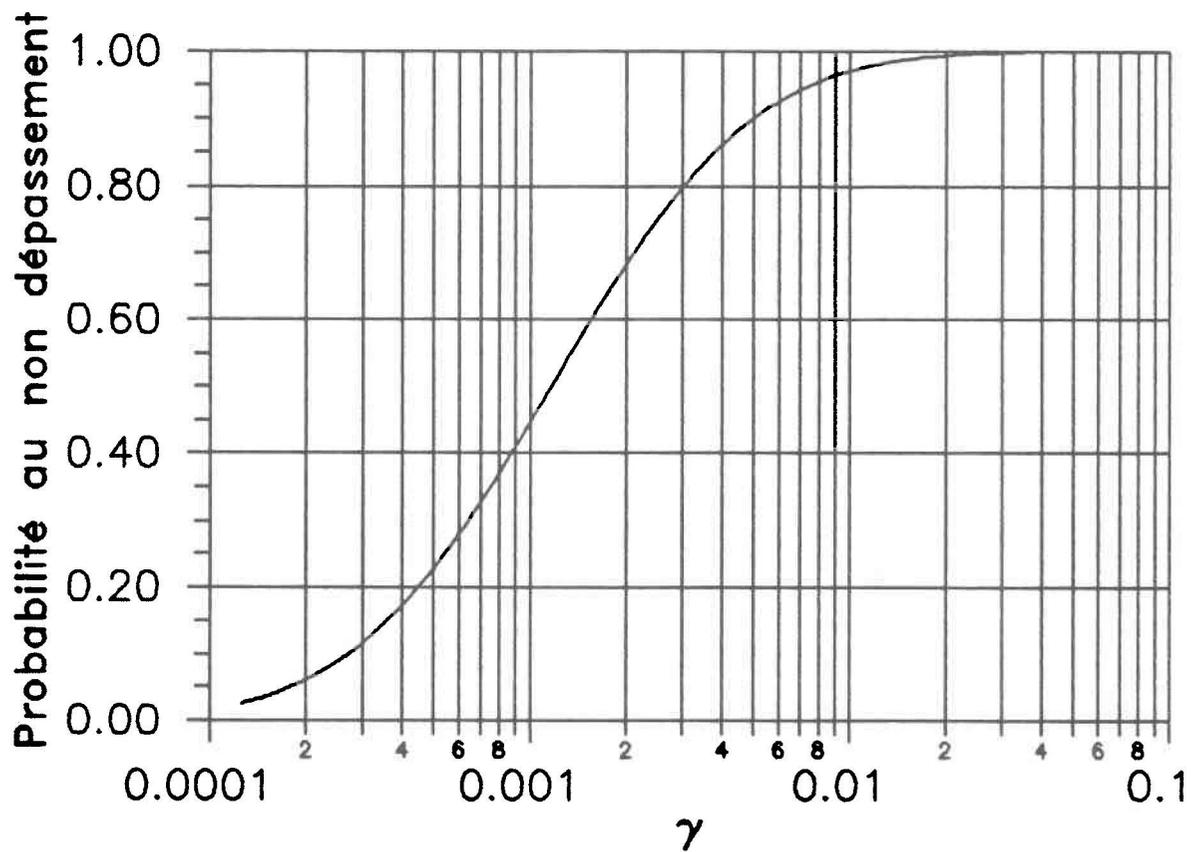
$$\begin{aligned} \mu(\nu) &= 1.32 \times 10^{-7} \text{ m/s} \\ \sigma(\nu) &= 3.86 \times 10^{-8} \text{ m/s} \\ \mu(\lambda) &= 2.32 \times 10^{-7} \text{ 1/s} \\ \sigma(\lambda) &= 1.16 \times 10^{-7} \text{ 1/s} \end{aligned}$$

Avec les équations (80) et (81), on peut estimer les paramètres statistiques de γ à:

$$\begin{aligned}\mu(\gamma) &= 2.22 \times 10^{-3} \\ \sigma(\gamma) &= 3.60 \times 10^{-3}\end{aligned}$$

et produire le graphique de la figure (10). On y voit, par exemple, que la fraction lessivée est inférieure à 1.0 % sur 97.0 % de la superficie et est inférieure à 0.1 % sur 45 % de la superficie. Ce genre de résultat statistique ne plaît pas toujours aux utilisateurs de modèles. Cependant, il offre une appréciation de l'incertitude qui limite les interprétations abusives et renseigne sur la variabilité du processus. C'est pourquoi le calcul des paramètres statistiques de γ et le traçage de sa courbe de probabilité cumulative sont inclus dans le logiciel MINIPEST.

Figure 10 **Courbe de la distribution cumulative de la fraction lessivée à long terme du pesticide aldicarbe dans la région de Portneuf**



6. MODELE NUMERIQUE (modèle PESTE)

Les solutions analytiques du chapitre précédent ont des limitations évidentes. Ces limites sont la conséquence des hypothèses de stationnarité et d'homogénéité nécessaires pour l'obtention de systèmes intégrables. Ces solutions sont quand même très utiles car, lors d'une analyse préliminaire, les données nécessaires à une modélisation transitoire hétérogène, discrétisée en détail, sont très rarement disponibles.

Pour traiter ces problèmes particuliers, il existe des modèles numériques détaillés dont un bon exemple en est le modèle déterministe développé par Lindstrom et Piver (1985). Ces modèles, basés sur une discrétisation spatio-temporelle fine du domaine, permettent la simulation de situations complexes. Ils sont surtout utilisés pour la recherche, principalement parce qu'ils nécessitent des données extensives.

Il existe également des modèles numériques permettant des simulations non-stationnaires dans un milieu non-homogène, comme PRZM (Carsel et al., 1984), qui sont suffisamment simples pour être utilisés comme outil de gestion. De tels modèles doivent se contenter d'une discrétisation spatio-temporelle assez grossière pour limiter la quantité de données nécessaires à leur fonctionnement et pour limiter la durée des calculs.

Notre but est de développer un modèle numérique de ce type en y incluant une représentation de la variabilité spatiale des propriétés du sol. Ce nouveau modèle (PESTE) fonctionne avec un pas de temps journalier et le sol y est subdivisé en deux zones: la zone racinaire et la zone profonde. Cette discrétisation spatio-temporelle grossière est suffisante pour obtenir un modèle de gestion intéressant.

La partie déterministe du modèle est composée de deux systèmes de discrétisation par différences finies permettant de représenter, respectivement, la partie hydrique et la partie pesticide. Ces deux parties sont basées sur les équations présentées au chapitre 2. Quant à la partie stochastique, elle est basée sur la méthode de partition décrite à la section 4.1 (équations 56 et 57).

6.1 Partie déterministe

Comme il a déjà été mentionné au chapitre 2, le mouvement de l'eau et le transport des pesticides dans les sols peuvent être modélisés séparément en séquence. Cette procédure est valable lorsque les concentrations de pesticide sont faibles et qu'elles ne modifient pas les propriétés de l'eau de façon significative. Nous utilisons donc cette hypothèse pour faciliter le développement du modèle.

6.1.1 Partie hydrique

La modélisation de la partie hydrique suit le cheminement de l'eau dans le sol. On commence donc avec la séparation des apports entre l'eau infiltrée et l'eau ruissellée. En supposant que le taux d'infiltration maximum est constant et égal au coefficient de perméabilité à saturation, on fait une économie de paramètres car ce coefficient est déjà utilisé ailleurs dans le modèle.

L'évapotranspiration potentielle est estimée à partir d'un coefficient de bac (équation 2) et est distribuée de façon triangulaire entre les éléments composant la

zone racinaire. Ensuite, l'évapotranspiration réelle est calculée dans chaque élément:

$$ET_R = ET_p \frac{\theta}{\theta_r} \quad (82)$$

où ET_R est l'évapotranspiration réelle (m/s). De plus, on s'assure que l'évapotranspiration n'excède pas le contenu en eau du sol.

Les pertes causées par le réseau de drainage, lorsque présent, sont modélisées par l'interception d'une proportion fixe du flux hydrique traversant l'élément au niveau duquel les drains sont enfouis. Cette interception I_{DR} (en m/s) est donc égale à:

$$I_{DR} = C_{DR} \cdot q \quad (83)$$

où C_{DR} est le coefficient de drainage.

La percolation est modélisée par les équations de Buckingham (équation 3) et de Richards (équation 5). Etant donné que le pas de temps est journalier, on peut supposer que la percolation est uniquement gravitaire. On simplifie ainsi le modèle de percolation à:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = - \frac{\partial K(\theta)}{\partial z} \quad (84)$$

où $K(\theta)$ est représenté par l'équation de Campbell (équation 7).

Le paramètre β de l'équation de Campbell peut être relié à la capacité de rétention θ_r par la relation semi-empirique suivante:

$$\beta = \frac{-6.9}{\ln(\theta_r/n)} \quad (85)$$

basée sur l'hypothèse que la capacité de rétention correspond à un sol dont le coefficient de perméabilité est réduit à un millième (0.001) de ce qu'il était à saturation.

Si, à l'équation de percolation, on ajoute un terme P pour les pertes par évapotranspiration et drainage (1/s), on obtient:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} + \frac{\partial q}{\partial z} = -P \quad (86)$$

qui, une fois discrétisée en éléments superposés d'épaisseur Δz , devient:

$$\frac{\theta(i,j) - \theta(i,j-1)}{\Delta t} + \frac{q(i,j) - q(i-1,j)}{\Delta z} = -P(i,j) \quad (87)$$

où i dénote l'élément vertical et j dénote le pas de temps. Si, de plus, θ est remplacé par l'équation suivante, tirée de l'équation de Campbell (équation 7):

$$\theta = q^{1/\beta} n K_{sat}^{-1/\beta} \quad (88)$$

on a alors:

$$\left[q(i,j)^{1/\beta} - q(i,j-1)^{1/\beta} \right] \frac{n K_{sat}^{-1/\beta}}{\Delta t} + \frac{q(i,j) - q(i-1,j)}{\Delta z} = -P(i,j) \quad (89)$$

Le terme des pertes P peut être relié à l'évapotranspiration et au drainage par:

$$P = \frac{ET_R + I_{DR}}{\Delta z} \quad (90)$$

ou encore:

$$P(i,j) = \left[ET_p(i,j) \frac{\theta(i,j)}{\theta_r} + C_{DR} q(i,j) \right] \frac{1}{\Delta z} \quad (91)$$

qui devient lui aussi:

$$P(i,j) = \frac{1}{\Delta z} \left[\frac{ET_p}{\theta_r} n K_{sat}^{-1/\beta} q(i,j)^{1/\beta} + C_{DR} q(i,j) \right] \quad (92)$$

Une fois $P(i,j)$ connu, on peut alors calculer $q(i,j)$ par l'équation implicite:

$$\left[q(i,j)^{1/\beta} - q(i,j-1)^{1/\beta} \right] \frac{\Delta z}{\Delta t} n K_{sat}^{-1/\beta} + q(i,j) - q(i-1,j) + \Delta z P(i,j) = 0 \quad (93)$$

qui est l'équation maîtresse du calcul du flux hydrique. A chaque pas de temps, les pertes (équation 92) et le flux hydrique (équation 93) sont calculés successivement pour chaque élément, de la surface du sol jusqu'à la surface de la nappe. Etant donné qu'il s'agit d'une équation implicite, sa solution est obtenue par la méthode itérative de Newton (Bakhvalov, 1976).

6.1.2 Partie pesticide

Le modèle suppose que le pesticide est appliqué à la surface du sol de façon homogène. Les précipitations le dissolvent progressivement pour l'entraîner dans les eaux de ruissellement et d'infiltration. Pendant son séjour à la surface, il est soumis à une dégradation du premier ordre dont la constante inclut les processus de biodégradation et de photolyse. La quantité de pesticide à la surface M (kg/m^2) est donc modélisée par:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = -K_p M - P_s \quad (94)$$

où K_p est la constante de dégradation à la surface ($1/\text{s}$) et où P_s représente les gains consécutifs à un épandage et les pertes par dissolution ($\text{kg}/\text{m}^2\text{s}$).

L'absorption par les plantes est supposée proportionnelle à l'évapotranspiration selon:

$$u_A = K_A E_{TR} C \quad (95)$$

où u_A est le taux d'assimilation ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$) et K_A est la constante d'assimilation.

Les pertes par drainage sont, quant à elles, estimées par:

$$u_{DR} = C_{DR} q C \quad (96)$$

où u_{DR} est le taux de perte par drainage ($\text{kg}/\text{m}^3\text{s}$).

Le transport convectif, incluant l'adsorption-désorption, la dégradation et les pertes, peut être modélisé par l'équation (67), ce qui donne:

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \frac{\partial \rho K_D C}{\partial t} = - \frac{\partial q C}{\partial z} - \lambda C(\theta - \rho K_D) - J \quad (97)$$

où J représente les pertes par assimilation et drainage ($\text{kg/m}^2\text{s}$). Cette équation, une fois discrétisée en éléments superposés d'épaisseur Δz devient:

$$\frac{(\theta(i,j)C(i,j) - \theta(i,j-1)C(i,j-1))}{\Delta t} + \frac{\rho K_D}{\Delta t} (C(i,j) - C(i,j-1)) = - \frac{(q(i,j)C(i,j) - q(i-1,j)C(i-1,j))}{\Delta z} - \lambda C(i,j)[\theta(i,j) - \rho K_D] - J(i,j) \quad (98)$$

avec

$$J(i,j) = (K_A E T_R(i,j) + C_{DR} q(i,j)) \frac{C(i,j)}{\Delta z} \quad (99)$$

Par transformation algébrique, on obtient:

$$C(i,j) = \frac{\theta(i,j-1)C(i,j-1) \frac{\Delta z}{\Delta t} + \rho K_D C(i,j-1) \frac{\Delta z}{\Delta t} + q(i-1,j)C(i-1,j)}{\theta(i,j) \frac{\Delta z}{\Delta t} + \rho K_D \frac{\Delta z}{\Delta t} + q(i,j) + \lambda \left[\theta(i,j) - \rho(i) K_D(i) \right] \Delta z + J(i,j)} \quad (100)$$

Cette équation permet de calculer successivement, à chaque pas de temps, les concentrations de chaque élément, de la surface du sol jusqu'à la surface de la nappe.

6.2 Partie stochastique

La partie stochastique du modèle est basée sur la méthode de partition (équations 56 et 57) de la section 4.1, qui est un cas particulier de la méthode de Monte-Carlo. Le domaine de variation de chaque paramètre variable est subdivisé en un nombre fini de classes d'où sont tirées des réalisations approximativement équiprobables. Dans notre cas, ces réalisations correspondent à la médiane de chaque classe. Cette méthode converge plus rapidement que la méthode de Monte-Carlo classique (Bakhvalov, 1976).

Quand on a plusieurs variables aléatoires, chacune étant divisée en classes équiprobables, on exécute habituellement autant de simulations qu'il y a de combinaisons possibles entre les différentes réalisations de chaque variable. Cette méthode a déjà été utilisée à la sous-section 4.4.3 pour le calcul de la distribution de ν et nécessite l'indépendance des paramètres.

Dans le cas du modèle numérique stochastique qui est développé ici, le nombre de paramètres variables est de six (6). A moins de restreindre énormément le nombre des classes équiprobables, on obtient un nombre de combinaisons excessifs. On doit garder en perspective que le but est de produire un modèle de gestion et que, par conséquent, le temps de calcul ne doit pas être exagérément long.

Pour limiter le nombre des simulations, nous ne procédons pas par combinaison. Nous utilisons un nombre identique de réalisations équiprobables de chacune des variables aléatoires que nous utilisons séquentiellement. L'ordre des

différentes réalisations de chaque paramètre aléatoire est au préalable modifié aléatoirement. On obtient alors autant de jeux indépendants de réalisations des paramètres qu'il y a de classes équiprobables. Le mélange des réalisations assure ainsi l'indépendance des paramètres. Le nombre de réalisations est actuellement fixé à 30 et il permet d'obtenir de bonnes statistiques en cours de simulation.

Pour la génération des réalisations, deux lois de distribution sont utilisées. Les paramètres ayant un cv inférieur à 0.3 sont distribués selon la loi normale, tandis que les autres sont distribués selon la log-normale. Les résultats sont, quant à eux, interprétés au moyen de la loi log-normale.

6.3 Logiciel interactif

A partir des principes énoncés dans ce chapitre, un logiciel interactif permettant la simulation numérique stochastique du destin des pesticides dans la zone vadose a été programmé. Ce modèle, baptisé PESTE, est facile d'utilisation et est relativement rapide. Il permet plusieurs types de visualisation des résultats. Les figures 11 à 16 montrent les différents écrans de saisie des données et de visualisation des résultats obtenus lors d'un exemple d'application.

Le manuel d'utilisation, de même que la liste complète du code du programme sont présentés à l'annexe E. Cette annexe inclut également la description du fichier de données météorologiques nécessaire au fonctionnement du programme PESTE.

Les principaux genres d'utilisation proposés pour ce modèle sont:

- La simulation de l'impact de conditions météorologiques particulières.
- La vérification de l'effet d'un changement de la date d'application.
- La simulation de l'effet d'une addition de matières organiques dans la zone racinaire.
- La simulation de l'impact d'applications répétées.
- La simulation de l'impact des pratiques d'irrigation et de drainage.

Figure 11 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'un site

Version 3.1 - Mars 1988 **PESTE** - Par Denis Isabel - INRS-Eau

Fichier de site (.SIT): TEST
 Nom du site: St-Augustin

Paramètres	Zone racinaire		Zone profonde		unités
	moyenne	écart-type	moyenne	écart-type	
n:	30.0000	5.0000	35.0000	6.0000	%
rho:	1.2000	0.2000	1.2000	0.3000	t/m ³
Ksat:	2.0000	1.0000	2.0000	1.0000	um/s
Theta:	15.0000	5.0000	16.0000	10.0000	%
Foc:	1.5100	0.5000	1.5000	1.0000	%
Coefficient de variation de la dégradation:			0.5000		
Profondeur de la zone racinaire:		30.0000	cm		
Profondeur de la nappe souterraine:		1.0000	m		
Coefficient d'ETP:		0.5000			
Coefficient de drainage:		0.1000			
Profondeur des drains:		0.6000		m	

Lire Nommer Sauver Répertoire Modifier Retour
 Lire un fichier .SIT

Figure 12 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'un pesticide

```

                                PESTE
Version 3.1 - Mars 1988 - Par Denis Isabel - INRS-Eau
-----
Fichier de pesticide (.PES): TEST
Nom du pesticide: Atrazine
-----
                        Paramètres du pesticide
                                Solubilité: 500.0000 mg/L
Coefficient d'adsorption sur le carbone organique: 3.1000 mL/g
                                Coefficient de dégradation à 20°C: 0.0001 1/d
                                Coefficient de dégradation à la surface: 0.0300 1/d
                                Energie d'activation: 4.5000 J/mole
Coefficient d'assimilation par la végétation: 0.2000
-----

Nom Solubilité Koc Lambda Kp Ea Retour
Retour au menu du fichier pesticide
-----
```

Figure 13 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'une simulation

```

                                PESTE
Version 3.1 - Mars 1988 - Par Denis Isabel - INRS-Eau
-----
Fichier de simulation (.SIM): TEST
Nom de la simulation: Simulation d'essai
-----
      Nom du fichier site: test
      Nom du fichier pesticide: test
      Nom du fichier météo: test
      Date du début de la simulation: 74/ 5/15
      Date de la fin de la simulation: 74/ 6/26
      Nombre d'applications: 2

      Application No: 1      Date: 74/ 5/17      Quantité: 3.5000 kg/ha
      Application No: 2      Date: 74/ 6/ 2      Quantité: 2.0000 kg/ha
-----
Nom Site Pesticide Météo Début Fin Ajoute Enlève Retour
Nom de la simulation
```

Figure 14 Exemple de l'écran affiché par PESTE au cours d'une simulation

```
Version 3.1 - Mars 1988 PESTE - Par Denis Isabel - INRS-Eau
-----
Simulation: Simulation d'essai
Site: St-Augustin
Pesticide: Atrazine
Station météo: Station meteorologique fictive
-----

Simulation débutée le : 74/ 5/15
Actuellement rendue au : 74/ 6/ 2

                                moyenne   ecart-type
Infiltration : 0.000000 0.000000 mm/d
Masse de pesticide sur le sol : 1.940891 Kg/ha
Concentration sous la zone racinaire : 0.926615 0.817355 mg/L
Concentration atteignant la nappe : 0.000455 0.001240 mg/L
-----

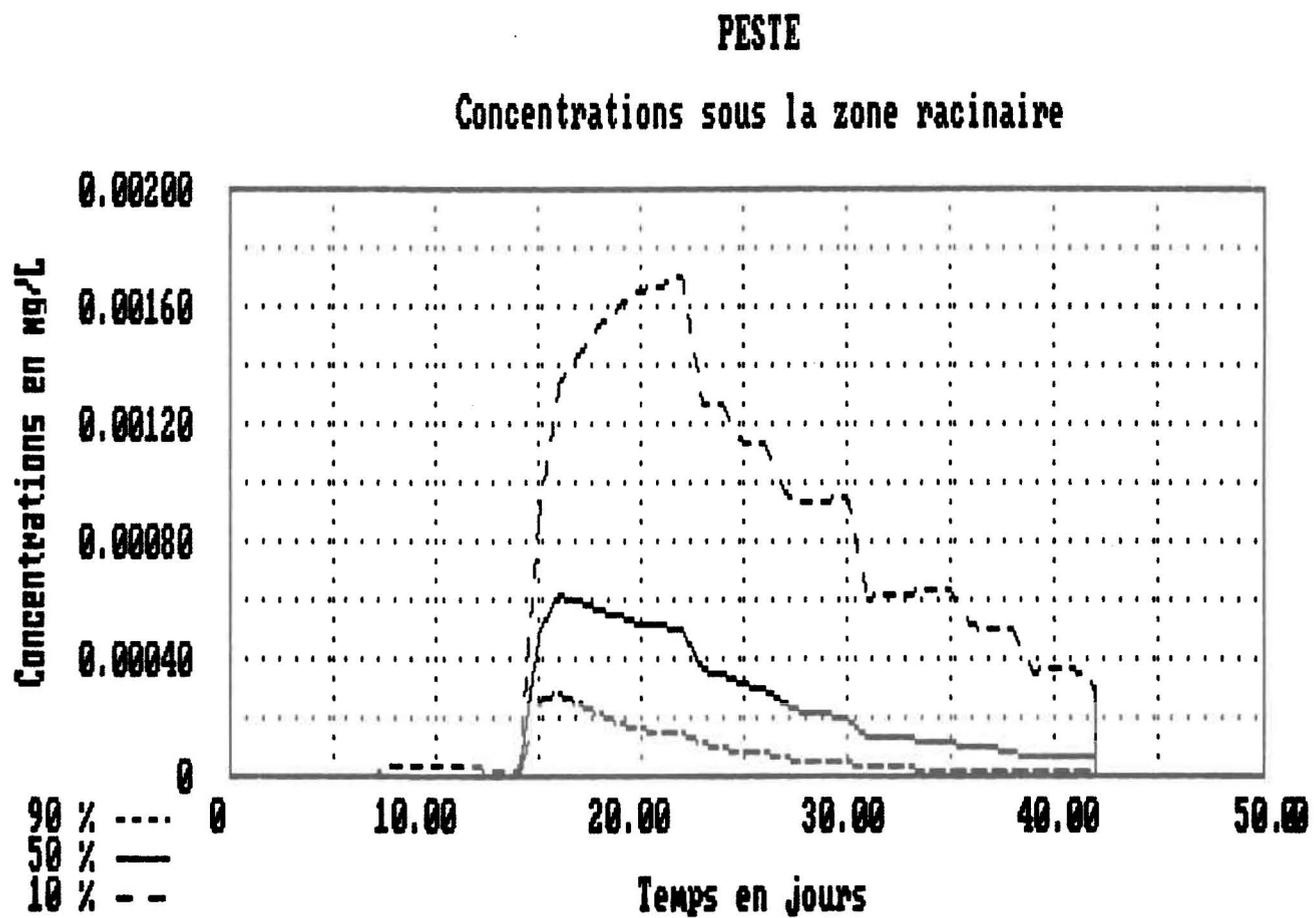
Tapez <A> pour suspendre l'exécution ou <S> pour l'abandonner
```

Figure 15 Exemple de bilan final présenté par PESTE suite à une simulation

PESTE			
Version 3.1	-	Mars 1988	- Par Denis Isabel - INRS-Eau
Simulation:	Simulation d'essai		
Site:	St-Augustin		
Pesticide:	Atrazine		
Station météo:	Station meteorologique fictive		
Pour la période du 74/ 5/15 au 74/ 6/26			
Bilan hydrique		Bilan pesticide	
	(cm)		(kg/ha)
Apports:	31.7500	Applications:	5.5000
Ruissellement:	0.0294	Ruissellement:	0.0000
Infiltration:	31.7205	Dégradation en surface:	0.3820
ETR:	0.0018	Drainage:	0.0004
Drainage:	0.1255	Assimilation:	4.7799
Recharge:	1.0540	Dégradation dans le sol:	0.0222
		Nappe:	0.0002

Tapez <A> pour suspendre l'exécution ou <S> pour l'abandonner

Figure 16 Exemple de sortie graphique de PESTE



7. CONCLUSION

La multiplication des cas de contamination des eaux souterraines par les pesticides employés en agriculture est un problème environnemental sérieux. Malheureusement, la complexité des processus impliqués et, en particulier, leur grande variabilité spatiale, ne facilite pas la gestion rationnelle de l'utilisation des pesticides. On a donc un cas typique où l'emploi de modèles peut guider l'élaboration des stratégies de protection de l'environnement.

En conséquence, le but de cette étude était le développement de modèles de gestion tenant compte de la variabilité spatiale des propriétés des sols. Il existe déjà de nombreux modèles de simulation du destin des pesticides dans la zone vadose, mais ceux présentés ici possèdent une caractéristique qui les différencient. Ils permettent de tenir compte de la variabilité spatiale de plusieurs processus, incluant les processus d'adsorption-désorption et de dégradation, alors que les modèles stochastiques auparavant disponibles ne tenaient compte que de la variabilité de la vitesse de migration des pesticides.

Deux types de solutions ont été développées. Premièrement, des solutions analytiques stochastiques permettant la simulation du destin des pesticides dans des conditions hydriques stationnaires et verticalement homogènes. Ces solutions sont basées sur des hypothèses assez contraignantes, mais sont néanmoins utiles dans le cadre d'une évaluation préliminaire ou pour la comparaison de différentes stratégies. De plus, ils permettent le calcul de la fraction lessivée à long terme, qui est une variable offrant beaucoup de possibilités en tant qu'indice de la vulnérabilité des eaux souterraines.

Le deuxième type de solution, soit la solution numérique du modèle, permet la simulation journalière de conditions transitoires et permet de tenir compte d'un plus grand nombre de processus. Elle est surtout utile pour évaluer l'impact de conditions météorologiques particulières ou pour vérifier l'effet d'un changement dans les dates d'application.

Le développement de ces nouveaux outils de gestion nous a permis d'identifier quelques avenues intéressantes pour les recherches futures dans ce domaine. Ainsi, la cartographie de la vulnérabilité des eaux souterraines au moyen de l'indice γ vaudrait la peine d'être comparée à d'autres méthodes. Il serait également intéressant de poursuivre le développement des modèles stochastiques analytiques pour obtenir une évaluation de la variance des concentrations. De nouveaux processus, tel la volatilisation, pourraient être incorporés dans le modèle numérique. Finalement, il est très important que, dès que des fonds seront disponibles pour le faire, une campagne de caractérisation de la variabilité spatiale des propriétés des sols au Québec soit amorcée. La vérification des modèles est en effet une étape essentielle actuellement en suspens.

En résumé, le développement de ces nouveaux modèles stochastiques fournit aux responsables de l'environnement des outils permettant maintenant de tenir compte des découvertes récentes concernant la variabilité spatiale des sols dans la gestion de l'utilisation des pesticides en agriculture.

TABLE DES NOTATIONS

a	coefficient empirique	
b	coefficient empirique	
C	concentration en solution	kg/m ³
C*	rapport de concentration	
C ₀	concentration de l'apport	kg/m ³
C _{bac}	coefficient de bac	
C _{DR}	coefficient de drainage	
cv	coefficient de variation	
D	coefficient de dispersion	m ² /s
EdN	intervalle d'échantillonnage	m
D _m	coefficient de diffusion moléculaire	m ² /s
E _A	énergie d'activation	J/mole
E _{bac}	évaporation de bac	m/s
erfc()	fonction d'erreur complémentaire	
exp()	fonction exponentielle	
ET _p	évapotranspiration potentielle	m/s
ET _R	évapotranspiration réelle	m/s
f	taux d'infiltration maximal	m/s
F _{MO}	proportion de matières organiques	kg/kg
F _{OC}	proportion de carbone organique	kg/kg
f(X)	fonction de densité de probabilité	
F(X)	fonction de répartition de probabilité	
h	pression (tension capillaire)	m
h ₀	pression capillaire minimale à saturation (tension)	m
H	charge hydraulique	m
I _{DR}	interception par le drainage	m/s
J	pertes totales	kg/m ² s
K _A	coefficient d'assimilation	
K(θ)	conductivité hydraulique	m/s
K _D	coefficient de partition (sol)	m ³ /kg

K_{OC}	coefficient de partition (carbone organique)	m^3/kg
K_{OW}	coefficient de partition (octanol)	m^3/kg
K_p	coefficient de dégradation à la surface	1/s
K_{sat}	coefficient de perméabilité à saturation	m/s
M	application de pesticide	kg/m^2
M'	quantité de pesticide lessivé	kg/m^2
m	nombre de paires équidistantes	
N	nombre de réalisations	
n	porosité	m^3/m^3
P	pertes hydriques	1/s
P	probabilité au non-dépassement	
p	processus	
P_e	nombre de Peclet	
P_S	gains et pertes en pesticide	kg/m^2s
q	flux hydrique	m/s
R	coefficient de retard	
$r(d)$	coefficient d'autocorrélation	
R_G	constante universelle des gaz	8.3 J/mole $^{\circ}K$
S	concentration de pesticide adsorbée	kg/kg
s	écart-type d'un échantillon	
T	température	$^{\circ}K$
T_0	température de référence	$^{\circ}K$
t	temps	s
$t_{1/2}$	demi-vie	s
U	paramètre de vitesse	m/s
u	moyenne d'un échantillon	
u_A	taux unitaire d'assimilation	kg/m^3s
u_C	flux convectif de pesticide	kg/m^2s
u_D	flux dispersif de pesticide	kg/m^2s
u_{DR}	taux unitaire de perte par drainage	kg/m^3s
u_p	flux de pesticide	kg/m^2s
v	vitesse moyenne dans les pores	m/s

w	taux de dégradation	$\text{kg/m}^3\text{s}$
w_j	pondération	
X	variable aléatoire	
x	distance	m
z	profondeur	m
α	dispersivité	m
β	coefficient empirique	
θ	teneur volumétrique en eau	m^3/m^3
θ_r	capacité de rétention	m^3/m^3
θ_f	point de flétrissement	m^3/m^3
Δx	équidistance	m
$\delta(t)$	fonction delta de Dirac	
$\Gamma()$	fonction gamma	
γ	fraction lessivée à long terme	
$\gamma(d)$	semivariance	
η	coefficient empirique	
λ	coefficient de dégradation	$1/\text{s}$
μ	moyenne d'une distribution	
ν	vitesse de migration des pesticides	m/s
ρ	densité brute du sol sec	kg/m^3
σ	écart-type d'une distribution	
τ	paramètre de temps	

LISTE DES FIGURES

Figure 1 Distribution des coefficients de variation observés pour les différents paramètres	30
Figure 2 Ajustement de trois distributions asymétriques aux données de Bresler et al. (1984)	33
Figure 3 Comparaison du modèle convectif déterministe avec le modèle convectif-dispersif déterministe	48
Figure 4 Comparaison du modèle convectif stochastique avec le modèle convectif-dispersif stochastique	49
Figure 5 Ecart absolu moyen entre les modèles pour différentes valeurs du nombre de Péclet et du coefficient de variation	50
Figure 6 Ecart absolu maximal entre les modèles pour différentes valeurs du nombre de Péclet et du coefficient de variation	52
Figure 7 Histogramme des valeurs de ν	59
Figure 8 Exemple de l'écran interactif du logiciel MINIPEST	65
Figure 9 Exemple de graphique produit par le logiciel MINIPEST	66
Figure 10 Courbe de la distribution cumulative de la fraction lessivée à long terme du pesticide aldicarbe dans la région de Portneuf	70
Figure 11 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'un site	81
Figure 12 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'un pesticide	82
Figure 13 Exemple de l'écran interactif de PESTE permettant de spécifier les caractéristiques d'une simulation	83
Figure 14 Exemple de l'écran affiché par PESTE au cours d'une simulation	84
Figure 15 Exemple de bilan final présenté par PESTE suite à une simulation	85
Figure 16 Exemple de sortie graphique de PESTE	86

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 1 Variabilité spatiale de la densité brute ρ observée dans plusieurs études	25
Tableau 2 Variabilité spatiale de la porosité n observée dans plusieurs études	26
Tableau 4 Variabilité spatiale de la capacité de rétention θ_r observée dans plusieurs études	27
Tableau 5 Variabilité spatiale du point de flétrissement θ_f observée dans plusieurs études	27
Tableau 6 Variabilité spatiale de la teneur en matières organiques f_{mo} observée dans plusieurs études	28
Tableau 7 Variabilité spatiale du coefficient de partition K_D observée dans plusieurs études	28
Tableau 8 Variabilité spatiale de la demi-vie des pesticides mesurée dans plusieurs études	28
Tableau 9 Synthèse des études de la variabilité spatiale	29
Tableau 10 Analyses géostatistiques publiées	34
Tableau 11 Distribution des paramètres de l'exemple	57
Tableau 12 Valeurs médianes de dix classes équiprobables de chacune des variates composant ν	58
Tableau 13 Dérivées partielles des paramètres variables pour les calculs par la méthode du développement en série de Taylor	60

BIBLIOGRAPHIE

- Aller L., Bennett T., Lehr J.H. et Petty R.J. (1985) DRASTIC: A standardized system for evaluating groundwater pollution potential using hydrogeologic settings. Rapport EPA/600/2-85/018, US Environmental Protection Agency, Ada, Oklahoma.
- Amoozegar-Fard A., Nielsen D.R. et Warrick A.W. (1982) Soil Solute Concentration Distributions for Spatially Varying Pore Water Velocities and Apparent Diffusion Coefficients. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 46, p. 3-9.
- Babalola O. (1978) Spatial Variability of Soil Water Properties in Tropical Soils of Nigeria. Soil Science, Vol. 126, p. 269-279.
- Bakhvalov N. (1976) Méthodes numériques. Editions MIR, Moscou, 606 p.
- Banton O. et Villeneuve J.-P. (1987) Evaluation of groundwater vulnerability to pesticides: A comparison of the agricultural DRASTIC index with PRZM leaching concentrations. Article accepté pour publication dans le "Journal of Contaminant Hydrology".
- Biggar J.W. et Nielsen D.R. (1976) Spatial Variability of the Leaching Characteristics of a Field Soil. Water Resources Research, Vol. 12, No. 1, P. 78-84.
- Bonazountas M. et Wagner J. (1984) SESOIL: A Seasonal Soil Compartment Model. Arthur D. Little Inc., Cambridge, Massachusetts.
- Bouwer E.J. et McCarty P.L. (1984) Modeling of Trace Organics Biotransformation in the Subsurface. Ground Water, Vol. 22, No. 4, P. 433-440.
- Bresler E. et Dagan G. (1983) Unsaturated Flow in Spatially Variable Fields: 2. Application of Water Flow Models to Various Fields. Water Resources Research, Vol. 19, No. 2, P. 421-428.
- Bresler E. et Dagan G. (1983) Unsaturated Flow in Spatially Variable Fields: 3. Solute Transport Models and Their Application to Two Fields. Water Resources Research, Vol. 19, No. 2, P. 429-435.
- Bresler E., Dagan G., Wagenet R.J. et Laufer A. (1984) Statistical Analysis of Salinity and Texture Effects on Spatial Variability of Soil Hydraulic Conductivity. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 48, No. 1, p. 16-25

- Cameron D.R. (1978) Variability of Soil Water Retention Curves and Predicted Hydraulic Conductivities. Soil Science, Vol. 126, p. 364-371.
- Campbell G.S. (1974) A Simple Method for Determining Unsaturated Conductivity from Moisture Retention Data. Soil Science, Vol. 117, p. 311-314.
- Carsel R.F., Smith C.N., Mulkey L.A., Dean J.D. et Jowise P. (1984) Users Manual for the Pesticide Root Zone Model (PRZM), Release 1. U.S.E.P.A. Report No EPA-600/3-84-109.
- Cassel D.K. et Bauer A. (1975) Spatial Variability in Soils Below Depth of Tillage: Bulk Density and Fifteen Atmosphere Percentage. Soil Sci. Soc. Amer. Proc., Vol. 39, p. 247-250.
- Coelho M.A. (1974) Spatial Variability of Water-Related Soil Physical Parameters. Ph.D. dissertation, University of Arizona, Tucson, Arizona, 97 p.
- Courtin P., Feller M.C. et Klinka K. (1983) Lateral Variability in Some Properties of Disturbed Forest Soils in S.W. British Columbia. Canadian Journal of Soil Science, Vol. 63, p. 529-539.
- Dagan G. et Bresler E. (1979) Solute Dispersion in Unsaturated Heterogeneous Soil at Field Scale: I. Theory. Soil. Sci. Soc. Am. J., Vol. 43, p. 461-467.
- Dagan G. et Bresler E. (1983) Unsaturated Flow in Spatially Variable Fields: 1. Derivation of Models of Infiltration and Redistribution. Water Resources Research, Vol. 19, No. 2, P. 413-420.
- De Smedt F. et Wierenga P.J. (1978) Approximate Analytical Solution for Solute Flow During Infiltration and Redistribution. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 42, p. 407-412.
- Eadie W.T., Drijard D., James F.E., Roos M. et Sadoulet B. (1971) Statistical Methods in Experimental Physics. North-Holland Publishing Cie, Amsterdam, 296 p.
- El Abd H. (1984) Spatial Variability of the Pesticide Distribution Coefficient. Ph.D. Thesis, University of California, Riverside, California.
- El Abd H, Jury W.A. et Cliath M.M. (1986) Spatial Variability of Pesticide Adsorption Parameters. Environmental Science and Technology, Vol. 20, No. 3, P. 256-260.

- Enfield C.G., Carsel R.F., Cohen S.Z., Phan T. et Walters D.M. (1982) Approximating Pollutant Transport to Ground Water. *Ground Water*, Vol. 20, No. 6, p. 711-722.
- Fréchette R. (1985) Inventaire des cas de contamination de l'eau par les pesticides au Québec. Rapport de stage présenté à Environnement Canada, INRS-Eau, 67 p.
- Gajem Y.M., Warrick A.W. et Myers D.E. (1981) Spatial Dependence of Physical Properties of a Typic Torrifluent Soil. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol. 45, p. 709-715.
- Godon D., Lajoie P. et Nadeau D. (1987) Atlas de l'utilisation des pesticides en agriculture au Québec en 1978, 1981 et 1982. Département de santé communautaire, Centre Hospitalier de l'Université Laval.
- Gumaa G.A. (1978) Spatial Variability of In Situ Available Water. Ph.D. Thesis, University of Arizona, Tucson, Arizona.
- Green R.E. et Karickhoff S.W. (1986) Estimating Pesticide Sorption Coefficients for Soils and Sediments. U.S.E.P.A. Report No. EPA/600/D-86/020, 45 p.
- Harkin J.M., Jones F.A., Fathulla R.N., Dzantor E.K. et Kroll D. (1986) Fate of Aldicarb in Wisconsin Ground Water. Dans: *Evaluation of Pesticides in Ground Water*; Garner W.Y., Honeycutt R.C. et Nigg H.N. éditeurs, American Chemical Society Symposium Series No. 315, Washington D.C.
- Hess P.J. (1986) Ground-Water Use in Canada, 1981. National Hydrology Research Institute Paper No. 28, Inland Water Directorate Bulletin No. 140, Ottawa.
- Holden P.W. (1986) Pesticides and Groundwater Quality: Issues and Problems in Four States. National Academy Press, Washington D.C., 134 p.. (NTIS No. PB86-200177)
- Jones R.L. (1986) Field, Laboratory, and Modeling Studies on the Degradation and Transport of Aldicarb Residues in Soil and Ground Water. Dans: *Evaluation of Pesticides in Ground Water*; Garner W.Y., Honeycutt R.C. et Nigg H.N. éditeurs, American Chemical Society Symposium Series No. 315, Washington D.C.
- Journel A. et Huijbregts C. (1978) Mining Geostatistics. Academic Press, New York, 600 p.

- Jury W.A. (1982) Simulation of Solute Transport Using a Transfer Function Model. Water Resources Research, Vol. 18, No. 2, P. 363-368.
- Jury W.A., Stolzy L.H. et Shouse P. (1982) A Field Test of the Transfer Function Model for Predicting Solute Transport. Water Resources Research, Vol. 22, No. 2, P.369-375.
- Jury W.A., Spencer W.F. et Farmer W.J. (1983) Use of Models for Assessing Relative Volatility, Mobility, and Persistence of Pesticides and Other Trace Organics in Soil Systems. Dans: Hazard Assessment of Chemicals: Current Development, Vol. 2, P. 1-41, Academic Press.
- Jury W.A., Spencer W.F. et Farmer W.J. (1983) Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soils: I. Model Description. Journal of Environmental Quality, Vol. 12, No. 4, P. 558-564.
- Jury W.A., Farmer W.J. et Spencer W.F. (1984) Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soils: II. Chemical Classification and Parameter Sensitivity. Journal of Environmental Quality, Vol. 13, No. 4, P. 567-572.
- Jury W.A., Spencer W.F. et Farmer W.J. (1984) Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soils: III. Application of Screening Model. Journal of Environmental Quality, Vol. 13, No. 4, P. 573-579.
- Jury W.A., Spencer W.F. et Farmer W.J. (1984) Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soils: IV. Review of Experimental Evidence. Journal of Environmental Quality, Vol. 13, No. 4, P. 580-586.
- Jury W.A. (1985) Spatial Variability of Soil Physical Parameters in Solute Movement: A Critical Literature Review. Electric Power Research Institute, Report No. EPR1 EA-4228, Palo Alto, California.
- Jury W.A. et Sposito G. (1985) Field Calibration and Verification of Solute Transport Models for the Unsaturated Zone. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 49, P. 1331-1341.
- Jury W.A., Sposito G. et White R.E. (1986) A transfer Function Model of Solute Transport Through Soil: 1. Fundamental Concepts. Water Resources Research, Vol. 22, No. 2, P. 243-247.
- Karickhoff S.W., Brown D.S. et Scott T.A. (1979) Sorption of Hydrophobic pollutants on Natural Sediments. Water Research, Vol. 13, No. 3, P. 241-248.

- Lee D.M., Reynolds W.D., Elrick D.E. et Clothier B.E. (1985) A comparison of Three Field Methods for Measuring Saturated Hydraulic Conductivity. Can. J. Soil Sci., Vol. 65, p.563-573.
- Libardi P.L., Reinhardt K., Nielsen D.R. et Biggar J.W. (1980) Simple Field Methods for Estimating Soil Hydraulic Conductivity. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 44, p. 3-6.
- Lindstrom T.F. et Piver W.T. (1985) A Mathematical Model for the Transport and Fate of Organic Chemicals in Unsaturated/Saturated Soils. Environmental Health Perspectives, Vol. 60, p. 11-28.
- McCarty P.L., Rittmann B.E. et Reinhard M. (1985) Processes Affecting the Movement and Fate of Trace Organics in the Subsurface Environment. Dans: Artificial Recharge of Groundwater, Asano T. éditeur, Butterworth, P. 627-646.
- Nielsen D.R., Biggar J.W. et Erh K.T. (1973) Spatial Variability of Field-Measured Soil-Water Properties. Hilgardia, Vol. 42, No. 7, P. 215-259.
- Nielsen D.R., Van Genuchten M.T. et Biggar J.W. (1986) Water Flow and Solute Transport Processes in the Unsaturated Zone. Water Resources Research, Vol. 22, No. 9, P. 89S-108S.
- Nofziger D.L. et Hornsby A.G. (1984) Chemical Movement in Soil: User's Guide. University of Florida, Gainesville, Florida.
- Placenka S. et Steenhuis T. (1984) User's Guide for the MOUSE Computer Program. Cornell University, Ithaca, New York.
- Rao P.S.C., Rao P.V. et Davidson J.M. (1977) Estimation of the Spatial Variability of Soil-Water Flux. Soil Sci. Am. J., Vol. 41, p. 1208-1209.
- Rao P.S.C. et Jessup R.E. (1982) Development and Verification of Simulation Models for Describing Pesticide Dynamics in Soils. Ecological Modelling, Vol. 16, P. 67-75.
- Rao P.S.C. et Wagenet R.J. (1985) Spatial Variability of Pesticides in Field Soils: Methods for Data Analysis and Consequences. Weed Science, Vol. 33, Suppl. 2, P. 18-24.
- Rao P.S.C., Edvardsson K.S.V., Ou L.T., Jessup R.E., Nkedi-Kizza P. et Hornsby A.G. (1986) Spatial Variability of Pesticide Sorption and Degradation Parameters. Dans: Evaluation of Pesticides in Ground Water; Garner W.Y.,

- Honeycutt R.C. et Nigg H.N. éditeurs, American Chemical Society
Symposium Series No. 315, Washington D.C.
- Russo D. et Bresler E. (1980) Field Determinations of Soil Hydraulic Properties for Statistical Analysis. Soil. Sci. Soc. Am. J., Vol. 44, p. 697-702.
- Russo D. et Bresler E. (1981) Soil Hydraulic Properties as Stochastic Processes: I. An Analysis of Field Spatial Variability. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 45, p. 682-687.
- Rawls W.J. et Brakensiek D.L. (1985) Prediction of Soil Water Properties Hydrologic Modeling. Dans: Watershed Management in the Eighties, ASCE Publication No. ISBN 0-87262-449-8.
- Scow K.M., Simkins S. et Alexander M. (1986) Kinetics of Mineralization of Organic Compounds at Low Concentrations in Soil. Applied and Environmental Microbiology, Vol. 51, No. 5, P. 1028-1035.
- Sharma M.L., Gander G.A. et Hunt C.G. (1980) Spatial Variability of Infiltration in a Watershed. J. Hydrol., Vol. 45, p. 101-122.
- Simkins S. et Alexander M. (1984) Models for Mineralization Kinetics with the Variables of Substrate Concentration and Population Density. Applied and Environmental Microbiology, Vol. 47, No. 6, P. 1299-1306.
- Simmons C.S., Nielsen D.R. et Biggar J.W. (1979) Scaling of Field-Measured Soil-Water Properties. Hilgardia, Vol. 47, p. 77-174.
- Simmons C.S. (1982) A Stochastic-Convective Transport Representation of Dispersion in One-Dimensional Porous Media Systems. Water Resources Research, Vol. 18, No. 4, P. 1193-1214.
- Smith C.N., Parrish R.S. et Carsel R.F. (1987) Estimating Sample Requirements for Field Evaluations of Pesticide Leaching. Environmental Toxicology and Chemistry, Vol. 6, p. 343-357.
- Sposito G., Jury W.A. et Gupta V.K. (1986) Fundamental Problems in the Stochastic Convection-Dispersion Model of Solute Transport in Aquifers and Field Soils. Water Resources Research, Vol. 22, No. 1, P. 77-88.
- Sposito G., White R.E., Darrah P.R. et Jury W.A. (1986) A Transfer Function Model of Solute Transport Through Soil: 3. The Convection-Dispersion Equation. Water Resources Research, Vol. 22, No. 2, P. 255-262.

- Sposito G. (1986) The "Physics" of Soil Water Physics. Water Resources Research, Vol. 22, No. 9, P. 83S-88S.
- Springer E.P. et Cundy T.W. (1987) Field-Scale Evaluation of Infiltration Parameters from Soil Texture for Hydrologic Analysis. Water Resources Research, Vol. 23, No. 2, p. 325-334.
- Stockton J.G. et Warrick A.W. (1971) Spatial Variability of Unsaturated Hydraulic Conductivity. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 36, p. 847-849.
- Van Genuchten M.T. et Alves W.J. (1982) Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. U.S. Department of Agriculture, Technical Bulletin No 1661, 149 p.
- Van Genuchten M.T. et Jury W.A. (1987) Progress in Unsaturated Flow and Transport Modeling. Review of Geophysics, Vol. 25, No. 2, P. 135-140.
- Vauclin M., Vierira S.R., Vachaud G. et Nielsen D.R. (1983) The Use of Co-kriging with Limited Field Observations. Soil Sci. Soc. Am. J., Vol. 47, p. 175-184.
- Villeneuve J.-P., Banton O. et Lafrance P. (1987) Développement d'un nouvel outil simple et adaptable pour l'évaluation de la vulnérabilité des eaux souterraines à la contamination par les pesticides. INRS-Eau, Rapport scientifique No. 233a.
- Wagenet D.W. (1981) Variability of Field Measured Infiltration Rates. M.S. Thesis, Utah State University, Logan, Utah, 105 p.
- Wagenet R.J. et Rao B.K. (1983) Description of Nitrogen Movement in the Presence of Spatially Variable Soil Hydraulic Properties. Agr. Water Mgmt., Vol. 6, p. 227-243.
- Wagenet R.J., Knighton R.E. et Bresler E. (1984) Soil Chemical and Physical Effects on Spatial Variability of Hydraulic Conductivity. Soil Science, Vol. 137, No. 4, p. 252-262.
- Wagenet R.J. et Rao P.S.C. (1985) Basic Concepts of Modeling Pesticides Fate in the Crop Root Zone. Weed Science, Vol. 33, Suppl. 2, P. 25-32.
- Wagenet R.J. (1986) Principles of Modeling Pesticide Movement in the Unsaturated Zone. Dans: Evaluation of Pesticides in Ground Water; Garner W.Y., Honeycutt R.C. et Nigg H.N. éditeurs, American Chemical Society Symposium Series No. 315, Washington D.C.

- Wagenet R.J. et Hutson J.L. (1986) Predicting the Fate of Nonvolatile Pesticides in the Unsaturated Zone. J. Environ. Qual., Vol. 15, No. 4, P. 315-322.
- Wang Y.-S., Subba-Rao R.V. et Alexander M. (1984) Effect of Substrate Concentration and Organic and Inorganic Compounds on the Occurrence and Rate of Mineralisation and Cometabolism. Applied and Environmental Microbiology, Vol. 47, No. 6, P. 1195-1200.
- Warrick A.W., Mullen G.J. et Nielsen D.R. (1977) Scaling Field-Measured Soil Hydraulic Properties Using a Similar Media Concept. Water Resources Research, Vol. 13, No. 2, p. 355-362.
- Warrick A.W. et Nielsen D.R. (1980) Spatial Variability of Soil Physical Properties in the Field. Dans: Applications of Soil Physics, Hillel D. editeur, Academic Press, New York, p. 319-344.
- White R.E., Dyson J.S., Haigh R.A., Jury W.A. et Sposito G. (1986) A Transfer Function Model of Solute Transport Through Soil. 2. Illustrative Applications. Water Resources Research, Vol. 22, No. 2, P. 248-254.
- Wood L.S., Scott H.D., Marx D.B. et Lavy T.L. (1987) Variability in Sorption Coefficients of Metolachlor on a Captina Silt Loam. Journal of the Environmental Quality, Vol. 16, No. 3, p. 251-256.

ANNEXES

ANNEXE A

Les méthodes de l'analyse statistique classique et de la géostatistique

Dans l'analyse statistique classique, l'ensemble des N mesures d'une variable aléatoire X obtenues dans un champ constituent un échantillon dont on calcule les paramètres, comme la moyenne u et l'écart-type s , de la façon suivante:

$$u(X) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$$

$$s(X) = \left[\frac{1}{N-1} \left[\sum_{i=1}^N X_i^2 - \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N X_i \right)^2 \right] \right]^{1/2}$$

On fait souvent l'hypothèse implicite que la distribution d'origine est normale. Cette hypothèse n'est cependant pas toujours vérifiée, et pour la valider, il faut utiliser un histogramme ou une courbe cumulative qu'on compare alors avec la fonction de densité f_N ou la fonction de répartition F_N de la loi normale:

$$f_N = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp \left[- \frac{(X-\mu)^2}{2\sigma^2} \right]$$

$$F_N = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{(X-\mu)/\sigma} e^{-X^2/2} dX$$

où μ et σ^2 sont respectivement la moyenne et la variance de la distribution, définis par:

$$\mu(X) = \int_{-\infty}^{\infty} X f(X) dX$$

$$\sigma^2(X) = \int_{-\infty}^{\infty} (X - \mu(X))^2 f(X) dX$$

où $f(X)$ représente la fonction de densité de probabilité. Lorsque l'échantillon n'a pas une distribution normale, une simple transformation mathématique peut souvent le normaliser. Ainsi, la distribution log-normale est régulièrement utilisée pour représenter les

échantillons asymétriques. Cette distribution est issue de la transformation logarithmique d'une loi normale et possède la fonction de densité f_{LN} suivante:

$$f_{LN} = \frac{1}{\sigma_L (2\pi)^{1/2}} \cdot \frac{1}{X} \exp \left[\frac{-(\ln X - \mu_L)^2}{2\sigma_L^2} \right]$$

où μ_L et σ_L sont les paramètres de la distribution normale parente. La loi log-normale n'est pas la seule à pouvoir représenter une distribution asymétrique possédant une borne inférieure. On peut également utiliser la loi exponentielle, dont la fonction de densité f_E est:

$$f_E = \frac{1}{\mu} \exp \left[\frac{-X}{\mu} \right] \quad \text{pour } X \geq 0$$

pour laquelle le coefficient de variation est fixe (cv = 1.0). On peut aussi utiliser un cas spécial de la loi Gamma ayant la fonction de densité suivante:

$$f_{GS} = \frac{4X}{\mu^2} \exp \left[\frac{-2X}{\mu} \right] \quad \text{pour } X > 0$$

et pour laquelle le coefficient de variation est également fixe (cv = 0.70). Cette loi a déjà été utilisée par Sposito et al. (1986) pour représenter la distribution des vitesses.

Ces deux distributions sont des cas particuliers de la loi gamma. Cette dernière possédant la fonction de densité de probabilité suivante:

$$f_G = \frac{\mu}{\sigma^2 \Gamma(\mu^2/\sigma^2)} \left[\frac{\mu X}{\sigma^2} \right]^{(\mu^2/\sigma^2 - 1)} \exp \left[-\frac{\mu X}{\sigma^2} \right]$$

Dans l'analyse géostatistique, la position des mesures est aussi importante que la mesure elle-même. Ainsi, on s'attend à ce que les mesures rapprochées soient plus autocorrélées que les mesures éloignées et il importe de savoir à partir de quelle distance les paramètres deviennent indépendants. Cette distance maximale d'autocorrélation sert à prédire l'espacement optimal des points de mesure et peut être évaluée à l'aide du semivariogramme.

La semivariance $\gamma(d)$ est une estimation de la variance des mesures espacées d'une distance d dans un échantillon composé de N mesures $X(x)$ colinéaires équidistantes de Δx . Elle est calculée par:

$$\gamma(d) = \frac{1}{2m} \sum_{i=0}^{m-1} (X(i\Delta x) - X(i\Delta x + d))^2$$

où

$$m = N - \frac{d}{\Delta x}$$

La semivariance peut se généraliser à des mesures non-colinéaires et non-équidistantes. Elle peut aussi s'exprimer sous forme de coefficient d'autocorrélation $r(d)$ grâce à:

$$r(d) = 1 - \frac{\gamma(d)^2}{s^2}$$

où s est l'écart-type des mesures. Les mesures suffisamment éloignées pour être indépendantes ont un coefficient d'autocorrélation nul, ce qui signifie que la semivariance tend asymptotiquement vers la variance des mesures. La distance maximale d'autocorrélation correspond à la distance où la semivariance rejoint la variance de l'ensemble et où l'autocorrélation devient nulle. Journel et Huijbregts (1978) présentent en détail les diverses méthodes de la géostatistique.

ANNEXE B

Démonstrations des solutions analytiques

Solution analytique déterministe pour une impulsion unitaire

Soit une colonne de sol homogène où les conditions hydriques sont stationnaires. La migration des pesticides peut y être décrite par l'équation différentielle:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial z} - \lambda C$$

Lorsque soumise à une impulsion unitaire correspondant à une application de pesticide, les conditions limites suivantes peuvent s'appliquer:

$$t=0 \quad \Rightarrow \quad C=0$$

$$t=0 \wedge z=0 \quad \Rightarrow \quad C = \frac{M}{v} \delta(t)$$

Nous procédons à la transformée de Laplace de ce système pour obtenir:

$$sC' = -v \frac{\partial C'}{\partial z} - \lambda C'$$

avec la condition limite:

$$t=0 \wedge z=0 \quad \Rightarrow \quad C' = \frac{M}{v}$$

Séparons les variables:

$$sC' + \lambda C' = -v \frac{\partial C'}{\partial z}$$

$$(s+\lambda)C' = -v \frac{\partial C'}{\partial z}$$

$$\frac{s+\lambda}{\nu} \partial z = - \frac{\partial C'}{C'}$$

Intégrons de chaque côté:

$$\left(\frac{s+\lambda}{\nu} \right) z = -\ln C' + A$$

Selon la condition limite, on a:

$$0 = -\ln \left(\frac{M}{\nu} \right) + A$$

qui devient:

$$A = \ln \left(\frac{M}{\nu} \right)$$

et qu'on peut ajouter à la solution pour obtenir:

$$\left(\frac{s+\lambda}{\nu} \right) z = -\ln C' + \ln \left(\frac{M}{\nu} \right)$$

Avec un peu d'algèbre:

$$\left(\frac{s+\lambda}{\nu} \right) z = \ln \left(\frac{M}{\nu} \cdot \frac{1}{C'} \right)$$

$$\exp \left(z \left(\frac{s+\lambda}{\nu} \right) \right) = \frac{M}{\nu} \cdot \frac{1}{C'}$$

$$C' = \frac{M}{\nu} \exp \left(-z \left(\frac{s+\lambda}{\nu} \right) \right)$$

$$C' = \frac{M}{\nu} \exp \left(-\frac{z}{\nu} s - \frac{z}{\nu} \lambda \right)$$

On obtient finalement:

$$C' = \frac{M}{\nu} \exp \left(-\frac{z}{\nu} s \right) \exp \left(-\frac{z}{\nu} \lambda \right)$$

Procédons à la transformation inverse:

$$C = \frac{M}{\nu} \delta \left(t - \frac{z}{\nu} \right) \exp \left(-\frac{z}{\nu} \lambda \right)$$

Qui est la solution recherchée.

Solution analytique stochastique (distributions normales)

On part du modèle déterministe obtenu précédemment:

$$C = \frac{M}{\nu} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right)$$

Selon les principes de la modélisation stochastique, la concentration moyenne est obtenue par:

$$\mu(C) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{M}{\nu} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) f_N(\lambda) f_N(\nu) d\lambda d\nu$$

qui peut aussi s'écrire:

$$\mu(C) = M \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{f_N(\nu)}{\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) f_N(\lambda) d\lambda d\nu$$

L'intégrale intérieure est égale à:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) \frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \exp\left[-\frac{(\lambda - \mu(\lambda))^2}{2\sigma^2(\lambda)}\right] d\lambda$$

Soit:

$$\frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\lambda \frac{z}{\nu} - \frac{(\lambda - \mu(\lambda))^2}{2\sigma^2(\lambda)}\right] d\lambda$$

ou encore:

$$\frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{z}{\nu} \lambda - \frac{(\lambda^2 - 2\lambda\mu(\lambda) + \mu^2(\lambda))}{2\sigma^2(\lambda)}\right] d\lambda$$

ou encore:

$$\frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{1}{2\sigma^2(\lambda)} \lambda^2 + \left(\frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} - \frac{z}{\nu} \right) \lambda - \frac{\mu^2(\lambda)}{2\sigma^2(\lambda)} \right] d\lambda$$

ou encore:

$$\frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[-\left(\frac{1}{2\sigma^2(\lambda)} \lambda^2 + \left(\frac{z}{\nu} - \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \right) \lambda + \frac{\mu^2(\lambda)}{2\sigma^2(\lambda)} \right) \right] d\lambda$$

qui, intégré, donne:

$$\frac{1}{\sigma(\lambda)(2\pi)^{1/2}} \cdot \left[\frac{\pi}{(2\sigma^2(\lambda))^{-1}} \right]^{1/2} \cdot \exp \left[\frac{\left(\frac{z}{\nu} - \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \right)^2 - 4 \frac{1}{2\sigma^2(\lambda)} \cdot \frac{\mu^2(\lambda)}{2\sigma^2(\lambda)}}{4 (2\sigma^2(\lambda))^{-1}} \right]$$

qu'on peut simplifier à:

$$\exp \left[\left(\left(\frac{z}{\nu} - \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \right)^2 - \frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^4(\lambda)} \right) \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} \right]$$

ou encore:

$$\exp \left[\left(\frac{z^2}{\nu^2} - 2 \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \frac{z}{\nu} + \frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^4(\lambda)} - \frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^4(\lambda)} \right) \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} \right]$$

ou encore:

$$\exp \left[\left(\frac{z^2}{\nu^2} - 2 \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \frac{z}{\nu} \right) \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} \right]$$

et finalement:

$$\exp \left[\frac{z^2 \sigma^2(\lambda)}{\nu^2} - \frac{z}{\nu} \mu(\lambda) \right]$$

qu'on remplace dans l'intégrale:

$$\mu(C) = M \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{1}{\nu} \exp\left[\frac{z^2 \sigma^2(\lambda)}{\nu^2} - \frac{z}{\nu} \mu(\lambda)\right] f_N(\nu) d\nu$$

dont on extrait les termes constants:

$$\mu(C) = \frac{M}{\sigma(\nu)(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{1}{\nu} \exp\left(\frac{z^2 \sigma^2(\lambda)}{\nu^2} - \frac{z}{\nu} \mu(\lambda) - \frac{(\nu - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)}\right) d\nu$$

Cette intégrale possède une singularité à $\nu = 0$ et doit être calculée en deux parties:

$$\mu(C) = \frac{M}{\sigma(\nu)(2\pi)^{1/2}} \left[\int_{-\infty}^{-0} (\dots) d\nu + \int_{+0}^{+\infty} (\dots) d\nu \right]$$

L'intégration de la première partie donne un résultat nul. Nous ne démontrerons donc que la deuxième partie:

$$\int_{+0}^{+\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{1}{\nu} \exp\left[\frac{z^2 \sigma^2(\lambda)}{\nu^2} - \frac{z}{\nu} \mu(\lambda) - \frac{(\nu - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)}\right] d\nu$$

Procédons par un changement de variable, posons:

$$x = t - \frac{z}{\nu} \Rightarrow \nu = \frac{z}{t-x} \Rightarrow d\nu = \frac{z}{(t-x)^2} dx$$

L'intégrale devient alors:

$$\int_{-\infty}^t \delta(x) \frac{t-x}{z} \exp\left[(t-x)^2 \frac{\sigma^2(\lambda)}{z^2} - (t-x)\mu(\lambda) - \frac{(z/(t-x) - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)}\right] \frac{z}{(t-x)^2} dx$$

qui a pour solution:

$$\frac{1}{t} \exp \left[t^2 \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} - t\mu(\lambda) - \frac{(z/t - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)} \right]$$

On a donc finalement:

$$\mu(C) = \frac{M}{t\sigma(\nu)(2\pi)^{1/2}} \exp \left[- \frac{(z/t - \mu(\nu))^2}{2\sigma^2(\nu)} - \mu(\lambda)t + \frac{\sigma^2(\lambda)}{2} t^2 \right]$$

Solution analytique stochastique (distributions gamma)

On prend le même modèle déterministe que dans le cas précédent:

$$C = \frac{M}{\nu} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right)$$

La concentration moyenne est donc:

$$\mu(C) = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} \frac{M}{\nu} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) f_G(\lambda) f_G(\nu) d\lambda d\nu$$

qui peut aussi s'écrire:

$$\mu(C) = M \int_0^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{f_G(\nu)}{\nu} \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) f_G(\lambda) d\lambda d\nu$$

L'intégrale intérieure est égale à:

$$\int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{z}{\nu} \lambda\right) \frac{a(\lambda)}{\Gamma(b(\lambda))} (a(\lambda) \lambda)^{b(\lambda)-1} \exp(-a(\lambda) \lambda) d\lambda$$

où $a(\lambda)$ et $b(\lambda)$ sont les paramètres de la distribution gamma de λ .

$$\frac{a(\lambda)}{\Gamma(b(\lambda))} \int_0^{\infty} \lambda^{b(\lambda)-1} \exp\left[-\left(a(\lambda) + \frac{z}{\nu}\right) \lambda\right] d\lambda$$

qui donne:

$$\frac{a(\lambda)}{\Gamma(b(\lambda))} \frac{\Gamma(b(\lambda))}{(a(\lambda) + z/\nu)^{b(\lambda)}} = \left[\frac{a(\lambda)}{(a(\lambda) + z/\nu)} \right]^{b(\lambda)} = \left[1 + \frac{z}{\nu} \frac{1}{a(\lambda)} \right]^{-b(\lambda)}$$

qu'on remplace dans l'intégrale complète pour obtenir:

$$\mu(C) = M \int_0^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \frac{1}{\nu} \left(1 + \frac{z}{\nu} \frac{1}{a(\lambda)}\right)^{-b(\lambda)} \frac{a(\nu)^{b(\nu)}}{\Gamma(b(\nu))} \nu^{b(\nu)-1} \exp(-a(\nu)\nu) d\nu$$

dont on extrait les termes constants:

$$\mu(C) = \frac{M a(\nu)^{b(\nu)}}{\Gamma(b(\nu))} \int_0^{\infty} \delta\left(t - \frac{z}{\nu}\right) \nu^{b(\nu)-2} \left(1 + \frac{z}{\nu} \frac{1}{a(\lambda)}\right)^{-b(\lambda)} \exp(-a(\nu)\nu) d\nu$$

Procédons à un changement de variable, posons:

$$x = t - \frac{z}{\nu} \Rightarrow \nu = \frac{z}{t-x} \Rightarrow d\nu = \frac{z}{(t-x)^2} dx$$

Notre intégrale devient alors:

$$\mu(C) = \frac{M a(\nu)^{b(\nu)}}{\Gamma(b(\nu))} \int_{-\infty}^t \delta(x) \left(\frac{z}{t-x}\right)^{b(\nu)-2} \left(1 + \frac{t-x}{a(\lambda)}\right)^{-b(\lambda)} \exp\left(\frac{-a(\nu)z}{t-x}\right) \frac{z}{(t-x)^2} dx$$

qui donne:

$$\mu(C) = \frac{M a(\nu)^{b(\nu)}}{\Gamma(b(\nu))} \left[\frac{z}{t}\right]^{b(\nu)-2} \left[1 + \frac{t}{a(\lambda)}\right]^{-b(\lambda)} \exp\left[-a(\nu) \frac{z}{t}\right] \frac{z}{t^2}$$

et que nous simplifions à:

$$\mu(C) = \frac{M a(\nu)^{b(\nu)}}{\Gamma(b(\nu))} \frac{z^{b(\nu)-1}}{t} \left[1 + \frac{t}{a(\lambda)}\right]^{-b(\lambda)} \exp\left[-a(\nu) \frac{z}{t}\right]$$

et à:

$$\mu(C) = \frac{M}{z\Gamma(b(\nu))} \left[a(\nu) \frac{z}{t} \right]^{b(\lambda)} \exp \left[-a(\nu) \frac{z}{t} \right] \left[1 + \frac{t}{a(\lambda)} \right]^{-b(\lambda)}$$

Or, les paramètres des distributions gamma sont donnés par:

$$a(\lambda) = \frac{\mu(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \quad b(\lambda) = \frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)} \quad a(\nu) = \frac{\mu(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \quad b(\nu) = \frac{\mu^2(\nu)}{\sigma^2(\nu)}$$

La solution finale est donc:

$$\mu(C) = \frac{M}{z\Gamma(\mu^2(\nu)/\sigma^2(\nu))} \left[\frac{\mu(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \frac{z}{t} \right]^{\frac{\mu^2(\nu)}{\sigma^2(\nu)}} \exp \left[-\frac{\mu(\nu)}{\sigma^2(\nu)} \frac{z}{t} \right] \left[1 + \frac{\sigma^2(\lambda)t}{\mu(\lambda)} \right]^{-\frac{\mu^2(\lambda)}{\sigma^2(\lambda)}}$$

ANNEXE C

Le logiciel MINIPEST

Il s'agit d'un petit logiciel facilitant l'utilisation des modèles stochastiques analytiques du chapitre 5. Ces modèles ont été conçus dans le but d'être employés lors de l'évaluation préliminaire du risque associé avec l'utilisation d'un pesticide donné. Leur formulation mathématique relativement lourde se prête cependant mal à un calcul manuel rapide, et les paramètres sont trop nombreux pour permettre la construction d'un nomogramme simple. D'où l'utilité d'un logiciel simple permettant l'exploitation de ces modèles.

MINIPEST est composé de menus interactifs, de style "LOTUS 1-2-3", qui permettent d'utiliser la plupart des fonctions du logiciel avec un minimum d'effort. A chaque menu, le choix se fait en déplaçant un rectangle blanc sur la liste des options au moyen des flèches gauches et droites. Lorsque l'option voulue est "allumée", on l'active en appuyant sur la touche de retour (ENTER). De plus, lorsqu'une option est allumée, une description de cette option est affichée sur la ligne suivante.

L'utilisateur expérimenté peut activer directement une option en appuyant sur la touche du clavier correspondant à la première lettre de cette option. Lorsque deux options commencent par la même lettre, c'est toujours la première apparaissant au menu qui est activée dans ce cas.

Le logiciel affiche à l'écran toutes les données du problème. Il est possible de modifier la valeur des paramètres et le type d'unités choisies. Il est également possible de sauver ces données dans un fichier (.MIN) pour les réutiliser plus tard. La simulation, c'est-à-dire le calcul de la concentration moyenne et le calcul du lessivage à long terme, est effectuée à chaque fois qu'on quitte un menu de modification des paramètres. Finalement, le menu des options de visualisation permet d'obtenir trois types de graphiques.

Listing du logiciel

```
'programme MINIPEST

'sous-programmes
DECLARE SUB attend ()
DECLARE SUB calcul ()
DECLARE SUB combine ()
DECLARE SUB ecran ()
DECLARE SUB ecrit (ligne%, colonne%, longueur%, precision%, valeur!)
DECLARE SUB fichiers ()
DECLARE SUB fond ()
DECLARE SUB graphe ()
DECLARE SUB graphique (points%, x!(), y!(), legende$())
DECLARE SUB lecture ()
DECLARE SUB menu (max%, cas%, clef$(), aide$())
DECLARE SUB modifie (moyenne!, ecart.type!, coefficient!, symbole$, base$,
identification$)
DECLARE SUB montre (ligne%, col%, longueur%, chose$)
DECLARE SUB noms ()
DECLARE SUB panneau ()
DECLARE SUB param ()
DECLARE SUB penche (x%, y%, mot$)
DECLARE SUB reaction ()
DECLARE SUB sauve ()
DECLARE SUB transport ()
DECLARE FUNCTION arrondit! (x!)
DECLARE FUNCTION existe% (nom$, extension$)
DECLARE FUNCTION gamma! (x!)
DECLARE FUNCTION modele (masse, temps, profondeur, moy.nu, ecart.nu,
moy.lambda, ecart.lambda)
DECLARE FUNCTION nombre! (chaine$)
DECLARE FUNCTION nu! (q!, n!, ksat!, beta!, rho!, kd!)
DECLARE FUNCTION question$ (interrogation$, longueur%)
DECLARE FUNCTION verifie% ()

'catalogue des variables communes      u.=moyennes,
',                                       s.=ecart type,
',                                       c.=coefficient d'unite,
',                                       r.=symbole d'unite
COMMON SHARED fichier$                  'nom du fichier
COMMON SHARED pesticide$                'nom du pesticide
COMMON SHARED site$                     'nom du site
COMMON SHARED titre$                    'titre de la simulation
COMMON SHARED q, c.q, r.q$              'debit
COMMON SHARED u.n, s.n, c.n, r.n$       'porosite
COMMON SHARED u.rho, s.rho, c.rho, r.rho$ 'densite brute
```

```

COMMON SHARED u.ksat, s.ksat, c.ksat, r.ksat$ 'permeabilite
COMMON SHARED u.beta, s.beta 'coefficient beta
COMMON SHARED m, c.m, r.m$ 'masse appliquee
COMMON SHARED koc, c.koc, r.koc$ 'partition sur la MO
COMMON SHARED u.foc, s.foc, c.foc, r.foc$ 'portion de carbone
organique
COMMON SHARED u.lambda, s.lambda, c.lambda 'coefficient de
degradation
COMMON SHARED r.lambda$
COMMON SHARED distribution$ 'distribution des
parametres
COMMON SHARED z, c.z, r.z$ 'profondeur
COMMON SHARED t, c.t, r.t$ 'temps
COMMON SHARED u.c, c.c, r.c$ 'concentration
COMMON SHARED u.nu, s.nu 'vitesse du pesticide

'constantes logiques et autres
CONST non% = 0, oui% = NOT non
CONST invalide! = 123456789
CONST pi! = 3.141593

'preparation des coefficients d'unites
DIM SHARED si$(100), autre$(100), rapport(100)
OPEN "unites.dat" FOR INPUT AS #1
WHILE NOT EOF(1)
    i% = i% + 1
    INPUT #1, si$(i%), autre$(i%), rapport(i%)
WEND
si$(i% + 1) = "FIN"
CLOSE #1

'mise en place du panneau
CALL panneau
CALL attend
CALL fond
CALL ecran

'description du menu principal
DIM c$(5), a$(5)
c$(1) = "Fichiers"
c$(2) = "Noms"
c$(3) = "Paramètres"
c$(4) = "Graphiques"
c$(5) = "Sortie"
a$(1) = "Gestion des fichiers MINIPEST"
a$(2) = "Identification de la simulation"
a$(3) = "Modification des paramètres et execution de la simulation"
a$(4) = "Visualisation graphique de la simulation"

```

```
a$(5) = "Retour à DOS"
```

```
fin = non
```

```
cas% = 1
```

```
WHILE NOT fin
```

```
  CALL menu(5, cas%, c$, a$())
```

```
  SELECT CASE cas%
```

```
    CASE 0
```

```
      fin = oui
```

```
    CASE 1
```

```
      CALL fichiers
```

```
    CASE 2
```

```
      CALL noms
```

```
    CASE 3
```

```
      CALL param
```

```
    CASE 4
```

```
      CALL graphe
```

```
    CASE 5
```

```
      fin = oui
```

```
  CASE ELSE
```

```
END SELECT
```

```
WEND
```

```
CLS
```

```
SYSTEM
```

```
FUNCTION arrondit (x)
```

```
'sous-programme qui arrondit a des multiples decimaux de 1, 2 ou 5
```

```
'ordre de grandeur
```

```
puissance% = INT(LOG(x) / LOG(10))
```

```
'facteur brut
```

```
facteur = x / 10 ^ puissance%
```

```
'facteur arrondi
```

```
SELECT CASE facteur
```

```
  CASE IS > 5!
```

```
    facteur = 10!
```

```
  CASE IS > 2!
```

```
    facteur = 5!
```

```
  CASE ELSE
```

```
    facteur = 2!
```

```
END SELECT
```

```
'nombre arrondi
```

```
arrondi = facteur * 10 ^ puissance%
```

```
END FUNCTION
```

```

SUB attend
'sous-programme qui bloque l'ecran en attendant une touche

    WHILE INKEY$ = ""
    WEND

END SUB

SUB calcul
'sous-programme de modification des parametres de calcul

'reinitialise la concentration moyenne
u.c = 0!

'description du menu
DIM c$(5), a$(5)
c$(1) = "Distributions"
c$(2) = "Profondeur"
c$(3) = "Temps"
c$(4) = "Unités"
c$(5) = "Simule"
a$(1) = "Choix de la loi de distribution statistique des parametres
variables"
a$(2) = "Profondeur où on veut connaître la concentration moyenne"
a$(3) = "Temps écoulé depuis l'application du pesticide"
a$(4) = "Unités désirées pour la concentration moyenne"
a$(5) = "Simule et retourne au menu des parametres"

'description du menu secondaire
DIM cc$(2), aa$(2)
cc$(1) = "Normale"
cc$(2) = "Gamma"
aa$(1) = "Distribution normale (symétrique et petit coefficient de
variation)"
aa$(2) = "Distribution gamma (asymétrique et grand coefficient de
variation)"

'selection et execution
fin = non
cas% = 4
WHILE NOT fin
    CALL menu(5, cas%, c$(), a$())
    SELECT CASE cas%
        CASE 0
            fin = oui
        CASE 1
            choix% = 2

```

```

        CALL montre(21, 5, 70, a$(1))
        CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
        IF choix% > 0 THEN distribution$ = cc$(choix%)
        CALL ecran
    CASE 2
        CALL modifie(z, invalide, c.z, r.z$, "m", c$(2))
        CALL ecran
    CASE 3
        CALL modifie(t, invalide, c.t, r.t$, "s", c$(3))
        CALL ecran
    CASE 4
        CALL modifie(invalide, invalide, c.c, r.c$, "kg/m3",
"Concentration moyenne")
        CALL ecran
    CASE 5
        fin = oui
    CASE ELSE
END SELECT
WEND

```

```

'calcul de la concentration moyenne
IF verifie THEN
    CALL combine
    u.c = modele(m, t, z, u.nu, s.nu, u.lambda, s.lambda)
    CALL ecran
END IF

```

END SUB

SUB combine

'sous-programme de calcul des parametres de nu

```

'calcul des parametres du coefficient de distribution
u.kd = u.foc * koc
s.kd = s.foc * koc

```

```

'estimation des derivees premieres et secondes
f = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta, u.rho, u.kd)
h = u.n / 20!
f1 = nu(q, u.n - h, u.ksat, u.beta, u.rho, u.kd)
f2 = nu(q, u.n + h, u.ksat, u.beta, u.rho, u.kd)
d1.n = (f2 - f1) / (2! * h)
d2.n = (f1 - 2! * f + f2) / (h * h)
h = u.ksat / 20!
f1 = nu(q, u.n, u.ksat - h, u.beta, u.rho, u.kd)
f2 = nu(q, u.n, u.ksat + h, u.beta, u.rho, u.kd)
d1.ksat = (f2 - f1) / (2! * h)
d2.ksat = (f1 - 2! * f + f2) / (h * h)

```

```

h = u.beta / 20!
f1 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta - h, u.rho, u.kd)
f2 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta + h, u.rho, u.kd)
d1.beta = (f2 - f1) / (2! * h)
d2.beta = (f1 - 2! * f + f2) / (h * h)
h = u.rho / 20!
f1 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta, u.rho - h, u.kd)
f2 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta, u.rho + h, u.kd)
d1.rho = (f2 - f1) / (2! * h)
d2.rho = (f1 - 2! * f + f2) / (h * h)
h = u.kd / 20!
f1 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta, u.rho, u.kd - h)
f2 = nu(q, u.n, u.ksat, u.beta, u.rho, u.kd + h)
d1.kd = (f2 - f1) / (2! * h)
d2.kd = (f1 - 2! * f + f2) / (h * h)

'calcul par la methode de taylor
u.nu = f + (d2.n * s.n ^ 2 + d2.ksat * s.ksat ^ 2 + d2.beta * s.beta ^
2 + d2.rho * s.rho ^ 2 + d2.kd * s.kd ^ 2) / 2!
s.nu = SQR((d1.n * s.n) ^ 2 + (d1.ksat * s.ksat) ^ 2 + (d1.beta *
s.beta) ^ 2 + (d1.rho * s.rho) ^ 2 + (d1.kd * s.kd) ^ 2)

```

END SUB

SUB ecran

'sous-programme qui met sur l'ecran les valeurs des parametres

```

'affichage des informations en mode bold
COLOR 15, 0
fichier$ = UCASE$(fichier$)
CALL montre(4, 13, 8, fichier$)
CALL montre(4, 34, 15, pesticide$)
CALL montre(4, 57, 20, site$)
CALL montre(5, 11, 66, titre$)
CALL ecrit(11, 10, 8, 4, q * c.q)
CALL montre(11, 33, 6, r.q$)
CALL ecrit(12, 10, 8, 4, u.n * c.n)
CALL ecrit(12, 20, 8, 4, s.n * c.n)
CALL montre(12, 33, 6, r.n$)
CALL ecrit(13, 10, 8, 4, u.rho * c.rho)
CALL ecrit(13, 20, 8, 4, s.rho * c.rho)
CALL montre(13, 33, 6, r.rho$)
CALL ecrit(14, 10, 8, 4, u.ksat * c.ksat)
CALL ecrit(14, 20, 8, 4, s.ksat * c.ksat)
CALL montre(14, 33, 6, r.ksat$)
CALL ecrit(15, 10, 8, 4, u.beta)
CALL ecrit(15, 20, 8, 4, s.beta)
CALL ecrit(11, 50, 8, 4, m * c.m)

```

```

CALL montre(11, 73, 6, r.m$)
CALL ecrit(12, 50, 8, 4, koc * c.koc)
CALL montre(12, 73, 6, r.koc$)
CALL ecrit(13, 50, 8, 4, u.foc * c.foc)
CALL ecrit(13, 60, 8, 4, s.foc * c.foc)
CALL montre(13, 73, 6, r.foc$)
CALL ecrit(14, 50, 8, 4, u.lambda * c.lambda)
CALL ecrit(14, 60, 8, 4, s.lambda * c.lambda)
CALL montre(14, 73, 6, r.lambda$)
CALL montre(18, 18, 10, distribution$)
CALL ecrit(18, 43, 8, 4, z * c.z)
CALL montre(18, 53, 6, r.z$)
CALL ecrit(18, 66, 8, 4, t * c.t)
CALL montre(18, 75, 6, r.t$)
CALL ecrit(19, 26, 8, 4, u.c * c.c)
CALL montre(19, 35, 6, r.c$)
COLOR 7, 0

```

```

'efface les deux lignes de la boite de dialogue
LOCATE 21, 1
PRINT SPACE$(80)
PRINT SPACE$(80)

```

END SUB

```

SUB ecrit (ligne%, colonne%, longueur%, precision%, valeur)
'sous-programme qui formate et ecrit un nombre reel a l'ecran

```

```

'preparation du masque
masque$ = STRING$(longueur% - precision% - 1, 35) + "." +
STRING$(precision%, 35)

```

```

'preparation de l'emplacement
LOCATE ligne%, colonne%, 0
PRINT SPACE$(longueur%)
LOCATE ligne%, colonne%, 0

```

```

'inscription de la valeur
IF valeur <> 0! THEN
  IF valeur < (10 ^ (longueur% - precision% - 1)) THEN
    PRINT USING masque$; valeur
  ELSE
    PRINT USING "#.^^^"; valeur
  END IF
END IF

```

END SUB

```

FUNCTION existe% (nom$, extension$)
'fonction logique qui verifie l'existence d'un fichier (reponse: oui/non)

'assemblage du nom complet du fichier
cherche$ = UCASE$(LEFT$(nom$ + SPACE$(8), 8) + " " + LEFT$(extension$,
3))

'on capture le repertoire courant dans un fichier temporaire
SHELL "DIR > dir.tmp"

'on ouvre le fichier repertoire pour la recherche
numero% = FREEFILE
OPEN "dir.tmp" FOR INPUT AS #numero%

'on y cherche le fichier
trouve% = non
WHILE NOT (EOF(numero%) OR trouve)
    LINE INPUT #numero%, ligne$
    IF cherche$ = LEFT$(ligne$, 12) THEN trouve% = oui
WEND
existe% = trouve%

'on ferme et detruit le fichier repertoire temporaire
CLOSE #numero%
KILL "dir.tmp"

```

END FUNCTION

SUB fichiers

'sous-programme de gestion des fichiers de minipest

```

'description du menu
DIM c$(5), a$(5)
c$(1) = "Lire"
c$(2) = "Nom"
c$(3) = "Sauver"
c$(4) = "Répertoire"
c$(5) = "Menu"
a$(1) = "Lire un fichier .MIN"
a$(2) = "Nommer/renommer le fichier"
a$(3) = "Sauver le fichier"
a$(4) = "Répertoire des fichiers .MIN"
a$(5) = "Retour au menu principal"

'selection et execution des options
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin

```



```

PRINT " -----
PRINT " q m
PRINT " n Koc
PRINT " rho Foc
PRINT " Ksat lambda
PRINT " beta
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT " CALCULS"
PRINT " Distributions: Profondeur: Temps:
PRINT " Concentration moyenne:"
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 223)

END SUB

FUNCTION gamma (x)
'Fonction Gamma
'Selon formules 6.1.16 et 6.1.36 de Abramowitz et Stegun

'initialisations
  STATIC n%, z, y, i%
  n% = INT(x)
  z = x - n%
  y = 1!

'recurrence
  IF x > 1! THEN
    FOR i% = 1 TO n% - 1
      y = y * (i% + z)
    NEXT i%
  ELSEIF x > 0! THEN
    y = 1! / x
  ELSE ERROR 5
  END IF

'polynome
  gamma = y * (1! - .577191652# * z + .988205891# * z * z - .897056937#
* z * z * z + .918206857# * z * z * z * z - .7567040779999999# * z * z * z
* z * z + .482199394# * z * z * z * z * z * z - .193527818# * z * z * z *
z * z * z * z + _

```

.035868343# * z * z)

END FUNCTION

SUB graphe

'sous-programme pour demander les graphiques

'initialisations

DIM x(200), y(200), legende\$(3)

'description du menu

DIM c\$(3), a\$(3)

c\$(1) = "C vs T"

c\$(2) = "C vs Z"

c\$(3) = "Menu"

a\$(1) = "Graphique de la concentration moyenne en fonction du temps"

a\$(2) = "Graphique de la concentration moyenne en fonction de la
profondeur"

a\$(3) = "Retour au menu principal"

'selection et execution

fin = non

cas% = 1

WHILE NOT fin

CALL menu(3, cas%, c\$(), a\$())

SELECT CASE cas%

CASE 0

fin = oui

CASE 1

IF verifie THEN

'Calcul de la courbe

CALL montre(21, 5, 70, "Calculs en cours")

CALL combine

FOR i% = 1 TO 200

x(i%) = i% * t / 50!

y(i%) = c.c * modele(m, (x(i%)), z, u.nu, s.nu,

u.lambda, s.lambda)

x(i%) = x(i%) * c.t

NEXT i%

'Tracage de la courbe

legende\$(1) = "Concentration en fonction du temps à

une profondeur de " + STR\$(z * c.z) + " " + r.z\$

legende\$(2) = "Temps (" + r.t\$ + ")"

legende\$(3) = "Concentration moyenne (" + r.c\$ + ")"

CALL graphique(200, x(), y(), legende\$())

CALL fond

CALL ecran

END IF

```

CASE 2
  IF verifie THEN
    'calcul de la courbe
    CALL montre(21, 5, 70, "Calculs en cours")
    CALL combine
    FOR i% = 1 TO 200
      x(i%) = i% * z / 50!
      y(i%) = c.c * modele(m, t, (x(i%)), u.nu, s.nu,
u.lambda, s.lambda)
      x(i%) = c.z * x(i%)
    NEXT i%
    'Tracage de la courbe
    legende$(1) = "Concentration en fonction de la
profondeur après " + STR$(t * c.t) + " " + r.t$
    legende$(2) = "Profondeur (" + r.z$ + ")"
    legende$(3) = "Concentration moyenne (" + r.c$ + ")"
    CALL graphique(200, x(), y(), legende$())
    CALL fond
    CALL ecran
  END IF
CASE 3
  fin = oui
CASE ELSE
END SELECT
WEND

END SUB

SUB graphique (points%, x(), y(), legende$())
'sous-programme qui trace un beau graphique

'recherche les extremes
xmax = 1.9 * x(50)
ymax = 0!
FOR i% = 1 TO points%
  IF y(i%) > ymax THEN
    ymax = y(i%)
    marque% = i%
  END IF
NEXT i%

'cas des courbes nulles
IF ymax = 0! THEN
  CALL montre(21, 5, 74, "Concentrations nulles, changez les
paramètres de calcul")
  CALL attend
  EXIT SUB
END IF

```

```

'arrondit les extremes
xmax = arrondit(xmax)
ymax = arrondit(ymax)

'constantes definissant la position du graphique
CONST xhaut% = 105, yhaut% = 43
CONST xbas% = 605, ybas% = 163

'passe au mode graphique et fait le cadre
SCREEN 2
LINE (xhaut, yhaut)-(xbas, ybas), , B

'fait le cadrille
FOR i% = xhaut TO xbas STEP (xbas - xhaut) / 10
    LINE (i%, yhaut)-(i%, ybas), , , &H8888
NEXT i%
FOR i% = yhaut TO ybas STEP (ybas - yhaut) / 10
    LINE (xhaut, i%)-(xbas, i%), , , &H8080
NEXT i%

'ecrit les titres
LOCATE 2, 42
PRINT "MINIPEST";
LOCATE 4, 46 - LEN(legende$(1)) / 2
PRINT legende$(1);
LOCATE 24, 46 - LEN(legende$(2)) / 2
PRINT legende$(2);
CALL penche(15, 100 + LEN(legende$(3)) * 2, legende$(3))

'ecrit les valeurs sur les axes
LOCATE 22, 13
PRINT "0";
LOCATE 22, 22
PRINT USING "###.##"; xmax / 5!;
LOCATE 22, 35
PRINT USING "###.##"; 2! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 48
PRINT USING "###.##"; 3! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 61
PRINT USING "###.##"; 4! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 74
PRINT USING "###.##"; xmax;
LOCATE 21, 11
PRINT "0"
LOCATE 18, 6
PRINT USING "###.##"; ymax / 5!;
LOCATE 15, 6

```

```

PRINT USING "###.##"; 2! * ymax / 5!;
LOCATE 12, 6
PRINT USING "###.##"; 3! * ymax / 5!;
LOCATE 9, 6
PRINT USING "###.##"; 4! * ymax / 5!;
LOCATE 6, 6
PRINT USING "###.##"; ymax;

```

```

'trace la courbe
VIEW (xhaut, yhaut)-(xbas, ybas)
WINDOW (0!, 0!)-(xmax, ymax)
PSET (0!, 0!)
FOR i% = 1 TO points%
    LINE (x(i% - 1), y(i% - 1))- (x(i%), y(i%))
NEXT i%
LINE -(x(points%), 0!)

```

```

'colore l'aire sous la courbe
PAINT (x(marque%), y(marque%) / 2!), CHR$(170) + CHR$(85)

```

```

'pause pour observer le graphique
CALL attend

```

```

'revient au mode texte
SCREEN 0

```

END SUB

SUB lecture

'lecture d'un fichier de donnees

```

'verification de l'existence du fichier
IF NOT existe(fichier$, "MIN") THEN
    CALL montre(21, 1, 60, "Fichier " + fichier$ + " introuvable")
    CALL attend
    fichier$ = ""
    EXIT SUB
END IF

```

```

'ouverture du fichier
OPEN fichier$ + ".MIN" FOR INPUT AS #1

```

```

'lecture du fichier
INPUT #1, pesticide$
INPUT #1, site$
INPUT #1, titre$
INPUT #1, q, c.q, r.q$
INPUT #1, u.n, s.n, c.n, r.n$

```

```

INPUT #1, u.rho, s.rho, c.rho, r.rho$
INPUT #1, u.ksat, s.ksat, c.ksat, r.ksat$
INPUT #1, u.beta, s.beta
INPUT #1, m, c.m, r.m$
INPUT #1, koc, c.koc, r.koc$
INPUT #1, u.foc, s.foc, c.foc, r.foc$
INPUT #1, u.lambda, s.lambda, c.lambda, r.lambda$
INPUT #1, distribution$
INPUT #1, z, c.z, r.z$
INPUT #1, t, c.t, r.t$
INPUT #1, u.c, c.c, r.c$

```

```

'fermeture du fichier
CLOSE #1

```

END SUB

```

SUB menu (max%, cas%, clef$(), aide$())
'sous-programme de menu a la 1-2-3

```

```

'boucle d'interrogation
fin = non
WHILE NOT fin

```

```

'libere les deux lignes du bas
LOCATE 24, 1, 0
PRINT SPACE$(80);
LOCATE 25, 1, 0
PRINT SPACE$(80);

```

```

'ecrit le menu
LOCATE 24, 5, 0
FOR i% = 1 TO max%
    IF i% = cas% THEN COLOR 0, 7
    PRINT clef$(i%);
    COLOR 7, 0
    PRINT " ";
NEXT i%
LOCATE 25, 5, 0
PRINT aide$(cas%);

```

```

'boucle de lecture de la commande
DO
    touche$ = INKEY$
LOOP WHILE touche$ = ""

```

```

'execution de la commande
SELECT CASE touche$

```

```

CASE CHR$(0) + CHR$(77)          'cas a droite
  cas% = cas% + 1
  IF cas% > max% THEN cas% = 1
CASE CHR$(0) + CHR$(75)          'cas a gauche
  cas% = cas% - 1
  IF cas% = 0 THEN cas% = max%
CASE CHR$(13)                    'choix final
  fin = oui
CASE CHR$(27)                    'retour au menu precedent
  cas% = 0
  fin = oui
CASE ELSE                        'identifie par la lettre
  touche$ = UCASE$(touche$)
  FOR i% = 1 TO max%
    IF touche$ = UCASE$(LEFT$(clef$(i%), 1)) THEN
      cas% = i%
      fin = oui
      EXIT FOR
    END IF
  NEXT i%
END SELECT

'libere les deux lignes du bas
LOCATE 24, 1, 0
PRINT SPACES$(80);
LOCATE 25, 1, 0
PRINT SPACES$(80);
WEND

```

END SUB

FUNCTION modele (masse, temps, profondeur, mu.nu, sigma.nu, mu.lambda, sigma.lambda)

'fonction de calcul de la concentration moyenne

'le calcul depend de la distribution utilisee pour les parametres
 SELECT CASE distribution\$

```

'cas de la distribution Gamma
CASE "Gamma"
  'preparation des variables accessoires
  a.nu = mu.nu / sigma.nu / sigma.nu
  b.nu = a.nu * mu.nu
  IF b.nu > 35! THEN
    CALL montre(21, 5, 74, "Paramètres trop peu variables,
    utilisez plutôt la distribution Normale")
    CALL attend
    modele = 0!
  END IF
END CASE

```

```

EXIT FUNCTION
END IF
a.lambda = mu.lambda / sigma.lambda / sigma.lambda
b.lambda = a.lambda * mu.lambda

'calcul par le modele analytique
temporaire = EXP(-a.nu * profondeur / temps) * (1! + temps /
a.lambda) ^ (-b.lambda)
modele = temporaire * masse / profondeur / gamma(b.nu) * (a.nu
* profondeur / temps) ^ b.nu

'cas de la distribution normale
CASE "Normale"
temporaire = (profondeur / temps - mu.nu) ^ 2 / 2! / sigma.nu
^ 2
temporaire = temporaire + mu.lambda * temps - sigma.lambda ^ 2
/ 2! * temps ^ 2
IF temporaire < -88.029 THEN
CALL montre(21, 5, 74, "Paramètres trop variables,
utilisez plutôt la distribution Gamma")
CALL attend
modele = 0!
EXIT FUNCTION
END IF
modele = masse / temps / sigma.nu / SQR(2! * pi) * EXP(-
temporaire)

CASE ELSE
ERROR 5
END SELECT

END FUNCTION

SUB modifie (moyenne, ecart.type, coefficient, symbole$, base$,
identification$)
'sous-programme pour modifier les parametres de simulation

'recherche des unites valides pour le parametre considere
IF NOT coefficient = invalide THEN
DIM c$(10), a$(10), coef(10)
WHILE NOT si$(i%) = "FIN"
i% = i% + 1
IF si$(i%) = base$ THEN
j% = j% + 1
c$(j%) = autre$(i%)
a$(j%) = "Unités de base : " + base$
coef(j%) = rapport(i%)
END IF

```

```

WEND

'selection de l'unité voulue
CALL montre(21, 5, 30, "Selection des unités")
CALL montre(22, 5, 40, "Paramètre :" + identification$)
cas% = 1
CALL menu(j%, cas%, c$(), a$())
IF cas% = 0 THEN cas% = 1
coefficient = coef(cas%)
symbole$ = c$(cas%)
CALL ecran
ELSE
coefficient = 1!
symbole$ = ""
END IF

'declaration de la valeur moyenne
IF NOT moyenne = invalide THEN
LOCATE 21, 5
IF NOT ecart.type = invalide THEN
PRINT "Valeur de la moyenne du parametre " + identification$ +
" : ";
ELSE
PRINT "Valeur du parametre " + identification$ + " : ";
END IF
INPUT reponse$
reponse = nombre(reponse$)
IF reponse > 0! THEN moyenne = reponse / coefficient
CALL ecran
END IF

'declaration de l'écart type
IF NOT ecart.type = invalide THEN
LOCATE 21, 5
PRINT "Valeur de l'écart type du paramètre " + identification$ + "
: ";
INPUT reponse$
reponse = nombre(reponse$)
IF reponse > 0! THEN ecart.type = reponse / coefficient
CALL ecran
END IF

END SUB

SUB montre (ligne%, colonne%, longueur%, chose$)
'sous-programme qui affiche une variable caractere

'preparation de l'emplacement

```

```

LOCATE ligne%, colonne%, 0
PRINT SPACE$(longueur%)
LOCATE ligne%, colonne%, 0

'impression de la chose
PRINT RIGHT$(chose$, longueur%)

```

END SUB

FUNCTION nombre (chaine\$)

'fonction qui transforme une variable caractere en nombre

```

temporaire$ = ""
valide$ = "0123456789.-"
longueur% = LEN(chaine$)
FOR i% = 1 TO longueur%
    c$ = MID$(chaine$, i%, 1)
    IF INSTR(valide$, c$) <> 0 THEN
        temporaire$ = temporaire$ + c$
    END IF
NEXT i%
nombre = VAL(temporaire$)

```

END FUNCTION

SUB noms

'sous-programme pour modifier les noms de la simulation

```

'description du menu
DIM c$(4), a$(4)
c$(1) = "Pesticide"
c$(2) = "Site"
c$(3) = "Titre"
c$(4) = "Menu"
a$(1) = "Nommer/renommer le pesticide"
a$(2) = "Nommer/renommer le site"
a$(3) = "Donner un titre à la simulation"
a$(4) = "Retour au menu principal"

```

```

'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
    CALL menu(4, cas%, c$(), a$())
    SELECT CASE cas%
        CASE 0
            fin = oui
        CASE 1

```



```

SUB penche (x%, y%, mot$)
'sous-programme pour ecrire du texte penche en mode graphique

'ecrit le prototype droit sur la derniere ligne
LOCATE 25, 1
PRINT mot$;

'transpose une image penchee du prototype aux coordonnees x,y
FOR ligne% = 0 TO 7
  FOR colonne% = 0 TO LEN(mot$) * 8
    IF POINT(colonne%, 199 - ligne%) > 0 AND POINT(colonne% + 1,
199 - ligne%) > 0 THEN
      PSET (x% - ligne% * 2, y% - colonne% / 2)
      PSET (x% - ligne% * 2 + 1, y% - colonne% / 2)
    END IF
  NEXT colonne%
NEXT ligne%

'efface le prototype
LINE (0, 192)-(639, 199), 0, BF

END SUB

FUNCTION question$ (interrogation$, longueur%)
'interrogation avec reponse alphanumerique

DO
  LOCATE 21, 1
  PRINT interrogation$;
  INPUT reponse$
  reponse$ = LTRIM$(reponse$)
  reponse$ = LEFT$(reponse$, longueur%)
LOOP WHILE reponse$ = ""
question$ = reponse$

END FUNCTION

SUB reaction
'sous-programme pour modifier les parametres de reaction

'reinitialise la concentration moyenne
u.c = 0!

'description du menu
DIM c$(5), a$(5)
c$(1) = "m"
c$(2) = "Koc"
c$(3) = "Foc"

```

```

c$(4) = "lambda"
c$(5) = "Simule"
a$(1) = "Masse appliquée"
a$(2) = "Coefficient de partition sur le carbone organique"
a$(3) = "Fraction de carbone organique"
a$(4) = "Coefficient de dégradation"
a$(5) = "Simule et retourne au menu des paramètres"

'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
  CALL menu(5, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      CALL modifie(m, invalide, c.m, r.m$, "kg/m2", c$(1))
      CALL ecran
    CASE 2
      CALL modifie(koc, invalide, c.koc, r.koc$, "m3/kg", c$(2))
      CALL ecran
    CASE 3
      CALL modifie(u.foc, s.foc, c.foc, r.foc$, "kg/kg", c$(3))
      CALL ecran
    CASE 4
      CALL modifie(u.lambda, s.lambda, c.lambda, r.lambda$,
"1/s", c$(4))
      CALL ecran
    CASE 5
      fin = oui
    CASE ELSE
  END SELECT
WEND

'calcul de la concentration moyenne
IF verifie THEN
  CALL combine
  u.c = modele(m, t, z, u.nu, s.nu, u.lambda, s.lambda)
  CALL ecran
END IF

END SUB

SUB sauve
'sous-programme pour sauver un fichier MINIPEST

```

```

'verification de l'existence du fichier
IF existe(fichier$, "MIN") THEN
    accord$ = question$("Fichier déjà existant, d'accord pour
remplacer (O/N) ", 1)
    IF NOT UCASE$(accord$) = "O" THEN
        EXIT SUB
    END IF
END IF

```

```

'ouverture du fichier pour ecrire
OPEN fichier$ + ".MIN" FOR OUTPUT AS #1

```

```

'écriture du fichier
WRITE #1, pesticide$
WRITE #1, site$
WRITE #1, titre$
WRITE #1, q, c.q, r.q$
WRITE #1, u.n, s.n, c.n, r.n$
WRITE #1, u.rho, s.rho, c.rho, r.rho$
WRITE #1, u.ksat, s.ksat, c.ksat, r.ksat$
WRITE #1, u.beta, s.beta
WRITE #1, m, c.m, r.m$
WRITE #1, koc, c.koc, r.koc$
WRITE #1, u.foc, s.foc, c.foc, r.foc$
WRITE #1, u.lambda, s.lambda, c.lambda, r.lambda$
WRITE #1, distribution$
WRITE #1, z, c.z, r.z$
WRITE #1, t, c.t, r.t$
WRITE #1, u.c, c.c, r.c$

```

```

'fermeture du fichier
CLOSE #1

```

```

END SUB

```

```

SUB transport

```

```

'sous-programme pour modifier les parametres de transport

```

```

'reinitialise la concentration moyenne
u.c = 0!

```

```

'description du menu
DIM c$(6), a$(6)
c$(1) = "q"
c$(2) = "n"
c$(3) = "rho"
c$(4) = "Ksat"
c$(5) = "beta"

```

```

c$(6) = "Simule"
a$(1) = "Flux hydrique (débit)"
a$(2) = "Porosité"
a$(3) = "Densité brute"
a$(4) = "Coefficient de perméabilité à saturation"
a$(5) = "Coefficient beta"
a$(6) = "Simule et retourne au menu des paramètres"

'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
  CALL menu(6, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      CALL modifie(q, invalide, c.q, r.q$, "m/s", c$(1))
      CALL ecran
    CASE 2
      CALL modifie(u.n, s.n, c.n, r.n$, "m3/m3", c$(2))
      CALL ecran
    CASE 3
      CALL modifie(u.rho, s.rho, c.rho, r.rho$, "kg/m3", c$(3))
      CALL ecran
    CASE 4
      CALL modifie(u.ksat, s.ksat, c.ksat, r.ksat$, "m/s",
c$(4))
      CALL ecran
    CASE 5
      CALL modifie(u.beta, s.beta, invalide, "", "", c$(5))
      CALL ecran
    CASE 6
      fin = oui
    CASE ELSE
  END SELECT
WEND

'calcul de la concentration moyenne
IF verifie THEN
  CALL combine
  u.c = modele(m, t, z, u.nu, s.nu, u.lambda, s.lambda)
  CALL ecran
END IF

END SUB

FUNCTION verifie%

```

'fonction qui verifie si les parametres sont initialises

```
verifie% = non
IF q = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.n = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.n = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.rho = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.rho = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.ksat = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.ksat = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.beta = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.beta = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF m = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF koc = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.foc = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.foc = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF u.lambda = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF s.lambda = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF NOT (distribution$ = "Normale" OR distribution$ = "Gamma") THEN
EXIT FUNCTION
IF z = 0! THEN EXIT FUNCTION
IF t = 0! THEN EXIT FUNCTION
verifie% = oui

END FUNCTION
```

ANNEXE D

Le logiciel PESTE

Il s'agit d'un logiciel interactif permettant de préparer et d'effectuer une simulation numérique stochastique du destin des pesticides dans la zone vadose. Ce logiciel, plus complet que MINIPEST, permet de simuler sur une base journalière plusieurs processus de transport et de dégradation.

La partie déterministe du modèle est basée sur une discrétisation par différences finies qui comporte dix éléments verticaux, soit cinq dans la zone racinaire et cinq dans la zone profonde. Les équations utilisées sont données au chapitre 6.

PESTE est composé de menus interactifs similaires à ceux de MINIPEST. Leur fonctionnement est identique, mais ils sont plus nombreux. Ainsi, les données concernant le site, le pesticide et la simulation sont traitées dans des écrans différents et peuvent être sauvées dans des fichiers différents. Le menu d'analyse des résultats permet de voir des graphiques de la concentration en fonction du temps ou des graphiques de la distribution des concentrations.

PESTE peut servir à vérifier l'effet des conditions météorologiques en utilisant différents fichiers de données météorologiques ou en changeant les dates d'application.

Listing du logiciel

```
'Programme PESTE
'Simulation stochastique numerique des pesticides
'dans la zone vadose

'Par Denis Isabel
'INRS-Eau
'Mars 1988

'liste des sous-programmes
DECLARE SUB modele ()
DECLARE SUB simulation ()
DECLARE SUB menu (max%, cas%, clef$(), aide$())
DECLARE SUB fichiers ()
DECLARE SUB resultats ()
DECLARE SUB panneau ()
DECLARE SUB attend ()
DECLARE SUB menu.site ()
DECLARE SUB menu.pesticide ()
DECLARE SUB menu.simulation ()
DECLARE SUB lit.site ()
DECLARE SUB sauve.site ()
DECLARE SUB ecran.principal ()
DECLARE SUB fond.principal ()
DECLARE FUNCTION question$ (interrogation$, longueur%)
DECLARE SUB fond.site ()
DECLARE SUB ecran.site ()
DECLARE SUB simule ()
DECLARE SUB site ()
DECLARE SUB pesticide ()
DECLARE FUNCTION existe% (nom$, extension$)
DECLARE SUB lit.pesticide ()
DECLARE SUB lit.simulation ()
DECLARE FUNCTION nombre! (chaine$)
DECLARE SUB modifie (moyenne!, ecart.type!, coefficient!, symbole$, base$,
identification$)
DECLARE SUB ecrit (ligne%, colonne%, longueur%, precision%, valeur!)
DECLARE SUB change.site ()
DECLARE SUB montre (ligne%, colonne%, longueur%, chose$)
DECLARE SUB date (message$, annee%, mois%, jour%)
DECLARE SUB ecran.simulation ()
DECLARE SUB sauve.simulation ()
DECLARE SUB change.simulation ()
DECLARE SUB fond.simulation ()
DECLARE SUB sauve.pesticide ()
DECLARE SUB change.pesticide ()
DECLARE SUB fond.pesticide ()
```

```

DECLARE SUB ecran.pesticide ()
DECLARE SUB distribue (moyenne!, ecart!, parametre!())
DECLARE FUNCTION inverse.normale! (moyenne!, ecart.type!, probabilite!)
DECLARE SUB preparation ()
DECLARE FUNCTION inverse.lognormale! (moyenne!, ecart.type!, probabilite!)
DECLARE SUB melange (parametre!())
DECLARE SUB fond.execution ()
DECLARE SUB ecran.execution ()
DECLARE SUB penche (x%, y%, mot$)
DECLARE FUNCTION arrondit! (x!)
DECLARE SUB graphique (points%, x!(), y!(), y2!(), y3!(), legende$())

```

'Constantes

```

CONST non% = 0, oui% = NOT non 'constantes logiques
CONST pi = 3.1415926536# 'le nombre PI
CONST racine% = 1, sol% = 2 'indice des parametres du site
CONST elements% = 10 'nombre d'elements verticaux
CONST ne.racine% = elements% / 2
CONST ne.sol% = elements% - ne.racine%
CONST realisations% = 30 'nombre de realisations stochastiques
CONST dt = 86400! 'duree d'une journee en secondes (pas de
temps)
CONST invalide! = 123456789 'indique un argument invalide
CONST rg = 8.3 'constante des gazs

```

'Parametres du pesticide

```

' c.=coefficient d'unite
' r.=symbole d'unite
COMMON SHARED nom.pesticide$ 'nom du pesticide
COMMON SHARED solubilite, c.solubilite
COMMON SHARED r.solubilite$ 'solubilite
COMMON SHARED koc, c.koc, r.koc$ 'coef. d'adsorption sur la m.o.
COMMON SHARED lambda, c.lambda, r.lambda$ 'coef. de degradation a 20 C
COMMON SHARED kp, c.kp, r.kp$ 'coef. de photodecomposition
COMMON SHARED ea, c.ea, r.ea$ 'energie d'activation
COMMON SHARED ca 'coef. d'assimilation

```

'Parametres du site

```

' u.=moyenne
' s.=ecart type
' c.=coefficient d'unite
' r.=symbole d'unite
COMMON SHARED nom.site$
DIM SHARED u.n(2), s.n(2), c.n, r.n$ 'porosite
DIM SHARED u.rho(2), s.rho(2), c.rho, r.rho$ 'densite du sol sec
DIM SHARED u.ksat(2), s.ksat(2), c.ksat, r.ksat$ 'permeabilite
DIM SHARED u.theta(2), s.theta(2), c.theta, r.theta$ 'capacite de
retention

```

DIM SHARED u.foc(2), s.foc(2), c.foc, r.foc\$ organique	'teneur en carbone
COMMON SHARED cv variation de la degradation	'coefficient de
COMMON SHARED racines, c.racines, r.racines\$ zone racinaire	'profondeur de la
COMMON SHARED nappe, c.nappe, r.nappe\$ nappe	'profondeur de la
COMMON SHARED cet	'coeff. d'ETP
COMMON SHARED cdrs	'coeff. de drainage
COMMON SHARED drain, c.drain, r.drain\$ drains	'profondeur des

'Parametres de la simulation

COMMON SHARED fichier.simulation\$
COMMON SHARED nom.simulation\$
COMMON SHARED fichier.pesticide\$
COMMON SHARED fichier.site\$
COMMON SHARED fichier.meteo\$
COMMON SHARED annee.debut%
COMMON SHARED mois.debut%
COMMON SHARED jour.debut%
COMMON SHARED annee.fin%
COMMON SHARED mois.fin%
COMMON SHARED jour.fin%
COMMON SHARED fois%
DIM SHARED annee.application%(5)
DIM SHARED mois.application%(5)
DIM SHARED jour.application%(5)
DIM SHARED quantite(5)
COMMON SHARED c.quantite, r.quantite\$

'Variables meteorologiques

COMMON SHARED nom.meteo\$
COMMON SHARED annee.meteo%
COMMON SHARED mois.meteo%
COMMON SHARED jour.meteo%
COMMON SHARED eau
COMMON SHARED evaporation
COMMON SHARED temperature.racine
COMMON SHARED temperature.sol

'Variables d'etat

DIM SHARED ruissellement(realizations)
DIM SHARED masse(realizations)
DIM SHARED q(elements, realizations)
DIM SHARED theta(elements, realizations)
DIM SHARED retention(elements, realizations)

```

DIM SHARED dz(elements)
DIM SHARED porosite(elements, realisations)
DIM SHARED permeabilite(elements, realisations)
DIM SHARED beta(elements, realisations)
DIM SHARED etp(elements)
DIM SHARED concentration(elements, realisations)
DIM SHARED rho(elements, realisations)
DIM SHARED kd(elements, realisations)
DIM SHARED lambda.brut(elements, realisations)
DIM SHARED lambda.corrige(elements, realisations)
DIM SHARED temperature(elements)
DIM SHARED etr(elements, realisations)
DIM SHARED cdr(elements)
DIM SHARED vieux(elements, realisations)
DIM SHARED vieille(elements, realisations)
DIM SHARED ancienne(elements, realisations)

```

```
'variables de bilan
```

```

COMMON SHARED moy.flux
COMMON SHARED ecart.flux
COMMON SHARED moy.masse
COMMON SHARED moy.racine
COMMON SHARED ecart.racine
COMMON SHARED moy.nappe
COMMON SHARED ecart.nappe

```

```
'preparation des coefficients d'unites
```

```

DIM SHARED si$(100), autre$(100), rapport(100)
OPEN "unites.dat" FOR INPUT AS #1
WHILE NOT EOF(1)
    i% = i% + 1
    INPUT #1, si$(i%), autre$(i%), rapport(i%)
WEND
si$(i% + 1) = "FIN"
CLOSE #1

```

```
'affichage du panneau de bienvenue
```

```

CALL panneau
CALL attend

```

```
'description du menu principal
```

```

DIM c$(4), a$(4)
c$(1) = "Fichiers"
c$(2) = "Exécution"
c$(3) = "Résultats"
c$(4) = "Arrêt"
a$(1) = "Gestion des fichiers de PESTE"
a$(2) = "Execution du modèle PESTE"

```

```
a$(3) = "Analyse des résultats du modèle PESTE"  
a$(4) = "Retour à DOS"
```

```
fin = non  
cas% = 1  
WHILE NOT fin  
  CALL menu(4, cas%, c$, a$())  
  SELECT CASE cas%  
    CASE 0  
      fin = oui  
    CASE 1  
      CALL fichiers  
    CASE 2  
      CALL modele  
    CASE 3  
      CALL resultats  
      CALL panneau  
    CASE 4  
      fin = oui  
    CASE ELSE  
  END SELECT  
WEND  
CLS  
SYSTEM  
  
'fin du programme  
END
```

```
FUNCTION arrondit (x)  
'sous-programme qui arrondit a des multiples decimaux de 1, 2 ou 5  
  
  'ordre de grandeur  
  puissance% = INT(LOG(x) / LOG(10))  
  
  'facteur brut  
  facteur = x / 10 ^ puissance%  
  
  'facteur arrondi  
  SELECT CASE facteur  
    CASE IS > 5!  
      facteur = 10!  
    CASE IS > 2!  
      facteur = 5!  
    CASE ELSE  
      facteur = 2!  
  END SELECT
```

```
'nombre arrondi  
arrondi = facteur * 10 ^ puissance%
```

```
END FUNCTION
```

```
SUB attend
```

```
'sous-programme qui bloque l'ecran en attendant une touche
```

```
WHILE INKEY$ = ""  
WEND
```

```
END SUB
```

```
SUB change.pesticide
```

```
'sous-programme pour modifier les parametre du pesticide
```

```
'description du menu
```

```
DIM c$(7), a$(7)
```

```
c$(1) = "Nom"
```

```
c$(2) = "Solubilité"
```

```
c$(3) = "Koc"
```

```
c$(4) = "Lambda"
```

```
c$(5) = "Kp"
```

```
c$(6) = "Ea"
```

```
c$(7) = "Retour"
```

```
a$(1) = "Nom du pesticide"
```

```
a$(2) = "Solubilité"
```

```
a$(3) = "Coefficient d'adsorption sur le carbone organique"
```

```
a$(4) = "Coefficient de dégradation à 20°C"
```

```
a$(5) = "Coefficient de dégradation à la surface"
```

```
a$(6) = "Energie d'activation"
```

```
a$(7) = "Retour au menu du fichier pesticide"
```

```
'selection et execution
```

```
fin = non
```

```
cas% = 1
```

```
WHILE NOT fin
```

```
CALL menu(7, cas%, c$(), a$())
```

```
SELECT CASE cas%
```

```
CASE 0
```

```
fin = oui
```

```
CASE 1
```

```
nom.pesticide$ = question$("Nouveau nom du pesticide : ", 60)
```

```
CALL ecran.pesticide
```

```
CASE 2
```

```
CALL modifie(solubilite, invalide, c.solubilite,  
r.solubilite$, "kg/m3", a$(2))
```

```
CALL ecran.pesticide
```

```

CASE 3
  CALL modifie(koc, invalide, c.koc, r.koc$, "m3/kg", a$(3))
  CALL ecran.pesticide
CASE 4
  CALL modifie(lambda, invalide, c.lambda, r.lambda$, "1/s",
a$(4))
  CALL ecran.pesticide
CASE 5
  CALL modifie(kp, invalide, c.kp, r.kp$, "1/s", a$(5))
  CALL ecran.pesticide
CASE 6
  CALL modifie(ea, invalide, c.ea, r.ea$, "J/mole", a$(6))
  CALL ecran.pesticide
CASE 7
  fin = oui
CASE ELSE
END SELECT
WEND
END SUB

```

```

SUB change.simulation
'sous-programme pour modifier les parametre de la simulation

```

```

'description du menu
DIM c$(9), a$(9)
c$(1) = "Nom"
c$(2) = "Site"
c$(3) = "Pesticide"
c$(4) = "Météo"
c$(5) = "Début"
c$(6) = "Fin"
c$(7) = "Ajoute"
c$(8) = "Enlève"
c$(9) = "Retour"
a$(1) = "Nom de la simulation"
a$(2) = "Nom du fichier site (.SIT)"
a$(3) = "Nom du fichier pesticide (.PES)"
a$(4) = "Nom du fichier météo (.MET)"
a$(5) = "Date du début de la simulation"
a$(6) = "Date de la fin de la simulation"
a$(7) = "Ajouter une application"
a$(8) = "Enlever une application"
a$(9) = "Retour au menu du fichier de la simulation"

```

```

'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin

```

```

CALL menu(9, cas%, c$, a$())
SELECT CASE cas%
  CASE 0
    fin = oui
  CASE 1
    nom.simulation$ = question$("Nouveau nom de la simulation : ",
60)
    CALL ecran.simulation
  CASE 2
    fichier.site$ = question$("Nom du fichier site : ", 8)
    CALL ecran.simulation
  CASE 3
    fichier.pesticide$ = question$("Nom du fichier pesticide : ",
8)
    CALL ecran.simulation
  CASE 4
    fichier.meteo$ = question$("Nom du fichier météo : ", 8)
    CALL ecran.simulation
  CASE 5
    CALL date("Date du début de la simulation", annee.debut%,
mois.debut%, jour.debut%)
    CALL ecran.simulation
  CASE 6
    CALL date("Date de la fin de la simulation", annee.fin%,
mois.fin%, jour.fin%)
    CALL ecran.simulation
  CASE 7
    fois% = fois% + 1
    CALL date("Date de l'application", annee.application%(fois%),
mois.application%(fois%), jour.application%(fois%))
    CALL modifie(quantite(fois%), invalide, c.quantite,
r.quantite$, "kg/m2", "Quantité appliquée à cette date")
    CALL ecran.simulation
  CASE 8
    IF fois% > 0 THEN
      IF fois% > 1 THEN correct = non ELSE correct = oui
      WHILE NOT correct
        LOCATE 21, 1
        PRINT SPACE$(80)
        LOCATE 21, 5
        INPUT "Numéro de l'application à enlever: "; enleve%
        IF enleve% > 0 AND enleve% <= fois% THEN correct = oui
      WEND
      fois% = fois% - 1
      FOR i% = enleve% TO fois% - 1
        annee.application%(i%) = annee.application%(i% + 1)
        mois.application%(i%) = mois.application%(i% + 1)
        jour.application%(i%) = jour.application%(i% + 1)

```

```

                quantite(i%) = quantite(i% + 1)
            NEXT i%
            CALL ekran.simulation
        END IF
    CASE 9
        fin = oui
    CASE ELSE
    END SELECT
WEND
END SUB

```

SUB change.site
'sous-programme pour modifier les parametre du site

```

'description du menu
DIM c$(13), a$(13)
c$(1) = "Nom"
c$(2) = "n"
c$(3) = "rho"
c$(4) = "Ksat"
c$(5) = "Theta"
c$(6) = "Foc"
c$(7) = "cv"
c$(8) = "racine"
c$(9) = "nappe"
c$(10) = "Cetp"
c$(11) = "Cdr"
c$(12) = "Drains"
c$(13) = "Retour"
a$(1) = "Nom du site"
a$(2) = "Porosité"
a$(3) = "Densité brute du sol sec"
a$(4) = "Coefficient de perméabilité à saturation"
a$(5) = "Capacité de rétention"
a$(6) = "Teneur en carbone organique"
a$(7) = "Coefficient de variation de la dégradation"
a$(8) = "Profondeur de la zone racinaire"
a$(9) = "Profondeur de la nappe"
a$(10) = "Coefficient d'évapotranspiration"
a$(11) = "Coefficient de drainage"
a$(12) = "Profondeur des drains"
a$(13) = "Retour au menu du fichier site"

```

```

'description du menu secondaire
DIM cc$(2), aa$(2)
cc$(1) = "zone racinaire"
cc$(2) = "zone profonde"
aa$(1) = "Modifier le paramètre dans la zone racinaire"

```

```

aa$(2) = "Modifier le paramètre dans la zone profonde"
choix% = 1

'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
  CALL menu(13, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      nom.site$ = question$("Nouveau nom du site : ", 60)
      CALL ecran.site
    CASE 2
      CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
      SELECT CASE choix%
        CASE 1
          CALL modifie(u.n(racine), s.n(racine), c.n, r.n$,
"m3/m3", c$(2) + " de la zone racinaire")
          CALL ecran.site
        CASE 2
          CALL modifie(u.n(sol), s.n(sol), c.n, r.n$, "m3/m3",
c$(2) + " de la zone profonde")
          CALL ecran.site
        CASE ELSE
          END SELECT
        CASE 3
          CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
          SELECT CASE choix%
            CASE 1
              CALL modifie(u.rho(racine), s.rho(racine), c.rho,
r.rho$, "kg/m3", c$(3) + " de la zone racinaire")
              CALL ecran.site
            CASE 2
              CALL modifie(u.rho(sol), s.rho(sol), c.rho, r.rho$,
"kg/m3", c$(3) + " de la zone profonde")
              CALL ecran.site
            CASE ELSE
              END SELECT
          CASE 4
            CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
            SELECT CASE choix%
              CASE 1
                CALL modifie(u.ksat(racine), s.ksat(racine), c.ksat,
r.ksat$, "m/s", c$(4) + " de la zone racinaire")
                CALL ecran.site
              CASE 2

```

```

CALL modifie(u.ksat(sol), s.ksat(sol), c.ksat, r.ksat$,
"m/s", c$(4) + " de la zone profonde")
CALL ecran.site
CASE ELSE
END SELECT
CASE 5
CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
SELECT CASE choix%
CASE 1
CALL modifie(u.theta(racine), s.theta(racine), c.theta,
r.theta$, "m3/m3", c$(5) + " de la zone racinaire")
CALL ecran.site
CASE 2
CALL modifie(u.theta(sol), s.theta(sol), c.theta,
r.theta$, "m3/m3", c$(5) + " de la zone profonde")
CALL ecran.site
CASE ELSE
END SELECT
CASE 6
CALL menu(2, choix%, cc$(), aa$())
SELECT CASE choix%
CASE 1
CALL modifie(u.foc(racine), s.foc(racine), c.foc,
r.foc$, "kg/kg", c$(6) + " de la zone racinaire")
CALL ecran.site
CASE 2
CALL modifie(u.foc(sol), s.foc(sol), c.foc, r.foc$,
"kg/kg", c$(6) + " de la zone profonde")
CALL ecran.site
CASE ELSE
END SELECT
CASE 7
CALL modifie(cv, invalide, invalide, "", "", a$(7))
CALL ecran.site
CASE 8
CALL modifie(racines, invalide, c.racines, r.racines$, "m",
a$(8))
CALL ecran.site
CASE 9
CALL modifie(nappe, invalide, c.nappe, r.nappe$, "m", a$(9))
CALL ecran.site
CASE 10
CALL modifie(cet, invalide, invalide, "", "", a$(10))
CALL ecran.site
CASE 11
CALL modifie(cdrs, invalide, invalide, "", "", a$(11))
CALL ecran.site
CASE 12

```

```

        CALL modifie(drain, invalide, c.drain, r.drain$, "m", a$(12))
        CALL ecran.site
    CASE 13
        fin = oui
    CASE ELSE
    END SELECT
WEND
END SUB

```

```

SUB date (message$, annee%, mois%, jour%)
'sous-programme pour demander une date particuliere

```

```

'on affiche le message
CALL montre(21, 5, 60, message$)

```

```

'on demande l'annee
correct = non
WHILE NOT correct
    LOCATE 22, 1
    PRINT SPACE$(80)
    LOCATE 22, 1
    INPUT "Année ="; annee%
    IF annee% > 50 AND annee% < 99 THEN correct = oui
WEND

```

```

'on demande le mois
correct = non
WHILE NOT correct
    LOCATE 22, 1
    PRINT SPACE$(80)
    LOCATE 22, 1
    INPUT "Mois ="; mois%
    IF mois% > 0 AND mois% < 13 THEN correct = oui
WEND

```

```

'on demande la journee
correct = non
WHILE NOT correct
    LOCATE 22, 1
    PRINT SPACE$(80)
    LOCATE 22, 1
    INPUT "Jour ="; jour%
    IF jour% > 0 AND jour% < 32 THEN correct = oui
WEND
END SUB

```

```

SUB distribue (moyenne, ecart.type, parametre())
'sous-programme de generation des distribution

```

```

'la loi de distribution utilisee depend du coefficient de variation
varia = ecart.type / moyenne
IF varia < .3 THEN

    'distribution normale
    FOR i% = 1 TO realisations
        probabilite = (i% - .5) / realisations
        parametre(i%) = inverse.normale(moyenne, ecart.type, probabilite)
    NEXT i%
ELSE

    'distribution lognormale
    FOR i% = 1 TO realisations
        probabilite = (i% - .5) / realisations
        parametre(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart.type,
probabilite)
    NEXT i%
END IF

END SUB

SUB ecran.execution
'sous-programme qui affiche les resultats intermediaires

COLOR 15, 0
'donnees generales
CALL montre(4, 20, 50, nom.simulation$)
CALL montre(5, 20, 50, nom.site$)
CALL montre(6, 20, 50, nom.pesticide$)
CALL montre(7, 20, 50, nom.meteo$)
LOCATE 10, 42
PRINT USING "##/##/##"; annee.debut%, mois.debut%, jour.debut%
LOCATE 11, 42
PRINT USING "##/##/##"; annee.meteo%, mois.meteo%, jour.meteo%
LOCATE 15, 42
PRINT USING "##.##### ##.#####"; moy.flux * 8640000!, ecart.flux *
8640000!
LOCATE 16, 42
PRINT USING "##.#####"; moy.masse * 10000!
LOCATE 17, 42
PRINT USING "##.##### ##.#####"; moy.racine * 1000!, ecart.racine *
1000!
LOCATE 18, 42
PRINT USING "##.##### ##.#####"; moy.nappe * 1000!, ecart.nappe *
1000!
COLOR 7, 0

```

END SUB

SUB ecran.pesticide

'sous-programme qui met sur l'ecran les valeurs des parametres du pesticide

```
'affichage des informations en mode BOLD
COLOR 15, 0
fichier.pesticide$ = UCASE$(fichier.pesticide$)
CALL montre(4, 32, 8, fichier.pesticide$)
CALL montre(5, 25, 50, nom.pesticide$)
CALL ecrit(9, 53, 8, 4, solubilite * c.solubilite)
CALL montre(9, 63, 6, r.solubilite$)
CALL ecrit(10, 53, 8, 4, koc * c.koc)
CALL montre(10, 63, 6, r.koc$)
CALL ecrit(11, 53, 8, 4, lambda * c.lambda)
CALL montre(11, 63, 6, r.lambda$)
CALL ecrit(12, 53, 8, 4, kp * c.kp)
CALL montre(12, 63, 6, r.kp$)
CALL ecrit(13, 53, 8, 4, ea * c.ea)
CALL montre(13, 63, 6, r.ea$)
CALL ecrit(14, 53, 8, 4, ca)
COLOR 7, 0
```

```
'efface les deux lignes de la boite de dialogue
LOCATE 21, 1
PRINT SPACE$(80)
PRINT SPACE$(80)
```

END SUB

SUB ecran.simulation

'sous-programme qui met sur l'ecran les valeurs des parametres de la simulation

```
'affichage des informations en mode BOLD
COLOR 15, 0
fichier.simulation$ = UCASE$(fichier.simulation$)
CALL montre(4, 34, 8, fichier.simulation$)
CALL montre(5, 26, 50, nom.simulation$)
CALL montre(8, 37, 8, fichier.site$)
CALL montre(9, 37, 8, fichier.pesticide$)
CALL montre(10, 37, 8, fichier.meteo$)
LOCATE 11, 37
PRINT USING "##/##/##"; annee.debut%, mois.debut%, jour.debut%
LOCATE 12, 37
PRINT USING "##/##/##"; annee.fin%, mois.fin%, jour.fin%
LOCATE 13, 37
```

```

PRINT USING "#"; fois%
LOCATE 15, 1
FOR i% = 1 TO 5
  PRINT SPACE$(80)
NEXT i%
LOCATE 15, 1
format$ = "      Application No: #      Date: ##/##/##      Quantité:
###.#### \      \"
FOR i% = 1 TO fois%
  PRINT USING format$; i%, annee.application%(i%),
mois.application%(i%), jour.application%(i%), quantite(i%) * c.quantite,
r.quantite$
NEXT i%
COLOR 7, 0

```

```

'efface les deux lignes de la boite de dialogue
LOCATE 21, 1
PRINT SPACE$(80)
PRINT SPACE$(80)

```

END SUB

SUB ecran.site

'sous-programme qui met sur l'ecran les valeurs des parametres du site

```

'affichage des informations en mode BOLD
COLOR 15, 0
fichier.site$ = UCASE$(fichier.site$)
CALL montre(4, 27, 8, fichier.site$)
CALL montre(5, 19, 60, nom.site$)
CALL ecrit(9, 18, 8, 4, u.n(racine) * c.n)
CALL ecrit(9, 28, 8, 4, s.n(racine) * c.n)
CALL ecrit(9, 44, 8, 4, u.n(sol) * c.n)
CALL ecrit(9, 54, 8, 4, s.n(sol) * c.n)
CALL montre(9, 69, 6, r.n$)
CALL ecrit(10, 18, 8, 4, u.rho(racine) * c.rho)
CALL ecrit(10, 28, 8, 4, s.rho(racine) * c.rho)
CALL ecrit(10, 44, 8, 4, u.rho(sol) * c.rho)
CALL ecrit(10, 54, 8, 4, s.rho(sol) * c.rho)
CALL montre(10, 69, 6, r.rho$)
CALL ecrit(11, 18, 8, 4, u.ksat(racine) * c.ksat)
CALL ecrit(11, 28, 8, 4, s.ksat(racine) * c.ksat)
CALL ecrit(11, 44, 8, 4, u.ksat(sol) * c.ksat)
CALL ecrit(11, 54, 8, 4, s.ksat(sol) * c.ksat)
CALL montre(11, 69, 6, r.ksat$)
CALL ecrit(12, 18, 8, 4, u.theta(racine) * c.theta)
CALL ecrit(12, 28, 8, 4, s.theta(racine) * c.theta)
CALL ecrit(12, 44, 8, 4, u.theta(sol) * c.theta)

```

```

CALL ecrit(12, 54, 8, 4, s.theta(sol) * c.theta)
CALL montre(12, 69, 6, r.theta$)
CALL ecrit(13, 18, 8, 4, u.foc(racine) * c.foc)
CALL ecrit(13, 28, 8, 4, s.foc(racine) * c.foc)
CALL ecrit(13, 44, 8, 4, u.foc(sol) * c.foc)
CALL ecrit(13, 54, 8, 4, s.foc(sol) * c.foc)
CALL montre(13, 69, 6, r.foc$)
CALL ecrit(14, 51, 8, 4, cv)
CALL ecrit(15, 41, 8, 4, racines * c.racines)
CALL montre(15, 51, 6, r.racines$)
CALL ecrit(16, 41, 8, 4, nappe * c.nappe)
CALL montre(16, 51, 6, r.nappe$)
CALL ecrit(17, 41, 8, 4, cet)
CALL ecrit(18, 41, 8, 4, cdrs)
CALL ecrit(19, 41, 8, 4, drain * c.drain)
CALL montre(19, 51, 6, r.drain$)
COLOR 7, 0

```

```

'efface le sdeux lignes de la boite de dialogue
LOCATE 21, 1
PRINT SPACE$(80)
PRINT SPACE$(80)

```

END SUB

```

SUB ecrit (ligne%, colonne%, longueur%, precision%, valeur)
'sous-programme qui formate et ecrit un nombre reel a l'ecran

```

```

'preparation du masque
masque$ = STRING$(longueur% - precision% - 1, 35) + "." +
STRING$(precision%, 35)

```

```

'preparation de l'emplacement
LOCATE ligne%, colonne%, 0
PRINT SPACE$(longueur%)
LOCATE ligne%, colonne%, 0

```

```

'inscription de la valeur
IF valeur <> 0! THEN
  IF valeur < (10 ^ (longueur% - precision% - 1)) THEN
    PRINT USING masque$; valeur
  ELSE
    PRINT USING "#.^^^^"; valeur
  END IF
END IF

```

END SUB

```

FUNCTION existe% (nom$, extension$)
'fonction logique qui verifie l'existence d'un fichier (reponse: oui/non)

'assemblage du nom complet du fichier
cherche$ = UCASE$(LEFT$(nom$ + SPACE$(8), 8) + " " + LEFT$(extension$,
3))

'on capture le repertoire courant dans un fichier temporaire
SHELL "DIR > dir.tmp"

'on ouvre le fichier repertoire pour la recherche
numero% = FREEFILE
OPEN "dir.tmp" FOR INPUT AS #numero%

'on y cherche le fichier
trouve% = non
WHILE NOT (EOF(numero%) OR trouve)
    LINE INPUT #numero%, ligne$
    IF cherche$ = LEFT$(ligne$, 12) THEN trouve% = oui
WEND
existe% = trouve%

'on signale bruyamment si on ne l'a pas trouve
IF NOT trouve% THEN BEEP

'on ferme et detruit le fichier repertoire temporaire
CLOSE #numero%
KILL "dir.tmp"

```

END FUNCTION

SUB fichiers

```

'sous-programme de gestion des fichiers de PESTE

'description du menu
DIM c$(4), a$(4)
c$(1) = "Site"
c$(2) = "Pesticide"
c$(3) = "Simulation"
c$(4) = "Retour"
a$(1) = "Créer ou modifier un fichier de site"
a$(2) = "Créer ou modifier un fichier de pesticide"
a$(3) = "Créer ou modifier un fichier de simulation"
a$(4) = "Retourner au menu principal"

'selection et execution
fin = non
cas% = 3

```

```

WHILE NOT fin
  CALL menu(4, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      CALL menu.site
    CASE 2
      CALL menu.pesticide
    CASE 3
      CALL menu.simulation
    CASE 4
      fin = oui
    CASE ELSE
  END SELECT
WEND

END SUB

SUB fond.execution
'sous-programme qui ecrit la partie permanente de l'ecran de calcul

CLS
PRINT "
PRINT "          Version 3.1   -   Mars 1988   -   Par Denis Isabel   -
INRS-Eau"
PRINT STRING$(80, 223)
PRINT "      Simulation: "
PRINT "          Site: "
PRINT "      Pesticide: "
PRINT " Station météo: "
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT
PRINT "          Simulation débutée le : "
PRINT "          Actuellement rendue au : "
PRINT
PRINT "          moyenne   ecart-type"
PRINT "          Infiltration :
mm/d"
PRINT "          Masse de pesticide sur le sol :
Kg/ha"
PRINT "          Concentration sous la zone racinaire :
mg/L"
PRINT "          Concentration atteignant la nappe :
mg/L"
PRINT
PRINT

```

```
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 223)
PRINT "Tapez <A> pour suspendre l'exécution ou <S> pour l'abandonner";
```

```
END SUB
```

```
SUB fond.pesticide
```

```
'sous-programme qui ecrit la partie permanente du menu du pesticide
```

```
CLS
```

```
PRINT "                                PESTE"
PRINT "      Version 3.1      -      Mars 1988      -      Par Denis Isabel      -
INRS-Eau"
PRINT STRING$(80, 223)
PRINT "  Fichier de pesticide (.PES): "
PRINT "  Nom du pesticide: "
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT "                                Paramètres du pesticide"
PRINT
PRINT "                                Solubilité:"
PRINT "Coefficient d'adsorption sur le carbone organique:"
PRINT "                                Coefficient de dégradation à 20°C:"
PRINT "                                Coefficient de dégradation à la surface:"
PRINT "                                Energie d'activation:"
PRINT "  Coefficient d'assimilation par la végétation:"
PRINT
PRINT
PRINT
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 223)
END SUB
```

```
SUB fond.simulation
```

```
'sous-programme qui ecrit la partie permanente du menu de la simulation
```

```
CLS
```

```
PRINT "                                PESTE"
PRINT "      Version 3.1      -      Mars 1988      -      Par Denis Isabel      -
INRS-Eau"
PRINT STRING$(80, 223)
PRINT "  Fichier de simulation (.SIM): "
PRINT "  Nom de la simulation: "
PRINT STRING$(80, 205)
```

```

PRINT
PRINT "          Nom du fichier site:"
PRINT "          Nom du fichier pesticide:"
PRINT "          Nom du fichier météo:"
PRINT "    Date du début de la simulation:"
PRINT "    Date de la fin de la simulation:"
PRINT "          Nombre d'applications:"
LOCATE 20, 1
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 223)
END SUB

```

```

SUB fond.site
'sous-programme qui ecrit la partie permanente du menu du site

```

```

CLS
PRINT "          PESTE"
PRINT "    Version 3.1    -    Mars 1988    -    Par Denis Isabel    -
INRS-Eau"
PRINT STRING$(80, 223)
PRINT "    Fichier de site (.SIT): "
PRINT "    Nom du site: "
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT "
          Zone racinaire          Zone profonde"
PRINT "Paramètres          moyenne    écart-type    moyenne    écart-type
unités"
PRINT "    n:"
PRINT "    rho:"
PRINT "    Ksat:"
PRINT "    Theta:"
PRINT "    Foc:"
PRINT "    Coefficient de variation de la dégradation:"
PRINT "    Profondeur de la zone racinaire:"
PRINT "    Profondeur de la nappe souterraine:"
PRINT "    Coefficient d'ETP:"
PRINT "    Coefficient de drainage:"
PRINT "    Profondeur des drains:"
PRINT STRING$(80, 205)
PRINT
PRINT
PRINT STRING$(80, 223)

END SUB

```

```

SUB graphique (points%, x(), y1(), y2(), y3(), legende$())
'sous-programme qui trace un beau graphique

```

```

'recherche les extremes de
xmax = x(points%)
ymax = 0!
FOR i% = 1 TO points%
  IF y1(i%) > ymax THEN ymax = y1(i%)
NEXT i%

'cas des courbes nulles
IF ymax = 0! THEN
  CALL montre(21, 5, 74, "Concentrations nulles, changez les
paramètres de calcul")
  CALL attend
  EXIT SUB
END IF

'arrondit les extremes
xmax = arrondit(xmax)
ymax = arrondit(ymax)

'constantes definissant la position du graphique
CONST xhaut% = 105, yhaut% = 43
CONST xbas% = 605, ybas% = 163

'passe au mode graphique et fait le cadre
SCREEN 2
LINE (xhaut, yhaut)-(xbas, ybas), , B

'fait le cadrille
FOR i% = xhaut TO xbas STEP (xbas - xhaut) / 10
  LINE (i%, yhaut)-(i%, ybas), , , &H8888
NEXT i%
FOR i% = yhaut TO ybas STEP (ybas - yhaut) / 10
  LINE (xhaut, i%)-(xbas, i%), , , &H8080
NEXT i%

'ecrit les titres
LOCATE 2, 44
PRINT "PESTE";
LOCATE 4, 46 - LEN(legende$(1)) / 2
PRINT legende$(1);
LOCATE 24, 46 - LEN(legende$(2)) / 2
PRINT legende$(2);
CALL penche(15, 100 + LEN(legende$(3)) * 2, legende$(3))

'ecrit les valeurs sur les axes
LOCATE 22, 13
PRINT "0";

```

```

LOCATE 22, 22
PRINT USING "###.##"; xmax / 5!;
LOCATE 22, 35
PRINT USING "###.##"; 2! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 48
PRINT USING "###.##"; 3! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 61
PRINT USING "###.##"; 4! * xmax / 5!;
LOCATE 22, 74
PRINT USING "###.##"; xmax;
LOCATE 21, 11
PRINT "0"
LOCATE 18, 3
PRINT USING "###.#####"; ymax / 5!;
LOCATE 15, 3
PRINT USING "###.#####"; 2! * ymax / 5!;
LOCATE 12, 3
PRINT USING "###.#####"; 3! * ymax / 5!;
LOCATE 9, 3
PRINT USING "###.#####"; 4! * ymax / 5!;
LOCATE 6, 3
PRINT USING "###.#####"; ymax;

```

'fait une petite legende

```

LOCATE 22, 2
PRINT "90 %"
LINE (50, 172)-(75, 172), , , &HFOFO
LOCATE 23, 2
PRINT "50 %"
LINE (50, 180)-(75, 180)
LOCATE 24, 2
PRINT "10 %";
LINE (50, 188)-(75, 188), , , &HFF00

```

'trace les courbes

```

VIEW (xhaut, yhaut)-(xbas, ybas)
WINDOW (0!, 0!)-(xmax, ymax)
PSET (0!, 0!)
FOR i% = 1 TO points%
    LINE (x(i% - 1), y1(i% - 1))-(x(i%), y1(i%)), , , &HFOFO
NEXT i%
LINE -(x(points%), 0!)
PSET (0!, 0!)
FOR i% = 1 TO points%
    LINE (x(i% - 1), y2(i% - 1))-(x(i%), y2(i%))
NEXT i%
LINE -(x(points%), 0!)
PSET (0!, 0!)

```

```

FOR i% = 1 TO points%
  LINE (x(i% - 1), y3(i% - 1))-x(i%), y3(i%)), , , &HFF00
NEXT i%
LINE -(x(points%), 0!)

'pause pour observer le graphique
CALL attend
CLS

'revient au mode texte
SCREEN 0

END SUB

FUNCTION inverse.lognormale (moyenne, ecart.type, probabilite)
'fonction qui calcule l'inverse de la loi lognormale cumulative

'transformation en logs
moyenne.log = LOG(moyenne ^ 2 / SQR(moyenne ^ 2 + ecart.type ^ 2))
ecart.log = SQR(LOG((moyenne ^ 2 + ecart.type ^ 2) / moyenne ^ 2))

'inversion dans le domaine transforme
x = inverse.normale(moyenne.log, ecart.log, probabilite)

'retour dans le domaine non-transforme
inverse.lognormale = EXP(x)

END FUNCTION

FUNCTION inverse.normale (moyenne, ecart.type, probabilite)
' Inverse de la PDF de la distribution normale
' D'apres Abramowitz & Stegun (1964) Formule 26.2.23, page 933.

IF probabilite <= 0! THEN ERROR 5
IF probabilite >= 1! THEN ERROR 5
IF ecart.type <= 0! THEN ERROR 5

IF probabilite < .5 THEN
  signe = 1!
  q = probabilite
ELSE
  signe = -1!
  q = 1! - probabilite
END IF

t = SQR(-2! * LOG(q))

```

```
numérateur = 2.515517 + .802853 * t + .010328 * t * t
dénominateur = 1! + 1.432788 * t + .189269 * t * t + .001308 * t * t * t
```

```
temporaire = t - numérateur / dénominateur
inverse.normale = signe * temporaire * écart.type + moyenne
```

```
END FUNCTION
```

```
SUB lit.pesticide
```

```
'sous-programme qui lit un fichier de pesticide de PESTE
```

```
  'verification de l'existence du fichier
  IF NOT existe(fichier.pesticide$, "PES") THEN
    CALL montre(21, 1, 60, "Fichier " + fichier.pesticide$ + ".PES
introuvable")
    CALL attend
    fichier.pesticide$ = ""
    EXIT SUB
  END IF
```

```
  'lecture du fichier
```

```
  OPEN fichier.pesticide$ + ".PES" FOR INPUT AS #1
  INPUT #1, nom.pesticide$
  INPUT #1, solubilite, c.solubilite, r.solubilite$
  INPUT #1, koc, c.koc, r.koc$
  INPUT #1, lambda, c.lambda, r.lambda$
  INPUT #1, kp, c.kp, r.kp$
  INPUT #1, ea, c.ea, r.ea$
  INPUT #1, ca
  CLOSE #1
```

```
END SUB
```

```
SUB lit.simulation
```

```
'sous-programme qui lit un fichier de simulation de PESTE
```

```
  'verification de l'existence du fichier
  IF NOT existe(fichier.simulation$, "SIM") THEN
    CALL montre(21, 1, 60, "Fichier " + fichier.simulation$ + ".SIM
introuvable")
    CALL attend
    fichier.simulation$ = ""
    EXIT SUB
  END IF
```

```
  'lecture du fichier
```

```
  OPEN fichier.simulation$ + ".SIM" FOR INPUT AS #1
  INPUT #1, nom.simulation$
```

```

INPUT #1, fichier.pesticide$
INPUT #1, fichier.site$
INPUT #1, fichier.meteo$
INPUT #1, annee.debut%, mois.debut%, jour.debut%
INPUT #1, annee.fin%, mois.fin%, jour.fin%
INPUT #1, fois%
FOR i% = 1 TO fois%
    INPUT #1, annee.application%(i%), mois.application%(i%),
jour.application%(i%), quantite(i%)
NEXT i%
INPUT #1, c.quantite, r.quantite$
CLOSE #1

```

END SUB

SUB lit.site

'sous-programme qui lit un fichier de site de PESTE

```

'verification de l'existence du fichier
IF NOT existe(fichier.site$, "SIT") THEN
    CALL montre(21, 1, 60, "Fichier " + fichier.site$ + ".SIT
introuvable")
    CALL attend
    fichier.site$ = ""
    EXIT SUB
END IF

```

```

'lecture du fichier
OPEN fichier.site$ + ".SIT" FOR INPUT AS #1
INPUT #1, nom.site$
INPUT #1, u.n(racine), s.n(racine), u.n(sol), s.n(sol), c.n, r.n$
INPUT #1, u.rho(racine), s.rho(racine), u.rho(sol), s.rho(sol), c.rho,
r.rho$
INPUT #1, u.ksat(racine), s.ksat(racine), u.ksat(sol), s.ksat(sol),
c.ksat, r.ksat$
INPUT #1, u.theta(racine), s.theta(racine), u.theta(sol), s.theta(sol),
c.theta, r.theta$
INPUT #1, u.foc(racine), s.foc(racine), u.foc(sol), s.foc(sol), c.foc,
r.foc$
INPUT #1, cv
INPUT #1, racines, c.racines, r.racines$
INPUT #1, nappe, c.nappe, r.nappe$
INPUT #1, cet
INPUT #1, cdrs
INPUT #1, drain, c.drain, r.drain$
CLOSE #1

```

END SUB

```

SUB melange (vecteur())
'sous-programme qui melange aleatoirement l'ordre des elements du vecteur

'on cherche la longueur du vecteur
longueur% = UBOUND(vecteur)
pile% = longueur%

'on fait une copie du vecteur
DIM temporaire(longueur%)
FOR i% = 1 TO longueur%
    temporaire(i%) = vecteur(i%)
NEXT i%

'on remplace aleatoirement les elements dans le vecteur
FOR i% = 1 TO longueur%
    adresse% = INT(RND * pile%) + 1
    vecteur(i%) = temporaire(adresse%)
    IF vecteur(i%) <= 0! THEN ERROR 100
    FOR j% = adresse% TO pile% - 1
        temporaire(j%) = temporaire(j% + 1)
    NEXT j%
    pile% = pile% - 1
NEXT i%

END SUB

SUB menu (max%, cas%, clef$( ), aide$( ))
'sous-programme de menu a la 1-2-3

'boucle d'interrogation
fin = non
WHILE NOT fin

    'libere les deux lignes du bas
    LOCATE 24, 1, 0
    PRINT SPACE$(80);
    LOCATE 25, 1, 0
    PRINT SPACE$(80);

    'ecrit le menu
    LOCATE 24, 4, 0
    FOR i% = 1 TO max%
        IF i% = cas% THEN COLOR 0, 7
        PRINT clef$(i%);
        COLOR 7, 0
        PRINT " ";
    NEXT i%

```

```

LOCATE 25, 4, 0
PRINT aide$(cas%);

'boucle de lecture de la commande
DO
  touche$ = INKEY$
LOOP WHILE touche$ = ""

'execution de la commande
SELECT CASE touche$
  CASE CHR$(0) + CHR$(77)          'cas a droite
    cas% = cas% + 1
    IF cas% > max% THEN cas% = 1
  CASE CHR$(0) + CHR$(75)          'cas a gauche
    cas% = cas% - 1
    IF cas% = 0 THEN cas% = max%
  CASE CHR$(13)                    'choix final
    fin = oui
  CASE CHR$(27)                    'retour au menu precedent
    cas% = 0
    fin = oui
  CASE ELSE                        'identifie par la lettre
    touche$ = UCASE$(touche$)
    FOR i% = 1 TO max%
      IF touche$ = UCASE$(LEFT$(clef$(i%), 1)) THEN
        cas% = i%
        fin = oui
        EXIT FOR
      END IF
    NEXT i%
END SELECT

'libere les deux lignes du bas
LOCATE 24, 1, 0
PRINT SPACE$(80);
LOCATE 25, 1, 0
PRINT SPACE$(80);
WEND

END SUB

SUB menu.pesticide
'sous-programme de modification d'un fichier pesticide

'affichage du panneau
CALL fond.pesticide
CALL ecran.pesticide

```

```

'description du menu
DIM c$(6), a$(6)
c$(1) = "Lire"
c$(2) = "Nommer"
c$(3) = "Sauver"
c$(4) = "Répertoire"
c$(5) = "Modifier"
c$(6) = "Retour"
a$(1) = "Lire un fichier .PES"
a$(2) = "Nommer/renommer le fichier"
a$(3) = "Sauver le fichier"
a$(4) = "Répertoire des fichiers .PES"
a$(5) = "Modifier les paramètres du pesticide"
a$(6) = "Retour au menu de gestion des fichiers"

'selection et execution des options
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
  CALL menu(6, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      fichier.pesticide$ = question$("Nom du fichier .PES à lire :
", 8)
      CALL lit.pesticide
      CALL ecran.pesticide
    CASE 2
      fichier.pesticide$ = question$("Nouveau nom du fichier .PES :
", 8)
      CALL ecran.pesticide
    CASE 3
      CALL sauve.pesticide
      CALL ecran.pesticide
    CASE 4
      CLS
      PRINT "Répertoire des fichiers .PES"
      SHELL "dir *.PES"
      PRINT "Pressez une touche pour revenir au menu des fichiers"
      CALL attend
      CALL fond.pesticide
      CALL ecran.pesticide
    CASE 5
      CALL change.pesticide
    CASE 6
      fin = oui
    CASE ELSE

```

```
        END SELECT
    WEND
END SUB
```

```
SUB menu.simulation
```

```
'sous-programme de modification d'un fichier de simulation
```

```
'affichage du panneau
CALL fond.simulation
CALL ecran.simulation
```

```
'description du menu
```

```
DIM c$(6), a$(6)
```

```
c$(1) = "Lire"
```

```
c$(2) = "Nommer"
```

```
c$(3) = "Sauver"
```

```
c$(4) = "Répertoire"
```

```
c$(5) = "Modifier"
```

```
c$(6) = "Retour"
```

```
a$(1) = "Lire un fichier .SIM"
```

```
a$(2) = "Nommer/renommer le fichier"
```

```
a$(3) = "Sauver le fichier"
```

```
a$(4) = "Répertoire des fichiers .SIM"
```

```
a$(5) = "Modifier les paramètres de la simulation"
```

```
a$(6) = "Retour au menu de gestion des fichiers"
```

```
'selection et execution des options
```

```
fin = non
```

```
cas% = 1
```

```
WHILE NOT fin
```

```
    CALL menu(6, cas%, c$(), a$())
```

```
    SELECT CASE cas%
```

```
        CASE 0
```

```
            fin = oui
```

```
        CASE 1
```

```
            fichier.simulation$ = question$("Nom du fichier .SIM à lire :
```

```
", 8)
```

```
            CALL lit.simulation
```

```
            CALL ecran.simulation
```

```
        CASE 2
```

```
            fichier.simulation$ = question$("Nouveau nom du fichier .SIM :
```

```
", 8)
```

```
            CALL ecran.simulation
```

```
        CASE 3
```

```
            CALL sauve.simulation
```

```
            CALL ecran.simulation
```

```
        CASE 4
```

```
            CLS
```

```

        PRINT "Répertoire des fichiers .SIM"
        SHELL "dir *.SIM"
        PRINT "Pressez une touche pour revenir au menu des fichiers"
        CALL attend
        CALL fond.simulation
        CALL ecran.simulation
    CASE 5
        CALL change.simulation
    CASE 6
        fin = oui
    CASE ELSE
    END SELECT
WEND
END SUB

SUB menu.site
'sous-programme de modification d'un fichier site

'affichage du panneau
CALL fond.site
CALL ecran.site

'description du menu
DIM c$(6), a$(6)
c$(1) = "Lire"
c$(2) = "Nommer"
c$(3) = "Sauver"
c$(4) = "Répertoire"
c$(5) = "Modifier"
c$(6) = "Retour"
a$(1) = "Lire un fichier .SIT"
a$(2) = "Nommer/renommer le fichier"
a$(3) = "Sauver le fichier"
a$(4) = "Répertoire des fichiers .SIT"
a$(5) = "Modifier les paramètres du site"
a$(6) = "Retour au menu de gestion des fichiers"

'selection et execution des options
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
    CALL menu(6, cas%, c$(), a$())
    SELECT CASE cas%
        CASE 0
            fin = oui
        CASE 1
            fichier.site$ = question$("Nom du fichier .SIT à lire : ", 8)
            CALL lit.site

```

```

        CALL ecran.site
    CASE 2
        fichier.site$ = question$("Nouveau nom du fichier .SIT : ", 8)
        CALL ecran.site
    CASE 3
        CALL sauve.site
        CALL ecran.site
    CASE 4
        CLS
        PRINT "Répertoire des fichiers .SIT"
        SHELL "dir *.sit"
        PRINT "Pressez une touche pour revenir au menu des fichiers"
        CALL attend
        CALL fond.site
        CALL ecran.site
    CASE 5
        CALL change.site
    CASE 6
        fin = oui
    CASE ELSE
    END SELECT
WEND
END SUB

SUB modele
'Sous programme qui effectue la simulation numerique
'constitue la partie la plus importante du logiciel

CONST total% = (ne.racine * ne.racine + ne.sol) / 2

'Initialisation de l'ecran
CLS
PRINT "Modèle PESTE"
INPUT "Nom du fichier de simulation (.SIM): "; fichier.simulation$
PRINT
PRINT "Preparation de la simulation"

PRINT "Lecture du fichier de simulation : "; fichier.simulation$ +
".SIM"
CALL lit.simulation
IF fichier.simulation$ = "" THEN EXIT SUB

PRINT "Lecture du fichier de pesticide : "; fichier.pesticide$ + ".PES"
CALL lit.pesticide
IF fichier.pesticide$ = "" THEN EXIT SUB

PRINT "Lecture du fichier site : "; fichier.site$ + ".SIT"
CALL lit.site

```

```

IF fichier.site$ = "" THEN EXIT SUB

PRINT
PRINT "Préparation des réalisations"
CALL preparation

'initialisation des variables de bilan
H.eau = 0!
H.rui = 0!
H.infil = 0!
H.etr = 0!
H.dr = 0!
H.nap = 0!
P.app = 0!
P.sur = 0!
P.rui = 0!
P.dr = 0!
P.ass = 0!
p.deg = 0!
p.nap = 0!

PRINT
PRINT "Ouverture du fichier meteo : "; fichier.meteo$ + ".MET"
'verification de l'existence du fichier
IF NOT existe(fichier.meteo$, "MET") THEN
    CALL montre(21, 1, 60, "Fichier " + fichier.meteo$ + ".MET
introuvable")
    CALL attend
    EXIT SUB
END IF
OPEN fichier.meteo$ + ".MET" FOR INPUT AS #1
LINE INPUT #1, nom.meteo$

PRINT "Recherche du jour du début de la simulation"
trouve = non
WHILE NOT EOF(1) AND NOT trouve
    INPUT #1, annee.meteo%, mois.meteo%, jour.meteo%, eau, evaporation,
temperature.racine, temperature.sol
    IF annee.meteo% = annee.debut% AND mois.meteo% = mois.debut% AND
jour.meteo% = jour.debut% THEN trouve = oui
WEND
IF NOT trouve THEN
    PRINT "La date de début n'est pas incluse dans le fichier"
    CLOSE #1
    CALL attend
    EXIT SUB
END IF

```

```

'ouverture du fichier trace
OPEN "trace.dat" FOR OUTPUT AS #2
duree% = 0

'on affiche le fond du panneau de simulation
CALL fond.execution

'boucle journaliere
WHILE NOT EOF(1) AND NOT (annee.meteo% = annee.fin% AND mois.meteo% =
mois.fin% AND jour.meteo% = jour.fin%)

    'lecture des donnees meteo de la journee
    INPUT #1, annee.meteo%, mois.meteo%, jour.meteo%, eau, evaporation,
temperature.racine, temperature.sol
    eau = eau / 1000!
    evaporation = cet * evaporation / 1000! * 25.4

    'applications
    application = 0!
    FOR i% = 1 TO fois%
        IF annee.meteo% = annee.application%(i%) AND mois.meteo% =
mois.application%(i%) AND jour.meteo% = jour.application%(i%) THEN
            application = quantite(i%)
        END IF
    NEXT i%
    P.app = P.app + application

    'initialisation des accumulateurs de statistiques
    flux.un = 0!
    flux.deux = 0!
    masse.un = 0!
    racine.un = 0!
    racine.deux = 0!
    nappe.un = 0!
    nappe.deux = 0!

    'boucle sur les realisations
    FOR realisation% = 1 TO realisations

        'arret pour observer le panneau
        IF UCASE$(INKEY$) = "A" THEN CALL attend
        IF UCASE$(INKEY$) = "S" THEN STOP

        'correction des coefficients de degradation
        FOR element% = 1 TO elements
            IF element% <= ne.racine THEN
                lambda.corrige(element%, realisation%) =
lambda.brut(element%, realisation%) * EXP(ea * (20! - temperature.racine)
/ rg / 293! / (273! + temperature.racine))
            END IF
        END FOR
    END FOR

```

```

ELSE
    lambda.corrige(element%, realisation%) =
lambda.brut(element%, realisation%) * EXP(ea * (20! - temperature.sol) /
rg / 293! / (273! + temperature.sol))
    END IF
NEXT element%

'Calcul du ruissellement et de l'infiltration
q(0, realisation%) = eau / dt
IF q(0, realisation%) <= permeabilite(1, realisation%) THEN
    ruissellement(realisation%) = 0!
ELSE
    ruissellement(realisation%) = q(0, realisation%) -
permeabilite(1, realisation%)
    q(0, realisation%) = permeabilite(1, realisation%)
END IF
H.eau = H.eau + eau
H.rui = H.rui + ruissellement(realisation%) * dt
H.infil = H.infil + q(0, realisation%) * dt

'calcul du bilan de surface
masse(realisation%) = masse(realisation%) + application

'lessivage
lessivage = solubilite * eau
IF lessivage > masse(realisation%) THEN
    concentration(0, realisation%) = masse(realisation%) / eau
    masse(realisation%) = 0!
ELSE
    concentration(0, realisation%) = solubilite
    masse(realisation%) = masse(realisation%) - lessivage
END IF
P.rui = P.rui * concentration(0, realisation%) *
ruissellement(realisation%) * dt

'degradation
masse(realisation%) = masse(realisation%) * EXP(-kp * dt)
P.sur = P.sur + masse(realisation%) * (EXP(kp * dt) - 1!)

'calcul de l'evapotranspiration potentielle
FOR i% = 1 TO ne.racine
    etp(i%) = evaporation * (ne.racine + 1 - i%) / total%
    IF etp(i%) >= retention(i%, realisation%) * dz(i%) / dt THEN
        etp(i%) = retention(i%, realisation%) * dz(i%) / dt
    END IF
NEXT i%

'boucle sur les elements

```

```

FOR element% = 1 TO elements

'calcul du flux hydrique et des pertes
bb = 1! / beta(element%, realisation%)
a = dz(element%) / dt * porosite(element%, realisation%)
a = a / permeabilite(element%, realisation%) ^ bb
a = a + etp(element%) / permeabilite(element%, realisation%) ^
bb * porosite(element%, realisation%) / retention(element%, realisation%)
B = 1! + cdr(element%)
c = q(element%, realisation%) ^ bb * dz(element%) / dt
c = c * porosite(element%, realisation%) /
permeabilite(element%, realisation%) ^ bb
c = c + q(element% - 1, realisation%)
qn = (q(element%, realisation%) + q(element% - 1,
realisation%)) / 2!
IF qn = 0! THEN qn = .001 * permeabilite(element%,
realisation%)
iteration% = 0
DO
f0 = a * qn ^ bb + B * qn - c
f1 = a * bb * qn ^ bb / qn + B
d = f0 / f1
qn = qn - d
IF qn <= 0! THEN qn = -qn / 10!
iteration% = iteration% + 1
LOOP UNTIL ABS(d / qn) < .001 OR qn < .001 *
permeabilite(element%, realisation%) OR iteration% > 10
IF qn < 1E-15 THEN qn = 0!
q(element%, realisation%) = qn

'calcul de la teneur en eau
ancienne(element%, realisation%) = theta(element%,
realisation%)
teneur = q(element%, realisation%) / permeabilite(element%,
realisation%)
teneur = teneur ^ (1! / beta(element%, realisation%))
teneur = teneur * porosite(element%, realisation%)
theta(element%, realisation%) = teneur

'calcul de l'evapotranspiration reelle
etr(element%, realisation%) = etp(element%) * theta(element%,
realisation%) / retention(element%, realisation%)
H.etr = H.etr + etr(element%, realisation%)
H.dr = H.dr + cdr(element%) * q(element%, realisation%) * dt

'calcul du transport et des reactions
vieille(element%, realisation%) = concentration(element%,
realisation%)

```

```

                num = ancienne(element%, realisation%) * vieille(element%,
realisation%) * dz(element%) / dt
                num = num + rho(element%, realisation%) * kd(element%,
realisation%) * vieille(element%, realisation%) * dz(element%) / dt
                num = num + q(element% - 1, realisation%) *
concentration(element% - 1, realisation%)
                dem = theta(element%, realisation%) - rho(element%,
realisation%) * kd(element%, realisation%)
                dem = dem * lambda.corrige(element%, realisation%) *
dz(element%)
                dem = dem + cdr(element%) * q(element%, realisation%)
                dem = dem + ca * etr(element%, realisation%)
                dem = dem + q(element%, realisation%)
                dem = dem + rho(element%, realisation%) * kd(element%,
realisation%) * dz(element%) / dt
                dem = dem + theta(element%, realisation%) * dz(element%) / dt
                concentration(element%, realisation%) = num / dem
                IF concentration(element%, realisation%) < 1E-15 THEN
concentration(element%, realisation%) = 0!
                P.dr = P.dr + concentration(element%, realisation%) *
cdr(element%) * q(element%, realisation%) * dt
                p.deg = p.deg + lambda.corrige(element%, realisation%) *
concentration(element%, realisation%) * (theta(element%, realisation%) -
rho(element%, realisation%) * kd(element%, realisation%)) * dt
                P.ass = P.ass + concentration(element%, realisation%) * ca *
etr(element%, realisation%) * dt

                NEXT element%
                H.nap = H.nap + q(elements, realisation%) * dt
                p.nap = p.nap + concentration(elements, realisation%) *
q(elements, realisation%) * dt

                'reinitialisation de l'element de surface
                vieille(0, realisation%) = concentration(0, realisation%)
                ancienne(0, realisation%) = theta(0, realisation%)

                'statistiques
                flux.un = flux.un + q(0, realisation%)
                flux.deux = flux.deux + q(0, realisation%) ^ 2
                masse.un = masse.un + masse(realisation%)
                racine.un = racine.un + concentration(ne.racine, realisation%)
                racine.deux = racine.deux + concentration(ne.racine,
realisation%) ^ 2
                nappe.un = nappe.un + concentration(elements, realisation%)
                nappe.deux = nappe.deux + concentration(elements, realisation%) ^
2

                NEXT realisation%

```

```

'calcul des resultats intermediaires
moy.flux = flux.un / realisations
ecart.flux = SQR(ABS((flux.deux - flux.un ^ 2 / realisations) /
(realisations - 1)))
moy.masse = masse.un / realisations
moy.racine = racine.un / realisations
ecart.racine = SQR(ABS((racine.deux - racine.un ^ 2 / realisations)
/ (realisations - 1)))
moy.nappe = nappe.un / realisations
ecart.nappe = SQR(ABS((nappe.deux - nappe.un ^ 2 / realisations) /
(realisations - 1)))

'affichage des resultats intermediaires
CALL ecran.execution

'on garde la trace des statistiques pour les graphiques
duree% = duree% + 1
WRITE #2, duree%, moy.racine, ecart.racine, moy.nappe, ecart.nappe

WEND
CLOSE #1
CLOSE #2

'affichage du bilan final
FOR i% = 9 TO 21
LOCATE i%, 1
PRINT SPACE$(80)
NEXT i%
LOCATE 9, 1
PRINT USING "
Pour la période du ##/##/## au ##/##/##";
annee.debut%; mois.debut%; jour.debut%; annee.fin%; mois.fin%; jour.fin%
PRINT
PRINT "
Bilan hydrique
Bilan
pesticide"
PRINT "
(kg/ha) "
(c m)
PRINT USING "
Apports: ###.#### Applications:
###.####"; H.eau * 100! / realisations, P.app * 10000!
PRINT USING "
Ruissellement: ###.#### Ruissellement:
###.####"; H.rui * 100! / realisations, P.rui * 10000! / realisations
PRINT USING "
Infiltration: ###.#### Dégradation en surface:
###.####"; H.infil * 100! / realisations, P.sur * 10000! / realisations
PRINT USING "
ETR: ###.#### Drainage:
###.####"; H.etr * 100! / realisations, P.dr * 10000! / realisations
PRINT USING "
Drainage: ###.#### Assimilation:
###.####"; H.dr * 100! / realisations, P.ass * 10000! / realisations
PRINT USING "
Recharge: ###.#### Dégradation dans le sol:
###.####"; H.nap * 100! / realisations, p.deg * 10000! / realisations

```

```
PRINT USING "  
###.####"; p.nap * 10000! / realisations  
CALL attend
```

Nappe:

```
END SUB
```

```
SUB modifie (moyenne, ecart.type, coefficient, symbole$, base$,  
identification$)
```

```
'sous-programme pour modifier les parametres de simulation
```

```
'recherche des unites valides pour le parametre considere
```

```
IF NOT coefficient = invalide THEN
```

```
  DIM c$(10), a$(10), coef(10)
```

```
  WHILE NOT si$(i%) = "FIN"
```

```
    i% = i% + 1
```

```
    IF si$(i%) = base$ THEN
```

```
      j% = j% + 1
```

```
      c$(j%) = autre$(i%)
```

```
      a$(j%) = "Unités de base : " + base$
```

```
      coef(j%) = rapport(i%)
```

```
    END IF
```

```
  WEND
```

```
'selection de l'unité voulue
```

```
CALL montre(21, 5, 30, "Selection des unités")
```

```
CALL montre(22, 5, 40, "Paramètre : " + identification$)
```

```
cas% = 1
```

```
CALL menu(j%, cas%, c$(), a$())
```

```
IF cas% = 0 THEN cas% = 1
```

```
coefficient = coef(cas%)
```

```
symbole$ = c$(cas%)
```

```
'on efface les lignes de menu
```

```
LOCATE 21, 1
```

```
PRINT SPACE$(80)
```

```
PRINT SPACE$(80)
```

```
'on affiche l'unité choisie
```

```
LOCATE 22, 5
```

```
PRINT "Unités: "; symbole$
```

```
ELSE
```

```
  coefficient = 1!
```

```
  symbole$ = ""
```

```
END IF
```

```
'declaration de la valeur moyenne
```

```

IF NOT moyenne = invalide THEN
  LOCATE 21, 5
  IF NOT ecart.type = invalide THEN
    PRINT "Valeur de la moyenne du parametre " + identification$ +
" : ";
  ELSE
    PRINT "Valeur du parametre " + identification$ + " : ";
  END IF
  INPUT reponse$
  reponse = nombre(reponse$)
  IF reponse > 0! THEN moyenne = reponse / coefficient
END IF

'declaration de l'ecart type
IF NOT ecart.type = invalide THEN
  LOCATE 21, 5
  PRINT "Valeur de l'ecart type du parametre " + identification$ + "
: ";
  INPUT reponse$
  reponse = nombre(reponse$)
  IF reponse > 0! THEN ecart.type = reponse / coefficient
END IF

END SUB

SUB montre (ligne%, colonne%, longueur%, chose$)
'sous-programme qui affiche une variable caractere

'preparation de l'emplacement
LOCATE ligne%, colonne%, 0
PRINT SPACE$(longueur%)
LOCATE ligne%, colonne%, 0

'impression de la chose
PRINT RIGHT$(chose$, longueur%)

END SUB

FUNCTION nombre (chaine$)
'fonction qui transforme une variable caractere en nombre

temporaire$ = ""
valide$ = "0123456789.-"
longueur% = LEN(chaine$)
FOR i% = 1 TO longueur%
  c$ = MID$(chaine$, i%, 1)
  IF INSTR(valide$, c$) <> 0 THEN
    temporaire$ = temporaire$ + c$
  
```

```

        END IF
    NEXT i%
    nombre = VAL(temporaire$)

END FUNCTION

SUB panneau

    CLS
    PRINT "panneau initial"

END SUB

SUB penche (x%, y%, mot$)
'sous-programme pour ecrire du texte penche en mode graphique

    'ecrit le prototype droit sur la derniere ligne
    LOCATE 25, 1
    PRINT mot$;

    'transpose une image penchee du prototype aux coordonnees x,y
    FOR ligne% = 0 TO 7
        FOR colonne% = 0 TO LEN(mot$) * 8
            IF POINT(colonne%, 199 - ligne%) > 0 AND POINT(colonne% + 1,
199 - ligne%) > 0 THEN
                PSET (x% - ligne% * 2, y% - colonne% / 2)
                PSET (x% - ligne% * 2 + 1, y% - colonne% / 2)
            END IF
        NEXT colonne%
    NEXT ligne%

    'efface le prototype
    LINE (0, 192)-(639, 199), 0, BF

END SUB

SUB preparation
'sous-programme de preparation des realisations

    'dimensionnement des variables temporaires
    DIM n.racine(realizations)
    DIM n.sol(realizations)
    DIM ksate.racine(realizations)
    DIM ksate.sol(realizations)
    DIM beta.racine(realizations)
    DIM beta.sol(realizations)
    DIM rho.racine(realizations)
    DIM rho.sol(realizations)

```

```

DIM ret.racine(realisations)
DIM ret.sol(realisations)
DIM kd.racine(realisations)
DIM kd.sol(realisations)
DIM lambda.racine(realisations)
DIM lambda.sol(realisations)

'porosite
CALL distribue(u.n(racine), s.n(racine), n.racine())
CALL melange(n.racine())
CALL distribue(u.n(sol), s.n(sol), n.sol())
CALL melange(n.sol())

'permeabilite
CALL distribue(u.ksat(racine), s.ksat(racine), ksat.racine())
CALL melange(ksat.racine())
CALL distribue(u.ksat(sol), s.ksat(sol), ksat.sol())
CALL melange(ksat.sol())

'parametre beta de la courbe caracteristique du sol
'evalue par la methode de Taylor
f = -6.9 / LOG(u.theta(racine) / u.n(racine))
H = u.theta(racine) / 20!
f1 = -6.9 / LOG((u.theta(racine) - H) / u.n(racine))
f2 = -6.9 / LOG((u.theta(racine) + H) / u.n(racine))
d1.theta = (f2 - f1) / (2! * H)
d2.theta = (f1 - 2! * f + f2) / (H * H)
H = u.n(racine) / 20!
f1 = -6.9 / LOG(u.theta(racine) / (u.n(racine) - H))
f2 = -6.9 / LOG(u.theta(racine) / (u.n(racine) + H))
d1.n = (f2 - f1) / (2! * H)
d2.n = (f1 - 2! * f + f2) / (H * H)
u.beta = f + (d2.theta * s.theta(racine) ^ 2 + d2.n * s.n(racine) ^ 2)
/ 2!
s.beta = SQR(d1.theta ^ 2 * s.theta(racine) ^ 2 + d1.n ^ 2 *
s.n(racine) ^ 2)
CALL distribue(u.beta, s.beta, beta.racine())
CALL melange(beta.racine())
f = -6.9 / LOG(u.theta(sol) / u.n(sol))
H = u.theta(sol) / 20!
f1 = -6.9 / LOG((u.theta(sol) - H) / u.n(sol))
f2 = -6.9 / LOG((u.theta(sol) + H) / u.n(sol))
d1.theta = (f2 - f1) / (2! * H)
d2.theta = (f1 - 2! * f + f2) / (H * H)
H = u.n(sol) / 20!
f1 = -6.9 / LOG(u.theta(sol) / (u.n(sol) - H))
f2 = -6.9 / LOG(u.theta(sol) / (u.n(sol) + H))
d1.n = (f2 - f1) / (2! * H)

```

```

d2.n = (f1 - 2! * f + f2) / (H * H)
u.beta = f + (d2.theta * s.theta(sol) ^ 2 + d2.n * s.n(sol) ^ 2) / 2!
s.beta = SQR(d1.theta ^ 2 * s.theta(sol) ^ 2 + d1.n ^ 2 * s.n(sol) ^ 2)
CALL distribue(u.beta, s.beta, beta.sol())
CALL melange(beta.sol())

'retention
CALL distribue(u.theta(racine), s.theta(racine), ret.racine())
CALL melange(ret.racine())
CALL distribue(u.theta(sol), s.theta(sol), ret.sol())
CALL melange(ret.sol())

'densite
CALL distribue(u.rho(racine), s.rho(racine), rho.racine())
CALL melange(rho.racine())
CALL distribue(u.rho(sol), s.rho(sol), rho.sol())
CALL melange(rho.sol())

'coefficient d'adsorption
CALL distribue((u.foc(racine) * koc), (s.foc(racine) * koc),
kd.racine())
CALL melange(kd.racine())
CALL distribue((u.foc(sol) * koc), (s.foc(sol) * koc), kd.sol())
CALL melange(kd.sol())

'coefficient de degradation
CALL distribue(lambda, lambda * cv, lambda.racine())
CALL melange(lambda.racine())
CALL distribue(lambda, lambda * cv, lambda.sol())
CALL melange(lambda.sol())

'on assigne les valeurs aux differents elements
FOR element% = 1 TO ne.racine

'parametres non variables
dz(element%) = racines / ne.racine
cdr(element%) = 0!

'parametres variables de la zone racinaire
FOR realisation% = 1 TO realisations

q(element%, realisation%) = u.ksat(racine) * .001
theta(element%, realisation%) = u.theta(racine)
concentration(element%, realisation%) = 0!
porosite(element%, realisation%) = n.racine(realisation%)
permeabilite(element%, realisation%) = ksat.racine(realisation%)
beta(element%, realisation%) = beta.racine(realisation%)
rho(element%, realisation%) = rho.racine(realisation%)

```

```

        retention(element%, realisation%) = ret.racine(realisation%)
        kd(element%, realisation%) = kd.racine(realisation%)
        lambda.brut(element%, realisation%) = lambda.racine(realisation%)
    NEXT realisation%
NEXT element%

FOR element% = ne.racine + 1 TO elements

'parametres variables de la zone profonde
dz(element%) = (nappe - racines) / ne.sol
cdr(element%) = 0!

'parametres variables de la zone profonde
FOR realisation% = 1 TO realisations

    q(element%, realisation%) = u.ksat(sol) * .001
    theta(element%, realisation%) = u.theta(sol)
    concentration(element%, realisation%) = 0!
    porosite(element%, realisation%) = n.sol(realisation%)
    permeabilite(element%, realisation%) = ksat.sol(realisation%)
    beta(element%, realisation%) = beta.sol(realisation%)
    rho(element%, realisation%) = rho.sol(realisation%)
    retention(element%, realisation%) = ret.sol(realisation%)
    kd(element%, realisation%) = kd.sol(realisation%)
    lambda.brut(element%, realisation%) = lambda.sol(realisation%)

    NEXT realisation%
NEXT element%

'installation des drains
IF drain < 0! OR drain > nappe THEN
    PRINT "***** Profondeur des drains incompatible"
    PRINT "***** Ils ont été replacés sous la zone racinaire"
    BEEP
    drain = racines
    attend
END IF
profondeur = 0!
element% = 1
WHILE profondeur < drain
    element% = element% + 1
    profondeur = profondeur + dz(element%)
WEND
cdr(element%) = cdrs

END SUB

FUNCTION question$ (interrogation$, longueur%)

```

'interrogation avec reponse alphanumerique

```
DO
  LOCATE 21, 1
  PRINT interrogation$;
  INPUT reponse$
  reponse$ = LTRIM$(reponse$)
  reponse$ = LEFT$(reponse$, longueur%)
  LOOP WHILE reponse$ = ""
  question$ = reponse$
```

END FUNCTION

SUB resultats

'sous-programme de visualisation des resultats

```
'graphiques d'un maximum de 300 points (jours)
DIM x(300), y1(300), y2(300), y3(300)
DIM legende$(3)
```

```
'verification de l'existence du fichier trace
IF NOT existe("trace", "dat") THEN
  CALL montre(21, 1, 60, "Simulation préalable requise")
  CALL attend
  EXIT SUB
END IF
```

```
'description du menu
DIM c$(3), a$(3)
c$(1) = "Racine"
c$(2) = "Nappe"
c$(3) = "Retour"
a$(1) = "Trace un graphique des concentrations à la base de la zone
racinaire"
a$(2) = "Trace un graphique des concentrations à la surface de la
nappe"
a$(3) = "Retour au menu principal"
```

```
'selection et execution
fin = non
cas% = 1
WHILE NOT fin
  CALL menu(3, cas%, c$(), a$())
  SELECT CASE cas%
    CASE 0
      fin = oui
    CASE 1
      'generation de trois courbes aleatoires
```

```

OPEN "trace.dat" FOR INPUT AS #1
i% = 0
WHILE NOT EOF(1)
  INPUT #1, x, moyenne, ecart, bidon, bidon
  IF moyenne > 0! AND ecart > 0! THEN
    i% = i% + 1
    x(i%) = x
    y1(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .1)
    y2(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .5)
    y3(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .9)
  END IF
WEND
CLOSE #1
legende$(1) = "Concentrations sous la zone racinaire"
legende$(2) = "Temps en jours"
legende$(3) = "Concentrations en mg/L"
CALL graphique(i%, x(), y1(), y2(), y3(), legende$())
CALL panneau
CASE 2
'generation de trois courbes aleatoires
OPEN "trace.dat" FOR INPUT AS #1
i% = 0
WHILE NOT EOF(1)
  INPUT #1, x, bidon, bidon, moyenne, ecart
  IF moyenne > 0! AND ecart > 0! THEN
    i% = i% + 1
    x(i%) = x
    y1(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .1)
    y2(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .5)
    y3(i%) = inverse.lognormale(moyenne, ecart, .9)
  END IF
WEND
CLOSE #1
legende$(1) = "Concentrations arrivant à la nappe"
legende$(2) = "Temps en jours"
legende$(3) = "Concentrations en mg/L"
CALL graphique(i%, x(), y1(), y2(), y3(), legende$())
CALL panneau
CASE 3
  fin = oui
CASE ELSE
END SELECT
WEND
END SUB

SUB sauve.pesticide
'sous-programme qui sauve un fichier de pesticide de PESTE

```

```

'verification de l'existence du fichier
IF existe(fichier.pesticide$, "PES") THEN
    accord$ = question$("Fichier déjà existant, d'accord pour
remplacer (O/N) ", 1)
    IF NOT UCASE$(accord$) = "O" THEN
        EXIT SUB
    END IF
END IF

```

```

'écriture du fichier
OPEN fichier.pesticide$ + ".PES" FOR OUTPUT AS #1
WRITE #1, nom.pesticide$
WRITE #1, solubilite, c.solubilite, r.solubilite$
WRITE #1, koc, c.koc, r.koc$
WRITE #1, lambda, c.lambda, r.lambda$
WRITE #1, kp, c.kp, r.kp$
WRITE #1, ea, c.ea, r.ea$
WRITE #1, ca
CLOSE #1

```

END SUB

SUB sauve.simulation

'sous-programme qui sauve un fichier de simulation de PESTE

```

'verification de l'existence du fichier
IF existe(fichier.simulation$, "SIM") THEN
    accord$ = question$("Fichier déjà existant, d'accord pour
remplacer (O/N) ", 1)
    IF NOT UCASE$(accord$) = "O" THEN
        EXIT SUB
    END IF
END IF

```

```

'écriture du fichier
OPEN fichier.simulation$ + ".SIM" FOR OUTPUT AS #1
WRITE #1, nom.simulation$
WRITE #1, fichier.pesticide$
WRITE #1, fichier.site$
WRITE #1, fichier.meteo$
WRITE #1, annee.debut%, mois.debut%, jour.debut%
WRITE #1, annee.fin%, mois.fin%, jour.fin%
WRITE #1, fois%
FOR i% = 1 TO fois%
    WRITE #1, annee.application%(i%), mois.application%(i%),
jour.application%(i%), quantite(i%)
NEXT i%
WRITE #1, c.quantite, r.quantite$

```

```

CLOSE #1

END SUB

SUB sauve.site
'sous-programme qui sauve un fichier de site de PESTE

'verification de l'existence du fichier
IF existe(fichier.site$, "SIT") THEN
    accord$ = question$("Fichier déjà existant, d'accord pour
remplacer (O/N) ", 1)
    IF NOT UCASE$(accord$) = "O" THEN
        EXIT SUB
    END IF
END IF

'écriture du fichier
OPEN fichier.site$ + ".SIT" FOR OUTPUT AS #1
WRITE #1, nom.site$
WRITE #1, u.n(racine), s.n(racine), u.n(sol), s.n(sol), c.n, r.n$
WRITE #1, u.rho(racine), s.rho(racine), u.rho(sol), s.rho(sol), c.rho,
r.rho$
WRITE #1, u.ksat(racine), s.ksat(racine), u.ksat(sol), s.ksat(sol),
c.ksat, r.ksat$
WRITE #1, u.theta(racine), s.theta(racine), u.theta(sol), s.theta(sol),
c.theta, r.theta$
WRITE #1, u.foc(racine), s.foc(racine), u.foc(sol), s.foc(sol), c.foc,
r.foc$
WRITE #1, cv
WRITE #1, racines, c.racines, r.racines$
WRITE #1, nappe, c.nappe, r.nappe$
WRITE #1, cet
WRITE #1, cdrs
WRITE #1, drain, c.drain, r.drain$
CLOSE #1

END SUB

```