

MODÉLISATION DU TRANSPORT DES ISOTOPES STABLES DE L'EAU (¹⁸O ET D) DANS LE CAS D'UN SOL NU EN CONDITIONS NATURELLES

A. MELAYAH^{1,2}, L. BRUCKLER¹, T. BARIAC²

RÉSUMÉ

Nous proposons dans ce travail un modèle mécaniste de prévision du comportement des isotopes stables de l'eau (¹⁸O et ²H) dans le système sol atmosphère soumis à des conditions climatiques quelconques. Les principales caractéristiques du modèle sont le couplage entre les flux dans le sol et dans l'atmosphère par l'intermédiaire du bilan d'énergie à la surface du sol et de la convection turbulente dans les basses couches atmosphériques, la prise en compte simultanée des flux isotopiques diffusifs et convectifs en phase liquide et gazeuse, et le couplage de ces flux isotopiques avec un modèle de transfert de masse et de chaleur. L'expérimentation s'appuie sur le suivi *in situ* pendant 50 jours d'une parcelle de sol nu, sur laquelle ont été caractérisés le bilan d'énergie et les conditions microclimatiques locales au cours du temps, les propriétés hydrodynamiques et thermiques du sol, l'évolution des profils hydriques, thermiques et isotopiques. Les résultats de la confrontation entre théorie et expérience montrent un accord global entre prévision et observation aussi bien en ce qui concerne les flux de masse et de chaleurs que les teneurs isotopiques. Cependant, des améliorations du modèle sont suggérées et la forte variabilité spatiale observée nécessite une intensification importante de l'échantillonnage.

¹Inra, Unité de Sciences du sol, Domaine Saint Paul, Site Agroparc, 84914 Avignon cedex 9.

²Cnrs URA 196, Laboratoire de biogéochimie isotopique, Université Pierre et Marie Curie Paris 6, Case 120, 4 Place Jussieu, Tour 26, 75252 Paris cedex 05.

INTRODUCTION

La connaissance des termes du bilan hydrique des sols intéresse des disciplines connexes telles que l'hydrologie, l'agronomie, la météorologie, et d'une façon plus générale, les sciences de l'environnement. Parmi les différents termes du bilan hydrique, l'évaporation suscite des recherches justifiées tant par leurs aspects théoriques (les processus du transport et du changement de phase dans les milieux poreux), que par leurs conséquences pratiques (mise au point de méthodes de mesure de l'évaporation en conditions naturelles). En ce qui concerne la quantification de l'évaporation *in situ*, on distingue classiquement les méthodes microclimatiques basées sur la mesure du bilan d'énergie et des échanges turbulents dans les basses couches de l'atmosphère, et les méthodes basées sur l'estimation du bilan hydrique au sol. La première famille de méthodes nécessite souvent un ensemble de conditions restrictives (dimensions de la parcelle, homogénéité du couvert), tandis que la seconde famille est lourde à mettre en œuvre et très sensible à la variabilité spatiale. Dans ce contexte, les méthodes basées sur la connaissance des teneurs des espèces isotopiques lourdes de l'eau et de leur évolution peuvent constituer une alternative. En effet, les espèces isotopiques lourdes de l'eau possèdent des propriétés physiques et chimiques proches de celles de l'eau ordinaire et représentent ainsi des traceurs intimes de la molécule d'eau dans les études de transfert de masse dans les sols capables d'indiquer l'origine et l'histoire de l'eau. De plus, le changement de phase liquide-vapeur de l'eau favorise la vaporisation des molécules légères (et inversement pour la condensation) et l'eau liquide restante s'enrichit en isotopes lourds. Ces derniers marquent ainsi naturellement le processus d'évaporation du sol.

L'intérêt de ce traçage naturel de l'évaporation et la recherche d'indicateurs isotopiques quantitatifs de l'évaporation du sol a suscité un certain nombre de travaux depuis plusieurs décennies. CRAIG et GORDON (1965) ont modélisé les transferts des isotopes stables de l'eau lors de l'évaporation à partir d'une surface d'eau libre. ZIMMERMANN *et al.*, (1967) ont constaté que l'enrichissement isotopique à la surface d'un sable saturé d'eau soumis à un régime évaporatoire permanent diminue de manière exponentielle avec la profondeur, et que le taux d'évaporation est proportionnel à la profondeur moyenne de pénétration de cet enrichissement. Ces travaux ont été étendus aux sols non saturés par BARNES et ALLISON (1983) qui ont développé un modèle simplifié décrivant les profils isotopiques dans un sol sableux en évaporation en conditions hydriques et isotopiques stationnaires et isothermes. À cette occasion, ces auteurs ont proposé trois méthodes d'estimation de l'évaporation à partir de profils isotopiques. BARNES et ALLISON (1984) ont étudié l'effet d'un gradient de température sur le comportement des isotopes dans le sol pour des régimes hydriques permanents

et ont montré que l'absence de prise en compte des effets thermiques peut, dans le cas où les flux gazeux sont non négligeables, induire des erreurs sur la prédiction des profils isotopiques, et par conséquent sur l'estimation de l'évaporation. À cette occasion, les auteurs ont souligné l'intérêt du traçage isotopique dans la décomposition des flux d'eau liquide et gazeuse dans le sol. BARNES et ALLISON (1988), WALKER *et al.*, (1988) et BARNES et WALKER (1989) ont étudié le cas des régimes hydriques transitoires en conditions isothermes. Ils concluent que, pour un même taux global d'évaporation, les profils isotopiques correspondant aux régimes permanent ou transitoire sont proches. Enfin, MATHIEU (1993) introduit un couplage explicite entre transport de l'eau, de la chaleur, et transport des isotopes stables de l'eau et applique le modèle proposé au cas d'une colonne de sol soumise à évaporation en laboratoire.

Malgré les apports considérables de ces différents travaux à notre connaissance sur le comportement des isotopes stables de l'eau en cours d'évaporation, leur transposition directe à des situations de terrain plus ou moins complexes est impossible compte tenu de leurs hypothèses restrictives (absence de couplage entre le sol et l'atmosphère par exemple). Le but de ce travail est de généraliser et d'étendre ces travaux à des sols et pour des conditions climatiques quelconques, en proposant un modèle de transfert qui réunit les principales conditions suivantes : prise en compte du transport de masse et de chaleur en régime transitoire et couplage avec les flux isotopiques de nature convective et diffusive, couplage des transferts d'eau, de chaleur et d'isotopes dans le sol avec le bilan d'énergie à la surface du sol et la turbulence dans les basses couches de l'atmosphère, et finalement, comparaison des résultats du modèle avec des données acquises *in situ* en conditions climatiques naturelles.

BASES THÉORIQUES DU MODÈLE

TRANSPORT DE MASSE ET DE CHALEUR DANS LE SOL

Le modèle décrivant le transport de masse et de chaleur dans le sol est un modèle mécaniste qui fournit à chaque instant les teneurs en eau et les températures dans le sol. On donnera ici un aperçu synthétique des bases du modèle. En ce qui concerne les transferts hydriques dans le sol, les principales hypothèses sont les suivantes : les flux sont monodimensionnels et le sol est rigide, l'eau est incompressible et chimiquement pure, la vapeur d'eau est assimilée à un gaz parfait et la pression totale dans la phase gazeuse est constante et égale à la pression atmosphérique, et les phases liquide et vapeur de l'eau sont en équilibre thermodynamique à chaque instant ce qui permet d'utiliser la relation de Kelvin entre l'humidité relative et le potentiel hydrique matriciel dans le sol. Pour la phase liquide, les transferts d'eau sont décrits par la loi de Darcy

généralisée aux sols non saturés. Pour la phase gazeuse, les transferts de vapeur d'eau sont décrits par la loi de Fick. Enfin, le flux de chaleur dans le sol est égal à la somme des transferts thermiques par conduction (loi de Fourier) et d'un terme provenant du changement de phase liquide-vapeur. En appliquant les lois de conservation de la masse et de l'énergie et en adoptant les hypothèses citées précédemment, on obtient un système couplé d'équations différentielles non linéaires du second ordre. La résolution du système est faite par la méthode des éléments finis et requiert la connaissance des profils initiaux de potentiel et de température ainsi que les évolutions des conditions aux limites au cours du temps (flux de chaleur ou température pour les transferts de chaleur, flux d'eau ou potentiel hydrique pour les transferts d'eau).

TRANSPORT DES ISOTOPES STABLES DE L'EAU DANS LE SOL

Le problème de la modélisation du transfert couplé d'isotopes stables de l'eau peut être formellement traité comme un cas particulier de transfert convectif-dispersif de soluté, en prenant en compte simultanément les flux isotopiques convectifs et diffusifs à chaque instant dans chacune des phases, liquide et gazeuse. On définira ainsi les flux convectifs en phase liquide dépendant des gradients de potentiel ou des gradients de température, et en phase gazeuse dépendant des gradients de pression partielle ou de température. Par ailleurs, les flux diffusifs d'isotopes sont liés aux gradients de concentration isotopique dans chaque phase et sont donnés par la loi de Fick. Dans la phase liquide, le coefficient de diffusion apparent englobe un terme de diffusion moléculaire et un terme lié à la dispersion. Dans la phase gazeuse, le coefficient de diffusion effectif pour chaque isotope est fonction de la porosité libre à l'air, de la tortuosité, de la température et d'un terme caractérisant le fractionnement isotopique cinétique en fonction de la nature de la diffusion des espèces isotopiques. En combinant les équations décrivant les flux isotopiques et l'équation de continuité (conservation de la masse), et en introduisant un coefficient de fractionnement isotopiques entre les phases liquide et gazeuse pour chaque espèce isotopique, on aboutit à l'expression explicite décrivant la variation de concentration isotopique dans le sol à chaque instant (MELAYAH, 1994). La résolution numérique de l'équation obtenue est réalisée par la méthode des éléments finis et suppose connus l'état isotopique initial et l'évolution des conditions aux limites au cours du temps, celles-ci pouvant correspondre à une concentration isotopique ou à un flux isotopique aux limites du système étudié.

COUPLAGE AVEC L'ATMOSPHÈRE

Le couplage avec les flux dans l'atmosphère permet de fournir aux modèles de transfert d'eau, de chaleur et d'isotopes dans le sol les conditions aux limites (à la surface du sol) calculées à partir du bilan d'énergie et de la description des flux turbulents dans les basses couches atmosphériques. Le bilan d'énergie à la surface du sol permet de décomposer le rayonnement net en la somme du flux de chaleur dans le sol, le flux de chaleur sensible, et le flux de chaleur latente. Le rayonnement net est lui même calculé à partir des rayonnements global et atmosphérique, et fait intervenir l'albédo et la température de surface. D'autre part, l'introduction de la convection turbulente dans les basses couches atmosphériques permet d'écrire les différents flux sous forme du produit d'un coefficient d'échange dépendant de la vitesse du vent, de la stratification thermique de l'air et de la rugosité de surface (MONIN et OBUKHOV, 1954 ; BRUTSAERT, 1982), et d'un gradient de température dans l'air (pour le flux de chaleur sensible), de concentration de vapeur d'eau dans l'air (pour le flux de chaleur latente), de concentration en isotopes dans l'air (pour les flux isotopiques). Au total, les équations de diffusion turbulente sont appliquées de façon analogue à la masse totale d'eau ou à chaque espèce isotopique, ce qui permet de travailler dans un cadre théorique unifié et cohérent quel que soit l'élément traité.

EXPÉRIMENTATION *IN SITU*

Dans le but d'acquérir le jeu de données nécessaire à la mise au point et à la validation du modèle de transport des espèces isotopiques de l'eau en conditions naturelles, une première expérience de terrain a été conduite pendant 50 jours en juillet et août 1990 sur un site expérimental situé au domaine St Paul du centre Inra d'Avignon. Les mesures issues de cette expérience constituent à la fois la base de données nécessaire à l'estimation des caractéristiques physiques du sol, à la caractérisation des conditions initiales et aux limites du modèle (hauteur de 1 mètre au-dessus de la surface du sol pour la condition supérieure, 1 mètre en profondeur pour la condition inférieure), et à la comparaison modèle-expérience. Par ailleurs, une expérience complémentaire en vue de connaître l'évolution des isotopes stables de l'eau dans la vapeur d'eau atmosphérique a été conduite sur la même parcelle en 1992 dans des conditions climatiques et hydriques proches de celles de l'expérience précédente.

Ces expériences ont été conduites sur une parcelle de 50 mètres de longueur et de 20 mètres de largeur, préalablement travaillée sur une couche de 15 à 20 centimètres de profondeur (rotobèche et rotavator). La texture de la parcelle (A = 27,2 % ; LF = 45,9 % ; LG = 15,8 % ; S = 11 %) est homogène. Le site est équipé d'une rampe d'irrigation à déplacement frontal, utilisée pour obtenir des

états hydriques et isotopiques initiaux les plus homogènes possibles. Au cours de l'expérimentation (10 juillet au 28 août 1990, parcelle initialement irriguée soumise à évaporation en conditions naturelles), les principales mesures suivantes ont été réalisées :

— en ce qui concerne le compartiment atmosphérique, on a mesuré la pluie, la vitesse du vent (anémomètre à impulsions), la température (sonde de platine) et l'humidité relative de l'air (psychromètre ventilé à thermocouples), ainsi que les rayonnements global et net (pyrradiomètre différentiel). Le flux de chaleur sensible a été mesuré par la méthode des fluctuations (capteur Campbell), le flux de chaleur dans le sol par analyse des profils thermiques au cours du temps. Le flux de chaleur latente est alors déduit de l'équation du bilan d'énergie. La figure 1 (données climatiques de base) résume l'ensemble des principales conditions microclimatiques et énergétiques rencontrées au cours de l'expérimentation. Par ailleurs, la composition isotopique de la vapeur d'eau atmosphérique locale (expérience de 1992) a été caractérisée par des prélèvements le matin (9 h) et l'après-midi (15 h). Deux campagnes de 24 h de prélèvements intensifs supplémentaires (toutes les deux heures) ont été réalisées. Les prélèvements de la vapeur d'eau atmosphérique ont été réalisés à 1 mètre au-dessus de la surface du sol en faisant passer un débit d'environ 1 à 2 l/mn à travers des pièges à carboglace refroidis à -80°C ;

— pour le sol, on a mesuré les profils de potentiels matriciel (tensiomètres), de teneur en eau (mesures gravimétriques et mesures neutroniques) et de température au cours du temps (sondes de platine), ainsi que les profils isotopiques au cours de l'expérience. Par ailleurs, la stratification du profil de sol s'est faite sur la base de mesures de densité par transmission gamma et rétrodiffusion, et les mesures de rugosité de surface (rugosimètre laser) ont permis d'avoir un ordre de grandeur de la rugosité aérodynamique. L'analyse des données obtenues *in situ* a permis d'estimer la conductivité hydraulique et la conductivité thermique dans le domaine non saturé. La capacité calorifique a été estimée à l'aide du modèle de DE VRIES (1963), le coefficient de diffusion à l'aide des résultats de BRUCKLER *et al.* (1989), la courbe de rétention est tirée de CHANZY (1991). Les coefficients de diffusion en phase liquide et gazeuse pour les isotopes sont de la même forme que ceux cités par BARNES et ALLISON (1988).

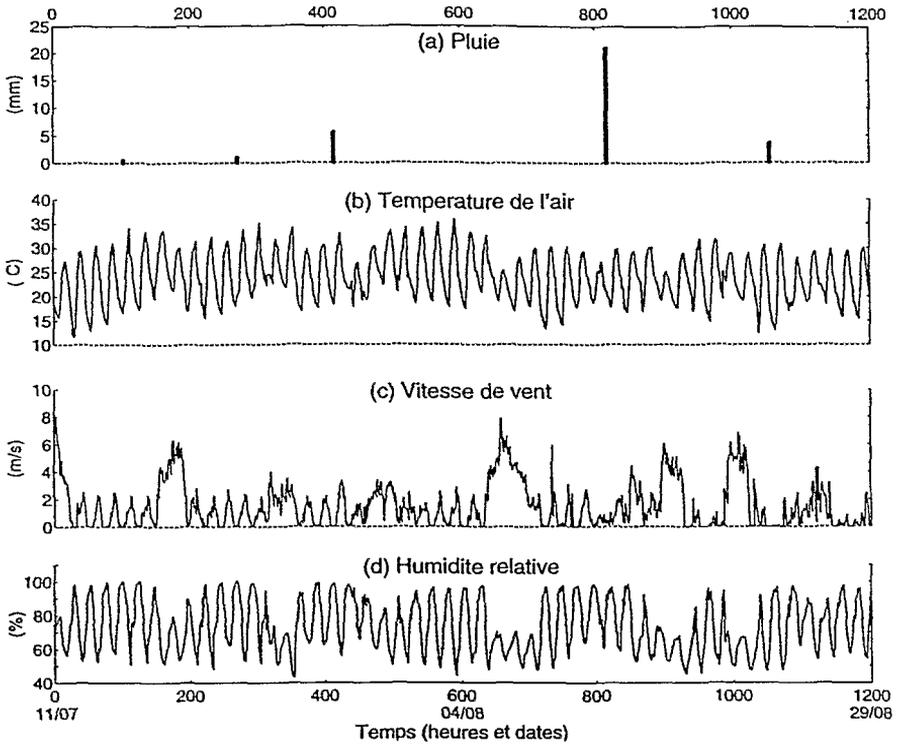


Figure 1 :

Principales caractéristiques climatiques pendant l'expérimentation in situ.

L'ensemble des mesures dans l'atmosphère ainsi que les températures dans le sol ont été réalisées de manière continue à l'aide d'une centrale d'acquisition Campbell CR7 (lecture toutes les 15 secondes et intégration toutes les 15 minutes). Les mesures de teneurs en eau et les lectures tensiométriques sont faites au pas de temps journalier tandis que la composition isotopique de l'eau a été suivie sur 2 à 3 profils de sol prélevés tous les 5 jours environ. Les échantillons prélevés ont été conservés dans des flacons en verre à fermeture hermétique. L'eau de ces échantillons est extraite par distillation sous vide et sous un gradient de température d'environ 270°C entre le sol chauffé à 80°C et un piège à azote liquide. Les teneurs en oxygène 18 et en deutérium sont alors déterminées avec une précision de l'ordre de 1 pour mille pour le deutérium et 0,3 pour mille pour l'oxygène 18. La figure 2 montre les profils isotopiques et les droites $^{18}\text{O}/\text{H}$ obtenus au cours de l'expérience. On constate une assez grande variabilité des profils isotopiques ainsi que l'évolution progressive du type d'eau à partir duquel a lieu l'évaporation.

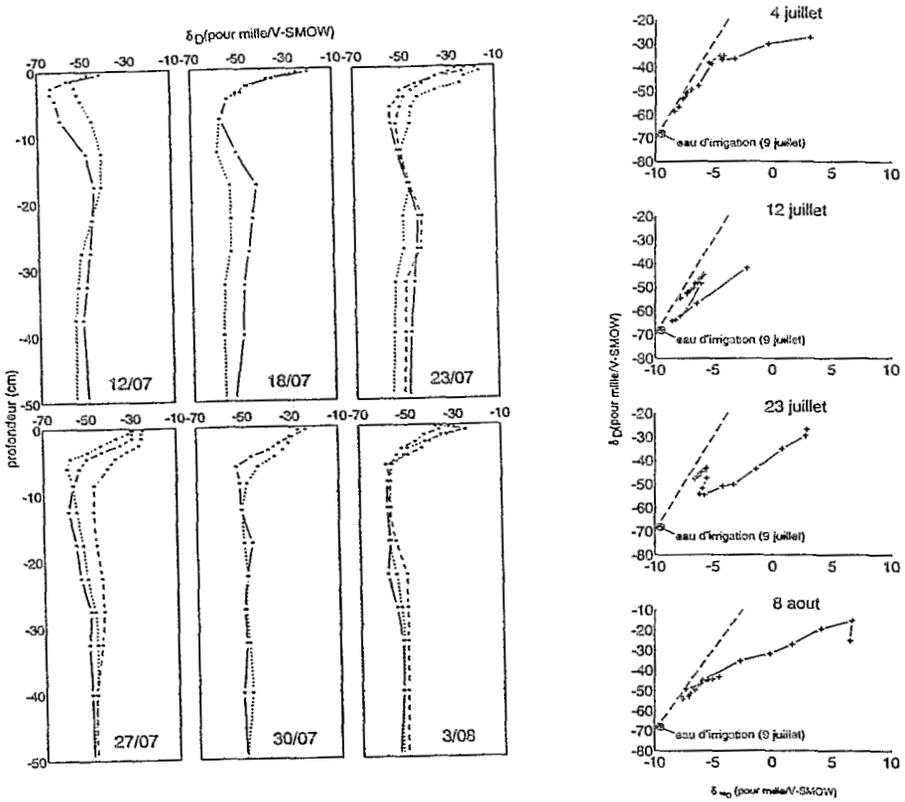


Figure 2 :

Profils isotopiques individuels et droites $^{18}O/^{16}O$ à différentes dates de prélèvements.

RÉSULTATS ET DISCUSSION

PHASE DE CALAGE

Nous avons introduit une période de calage de 11 jours pour l'estimation de la conductivité hydraulique dans la zone non saturée. En effet, l'estimation de la conductivité hydraulique apparente *in situ* cumule les transferts en phase liquide et gazeuse et surestime donc la conductivité hydraulique réelle. Les résultats du calage de la conductivité hydraulique sont donnés par la figure 3. On constate que les résultats sont cohérents, puisque la conductivité calée est bien inférieure à la conductivité hydraulique apparente.

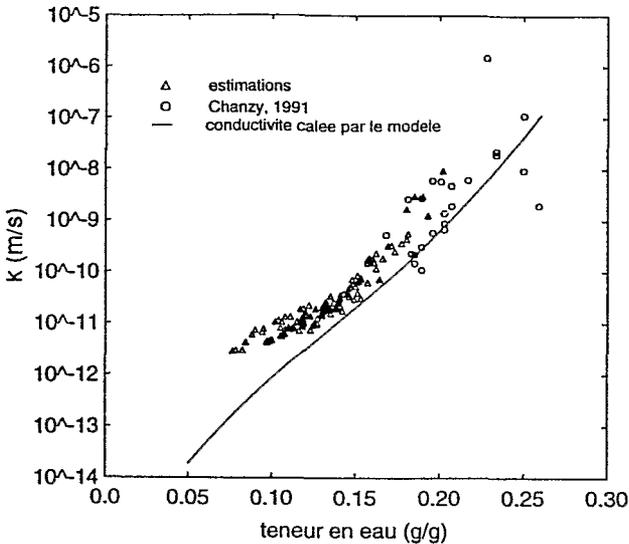


Figure 3 :

Valeurs calées par le modèle de transfert d'eau et de chaleur et valeurs mesurées pour la conductivité hydraulique in situ.

FLUX DE MASSE ET DE CHALEUR

La figure 4 montre les comparaisons entre les valeurs mesurées et calculées pour les différents flux à la surface du sol, tandis que la figure 5 compare les teneurs en eau et les températures observées et calculées dans les horizons de surface. Globalement, l'accord est satisfaisant et présente des biais minimes. On en déduit que la valeur des principaux flux dans le sol (phases liquide, gazeuse) et que les variables décrivant l'état physique du sol (humidité, température) fournis au modèle de transfert des isotopes sont corrects.

CONCENTRATIONS ISOTOPIQUES

La figure 6 montre des profils isotopiques calculés et observés (D) tandis que la figure 7 fournit une comparaison globale entre les concentrations isotopiques calculées et mesurées dans le sol. Globalement, l'accord est satisfaisant mais on constate cependant d'une part, l'existence de biais, et d'autre part, une variabilité importante des concentrations mesurées. Le premier point peut renvoyer aux bases mêmes du modèle et aux hypothèses simplificatrices introduites. En particulier, la prise en compte de modèles de transferts dans le sol à plusieurs compartiments de mobilité différentes (MATHIEU, 1993) en liaison avec l'espace poral et la structure du sol par exemple pourrait être introduite. Le second point

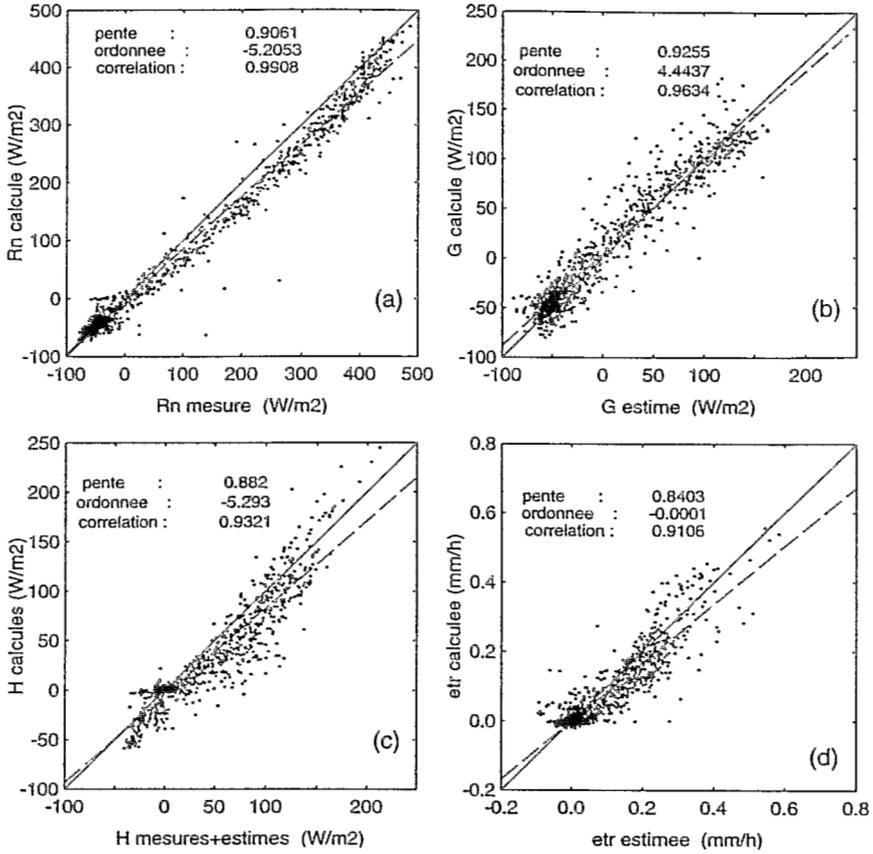


Figure 4 :
Régression linéaire entre les flux calculés et observés à la surface du sol.

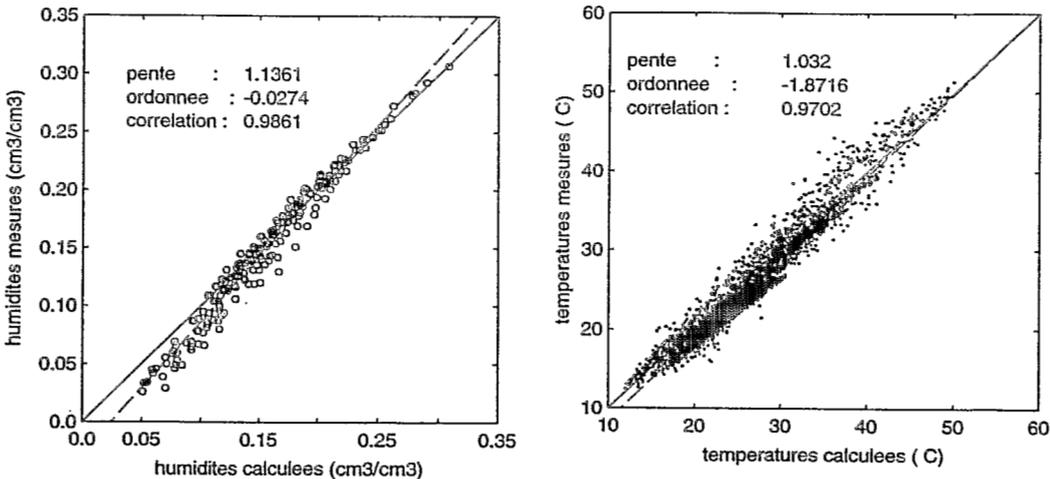


Figure 5 :
Régression linéaire entre les teneurs en eau et températures calculées et observées.

renvoie aux stratégies d'échantillonnage pour les mesures isotopiques en conditions naturelles. En effet, la variabilité spatiale importante dans notre cas avait été sous-estimée au départ, et il en découle une grande incertitude sur les profils isotopiques moyens. À la limite, chaque profil isotopique local enregistre une histoire particulière, elle même liée à la somme de toutes les sources de variation accumulées au cours du temps (état structural de surface, apport d'eau, Infiltrabilité locale, etc.).

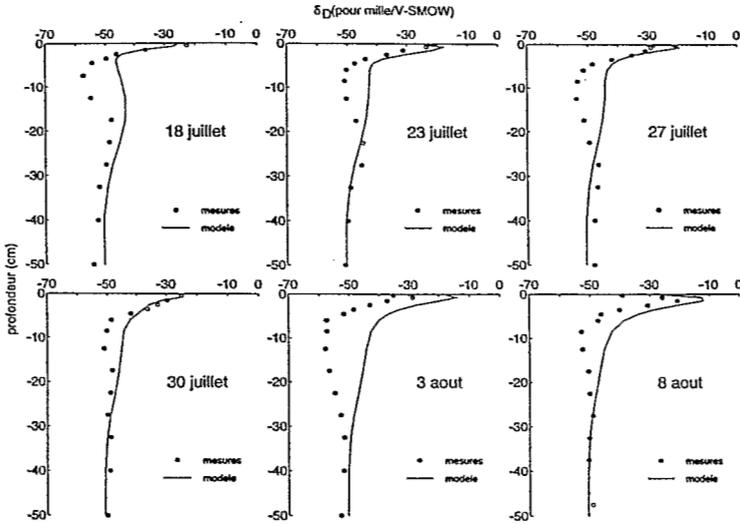


Figure 6 :
Profils isotopiques observés et calculés à différentes dates.

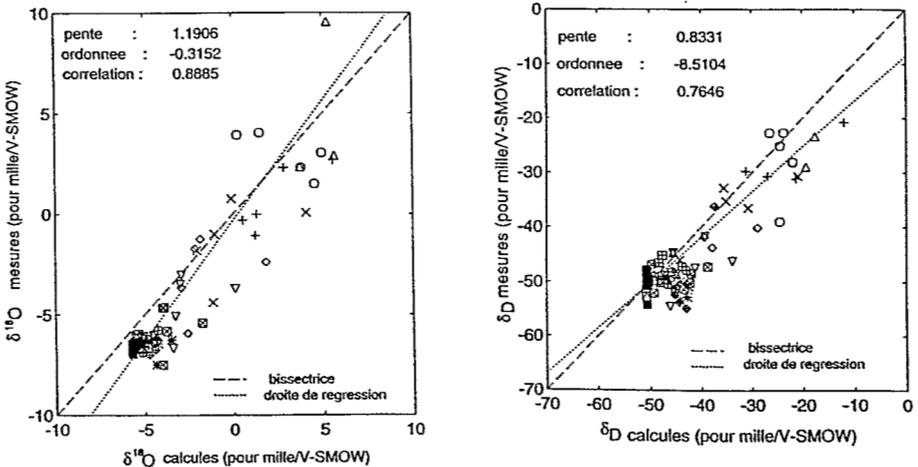


Figure 7 :
Régressions linéaires entre les teneurs isotopiques (¹⁸O et ²H) calculées et observées au cours de l'expérience in situ (les différents symboles correspondent à différentes profondeurs).

CONCLUSION

Par rapport aux approches existantes dans le domaine de la prévision des profils isotopiques en sol nu soumis à évaporation, le modèle proposé présente un cadre théorique cohérent et global puisqu'il y a couplage explicite entre les transferts dans le sol et les échanges sol-atmosphère, couplage entre les flux de masse globaux et les flux des espèces isotopiques traitées, et couplage entre les transferts d'eau et de chaleur. Par ailleurs, la référence expérimentale utilisée s'étend sur une période longue (50 jours), ce qui permet de couvrir les phases successives du processus d'évaporation. Les résultats montrent un accord global entre prévision et observation aussi bien en ce qui concerne les flux que les variables d'état (teneur en eau, températures, concentrations en isotopes), bien que des améliorations soient possibles dans les bases mêmes du modèle. En particulier, une amélioration de la connaissance des coefficients de transfert isotopique en laboratoire, ou l'introduction de phases mobile et immobile pour le transport d'isotopes est envisageable. Enfin, nos résultats expérimentaux ont montré une grande variabilité spatiale des profils isotopiques *in situ* même en conditions agricoles apparemment homogènes, et une meilleure estimation des valeurs moyennes suppose une amélioration de l'échantillonnage et peut également inciter à envisager une simulation stochastique dans la modélisation du transport des isotopes.

BIBLIOGRAPHIE

- BARNES C.J., ALLISON G.B., 1983. The distribution of deuterium and ¹⁸O in dry soils. 1. Theory. *J. Hydrol*, 60 : 141-156.
- BARNES C.J., ALLISON G.B., 1984. The distribution of deuterium and ¹⁸O in dry soils. 3. Theory for non-isothermal water movement. *J. Hydrol*, 74 : 119-135.
- BARNES C.J., ALLISON G.B., 1988. Tracing of water movement in the unsaturated zone using stable isotopes of hydrogen and oxygen. *J. Hydrol.*, 100 : 143-176.
- BARNES C.J., WALKER G.R., 1989. The distribution of deuterium and ¹⁸O during unsteady evaporation from a dry soil. *J. Hydrol.*, 112 : 55-67.
- BRUCKLER L., BALL B.C., RENAULT P., 1989. Laboratory estimation of gas diffusion coefficient and effective porosity in soils. *Soil Sci.*, 147 : 1-10.
- BRUTSAERT W., 1982. Evaporation into the atmosphere : Theory, History and Applications. D. Reidel, Dordrecht, Holland.
- CHANZY A., 1991. Modélisation simplifiée de l'évaporation d'un sol nu en utilisant l'humidité et la température de surface accessibles par télédétection. *Thèse, INAPG, Paris.*
- CRAIG H., GORDON L.I., 1965. Deuterium and Oxygen-18 variations in the ocean and marine atmosphere. In *Stable Isotopes in Oceanography Studies and Paleotemperatures*, 9-130.
- DE VRIES D.A., 1963. Thermal properties of soils. *W.R. Van Wijk, North-Holland, Amsterdam*, 210-235.
- MATHIEU R., 1993. Contribution de la géochimie isotopique (²H et ¹⁸O) à la caractérisation des mouvements de l'eau dans les sols argileux. *Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris.*

- MELAYAH A., 1994. Modélisation du transfert des isotopes stables de l'eau (¹⁸O et D) dans un sol nu en conditions naturelles. *Thèse, Université Pierre et Marie Curie, Paris.*
- MONIN A.S., OBUKHOV A.M., 1954. Dimensionless characteristics of turbulence in surface layer. *Akad. Nauk. SSSR, Geofiz. Inst. Tr.*, 24 : 163-167.
- WALKER G.R., HUGHES M.W., ALLISON G.B., BARNES C.J., 1988. The movement of isotopes of water during evaporation from a bare soil surface. *J. Hydrol.*, 97 : 181-197.
- ZIMMERMANN U., EHHALT D., MUNNICH K.O., 1967. Soil water movement and evapotranspiration: Changes in the isotopic composition of the water. In *Isotopes in Hydrology*, IAEA, Vienna, 567-585.