

Université Pierre et Marie Curie, Ecole des Mines de Paris, Université Paris Sud et Ecole
Nationale du Génie Rural des Eaux et des Forêts

Master 2 Sciences de l'Univers, Environnement, Ecologie

Parcours Hydrologie-Hydrogéologie

**Modélisation spatialisée des onctions de dégradation des pesticides dans le sol en conditions
dynamiques de transport à l'échelle de l'organisation des pores**

(Par la méthode de Boltzmann sur réseau)

Daïdine ALLAOUI

Maitre de Stage : Valérie POT



UMR Environnement et Grandes Cultures INRA/IANA-PG
F-78850 THIVERVAL-GRIGON

30 Juin 2009



Abstract:

Chemicals and organic pesticides are considered as causes of environmental pollution because of their use in agriculture. However, their use are necessary to the contribution to the development or improvement of agriculture with the aim of taking into account the world population growth. One scheme to know or understand pesticides action in the soil is the modelling of their transfer. In this work, we have introduced simulated and experimental data on soil heterogeneities into a lattice Boltzmann model that describes pesticide dynamics at pore scale. Several tests, thus, have been carried out by comparing Boltzmann model results with analytical solutions of transport equations by calculating the error of L2 norm. We release thus that the model has allowed to evaluate the role of spatial location of pesticide degradation on a non perturbed soil sample with the help of computed tomography images.

Table des matières :

Abstract:	2
1 .INTRODUCTION :	5
2. MATERIELS ET METHODES :	7
2.1. Classification des pesticides:	7
2.2. La réactivité des pesticides :.....	8
2.2.1. La rétention :	8
2.2.2. La dégradation :.....	9
2.3. Description du transport:	10
2.4. Principe des modèles de Boltzmann sur réseau :.....	12
2.4.1. Modèle de Boltzmann sur réseau à un temps de relaxation :	14
2.4.2. Modèle de Boltzmann sur réseau à multiples temps de relaxation :.....	16
2.4.3. Modèle de Boltzmann sur réseau à deux temps de relaxation :.....	16
2.4.4. Conditions aux limites :.....	17
2.5. Les tests :	18
2.5.1. Test 1 : Dégradation en milieu homogène :	19
2.5.2. Test 2 : Dégradation avec transport diffusif :	19
2.5.3. Test 3 : Dégradation avec transport convectif -dispersif :.....	20
2.6. L'hétérogénéité :.....	21
2.6. 2. Le milieu poreux 3D :	22
2.7. Correspondance des unités :	23
3. RESULTATS ET DISCUSSION:	23
3.1. Test 1:.....	23
3.2. Test 2:.....	25
3.3. Test 3 :	26
3.4. L'hétérogénéité à l'échelle du pore:	28

3.5. Hétérogénéité dans le milieu poreux :	31
4. CONCLUSION :	36
Bibliographie :	37
RESUME :	38

1 .INTRODUCTION :

La population mondiale étant en forte croissance, cela engendre une forte demande en nourriture. L'utilisation des fertilisants, des produits phytosanitaires et des rejets agricoles est donc indispensable pour une agriculture économique viable. La qualité chimique des eaux est donc altérée en raison des pollutions diffuses et localisées d'origine accidentelle, résultant de techniques plus ou moins bien maîtrisées.

De ce fait, les activités agricoles sont confrontées aux problèmes de l'utilisation de ces intrants. D'où la nécessité de mettre en œuvre des moyens pour limiter ou supprimer les impacts environnementaux négatifs. Autrement dit, la mise sur pieds d'outils scientifiques susceptibles de faire progresser une agriculture respectueuse de l'environnement.

La connaissance scientifique des processus déterminants les transferts des polluants dans le milieu naturel passe par la description et la quantification des mécanismes physiques, chimiques et biologiques se produisant dans le sol. Elle donne les bases de prédiction, de prévention et de gestion des risques de pollution chimiques des différents compartiments de l'environnement.

Le modèle numérique est un outil fondamental de la description et de la prédiction des transferts des polluants dans le sol. C'est dans ce cadre que s'inscrit mon stage sur la simulation des transferts des pesticides à l'échelle de l'organisation des pores par un modèle de Boltzmann sur réseau (LBM).

Le sujet consiste à décrire la dynamique des pesticides dans le sol au niveau de l'organisation du réseau poral. Prendre en compte à l'échelle du pore le couplage des processus physiques, chimiques et biologiques responsables du devenir et du transport des pesticides dans le sol.

Le sol est un milieu complexe. Il présente différentes hétérogénéités qui peuvent être physiques dues à sa structure (taille des pores, tortuosité et connectivité) et à la teneur en eau dans les pores ; biologiques liées aux ressources nutritives qui sont distribuées d'une manière hétérogène et aux microorganismes dégradants qui sont eux aussi distribués d'une manière hétérogène. Les hétérogénéités sont aussi physico-chimiques, liées aux différentes natures chimiques des constituants du sol qui sont de plus répartis de façon hétérogène.

Peu d'étude de modèles ont pris en compte ces hétérogénéités, notamment la biodégradation. L'objet est de déterminer et quantifier l'impact de ces localisations et des distributions séparées (la rétention et la dégradation) sur le transport des pesticides dans le sol en intégrant les hétérogénéités qui le compose dans un modèle numérique.

Il s'agit d'utiliser un modèle de Boltzmann sur réseau développé dans l'unité EGC sol de l'Institut National de la Recherche Agronomique (INRA) qui prend en compte la description explicite du réseau poral et la répartition spatiale des sites de la rétention/ libération et des microorganismes dans le sol.

Cette étude comporte deux grandes parties :

- Une première partie où nous avons testé le module de la dégradation de soluté développé dans le LBM. Nous avons comparé les solutions analytiques des équations du transport de soluté avec la dégradation dans le sol connues avec les résultats du modèle.

- Dans la deuxième partie, nous avons modélisé le transport des pesticides dans un milieu poreux réel à 3D issu d'images tomographiques d'un échantillon de sol.

2. MATERIELS ET METHODES :

2.1. Classification des pesticides:

Les pesticides signifient étymologiquement « tueurs de fléaux ». Ce sont des produits obtenus souvent par synthèse chimique dont les propriétés toxiques permettent de lutter contre les organismes nuisibles pour des cultures. C'est la raison pour laquelle leur utilisation est soumise à des règles strictes.

Ils sont utilisés depuis plus d'un siècle, pour trois principaux intérêts : la protection des cultures, la protection sanitaire et l'entretien des espaces non agricoles. Il existe trois types de classifications des pesticides selon leur nature :

- Classification chimique où on distingue :

Les pesticides inorganiques, ils sont peu nombreux mais certains sont utilisés en grande quantité tels que le cuivre et le soufre. Ils sont très anciens et leur emploi est apparu avant le début de la chimie organique de synthèse (R. Calvet, 2005).

Les pesticides organométalliques dont la molécule est constituée d'un complexe de métal et un anion organique dithiocarbamate. On peut citer le mancozèbe (complexe de zinc), le manèbe qui est un complexe de manganèse.

Les pesticides organiques (par exemple le piclorame) qui sont les plus nombreux et appartiennent à diverses familles. Leur définition dépend des critères d'utilisation.

- Classification biologique : selon l'organisme vivant à éliminer, on distingue plusieurs catégories dont les principaux sont les insecticides-acaricides, les fongicides et les herbicides.

- Classification selon l'usage : on distingue six principales catégories d'usage, la culture (herbicides et fongicides par exemple), les bâtiments d'élevage (insecticides), les locaux de stockage des végétaux (fongicides), les zones non agricoles (herbicides), les bâtiments d'habitation (bactéricides).

Les pesticides peuvent être un risque pour l'environnement. Ce risque peut s'exprimer entre l'état où l'effet nocif ne se produit pas et la certitude absolue où cet effet se produira. Sa

nature dépend de celle de l'agent ou de l'action et également de celle de l'entité concernée. Il existe donc différents types de risques dont l'existence dépend du danger produit.

2.2. La réactivité des pesticides :

Plusieurs phénomènes de réactivité interviennent dans le transport des pesticides dans le sol. Ils peuvent contribuer à abaisser les concentrations des substances dissoutes dans la phase liquide du sol. C'est le cas de la précipitation qui est un passage des solutés dans la phase solide ou la retenue par rétention des substances sur la phase solide du sol. Ces deux phénomènes se comportent donc comme des puits. A l'opposé, la mobilisation des substances de la phase solide vers la phase liquide par la dissolution ou désorption, se comporte comme une source. Il y a également les transformations chimiques, biologiques qui peuvent aussi se comporter comme des puits ou des sources selon les substances concernées (Debos et al, 2002).

2.2.1. La rétention :

La rétention des molécules dans le sol peut être due à plusieurs phénomènes :

- Adsorption physique qui peut être due, à une interaction électrostatique des molécules ionisées (argiles et des substances humiques) ou le résultat des réactions de complexation de surface.
- Adsorption physicochimique due à la formation des liaisons covalentes entre les molécules retenues et les surfaces des constituants du sol.
- Adsorption biologique due à la microfaune du sol, principalement les champignons.

A l'équilibre, la relation entre la concentration de la molécule dans la phase liquide et la quantité adsorbée dans la phase solide est classiquement donnée par l'isotherme d'adsorption linéaire. Il est habituellement décrit par :

$$q_a = K_d \cdot C_e \quad (1)$$

Où K_d est un coefficient de partage entre les phases solide et liquide (L/Kg)

qa : la quantité adsorbée par unité de masse d'adsorbant (mg/Kg)

Ce : la concentration à l'équilibre (mg/L)

Toutefois, pour la plupart des pesticides, l'isotherme d'adsorption est non linéaire, et on utilise la formulation de Freundlich suivante :

$$q_a = K_f C_e^{n_f} \quad (2)$$

Kf : coefficient de partage entre les phases en présence (mg 1-n Ln /Kg)

nf: exposant empirique (-)

Les phénomènes de rétention ne se produisent pas toujours à l'équilibre dans les sols. De plus, l'adsorption est très souvent accompagnée de phénomènes de rétention irréversible. La rétention joue un rôle important dans le transfert des pesticides dans le sol, en contrôlant les concentrations dans la phase liquide. Elle joue également un rôle sur la biodisponibilité des pesticides, donc de leur dégradation (Calvet, 2002).

2.2.2. La dégradation :

La dégradation des solutés est classiquement représentée par la décroissance d'ordre 1 dont l'équation analytique est la suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\mu C \quad (3)$$

Où C : représente la concentration du soluté (mg/L)

t : le temps (s)

μ : le taux de dégradation (s-1)

Cependant, la dégradation des pesticides est plus complexe. Elle peut être le résultat d'un processus communautaire qui associe des espèces microbiennes possédant des capacités de dégradation différentes. En effet, d'après Soulas (2002), aucun microorganisme du sol n'arrive

seul à conduire le processus métabolique jusqu'à son terme pour la plupart des pesticides. De ce fait, ils doivent pouvoir récupérer à partir d'autres substrats du carbone et de l'énergie nécessaire à leur croissance. Il existe donc plusieurs modèles de dégradation qui tiennent compte :

- De la vitesse de dégradation,
- Des caractéristiques physiologiques de la microflore dégradante.
- Du substrat

Enfin, la texture du sol, la température, l'humidité, la teneur en eau et d'autres variables abiotiques jouent un rôle influent sur la dynamique des pesticides dans le sol (Barriuso, 2003). Dans le cadre de ce travail, pour faire de la dégradation nous avons utilisé l'équation (3).

2.3. Description du transport:

Trois mécanismes doivent être pris en compte dans le transport en solution des éléments conservatifs :

- La convection qui entraîne des éléments en solution dans le mouvement du fluide en déplacement. Le soluté se déplace à la vitesse moyenne de l'eau avec la même concentration. Son équation analytique en 1D est la suivante :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (4)$$

θ : la teneur en eau dans le sol (m^3/m^3),

x : coordonnée spatiale (m),

U : la vitesse de Darcy (m/s)

Les autres termes sont précédemment définis.

- La diffusion moléculaire qui est un mouvement brownien dû à l'agitation moléculaire où les particules sont envoyées dans toutes les directions de l'espace. Le transport par diffusion se fait des zones à forte concentration vers les zones à concentration faible, avec une vitesse

d'écoulement nul (pas de mouvement d'eau). Elle est définie par l'équation du transport suivante, écrit en 1D :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (5)$$

Où D représente le coefficient de la diffusion moléculaire dans le sol (m²/s)

- La dispersion cinématique qui est un phénomène de mélange lié à l'hétérogénéité des vitesses microscopiques au sein du milieu. Ici le soluté se déplace avec l'eau. L'équation générale monodimensionnelle de convection / dispersion du transport de soluté sans interaction entre le soluté et la phase solide pour un régime permanent est donc la suivante :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6)$$

Ici, D : représente le coefficient de la dispersion (m²/s) et les autres termes sont également définis précédemment.

Cette équation de conservation de la masse suppose que la totalité de l'eau du sol participe au transport convectif et dispersif du soluté. Elle prédit une courbe d'élution sigmoïdale pour les valeurs du nombre de Péclet pas trop faible (B. Normand et al, 2002) qui est défini de la manière suivante :

$P = UL/D$ avec L, la longueur caractéristique du milieu poreux (m).

Pour les éléments non conservatifs, l'adsorption, si elle est considérée comme un processus se produisant à l'équilibre, est introduite dans les équations de la convection dispersion selon :

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial S}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (7)$$

Avec :

S : La concentration en soluté de la phase solide (adsorbée) (mg/Kg sol)

ρ_b : La densité apparente du sol (g/cm³)

On peut aussi écrire l'équation précédente comme suit :

$$\theta R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} \quad (8)$$

Avec R, le coefficient de retard défini par : $R = 1 + K_d \cdot \rho / \Theta$; dans le cas d'une isotherme linéaire. Il est égal à 1 s'il n'y a pas d'adsorption. Plus l'adsorption est forte, plus R est élevé et le transport est ralenti d'où le terme de retard. Pour les polluants courant, il est compris entre 1 et 2, pour d'autre il peut atteindre 4 (Atteia, 2005). Pour les pesticides, on n'a pas toujours cet équilibre de phases, et R est donc approximatif.

Enfin, la dégradation dans la phase liquide est introduite dans l'équation de la convection dispersion par le terme puits selon :

$$\theta R \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} - \mu C \quad (9)$$

Avec μ : le taux de la décroissance en phase liquide (s⁻¹). On néglige la dégradation dans la phase solide.

Le sol est composé d'une grande hétérogénéité structurale caractérisé par la taille, la forme et la saturation des pores (Gonod, 2002). Cette complexité structurale a un rôle majeur dans la détermination des flux et des sites réactifs. Les microorganismes auraient une préférence, elles se situent près des parois solides dans l'eau (Or et al, 2006). Les équations présentées ci-dessus représentent une description macroscopique des phénomènes et ne prennent pas en compte de façon explicite ces hétérogénéités. Nous avons donc utilisé un modèle de Boltzmann sur réseau pour les prendre en compte.

2.4. Principe des modèles de Boltzmann sur réseau :

La méthode de Boltzmann sur réseau communément appelée Lattice Boltzmann Equation Model (LBE) est une méthode relativement récente qui permet de résoudre les équations d'écoulement des fluides et des polluants dans les géométries complexes des milieux poreux. Historiquement, elle est issue des modèles de gaz sur réseau qui simulent un fluide en le discrétisant en vitesse, en temps et en espace. De ce fait, l'évolution d'un fluide est régie par des règles microscopiques de

collision et de propagation d'un nombre limité de particules se déplaçant aux noeuds d'un réseau fixe. Localement, les interactions microscopiques entre les particules doivent respecter les lois de conservation de la masse et de la quantité de mouvement (Frisch et al, 1987).

Dans le modèle LBE, les variables Booléennes des modèles de gaz sur réseau qui représentent les particules sont remplacées par des variables réelles représentant une fonction de distribution des populations des particules. L'opérateur de collision est obtenu soit par la moyenne de l'opérateur Booléen soit par la linéarisation de la matrice des collisions autour de l'état d'équilibre. Dans ce dernier cas, l'opérateur de collision est donc déterminé par les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice. L'évolution des distributions des populations des particules est calculée par l'approximation de Boltzmann qui suppose une absence de corrélation entre les particules avant la collision. Celle-ci est également appelée hypothèse de chaos moléculaire (V. POT, 1994). L'équation d'évolution du LBE est donnée par l'équation de Boltzmann linéarisée suivante :

$$\begin{array}{ccc}
 \text{Etape propagation} & & \text{Etape collision} \\
 \leftarrow & \longrightarrow & \longleftarrow \\
 f_q(\vec{r} + \vec{c}_q t + 1) = f_q(\vec{r}, t) + \sum_{k=1}^Q S_{qk} (f_k(\vec{r}, t) - f_k^{eq}(\vec{r}, t)) & &
 \end{array} \quad (10)$$

Avec q et k : indices de lignes et de colonnes de la matrice S

\vec{r} : Nœud ou site du réseau

\vec{c}_q : Vecteur vitesse microscopique dans la direction q [lu/tu]

Q : nombre maximal de vitesses microscopiques

T : temps [tu]

$f_q(\vec{r}, t)$: Fonction de distribution des populations

$f_k^{eq}(\vec{r}, t)$: Fonction de distribution des populations à l'équilibre

S : matrice des collisions de dimension Q x Q.

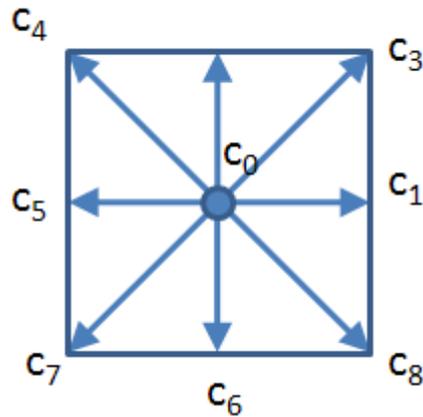


Fig.1 : Schéma de la distribution des vitesses microscopiques discrètes sur une grille carrée dans le cas du modèle à 2 dimensions et 9 vitesses (D2Q9).

Les valeurs propres de la matrice λ_q correspondent à l'inverse de leur temps de relaxation à l'équilibre. Ces valeurs propres λ_q doivent être comprises entre -2 et 0 pour maintenir la stabilité linéaire.

Le modèle de Boltzmann sur réseau est donc défini par trois composantes :

- Une phase discrète définie par un réseau régulier à dimensions D avec un ensemble de vitesses discrètes judicieusement choisies et qui connectent chaque nœud de réseau à un certain nombre de ses voisins et par l'ensemble des fonctions de distribution des vitesses ou de distributions des populations.

- Une matrice de collision S et des fonctions de la distribution des populations à l'équilibre.

- L'équation de l'évolution discrétisée en temps.

2.4.1. Modèle de Boltzmann sur réseau à un temps de relaxation :

Pour le cas des écoulements, le modèle le plus utilisé dans le milieu poreux est le Lattice Bhatnagar-Gross-Krook (BKG). Dans le modèle, les Q temps de relaxation sont tous égaux et la matrice s'écrit :

$S = \lambda I$ avec $\lambda = -1/\tau$ ou $\tau (>1/2)$ est l'unique temps de relaxation du modèle.

L'équation d'évolution du modèle BGK s'écrit de la manière suivante :

$$f_q(\vec{r} + \vec{c}_q, t+1) = f_q(\vec{r}, t) - \lambda[f_q(\vec{r}, t) - f_q^{eq}(\vec{r}, t)] \quad (11)$$

Un choix judicieux des distributions à l'équilibre permet de simuler correctement les écoulements de Navier-Stokes. Notamment, l'équation de la continuité du modèle BGK est la forme exacte de l'équation de la continuité d'un fluide qui ressemble à l'équation habituelle de Navier-Stokes pour un fluide incompressible. Avec la dégradation l'équation 11 devient :

$$f_q(\vec{r} + \vec{c}_q, t+1) = f_q(\vec{r}, t) - \lambda[f_q(\vec{r}, t) - f_q^{eq}(\vec{r}, t)] - \mu f_q^{eq}(\vec{r}, t) \quad (12)$$

Dans le cas de la simulation d'un soluté non réactif, une nouvelle fonction de distribution de particules $g_q(\vec{r}, t)$, représentant le soluté est introduite dans le modèle BGK. L'équation devient :

$$g_q(\vec{r} + \vec{c}_q, t+1) = g_q(\vec{r}, t) - \lambda_g[g_q(\vec{r}, t) - g_q^{eq}(\vec{r}, t)] \quad (13)$$

Avec λ_g : la valeur propre de la matrice des collisions associées au transport

Pour la résolution de l'équation du transport, les distributions à l'équilibre $g_q^{eq}(C, \vec{u})$ s'écrivent de la manière suivante :

$$g_q^{eq}(C, \vec{u}) = t_q C [1 + \frac{1}{C_s^2}(\vec{c}_q, \vec{u})] \quad (14)$$

Avec C : la concentration du soluté défini par $C = \sum_q g_q$.

t_q : Poids

C_s^2 : Constante

C : Concentration du soluté (g/l)

\vec{u} : Vecteur vitesse macroscopique

L'équation d'évolution du modèle BGK pour le transport (équation 13) et les distributions à l'équilibre (équation 14) résout l'équation macroscopique de la convection – dispersion (équation 6).

Le coefficient de la dispersion hydrodynamique est relié au temps de relaxation du modèle selon l'équation suivante :

$$D = (2\tau_g - 1) \frac{C_s^2}{2} \quad (15)$$

Les inconvénients du modèle BGK sont la dépendance de la viscosité vis-à-vis de la position de la frontière et l'instabilité numérique. En effet, la perméabilité dépend de la viscosité au lieu de dépendre des propriétés physiques du milieu. Les modèles à plusieurs temps de relaxation corrigent les deux inconvénients.

2.4.2. Modèle de Boltzmann sur réseau à multiples temps de relaxation :

Comme pour le modèle BGK, la matrice S est une matrice diagonale. Par contre, pour le modèle à multiples temps de relaxation MRT, les valeurs propres de la matrice ne sont pas égales entre elles. Nous avons utilisé un modèle à 2 temps de relaxation qui corrige les inconvénients du modèle BGK et qui est aussi efficace en terme de temps de calcul (Ginzburg, 2005).

2.4.3 Modèle de Boltzmann sur réseau à deux temps de relaxation :

Ce modèle proposé par Ginzburg (2005), décrit les deux temps de relaxation et leur lien à la viscosité et à la dispersion. Il est une alternative aux modèles à multiple temps de relaxation, il présente une performance de calcul égale à ceux d'un seul temps de relaxation et corrige la dépendance de la perméabilité à la viscosité et améliorent les conditions de stabilité.

2.4.4. Conditions aux limites :

Pour simuler les écoulements dans un milieu poreux on introduit une phase solide dans le modèle avec une condition d'imperméabilité aux nœuds du réseau appartenant aux sites solides (phase solide). Pour cela, il existe plusieurs règles d'imperméabilité dont la plus adaptée est pour les milieux poreux à géométrie complexe est celle de rebond (Bounce-Back). Ici, les populations de particules qui rencontrent un site solide repartent dans la direction d'où elles viennent. Pour ce modèle TRT cette règle de rebond permet de retrouver les écoulements de Poiseuille exacts si la frontière physique de la phase solide se trouve à mi-chemin entre le site fluide et le site solide (Ginzbourg, 2005). Cette règle s'écrit de la manière suivante :

$$f_{\bar{q}}(\bar{r}_b, t+1) = \tilde{f}_q(r_b + \bar{c}_q, t+1) \quad (16)$$

r_b : Site frontière appartenant à la phase fluide dont au moins un des ses voisins est un site solide ($r_b + \bar{c}_q$).

$\tilde{f}_q(r_b + \bar{c}_q, t+1)$: Fonction de distribution obtenue après les étapes de collision et de propagation

$f_{\bar{q}}(\bar{r}_b, t+1)$: Population réfléchies depuis la paroi solide

\bar{q} : Direction opposée à la direction q

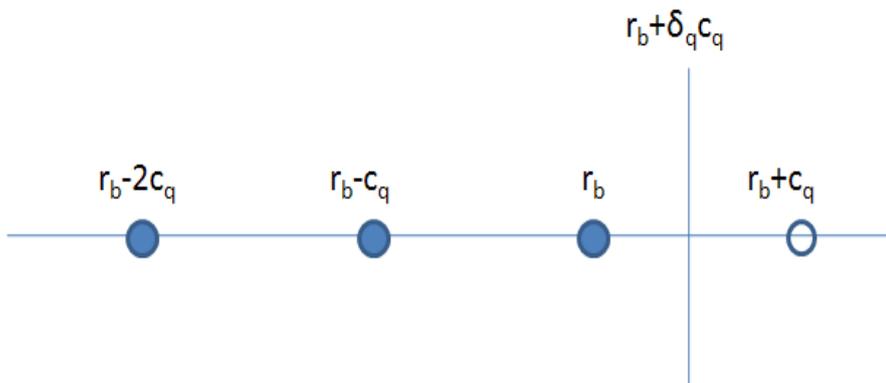


Fig.2 : Schéma de rebond à la paroi solide

Sur le schéma, la frontière solide est placée à mi-distance entre le nœud fluide frontière r_b et le nœud solide frontière r_b+c_q ($\delta_q=1/2$). Les cercles bleus représentent les nœuds fluides et le cercle blanc représente le nœud solide.

2.5. Les tests :

Le but est de comparer les résultats donnés par le modèle de LBE et les solutions analytiques des modes de transport connus. Cette comparaison a été effectuée pour différentes valeurs du taux de la dégradation, m , au moyen de calcul de l'erreur entre les concentrations C_{LB} du modèle et C_{TH} calculées à partir des solutions analytiques. Pour tous ces tests, nous avons considéré une densité et une viscosité homogènes et constantes.

Nous avons vérifié le modèle à l'aide du calcul de l'erreur de norme L^2 entre les concentrations données par le modèle qu'on a appelée concentrations de Boltzmann et celles calculées par la solution analytique qu'on a appelée concentrations théoriques. Cette erreur est calculée par la formule suivante :

$$L^2 = \sqrt{\frac{\sum_0^i (C_{LB} - C_{TH})^2}{\sum_0^i (C_{TH})^2}} \quad (17)$$

Où C_{LB} : Concentration de Boltzmann

C_{TH} : Concentration théorique.

i : nombre de valeurs

Nous avons réalisés 3 séries de tests où nous avons vérifié le module de dégradation en phase liquide (test1), l'effet de la diffusion (test2), puis la convection-dispersion (test3).

2.5.1. Test 1 : Dégradation en milieu homogène :

Nous avons commencé par une vérification du module de dégradation dans un système à concentration homogène. Une géométrie simple à 3D a été choisie avec $NX=NY=NZ=10$ sites et différentes valeurs du taux de dégradation.

Nous avons comparé la solution donnée par le modèle et la solution analytique de l'équation de la dégradation (équation 3) écrite ci-dessous:

$$C(t) = M_0 e^{(-\mu t)}, \text{ Avec } M_0: \text{ Masse initiale du soluté}$$

$$\text{L'erreur de norme } L^2 \text{ calculée s'écrit : } L^2 = \sqrt{\frac{\sum_0^t (C_{LB}(t) - C_{TH}(t))^2}{\sum_0^t (C_{TH}(t))^2}} \quad (18)$$

2.5.2. Test 2 : Dégradation avec transport diffusif :

Nous avons comparé la solution donnée par le modèle et la solution analytique de la dégradation avec le transport diffusif donné par Bear (1988) pour une injection d'un traceur (de type Dirac) dans un milieu monodimensionnel.

$$C(x,t) = \frac{M_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4DT} - \mu t\right) \quad (19)$$

Avec : $C(x,t)$ concentration au point x à l'instant t

M_0 : masse initiale du soluté

x : distance à l'origine

D : coefficient de diffusion

Le système étudié a pour géométrie $NX=4500 \text{ lu}$ et $NY=3 \text{ lu}$. De plus, nous avons étudié l'effet des conditions aux limites en ajoutant la phase solide. Dans ce deuxième cas, le système étudié est celui de 2 plaques planes parallèles de longueur $L=4500 \text{ lu}$ et distantes de $H = NY-2$. Pour les deux cas, le pic de soluté (Dirac) a été positionné au milieu du système ($NX=2250 \text{ lu}$).

Dans les deux cas, l'erreur L^2 s'écrit :
$$L^2 = \sqrt{\frac{\sum_0^n (C_{LB}(x) - C_{TH}(x))^2}{\sum_0^n (C_{TH}(x))^2}} \quad (20)$$

La sommation est effectuée sur tous les points du réseau et calculée à $t= TMAX=9000 \text{ tu}$.

Pour le cas de la diffusion avec la phase solide, deux valeurs du coefficient de diffusion ($0,46 \text{ lu}^2/\text{tu}$ et $0,046 \text{ lu}^2/\text{tu}$) et 3 valeurs de distance entre les deux plaques (3lu , 23lu , 48lu) sont testées pour évaluer l'effet des conditions aux limites (rebond).

2.5.3. Test 3 : Dégradation avec transport convectif -dispersif :

Ici nous avons répété la même géométrie à plaques planes en plaçant le pulse de soluté à 1000 lu par rapport à l'axe de NX (4500 lu). La solution analytique dans ce cas est donnée par Bear en 1988 :

$$C(x,t) = \frac{M_0}{\sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{(x - U_0 t)^2}{4DT} - \mu t\right) \quad (21)$$

Avec : U_0 : la vitesse des pores

D : coefficient de dispersion

Nous avons également évalué l'effet des conditions aux limites. Ainsi nous avons pris deux valeurs de NY ($5 lu$ et $25lu$) et deux valeurs de vitesses U ($8 \cdot 10^{-2} lu/tu$ et $10^{-2} lu/tu$).

2.6. L'hétérogénéité :

Le milieu naturel n'étant pas homogène, nous avons simulé une localisation liée à l'hétérogénéité de la fonction de la dégradation à l'échelle d'un pore. En effet, une hypothèse est que les microorganismes ont tendance à se localiser le plus souvent près des parois des pores (OR et al, 2007). D'où l'idée de programmer une dégradation plus importante près des parois solides qu'au milieu du pore.

Nous avons donc repris la géométrie de 2 plaques parallèles pour représenter un pore et nous avons affecté aux sites fluides frontières des parois solides un taux de dégradation μ , et nous avons annulé ce taux pour les autres sites fluides.

Dans un premier temps, nous avons comparé la concentration avec hétérogénéité à la concentration calculée pour un milieu homogène équivalent dans lequel le taux de dégradation a été calculé par une simple moyenne pondérée μ_p .

$$\mu_p = \frac{(N_{BF} \cdot \mu_{solide} - N_F \mu_{int})}{(N_T)} \quad (22)$$

Avec : μ_{solide} : taux de la dégradation près de la phase solide

μ_{int} : taux de la dégradation pour les autres sites fluide

N_F : nombre de sites fluides qui ne sont pas au contact avec la phase solide

N_{BF} : nombres de sites fluides en contact avec la phase solide

N_T : $N_F + N_{BF}$: nombre de sites fluides total

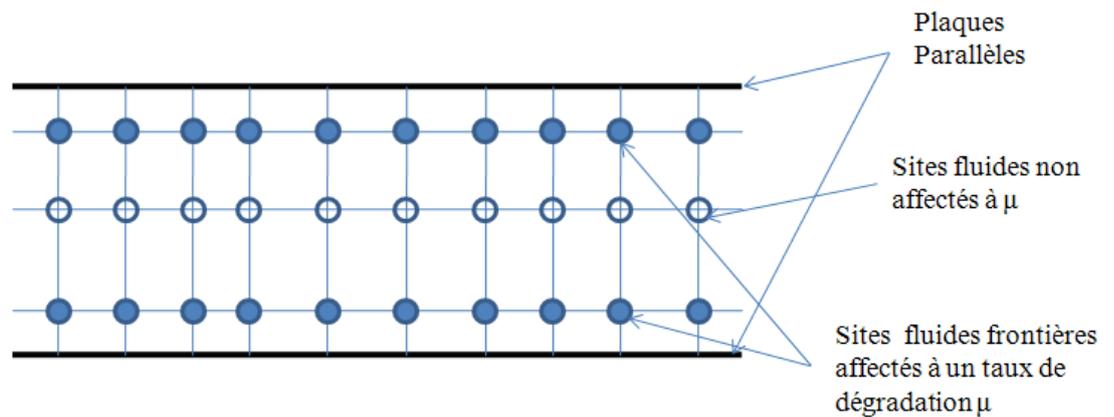


Figure 3 : Schéma représentant l'hétérogénéité entre 2 plaques parallèles avec phase solide

2.6. 2. Le milieu poreux 3D :

Nous avons pris une image tomographique d'une taille réelle d'environ $6,5\text{mm}^3$, de résolution $68\mu\text{m}$ (taille = $96 \times 96 \times 96$ voxels) issu d'un échantillon de sol prélevé dans l'horizon labouré (0 à 30cm) d'un sol limono-argileux de Feucherolles (Yvelines). Cette image est directement introduite dans le modèle LBM pour donner un système à géométrie cubique où $N_X = N_Y = N_Z = 96 lu$. Nous appliquons un coefficient de diffusion 100 fois moins élevé que celui que nous avons pris dans nos tests pour réaliser une simulation de transport. Ceci, pour éviter que tout le soluté soit diffusé.

Nous avons utilisé le champ de vitesse stationnaire, calculé pour cet échantillon (Elyeznasni et al, 2008). Nous avons ensuite appliqué un pulse (Dirac) de soluté sans dégradation dans un premier temps, ensuite avec la dégradation. Nous n'avons considéré que les valeurs μ comprises entre $10^{-4} tu^{-1}$ et $10^{-5} tu^{-1}$. La concentration est injectée à $Z = 20$ sites.

2.7. Correspondance des unités :

Considérant une valeur du coefficient de la diffusion moléculaire des pesticides de Jury et al 1983 de $D=0,0179\text{cm}^2/\text{h}$ et une correspondance entre l'unité réseau du modèle LBM (distance entre deux sites) $1\text{ lu} = 68\mu\text{m}$ (résolution spatiale de l'image tomographique), nous donnons dans le tableau suivant la correspondance des unités réseau aux unités physiques réelles pour D_{LB} de $0,46\text{ lu}^2/\text{tu}$.

	Unités Réseaux	Unités Physique Réelles
Coefficient de diffusion moléculaire (D)	$0,46\text{ lu}^2/\text{tu}$	$6,9.10^{-4}\text{cm}^2/\text{s}$
Temps	1 tu	4,3 s
Taux de dégradation μ (DT50)	$1.\text{tu}^{-1}$	3.10^{-2} h^{-1}
Vitesse (U)	$1.10^{-2}\text{ lu}/\text{tu}$	0 ,057 cm/h

Tableau 1 : Correspondance des unités réseau en unités physiques réelles

3. RESULTATS ET DISCUSSION:

3.1. Test 1:

La figure 4 montre l'évolution de la concentration en fonction du temps calculée par le modèle LB pour une valeur de $\mu=10^{-2}\text{ tu}^{-1}$. Nous avons une bonne superposition de la courbe calculée par le modèle LB et solution analytique.

Nous constatons donc que pour des valeurs de μ comprises entre 10^{-5} et 10^{-2} tu^{-1} L^2 augmente de 10^{-5} à 10^{-3} (Tableau2).

μ	L^2
0,1	$1,81.10^{-1}$
0,01	$2,29.10^{-3}$
0,001	$3,37.10^{-4}$
0,0001	$3,52.10^{-5}$

Tableau 2 : Résultats des erreurs L^2 en fonction de μ dans le cas d'une dégradation homogène

Le modèle est donc valide dans les conditions de ce test pour des valeurs de μ inférieures à 10^{-2} tu^{-1} , autrement dit à $\mu < 3.10^{-4} \text{ h}^{-1}$.

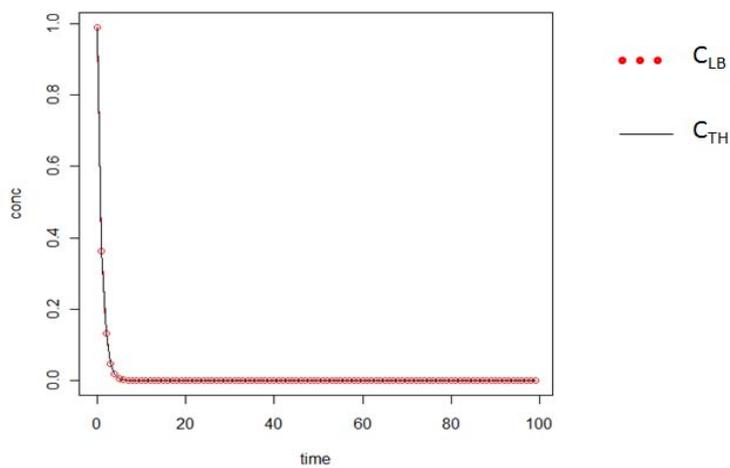


Figure 3 : Evolution temporelle des concentrations C_{TH} et C_{LB} dans le cas d'une dégradation en milieu homogène

3.2. Test 2:

Dans le cas du transport diffusif sans phase solide, nous avons toujours une bonne superposition des courbes de concentrations calculées par le modèle LB et la solution pour des valeurs de μ inférieures $10^{-3} tu^{-1}$. Pour des valeurs de μ comprises entre 10^{-5} et $10^{-4} tu^{-1}$ l'erreur augmente de l'ordre de 0,1 à 0,4 % (Tableau 3). Au delà de $10^{-3} tu^{-1}$, le modèle diverge de la solution théorique jusqu'à une erreur de 30%.

μ	L^2
0,01	$3,65.10^{-1}$
0,002	$1,83.10^{-2}$
0,001	$4,76.10^{-3}$
0,0005	$1,29.10^{-3}$
0,0004	$8,62.10^{-4}$
0,0003	$5,22.10^{-4}$
0,0001	$1,24.10^{-4}$

Tableau 3 : Evolution de l'erreur L^2 en fonction de μ dans le cas d'une diffusion

μ	D	
	0,46	0,046
	L^2	L^2
1.10^{-2}	$3,64.10^{-1}$	$3,64.10^{-1}$
1.10^{-3}	$4,78.10^{-3}$	$4,15.10^{-3}$
1.10^{-4}	$1,24.10^{-4}$	$1,43.10^{-4}$
1.10^{-5}	$7,05.10^{-5}$	$1,82.10^{-4}$

Tableau 4 : Evolution de l'erreur en fonction du μ et du coefficient de la diffusion pour un transport diffusif avec la phase solide et quelque soit la valeur de NY (5,25 et 50)

Le modèle est donc valide pour des taux de dégradation inférieurs ou égaux à 10^{-3} tu^{-1} . De plus, il n'y a pas d'effet de la condition aux limites de type rebond.

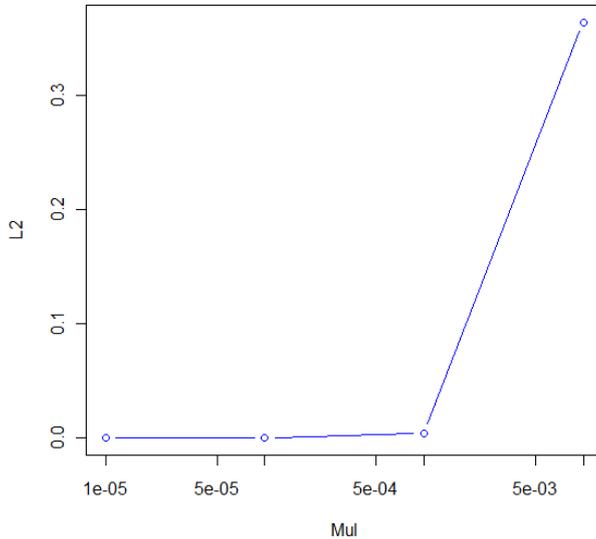


Figure 4: Erreurs L^2 en fonction de μ dans le cas d'une dégradation avec un transport diffusif sans phase solide

3.3. Test 3 :

Avec le transport convectif, nous avons toujours les concentrations C_{TH} et C_{LB} très proches et l'erreur L^2 qui augmente pour des valeurs de μ élevées (figure 5). Elle varie aussi en fonction de la vitesse comme le montre le tableau 4. . Pour $NY=25 \text{ lu}$ et $\mu=10^{-4} \text{ tu}^{-1}$, nous avons une erreur de $8,93 \cdot 10^{-3}$ avec une vitesse de $U=8 \cdot 10^{-2} \text{ lu/tu}$ alors qu'elle est de $3,80 \cdot 10^{-4}$ pour une vitesse de 10^{-2} lu/tu . L'erreur L^2 varie très peu en fonction de la distance entre les deux plaques.

La relation entre les valeurs de μ et L^2 est décrite par une régression d'ordre 2 (figure 5).

μ	U	
	1.10 ⁻²	1.10 ⁻²
	L2	L2
1.10 ⁻³	1,45.10 ⁻²	1.10 ⁻³
7.10 ⁻⁴	1,09.10 ⁻²	2,71.10 ⁻³
5.10 ⁻⁴	18,93.10 ⁻³	1,59.10 ⁻³
1.10 ⁻⁴	5,99.10 ⁻³	3,80.10 ⁻⁴
1.10 ⁻⁵	5,66.10 ⁻³	2,58.10 ⁻⁴

Tableau 4 : Evolution de L^2 en fonction de la vitesse pour $NY=25lu$

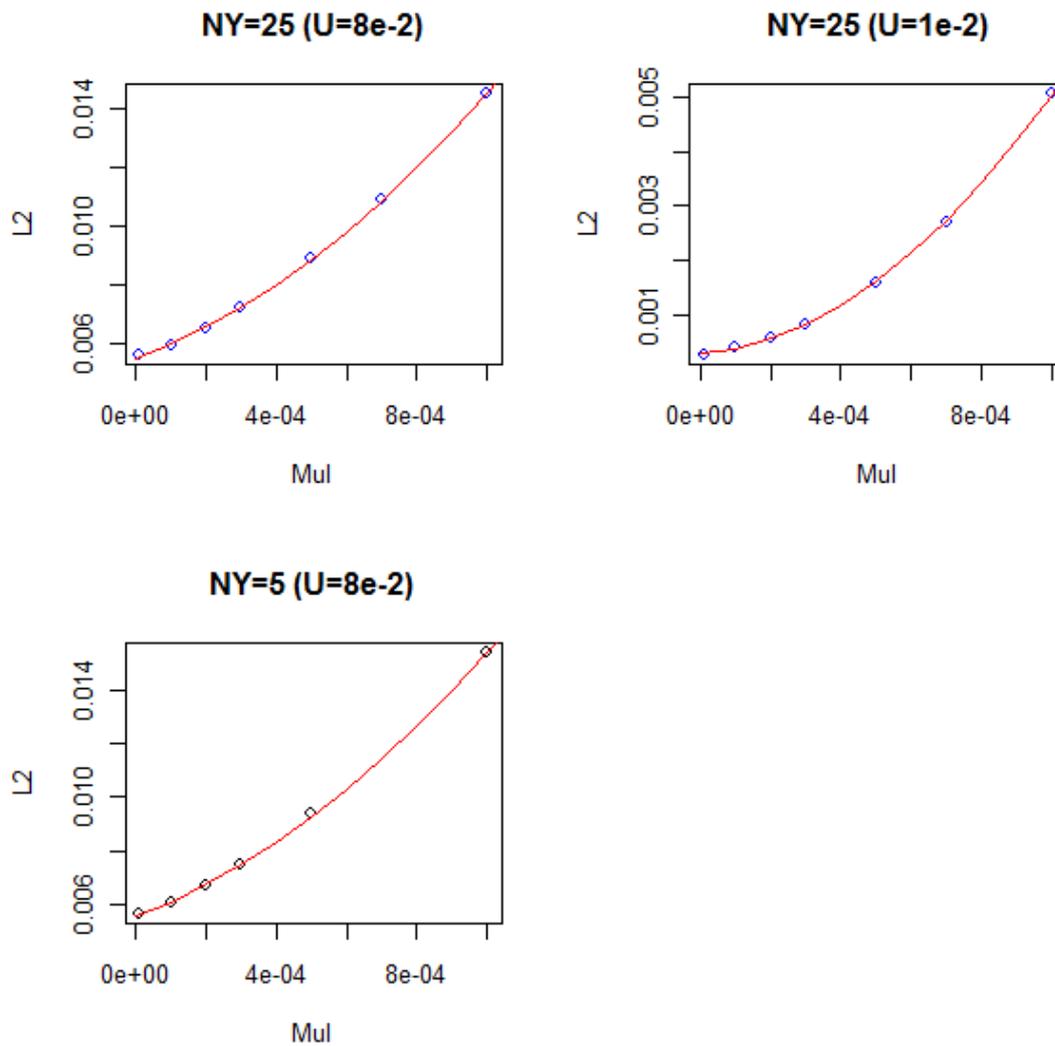


Figure 5 : Erreur L^2 en fonction de μ pour le cas d'une dégradation avec un transport convectif-dispersif

Pour des valeurs de μ supérieures à 10^{-3} tu^{-1} , les erreurs deviennent très importantes, ce qui limite le domaine de validité du modèle aux valeurs de μ du tableau 4.

3.4. L'hétérogénéité à l'échelle du pore:

Dans les figures 6 à 9, les courbes rouges représentent les concentrations calculées par le modèle avec hétérogénéité, les courbes bleues et noires représentent respectivement les concentrations calculées par le modèle pour un milieu équivalent (moyenne pondérée du taux de dégradation) et les concentrations théoriques correspondantes.

- Pour $U=10^{-2} \text{ lu/tu}$ et $NY=5\text{lu}$: Avec la moyenne pondérée ($\mu_p=0,67.10^{-4} \text{ tu}^{-1}$ et $\mu_p=0,67.10^{-5} \text{ tu}^{-1}$) calculée respectivement pour les deux taux de dégradation ($\mu_{int}=1.10^{-4}$ et $1.10^{-5} \text{ tu}^{-1}$), les deux courbes théorique et calculée se superposent avec une erreur $L^2=3,42.10^{-4}$ et $2.62.10^{-4}$ respectivement. Lorsque la répartition des fonctions de dégradation est hétérogène, la courbe calculée par le modèle LB est différente de celle du modèle équivalent. Pour ce dernier cas $\mu=10^{-4} \text{ tu}^{-1}$ et l'erreur $L^2=8,16.10^{-1}$. Cette différence diminue avec le taux de la dégradation avec une erreur L^2 de $6,14.10^{-2}$ pour une valeur de $\mu=10^{-5} \text{ tu}^{-1}$ (figure 6).

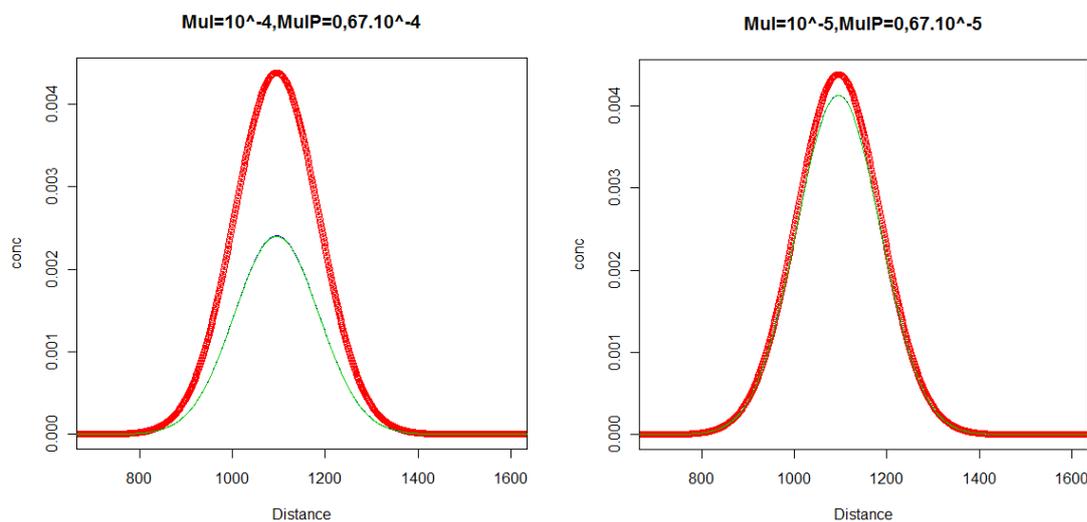


Figure 6 : Profils de concentration relative pour le cas d'une répartition hétérogène des fonctions de dégradation pour $U= 10^{-2} \text{ lu /tu}$ et $NY=5 \text{ lu}$

- Pour $U=8.10^{-2} \text{ lu/tu}$ et $NY=5\text{lu}$, on trouve des résultats semblables. L'erreur est de $L^2=5,64.10^{-3}$ et $5,88.10^{-3}$ pour $\mu_{\text{int}}=1.10^{-4}$ et $1.10^{-5} \text{ tu}^{-1}$ respectivement, entre le milieu équivalent et la solution analytique. Avec hétérogénéité, les différences sont quantifiées par les erreurs L^2 qui sont respectivement de $8,16.10^{-1}$ et de $5,84.10^{-2}$ pour les valeurs de $\mu=10^{-4}$ et 10^{-5} tu^{-1} (figure 7).

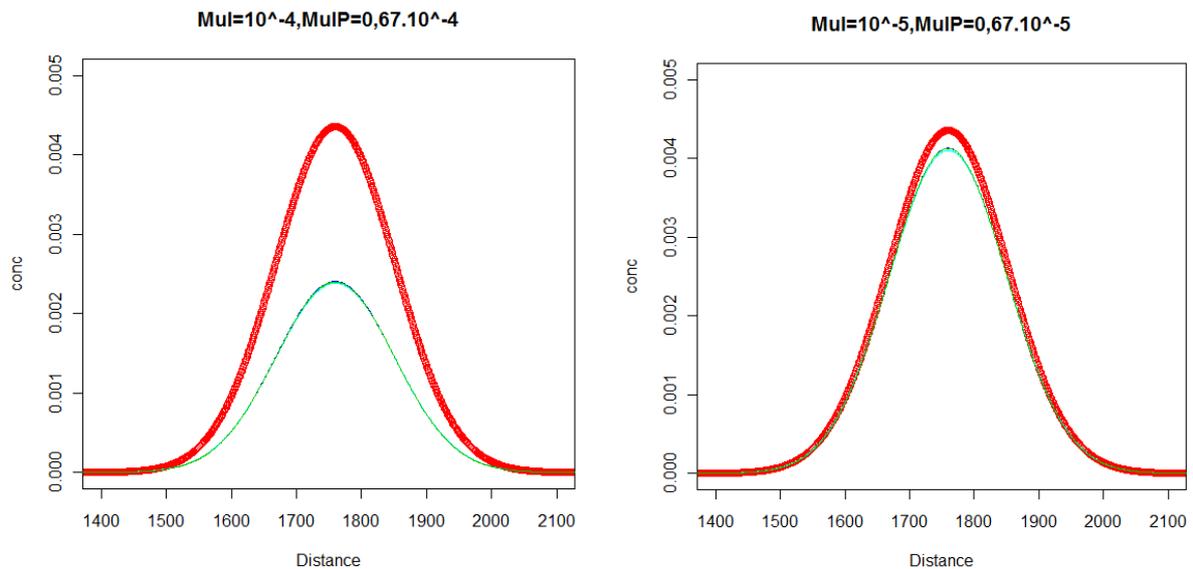


Figure 7 : Profils de concentration relatives pour le cas d'une répartition hétérogène des fonctions de dégradation pour $U= 8.10^{-2} \text{ lu /tu}$ et $NY=5 \text{ lu}$

- Pour $U=10^{-2} \text{ lu /tu}$ et $NY=25 \text{ lu}$, l'erreur est de ($L^2=2,48.10^{-4}$ et $L^2=2,56.10^{-4}$) entre le milieu équivalent et la solution analytique ($\mu_p=0,087.10^{-5} \text{ tu}^{-1}$ et $\mu_p=0,087.10^{-4} \text{ tu}^{-1}$). Avec hétérogénéité pour des valeurs de $\mu=10^{-4} \text{ tu}^{-1}$ et $\mu=10^{-5} \text{ tu}^{-1}$, les erreurs L^2 sont respectivement de $5,58.10^{-1}$ et de $7,85.10^{-2}$ (figure 8).

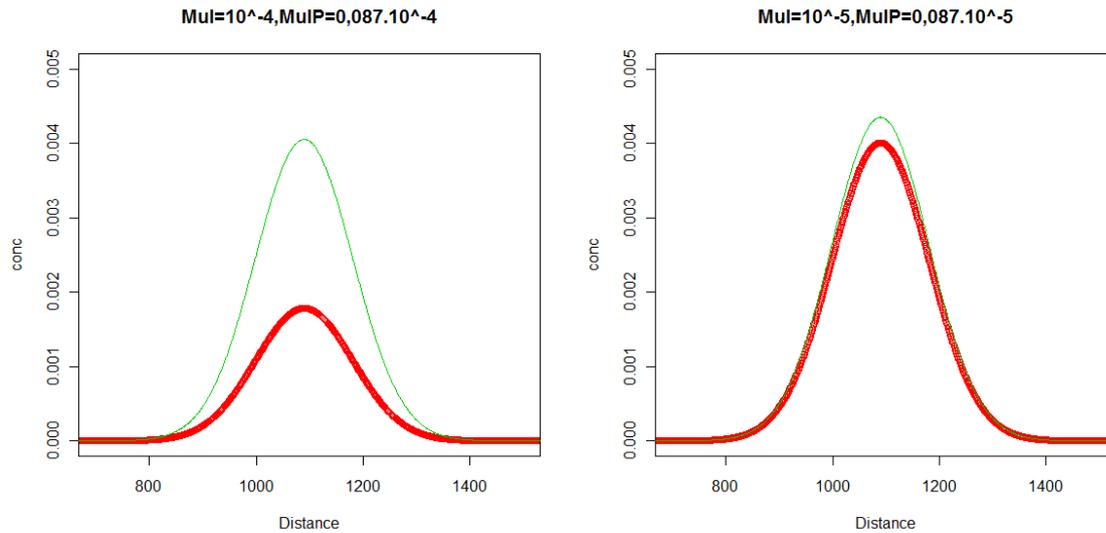


Figure 8 : Profils de concentration relative pour le cas d'une répartition hétérogène des fonctions de dégradation pour $U=10^2 tu^{-1}$ et $NY=25 lu$.

-Pour $U=8.10^2 lu /tu$ et $NY=25 lu$, avec les moyennes pondérées ($\mu_p=0,087.10^{-5}tu^{-1}$ et $\mu_p=0,087.10^{-4}tu^{-1}$), les deux courbes théorique et calculée pour le milieu équivalent se superposent aussi ($L^2=5,64.10^{-3}$ et $L^2=5,66.10^{-3}$). Avec hétérogénéité, pour des valeurs de $\mu=10^4 tu^{-1}$ et $10^5 tu^{-1}$, la courbe du modèle est différente de la courbe théorique avec des erreurs respectives de $5,6.10^{-1}$ et de $8,15.10^{-2}$ (figure 9).

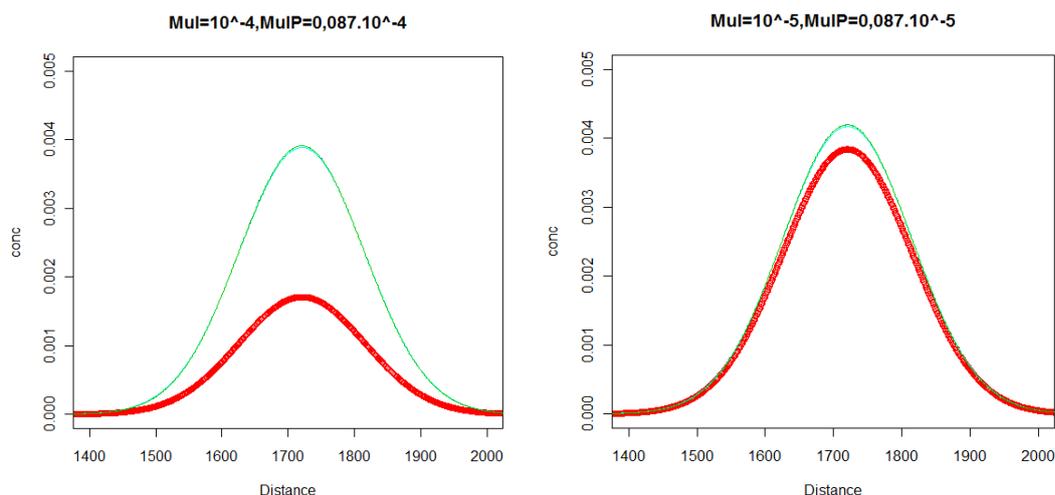


Figure 9 : Profils de concentration relative pour le cas d'une répartition hétérogène des fonctions de dégradation pour $U=8.10^2 lu / tu$ et $NY= 25lu$

Nous constatons que les courbes restent toujours gaussiennes pour le cas hétérogène.

- Pour $\mu=10^{-4}tu^{-1}$, quelque soit la valeur de la vitesse U, nous avons plus de dégradation pour NY= 25 que pour NY=5.

- Par contre, pour $\mu=10^{-5}tu^{-1}$, quelque soit la valeur de U, nous avons moins de dégradation pour NY=25 par rapport à NY=5.

Nous remarquons également que pour la distribution hétérogène avec NY=25, la dégradation est surévaluée par rapport au milieu équivalent. Alors qu'avec NY=5, on la sous-évalue.

Nous avons donc mis en évidence l'impact d'une distribution hétérogène des sites de la dégradation sur le transport des solutés.

3.5. Hétérogénéité dans le milieu poreux :

La figure 10 représente la porosité de l'échantillon de sol. La porosité de l'échantillon est constituée de deux micropores dont l'un a une taille d'environ deux fois supérieure à l'autre. La valeur de porosité obtenue après seuillage de l'image originale en niveaux de gris, est de 18%.

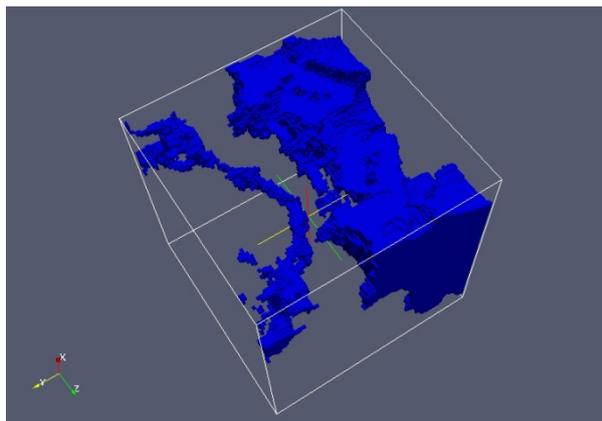


Figure 10 : Image tomographique des micropores dans un sol de Feucherolles.

La figure 11 présente le champ de vitesse stationnaire obtenu en appliquant un champ de force dans la direction z. L'écoulement se fait avec une vitesse plus importante dans le grand pore que dans le petit. Dans le grand pore, on observe que la vitesse augmente aux deux points de rétrécissement. Le régime permanent est atteint au bout de 1000 tu .

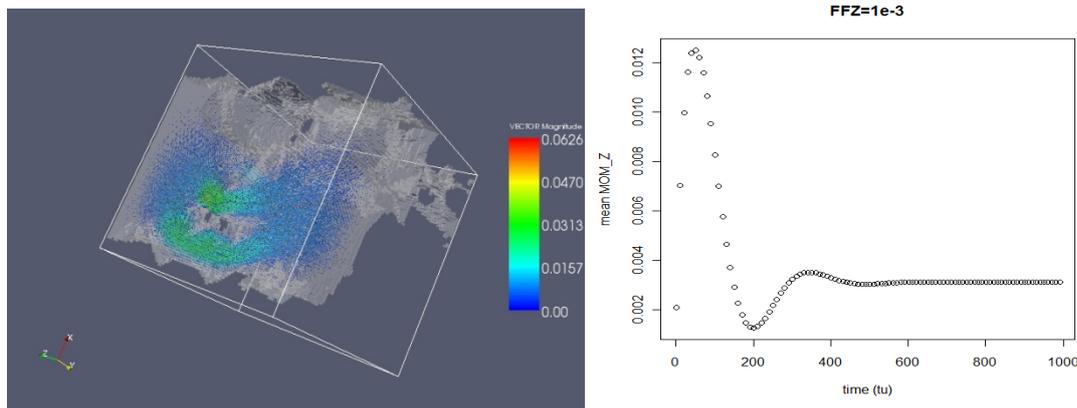


Figure 11 : Image des champs de vitesse et de son profil d'évolution dans le temps

Les figures suivantes (13 à 15) montrent le transport par convection d'un soluté conservatif (figure 13) et d'un pesticide (figures 14-15) dans le milieu poreux. Sur la figure 13 nous observons 3 pics sur la courbe : le premier pourrait correspondre à un piégeage du soluté conservatif dû à une diffusion très faible, le deuxième à la convection moyenne et le troisième pourrait être dû à une convection rapide dans les micropores (Figure 13). En effet, la vitesse moyenne calculée à partir du champ de vitesse est de $3,44 \cdot 10^{-3} lu/tu$ ce qui correspondrait à un déplacement moyen du pic de $5000 \times 3,44 \cdot 10^{-3} = 17,2 lu$. Nous observons que le deuxième pic est positionné autour de $35 lu$, ce qui correspond au déplacement moyen.

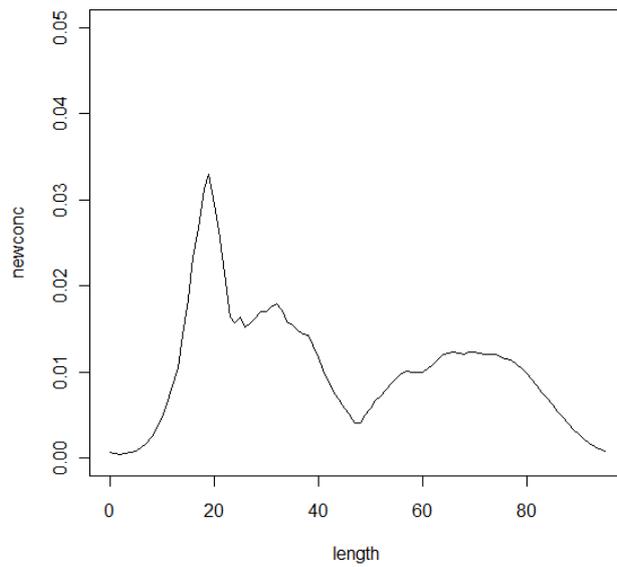


Figure13 : Profil de la concentration relative du soluté sans dégradation à $t=5000tu$

Dans le cas où nous avons de la dégradation homogène (figures 14 et 15), on constate que l'amplitude des pics diminue avec le taux de dégradation.

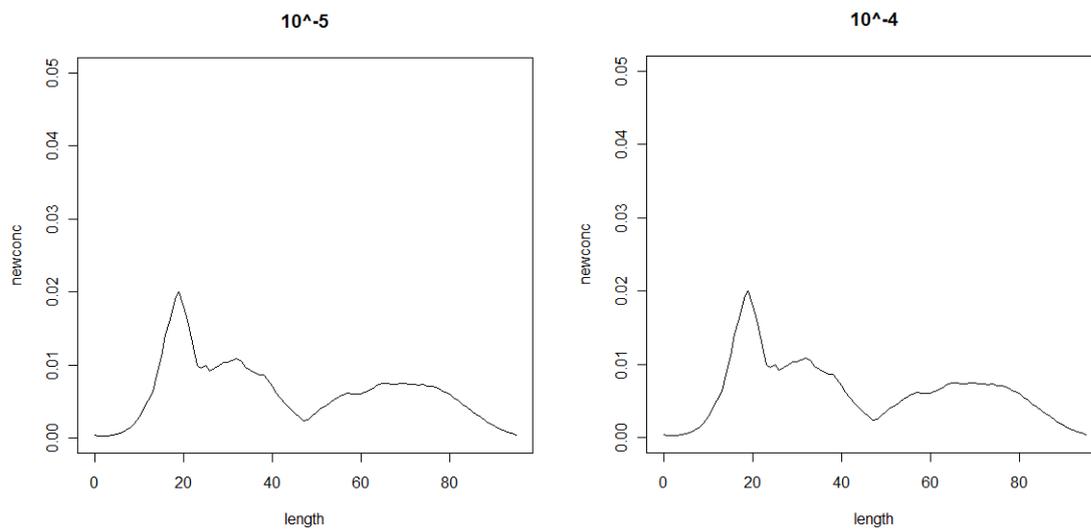


Figure 14: Profils des concentrations relatives du soluté avec dégradation pour des taux de 10^{-5} et $10^{-4} tu^{-1}$.

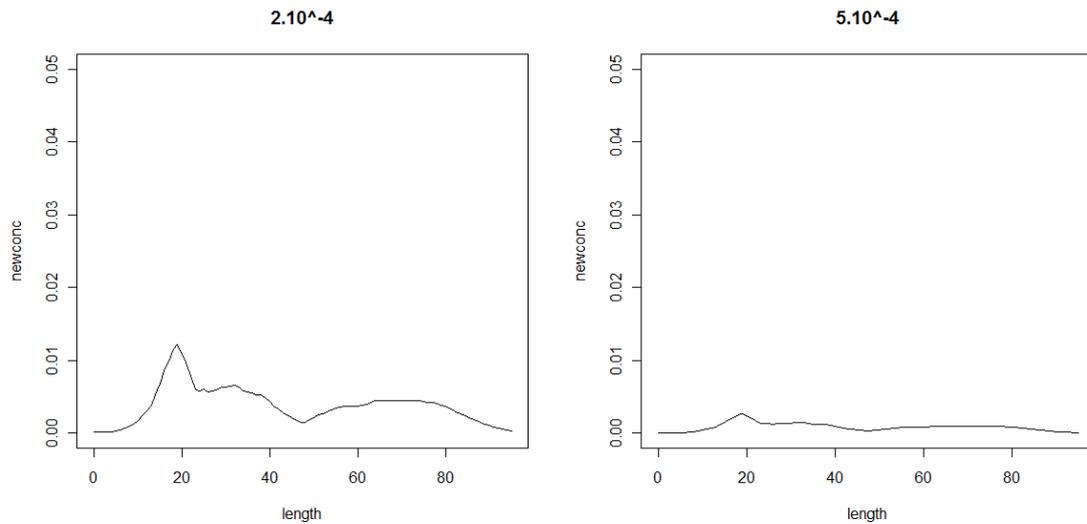


Figure 15 Profils de la concentration relative du soluté avec dégradation pour des taux de 2.10^{-4} et $5.10^{-4} \text{ tu}^{-1}$

Nous avons appliqué la même distribution hétérogène des fonctions de dégradation (près des parois solides) pour tout le milieu poreux. Les résultats du test (Figure 16) montrent que le premier pic n'est pas modifié par rapport à une distribution homogène ; l'amplitude du deuxième pic est plus faible et par contre l'amplitude du troisième pic est plus élevée. La bonne superposition du premier pic de la diffusion pour les deux cas peut s'expliquer par le fait que le piégeage physique du soluté dans cette zone à faible écoulement contribue à un temps d'homogénéisation de la concentration dans cette zone similaire avec ou sans distribution hétérogène de la dégradation. Le troisième pic montre que le transport préférentiel par convection est plus accentué avec la distribution hétérogène. Si on prend l'hypothèse d'un profil de vitesse de Poiseuille dans les pores du milieu poreux, dans le cas d'une distribution hétérogène, le soluté au centre du pore et soumis à une vitesse de convection plus grande sera moins soumis à la dégradation. Ceci pourrait expliquer l'amplitude plus grande du troisième pic.

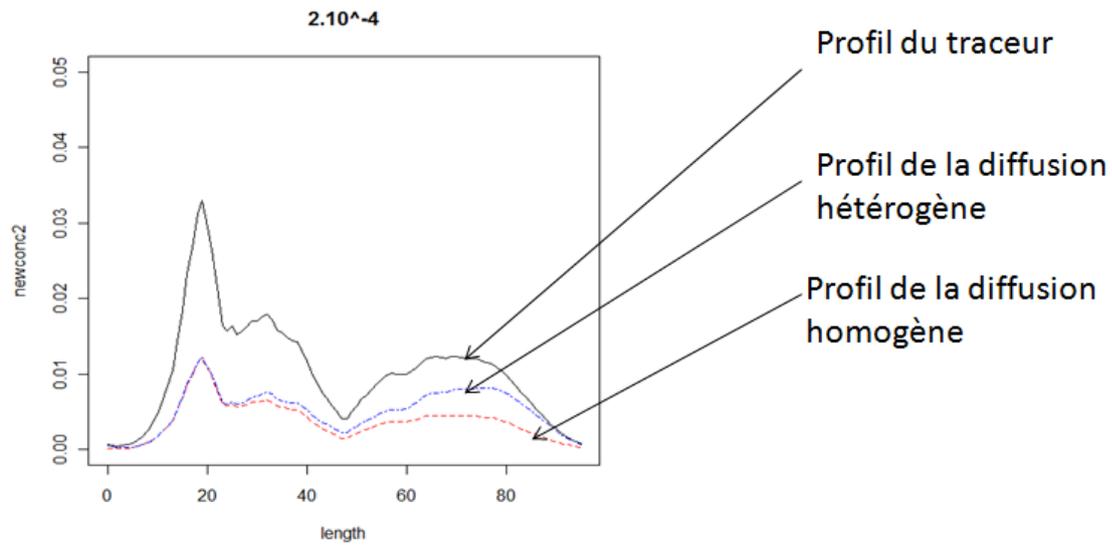


Figure 16 : Profils de la concentration relative du soluté avec une dégradation pour des taux de $2.10^{-4}tu^{-1}$

4. CONCLUSION :

Ce travail de modélisation nous a permis de comprendre les mécanismes de transport dans les micropores. A partir des différents tests effectués nous avons évalué les domaines de validité du modèle tels que les conditions aux limites, dans notre cas de type rebond (Bounce –Back) qui n’as pas d’effet sur la dégradation. Le modèle est donc valide pour les cas suivants :

- Dans le cas de la dégradation seule, c’est à un taux de dégradation, μ inférieur à $3.10^{-4}h^{-1}$.
- Dans une dégradation avec diffusion, c’est avec un μ inférieur à $3.10^{-5}h^{-1}$, où nous n’avons pas d’effet de condition aux limites comme on l’a dit un peu plus haut.

Pou le cas de la convection, le modèle a montré que pour des valeurs du taux de dégradation supérieur à $3.10^{-5}h^{-1}$, le pourcentage d’erreur devient important, ce qui limite notre domaine de validité à des valeurs de μ qui lui sont inférieures.

Nous avons également mis en évidence l’impact d’une distribution hétérogène des sites de la dégradation sur le transport des solutés avec le modèle de Boltzmann sur réseau dans une géométrie simple de pore et pour une géométrie de milieu poreux 3D réel, issue d’une image tomographique d’un échantillon de sol non remanié.

Bibliographie :

1. APPERT Cécile (1993) ; Transition de phase dynamique de type liquide gaz et création d'interface dans un gaz sur réseau ; Thèse ENS.
2. ATTEIA Olivier (2005) ; Chimie et pollution des eaux souterraines, Hermès-Lavoisier.
3. BARRIUSO Enrique (2003) ; Estimations des risques environnementaux des pesticides ; INRA
4. BEAR Jacob (1988) ; Dynamics of Fluids in Porous Media ; Dover.
5. CALVET Raoul (2005) ; Les pesticides dans le sol, conséquences agronomiques et environnementales ; GROUPE France AGRICOLE
6. DEBOS Carol et al (2002) ; Modélisation des pesticides dans l'environnement ; Club CRIN « Environnement et société ».
7. Elyeznasni N., Pot V., Ginzburg I., Genty A. - 2008. Transport modeling of pesticides in soil porosity using Lattice Boltzmann simulations and 3D maps provided from X-ray computed tomography. Computational Methods in Water Resources XVII International Conference, July 6-10 2008, San Francisco, USA.
8. GINZBOURG Irina, Les problèmes des conditions aux limites dans les méthodes de gaz sur réseaux à plusieurs phases ; Thèse Paris VI.
9. GONOD et al (2005), Spatial distribution of Microbial 2,4-Dichlorophenoxy Acetic Acid Mineralization from Field to Microhabitat Scales, Soil Science Society of America Journal, 70, 64-71.
10. NUNAN et al (2003) ; Quantification of the in situ distribution of soil bacteria by large-scale imaging of thin sections of undisturbed soil ; FEMS Microbiology Ecology, 44, 203-215.
11. OR et al (2007) ; Physical constraints affecting bacterial habitats and activity in unsaturated porous media. Advances in Water Resources, 30, 1505-1527.
12. POT Valérie (1994) ; Etude microscopique du transfert et du changement de phase en milieu poreux, par la méthode des gaz sur réseau ; Thèse Paris VI.

RESUME :

Les écosystèmes se trouvent actuellement menacés par un ensemble de polluants organiques et métalliques. Toutefois, l'utilisation des fertilisants, des produits phytosanitaires et des rejets agricoles est indispensable pour une agriculture économique viable en raison d'une population mondiale qui ne cesse de croître. D'où la nécessité de mettre sur pied d'outils scientifiques susceptibles de faire progresser une agriculture respectueuse de l'environnement. De ce fait, nous avons utilisé un modèle numérique (Boltzman sur réseau) qui décrit la dynamique des pesticides dans le sol au niveau des micropores. Il s'agit de la modélisation de la dégradation et les formes de transport par diffusion et dispersion. Ceci en prenant en compte les hétérogénéités spatiales du sol. Pour ce faire, une série de tests a été effectuée pour valider le modèle. Les résultats de celui ci ont été comparés avec ceux des solutions analytiques de transport de pesticides connues. L'évaluation est faite par un calcul d'erreur de norme L2. Ce modèle a permis de simuler la dynamique des pesticides dans un échantillon de sol non remanié, à l'aide d'une image tomographique de la porosité du milieu. Le modèle a permis de mettre en évidence le rôle de l'hétérogénéité spatiale des fonctions de dégradation sur le transport des pesticides.