

## **Estimation des paramètres de transport de l'eau et des solutés dans les sols non saturés principe, limites**

En préalable à la présentation de la méthode utilisée et des résultats, il semble nécessaire d'énoncer les équations qui permettent de décrire les flux d'eau dans le sol ainsi que les variables et paramètres associés, et de discuter des méthodes déjà existantes pour l'estimation de ces paramètres.

Il faudra également définir ce qu'on entend par conductivité électrique du sol, rappeler les paramètres qui la contrôlent, ainsi que les modèles et équations qui tentent de la relier à d'autres paramètres du sol, comme la teneur en eau.

Enfin, on rappellera la définition du problème inverse, avant de présenter l'algorithme d'inversion utilisé, et de discuter du choix d'une fonction objective adaptée au problème étudié.

### **1.1. Hydrodynamique et transport des solutés en zone non saturée**

#### **1.1.1. Équation de Richards**

Les flux d'eau dans un milieu poreux et variablement saturé sont décrits classiquement par l'équation de Richards (1931). Cette équation générale des écoulements en milieu non saturé résulte d'une combinaison de la loi de Darcy, étendue aux milieux non saturés, et de l'équation de continuité. Cette dernière s'écrit :

$$\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} \quad (1)$$

où  $h$  est le potentiel matriciel [L],  $\theta$  est le contenu en eau volumique du sol (sans dimension),  $q$  est le flux [L T<sup>-1</sup>],  $t$  est le temps [T], et  $z$  [L] est la coordonnée verticale comptée positivement vers le haut.

La loi de Darcy exprime la relation qui existe entre le flux et le gradient hydraulique :

$$q = -K(h) \frac{\partial \phi}{\partial z} \quad (2)$$

où  $K$  est la conductivité hydraulique [L T<sup>-1</sup>], et  $\phi$  est le potentiel hydraulique [L]. Ainsi, exprimée dans une forme à 3 dimensions, où la conductivité hydraulique  $K$  est isotrope, l'équation de Richards s'écrit:

$$\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ K(h) \frac{\partial (h + x_i)}{\partial x_i} \right] \quad (3)$$

où  $x_i (i=1,2,3)$  sont les coordonnées spatiales avec  $x_1$  la coordonnée verticale comptée positivement vers le haut.

La résolution de l'équation de Richards implique au préalable une formalisation mathématique des fonctions  $K(h)$  et  $\theta(h)$ , qui sont respectivement la conductivité hydraulique du milieu, et la teneur en eau volumique en fonction du potentiel matriciel  $h$ .

Il existe deux groupes principaux de modèles permettant d'appréhender la relation  $K(h)$ . Le premier se base sur une généralisation de l'approche de Kozeny, pour lequel la conductivité hydraulique relative  $K_r$  dépend du taux effectif de saturation  $S_e$ :

$$K_r = \frac{K}{K_s} = S_e^\alpha \quad (4)$$

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (5)$$

où  $K_s$  est la conductivité hydraulique à saturation [L T<sup>-1</sup>],  $\alpha$  est un coefficient qui varie entre 3 et 3,5 selon le sol, et  $\theta_r$  et  $\theta_s$  sont les teneurs en eau volumique résiduelle et à saturation respectivement.

Le second groupe de modèles, dits modèles statistiques, utilise une relation  $\theta(\phi)$ , teneur en eau en fonction du potentiel matriciel, pour calculer la fonction  $K(\theta)$ . Il comprend, entre autres les modèles de Burdine (1953), Wille et Gardner (1958), Childs et Collis-George (1950), Millington et Quirk (1961), Mualem (1976) et van Genuchten (1980).

Dans ces modèles, le milieu poreux est envisagé comme un ensemble de pores interconnectés. Chaque pore possède deux états d'équilibre possibles : rempli par un fluide ou vide (c'est-à-dire rempli d'air). La vitesse du fluide dans les pores est décrite par la loi de Poiseuille. L'équation de Darcy est appliquée à une tranche de sol qui échantillonne l'ensemble des pores, de tailles différentes, et alignés parallèlement. Ces modèles se différencient par les hypothèses sur l'interconnectivité des pores et la tortuosité. Nous avons choisi d'utiliser dans le cadre de ce travail le modèle le plus largement répandu qui est celui de van Genuchten (1980).

### 1.1.2. Paramètres de Mualem-van Genuchten

La formulation des fonctions  $K(h)$  et  $\theta(h)$  que nous avons choisie pour ce travail est celle de Mualem-van Genuchten qui utilise les expressions suivantes de  $K(h)$  et  $\theta(h)$ , établies par Mualem (1976) et van Genuchten (1980) :

$$\theta(h) = \theta_r + (\theta_s - \theta_r) \left[ 1 + (\alpha h)^n \right]^{-m} \quad (6)$$

$$K(h) = K_s Se^l \left[ 1 - \left( 1 - Se^{1/m} \right)^m \right]^2 \quad (7)$$

où  $l$  est un paramètre lié à la tortuosité du sol (sans dimension),  $n$  et  $m$  des coefficients de forme tels que  $m=1-1/n$  et  $n>1$  (sans dimension), et  $\alpha$  un coefficient de forme [ $L^{-1}$ ].

### 1.1.3. Processus de transport des solutés

Selon de Marsily (1981), on distingue trois mécanismes principaux de migration des espèces chimiques dissoutes dans l'eau dans un milieu poreux : la convection, la diffusion moléculaire et la dispersion cinématique :

*- La convection*

C'est l'entraînement des éléments en solution dans le mouvement du fluide qui se déplace. Cependant, si le fluide présent dans le sol est pour partie immobile, la migration des éléments par voie convective n'est assurée que par la partie mobile du fluide présent dans le milieu. Ainsi la convection n'a lieu que dans la porosité dite cinématique (i.e. qui participe effectivement au transport de l'eau).

*- La diffusion moléculaire*

Ce phénomène est lié à l'agitation moléculaire. Dans un fluide au repos, les molécules et ions dissous se déplacent dans toutes les directions de manière aléatoire (mouvement brownien), la résultante de ces mouvements à l'échelle macroscopique étant nulle. En effet il n'y a pas de mouvement d'ensemble car la somme vectorielle des vitesses de toutes les particules s'annule. S'il existe un gradient de concentration, alors le mouvement brownien, par cette agitation moléculaire, tend à équilibrer les concentrations.

*- La dispersion cinématique (appelée aussi dispersion hydrodynamique)*

A l'échelle du pore, il existe un gradient de vitesse, selon lequel les molécules au centre du pore se déplacent plus rapidement que celles en bordure.

Selon le trajet de pore à pore parcouru, il s'opère aussi une différenciation des vitesses des particules.

#### **1.1.4. Equation de convection-dispersion et coefficients de dispersion**

Par le phénomène de dispersion cinématique, on tient en compte l'hétérogénéité du champ de vitesse. Par une loi analogue à la loi de Fick, on peut tenir compte de la dispersion cinématique grâce à l'usage d'un coefficient de dispersion  $\mathbf{D}$  [ $L^2 T^{-1}$ ] qui s'intègre à l'équation 1D de convection-dispersion suivante :

$$\frac{\partial \theta C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\partial \theta v C}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \theta D \frac{\partial C}{\partial z} \right] - F(C, S) \quad (8)$$

où  $\rho_b$  est la densité apparente du sol [ $M L^{-3}$ ],  $C$  la concentration en soluté [ $M L^{-3}$ ],  $t$  le temps [ $T$ ],  $S$  la concentration de la phase adsorbée [ $M M^{-1}$ ],  $v$  la vitesse de l'eau [ $L T^{-1}$ ] et  $F(C, S)$  une fonction qui décrit les interactions solide-liquide (sorption, désorption, précipitation, dissolution).

Si l'on considère un milieu en 3 dimensions, alors  $\overline{\overline{D}}$  est un tenseur symétrique du 2<sup>ème</sup> ordre ayant comme direction principale la direction du vecteur vitesse de l'écoulement, les deux autres directions principales étant généralement orthogonales à la première. Le tenseur de dispersion exprimé dans les directions principales d'anisotropie se réduit à trois composantes :

$$\overline{\overline{D}} = \begin{vmatrix} D_L & 0 & 0 \\ 0 & D_T & 0 \\ 0 & 0 & D_T \end{vmatrix} \quad (9)$$

$D_L$  étant le coefficient de dispersion longitudinale (dans le sens de l'écoulement) et  $D_T$  le coefficient de dispersion transversale (dans les deux directions orthogonales à l'écoulement).

Les valeurs de ces coefficients de dispersion varient avec la valeur du module de la vitesse de Darcy ou de la vitesse microscopique moyenne d'écoulement  $v$  ; on utilise le nombre de Péclet  $P_e$  [-], pour différencier les régimes d'écoulement et les rôles respectifs joués par les phénomènes de diffusion moléculaire et de dispersion cinématique :

$$P_e = \frac{|v|l}{d_0} \quad (10)$$

où  $v$  représente la vitesse microscopique moyenne [ $L T^{-1}$ ],  $l$  la longueur caractéristique du milieu poreux (diamètre moyen des grains ou des pores) [ $L$ ] et  $d_0$  le coefficient de diffusion moléculaire [ $L^2 T^{-1}$ ]. Plus  $P_e$  est élevé, plus la dispersion cinématique l'emporte sur la diffusion moléculaire. Pour  $P_e=1$ , les rôles des 2 phénomènes sont équilibrés.

Par ailleurs, il est souvent fait référence dans la littérature aux *coefficients de dispersion intrinsèque*  $\alpha_L$  et  $\alpha_T$  [ $L$ ] qui sont égaux au quotient du coefficient de dispersion cinématique par la composante de la vitesse intergranulaire moyenne parallèle à la direction considérée.

$$\alpha_L = \frac{D_L}{U} \quad (11)$$

$$\alpha_T = \frac{D_T}{U} \quad (12)$$

où  $U$  est la vitesse de Darcy [ $L T^{-1}$ ].

Ces paramètres sont très variables selon le type de mesure : de Marsily (1981) rapporte qu'en laboratoire, sur colonnes de sable,  $\alpha_L$  est de l'ordre de quelques centimètres, alors que, à l'échelle des aquifères, il est de l'ordre du mètre à la centaine de mètres.  $\alpha_T$  est beaucoup plus petit et vaut entre 1/5 et 1/100 de  $\alpha_L$ . Il est admis qu'en moyenne  $\alpha_T$  est égale au dixième  $\alpha_L$  (tests de traçages en milieu aquifère). Par la suite on emploiera le terme 'dispersivité' pour désigner le coefficient de dispersion intrinsèque  $\alpha_L$  et on utilisera le symbole  $D$  pour s'y référer.

Vanderborght et Vereecken (2007), qui font une analyse statistique sur 635 données de mesures de dispersivité (issus de 57 publications dans des journaux scientifiques), montrent qu'il y a une augmentation significative de la valeur de  $D$  lorsque les dimensions de l'expérience augmentent. Alors que, sur des mesures en laboratoire (colonnes ou échantillons), la moyenne des mesures est proche de 7 cm, les mesures de terrain montrent des valeurs égales en moyenne à 30 cm. De même, la nature des conditions aux limites de l'expérience utilisée pour mesurer  $D$  a un impact significatif sur sa valeur. Les valeurs obtenues lors d'expériences réalisées à saturation sont largement supérieures à celles obtenues lors d'expériences où la saturation n'est pas atteinte.  $D$  est donc un paramètre, qui dépend largement des conditions de l'expérience pendant laquelle on le détermine, ce qui implique par exemple, que son emploi pour des mesures prédictives doit être accompagné de multiples précautions.

### **1.1.5. Quelles méthodes pour estimer les paramètres hydrodynamiques et de transport des solutés ?**

Il semble qu'il existe 3 approches bien distinctes pour estimer les paramètres hydrodynamiques :

- La première, qui a connu de nombreux développements depuis ses débuts il y a environ vingt ans, est l'utilisation de fonctions de pédotransfert. Il s'agit de fonctions mathématiques permettant d'estimer les courbes de rétention en eau et de conductivité hydraulique à partir de mesures de granulométrie, de porosimétrie par intrusion de mercure, de teneur en matière organique ou encore de masse volumique apparente (Bastet et al., 1998 ; Schaap et Leij, 2001). Dans le même ordre d'idée, Haverkamp et al. (2005) proposent un index de forme pour prédire l'allure de la courbe de rétention à partir des propriétés texturales du sol.

- La seconde approche consiste à acquérir des points expérimentaux de ces courbes  $K(h)$  et  $\theta(h)$ , et de calibrer ensuite les relations afin que les courbes respectent au mieux les données expérimentales. On utilise par exemple des presses de Richards (Klute, 1986) pour obtenir des valeurs ponctuelles de  $\theta(h)$ , et des mesures de débit à partir d'infiltromètres à disque ou en cylindres sous pression pour obtenir des valeurs ponctuelles de  $K(h)$ .
- La dernière enfin est celle des méthodes dites inverses, comme la technique du flux à divers paliers de pression ('multistep outflow experiment') (Finsterle et Faynishenko, 1998). Le principe général de ces méthodes est de dériver les propriétés hydrodynamiques d'un sol à partir de mesures réalisées lors d'une expérience qui implique un flux d'eau. C'est un enregistrement de mesures sur un système dynamique. Il peut s'agir, par exemple, d'une infiltration d'eau ou d'une évaporation. Les mesures peuvent être la teneur en eau volumique du sol, la quantité d'eau infiltrée ou évaporée, ou encore le potentiel matriciel. Un algorithme d'optimisation est utilisé pour déterminer le jeu de paramètres qui permet de simuler au plus proche les mesures. Alors que les premières méthodes inverses mises au point nécessitaient, pour le traitement mathématique du problème, un état stationnaire, c'est-à-dire un flux constant au cours du temps, de nouvelles méthodes qui s'accommodent de régimes transitoires ont vu le jour. L'avantage de ces nouvelles méthodes est multiple : les expériences sont plus courtes, car il n'est pas nécessaire d'atteindre un régime permanent, l'information contenue est aussi plus large car le régime transitoire explore un domaine de valeurs des variables plus grand que le régime permanent (par exemple la sorptivité dans le cas d'une infiltration à disque). Le choix du type d'expérimentation est aussi plus large. On peut citer entre autres les expériences de «one-step» (Kool et al., 1985) ou «multi-step» (Eching et Hopmans, 1993) «outflow», qui sont des écoulements d'eau à travers des cylindres de sol sous un ou plusieurs paliers de pression ou du pénétromètre conique (Gribb, 1996). Des conditions de drainage (Dane et Hruska, 1983), d'évaporation (Romano et Santini, 1999; Jhorar et al., 2002), d'infiltration (Russo et al., 1991 ; Zou et al., 2001) ou d'infiltration et redistribution (Lambot et al., 2002) peuvent aussi être utilisées. Jacques et al. (2002) inversent quant à eux les paramètres hydrodynamiques sous une condition de pluie. Comparées aux méthodes du second groupe, les méthodes inverses ont aussi l'avantage d'opérer dans une seule et même expérience et d'éviter donc un échantillonnage multiple. De plus le fait d'opérer au champ permet d'éviter les mesures de laboratoire qui peuvent être non représentatives des conditions de terrain.

Il est évident que les résultats de modélisations-prédictions de transferts d'eau (et éventuellement de soluté) sont dépendants des modèles choisis (expression mathématique des fonctions  $\theta(h)$  et  $K(h)$ ), et des paramètres associés. L'estimation des paramètres est un préliminaire crucial à la modélisation et par conséquent le choix de la méthode d'estimation est capital. Des questions d'échelles sont aussi au cœur du problème de la modélisation numérique des transferts d'eau et plus particulièrement de l'estimation des paramètres. Il serait difficile de ne pas parler, ne serait-ce que brièvement, des questions de représentativité spatiale des paramètres hydrodynamiques. En effet comment utiliser une mesure ponctuelle (sur quelques  $\text{cm}^3$  de sol par exemple) pour estimer la valeur d'un paramètre qui représentera le sol sur une parcelle (plusieurs  $\text{m}^2$ ) ? Comment effectuer le transfert d'échelle ('upscaling') ? Peut-on mesurer en plusieurs endroits une variable et calculer une moyenne qui est censée représenter la variable en question à l'échelle de la parcelle (Mertens et al., 2002) ? Ces questions, bien que cruciales, ne sont pas l'objet direct de ce travail. Néanmoins le lecteur intéressé pourra se référer à l'article de synthèse de Vereecken et al. (2007) qui expose les différentes méthodes utiles au transfert des propriétés hydrodynamiques du sol mesurées localement à une échelle supérieure. Quoi qu'il en soit, on gardera à l'esprit que du choix de la méthode découle la représentativité spatiale du jeu de paramètres obtenus et ce en raison des différences de volume investigués, ou des distances entre les points d'échantillonnages ou de mesures.

#### **1.1.6. Un exemple d'outil de mesure des propriétés hydrodynamiques du sol : l'infiltromètre à disque**

Afin de donner une idée de l'intérêt de l'infiltromètre à disque et de justifier du choix de son utilisation pour la méthode que nous allons proposer, il convient maintenant de décrire l'appareil et son fonctionnement avant d'indiquer les usages qui lui sont habituellement réservés. L'infiltromètre à disque «Triple Ring Infiltrometer at Multiple Suctions» (TRIMS) permet de réaliser des essais d'infiltration sous charge négative maintenue constante (Perroux et White, 1988 ; Ankeny et al., 1991 ; Reynolds et Elrick, 1991). Cet appareil est conçu pour mesurer *in situ* le flux d'infiltration axisymétrique de l'eau dans le sol à travers un disque.

## Principe

Les aspects théoriques et pratiques de son utilisation, en vue d'une caractérisation hydrodynamique des sols, ont été synthétisés par Coquet et al. (2000). Le principe repose sur la mesure du flux d'infiltration de l'eau dans des conditions de non-saturation. Les moteurs de l'infiltration sont la succion exercée sur l'eau par les capillaires du sol, et la gravité. Le potentiel de l'eau à l'interface disque/sol est déterminé par l'utilisateur. La gamme de potentiel qui peut être explorée se situe entre -25 et 0 cm de hauteur de colonne d'eau, soit entre -2,5 et 0 kPa. Il est donc possible d'établir *in situ* une relation expérimentale entre la conductivité hydraulique du sol et le potentiel de l'eau dans une gamme proche de la saturation. En faisant référence à la théorie capillaire, on peut relier, via la loi de Jurin, le potentiel de l'eau  $h$  à un diamètre maximal équivalent de pore  $d_{eq}$  [L] pouvant être mis en jeu à un potentiel de l'eau donné. On parle de diamètre équivalent car on assimile les pores à des capillaires parfaitement cylindriques. Si  $h$  et  $d_{eq}$  sont exprimés en cm, la loi de Jurin s'écrit :

$$d_{eq} = \frac{0,3}{h} \quad (13)$$

Par exemple, pour un potentiel de -1 cm de hauteur de colonne d'eau, le diamètre maximal des pores mis en jeu est de 0,3 cm. L'utilisation d'une gamme de potentiels de l'eau entre -25 et 0 cm correspond à un spectre de pores de diamètre équivalent supérieur ou égal à 0,12 mm.

## Description de l'appareil

L'appareil (Figure 1) est constitué d'un disque creux (D) muni d'une membrane (M) à sa base en contact avec le sol. Le disque est alimenté en eau par un réservoir (RA) gradué, amovible et fermé à sa partie supérieure par une pince de Mohr. L'entrée de l'air dans le réservoir d'alimentation se fait par un tube (B) relié à un vase de Mariotte (VM) permettant de régler le potentiel de l'eau au niveau de la surface du sol. Pour que l'eau quitte l'infiltromètre et s'infilte dans le sol, elle doit être remplacée dans le réservoir d'alimentation par un volume identique d'air. Cet air transite à travers le vase de Mariotte par le tube A à la pression atmosphérique. Les bulles d'air ainsi formées à la base du tube A remontent dans le vase de Mariotte et rejoignent le volume d'air contenu dans celui-ci. Compte tenu de la charge

hydrostatique  $h_1$  (en cm) existant entre la base du tube (A) et la surface de l'eau contenue dans le vase de Mariotte, le volume d'air du vase de Mariotte est à une pression  $p_{airVM}$  [ $M L^{-1} T^{-2}$ ] inférieure à la pression atmosphérique  $p_{atm}$  [ $M L^{-1} T^{-2}$ ] :

$$p_{airVM} = p_{atm} - \rho_w h_1 g \quad (14)$$

où  $\rho_w$  est la masse volumique de l'eau [ $M L^{-3}$ ] et  $g$  l'accélération de la pesanteur [ $L T^{-2}$ ].

Lors de l'infiltration de l'eau, l'air quitte le vase de Mariotte par le tube (B) à la pression  $p_{airVM}$  pour rejoindre le réservoir d'alimentation. L'eau située juste à la sortie du tube (B) a donc une pression égale à celle de l'air qui sort du tube. On en déduit la pression de l'eau  $p_0$  à la sortie du disque de l'infiltromètre:

$$p_0 = p_{airVM} + \rho_w h_2 g = p_{atm} + \rho_w (h_2 - h_1) g \quad (15)$$

Soit, si l'on exprime les pressions en unité de hauteur de colonne d'eau, un potentiel de l'eau  $h_0$  à la sortie de l'infiltromètre:

$$h_0 = h_2 - h_1 \quad (16)$$

La hauteur  $h_2$  est déterminée en remontant le tube (A) jusqu'à ce que l'eau coule à travers la membrane. On a alors  $h_0=0$  et  $h_1=h_2$ . Le tube est alors rabaissé de la distance correspondant au potentiel  $h_0$  désiré.

La membrane du disque doit avoir un potentiel d'entrée d'air bien inférieur à -25 cm tout en ayant une résistance hydraulique négligeable devant celle du sol. Pour assurer un parfait contact entre la membrane et le sol, on dispose une mince couche de sable fin entre les deux. La taille des grains est choisie de telle sorte que la sorptivité du sable soit importante (ainsi le sable se sature rapidement), sans toutefois que les grains soient trop grossiers, auquel cas le sable ne serait pas saturé aux faibles potentiels. Le sable de Fontainebleau, dont la taille médiane des grains est 0,15 mm, est bien adapté à cet usage.

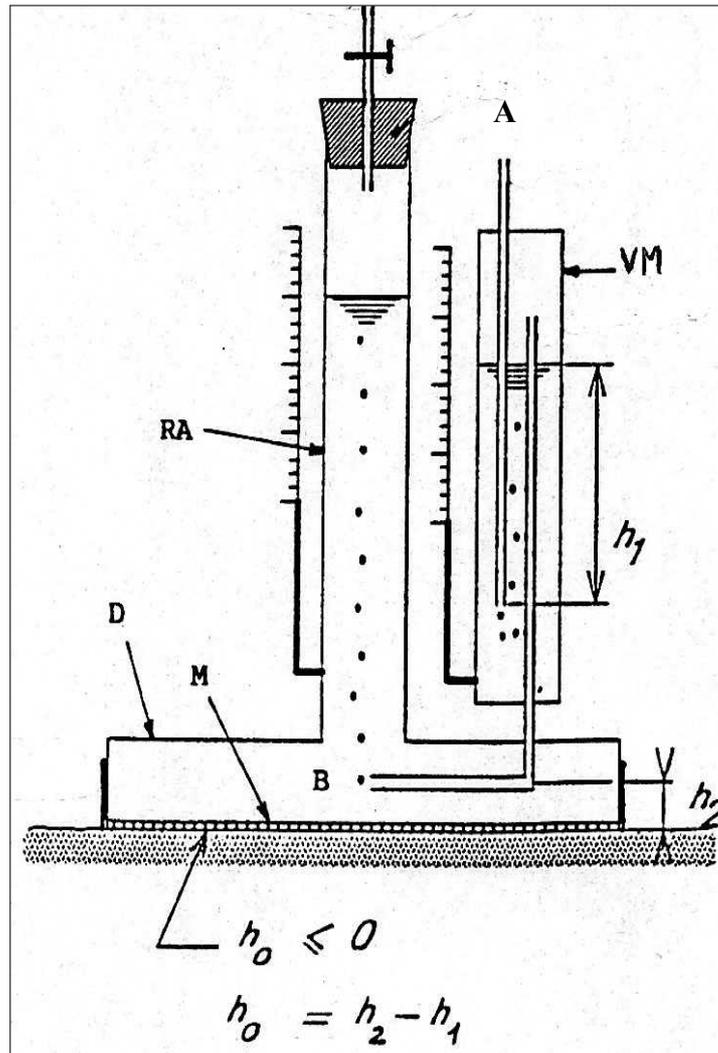


Figure 1. Schéma de l'infiltromètre à disque (RA : réservoir d'alimentation en eau ; VM : vase de Mariotte ; D : disque creux ; M : membrane de nylon ; A : tube d'aération du vase de Mariotte ; B : tube d'aération du réservoir d'alimentation)

### Usages

L'infiltromètre à disque est très couramment utilisé pour quantifier les effets des macropores et les chemins d'infiltration préférentiels sur le terrain. Les données d'infiltromètre à disque sont utilisées depuis déjà deux décennies pour estimer la caractéristique de conductivité hydraulique  $K$  proche de la saturation et à saturation, l'estimation de  $K$  à partir des données d'infiltrométrie étant réalisée le plus souvent grâce à la solution analytique de Wooding

(1968). L'analyse des régimes transitoire et stationnaire de l'infiltration permet de déduire des informations sur les caractéristiques hydrodynamiques, notamment la conductivité hydraulique et la sorptivité du sol (White et Perroux, 1987 ; Warrick, 1992 ; Vandervaere, 1995 ; Vandervaere et al., 2000). Il est connu que la présence de macropores dans le sol peut contribuer à des mouvements rapides de l'eau et de solutés vers la profondeur (Watson et Luxmoore, 1986), et que, à saturation, l'essentiel des flux prend place dans les macropores (Nachabe, 1995). C'est en raison principalement de son adaptation à l'étude de la macroporosité du sol que l'infiltromètre à disque connaît une large popularité (Coquet et al., 2005a). En raison de la rapidité des mesures, l'infiltromètre à disque a aussi été utilisé pour appréhender la variabilité spatiale des propriétés hydrauliques du sol (Mohanty et al., 1994). Son usage pour une estimation inverse des paramètres hydrodynamiques du sol connaît lui aussi un intérêt important (Simunek et van Genuchten, 1996; Simunek et al., 1999 ; Simunek et al., 1998 ; Ramos et al., 2006).

## **1.2. La conductivité électrique du sol, mesure indirecte de la teneur en eau volumique du sol**

Afin de suivre les flux d'eau et/ou de soluté dans le sous-sol, il est devenu manifeste que les méthodes géophysiques sont une aide précieuse. On peut citer en ce qui concerne la tomographie de résistivité électrique les travaux de Daily et al. (1992), Kemna et al. (2002), Vanderborght et al. (2005), Liu et Yeh. (2004) et Singha et Gorelick (2005). Les mesures radar aussi sont largement utilisées, en association avec des mesures électriques (Binley et al., 2002 ; Grote et al., 2003 ; Lunt et al., 2005) ou non (Saintenoy et al., 2008). Le principe est d'obtenir une image en 1D, 2D ou 3D de la résistivité électrique ou de la permittivité diélectrique du sous-sol. De cette information géophysique, les auteurs dérivent une information sur le contenu en eau et/ou en soluté. La relation entre variable géophysique (la résistivité électrique ou la permittivité diélectrique) et la variable hydraulique (teneur en eau volumique) revêt donc une importance particulière.

D'un point de vue historique, c'est le problème de la salinisation des sols, menant dans les cas les plus sévères à l'impossibilité pour la plante de pousser, qui a incité les chercheurs en science du sol à développer, depuis les années 1970, la mesure de la conductivité électrique apparente. A partir des années 1990, le développement d'équipements mobiles de mesure de la conductivité électrique a permis d'économiser du temps et de couvrir des surfaces bien plus

importantes. De nos jours, grâce aux systèmes de mesures géo-référencées, la méthode de mesure de la conductivité électrique permet une gestion efficace des parcelles cultivées, et est devenue un outil précieux pour l'agriculture de précision (Corwin et Lesch, 2005).

Parallèlement, d'autres applications de la mesure de conductivité électrique apparente du sol ont été développées, la mesure de la conductivité électrique apparente devenant alors une mesure indirecte de nombreux paramètres bio-physico-chimiques du sol comme la teneur en eau volumique, la texture, la masse volumique apparente, la matière organique ou la capacité d'échange cationique. En raison de la relation complexe qui existe entre la mesure de la conductivité électrique apparente et les différents paramètres du sol, de nombreux modèles empiriques et semi-empiriques ont été proposés, et dans une certaine mesure, ont été testés (Friedman, 2005).

L'objet de ce chapitre est premièrement d'exposer les paramètres qui influent sur la conductivité électrique du sol, puis dans un second temps de rappeler les différents outils géophysiques qui permettent de la mesurer, et enfin d'établir un inventaire des modèles prédictifs qui permettent de relier la teneur en eau volumique à la conductivité électrique, et de discuter de leurs possibles applications.

### 1.2.1. Définitions

#### 1.2.1.1. Résistance, résistivité, conductance et conductivité

La conductance électrique est la capacité d'un matériau à laisser passer un courant électrique. On l'exprime en S (siemens). La conductivité électrique est la conductance d'une portion de matériau de 1m de long et de 1m<sup>2</sup> de section. On l'exprime en S.m<sup>-1</sup>.

La résistance électrique est la capacité d'un matériau à s'opposer au passage du courant électrique. On l'exprime en Ω (ohm). La résistivité électrique est la résistance d'une portion de matériau de 1m de long et de 1m<sup>2</sup> de section. On l'exprime en Ω.m. Si l'on considère un échantillon de sol cylindrique, de longueur  $L$  (m) et de section  $S$  (m<sup>2</sup>), disposé entre deux plaques conductrices reliées à un générateur délivrant un courant électrique d'intensité  $I$  (A) et de tension  $U$  (V), alors la résistivité électrique de l'échantillon  $\rho$  vaut:

$$\rho = \frac{SU}{LI} \quad (17)$$

La résistivité électrique  $\rho$  est donc homogène à des  $V A^{-1} L$ , alors que la conductivité électrique  $\sigma$  est homogène à des  $V^{-1} A L^{-1}$ .

Friedman (2005) définit la conductivité électrique apparente  $\sigma_a$  d'un échantillon de sol, et ce pour un milieu hétérogène et multiphasique, comme la conductivité électrique d'un échantillon homogène et à une seule phase d'un matériau qui lui est équivalent.

### **1.2.1.2. Origine de la conductivité électrique des sols**

Le sol est un milieu hétérogène triphasique. Le courant peut être, en théorie, conduit par chacune des 3 phases (gazeuse, liquide, solide). Cependant, la phase gazeuse est un très bon isolant. La conduction du courant a lieu dans les phases liquides et solides, et ce, grâce aux phénomènes suivants :

- La phase liquide conduit le courant par l'intermédiaire des ions et des complexes ioniques qui s'y trouvent. Il s'agit d'une conduction électrolytique. La valeur de la conductivité dépend de la nature des ions présents (en raison de leur différence de mobilité électrique) et de leurs concentrations.
- La phase solide, qui est l'ensemble des constituants du sol, est isolante dans le cas de matériaux électriquement neutres et isolants (cas du sable pur, composition chimique  $SiO_2$ ), ou conductrice dans le cas contraire. Des déficits de charge à la surface des minéraux, et notamment des minéraux argileux, conduisent à l'adsorption d'ions sur ces surfaces qui sont à l'origine d'une conduction dite de surface. Les électrons libres, qui se trouvent en surface des constituants métalliques du sol, assurent quant à eux la propagation d'un courant électrique de nature électronique.

### **1.2.1.3. Paramètres influençant la conductivité électrique**

Il existe de nombreux paramètres qui influencent la conductivité électrique d'un sol ou d'un échantillon de sol. Ceux-ci peuvent être regroupés en deux classes qui sont les paramètres intrinsèques du sol, relativement invariants au cours du temps, et les paramètres environnementaux, qui varient au cours du temps, en réponse aux conditions climatiques et aux pratiques humaines (agricoles notamment) :

Les paramètres intrinsèques du sol sont :

- la texture
- la forme et orientation des particules
- la porosité
- la composition minéralogique du sol
- la masse volumique apparente du sol
- la capacité d'échange cationique (CEC)
- la mouillabilité des surfaces solides
- la matière organique

Les paramètres environnementaux sont :

- la température
- la teneur en eau volumique  $\theta$
- la teneur en sels dissous dans la solution du sol. La conductivité électrique de l'eau est directement proportionnelle, à une température donnée, à la charge ionique de l'eau.
- la quantité d'ions adsorbés, et notamment le ratio d'adsorption du sodium -  $SAR = [Na^+] / ([Ca^{2+}] + [Mg^{2+}] / 2)^{0.5}$  (où  $[Na^+]$ ,  $[Ca^{2+}]$  et  $[Mg^{2+}]$  sont des concentrations ioniques).

Il est assez clair que les paramètres intrinsèques du sol ne changent pas lors d'une expérience d'infiltration, alors que les paramètres environnementaux sont quant à eux directement susceptibles de varier lors de ce type d'expérience.

### **Minéralisation de l'eau et teneur en eau volumique**

Parmi les paramètres dont dépend la conductivité électrique du sol, c'est en premier lieu la quantité d'eau et la conductivité électrique de l'eau  $\sigma_w$  qui influent sur la valeur de  $\sigma_a$  (conductivité électrique apparente) puisque c'est la phase aqueuse qui assure l'essentiel des transports d'électricité dans le sol. La conductivité électrique d'un échantillon de sol  $\sigma_a$  augmente lorsque la teneur en eau volumique ou la teneur en sels dissous croît (Shea et Luthin, 1961 ; Waxman et Smits, 1968 ; Gupta et Hanks, 1972 ; Bohn et al., 1982).

Par ailleurs, il existe une relation linéaire entre la conductivité électrique de l'eau et sa minéralisation totale. Il existe une relation approximative utile entre la concentration en soluté  $C$  (meq L<sup>-1</sup>) et  $\sigma_w$  (dS m<sup>-1</sup>), valable pour des eaux possédant une conductivité électrique comprise entre 0,1 et 10,0 dS.m<sup>-1</sup>, qui s'écrit :

$$C = 10 \sigma_w \quad (18)$$

Au-delà de  $10 \text{ dS m}^{-1}$ , cette relation linéaire n'est plus valable, et la valeur de  $C$  calculée d'après la mesure de  $\sigma_w$  serait sous-estimée (Rhoades et al., 1989).

L'augmentation de la conductivité électrique apparente du sol, liée à une augmentation de  $\theta$ , se produirait jusqu'à un certain degré de saturation à partir duquel  $\sigma_a$  resterait constante. La valeur de 60% serait le seuil moyen (Sreedeeep et al., 2004 ; Richard et al., 2005).

### Effet de la température

La température a une influence importante sur  $\sigma_a$ . C'est pourquoi il est nécessaire, afin de comparer des valeurs acquises dans des conditions de température différentes, d'exprimer  $\sigma_a$  à une température de référence standard ( $25^\circ\text{C}$ ). La correction s'effectue selon la relation :

$$\sigma_{25^\circ\text{C}} = f_T \sigma_T \quad (19)$$

où  $\sigma_{25^\circ\text{C}}$  est la conductivité électrique à la référence de  $25^\circ\text{C}$ ,  $f_T$  le facteur de conversion de température, et  $\sigma_T$  la conductivité électrique mesurée à la température  $T$  ( $^\circ\text{C}$ ). Des valeurs de  $f_T$  ont été publiées par le U.S. Salinity Lab. Staff (1954), et de nombreux auteurs ont proposé des relations. Par exemple, le facteur de correction  $f_T$  de Sheets et Hendrickx (1995) s'écrit :

$$f_T = 0.447 + 1.4034 \times \exp\left[\frac{-T}{26.815}\right] \quad (20)$$

En appliquant cette relation aux températures  $10^\circ\text{C}$  et  $20^\circ\text{C}$ , il apparaît que le facteur de conversion vaut respectivement 1,4 et 1,1. Ainsi pour un écart de  $10^\circ\text{C}$ , correspondant par exemple à une variation saisonnière, la valeur de  $\sigma_a$  varie d'environ 25%. Entre  $9^\circ\text{C}$  et  $10^\circ\text{C}$ , le facteur de conversion varie entre 1,45 et 1,41, soit une variation de 2.5 % entre ces deux températures.

### **1.2.2. Méthodes de mesures de la conductivité électrique apparente**

Il existe trois types de méthodes pour mesurer la conductivité électrique apparente d'un sol qui sont les méthodes basées sur la mesure de la résistivité électrique, de l'induction électromagnétique, et de la réflectométrie en domaine temporel ('Time Domain Reflectometry') (Corwin et Lesch, 2005).

#### **1.2.2.1. Les méthodes basées sur la mesure de la résistivité électrique**

Les méthodes de résistivité électrique consistent en l'injection d'un courant électrique entre 2 électrodes disposées à la surface du sol et à la mesure du potentiel électrique par un second jeu d'électrodes disposées au voisinage des électrodes d'injection. Ces méthodes ont été développées dans les années 1920 simultanément en France et aux Etats-Unis sous les impulsions respectives de Conrad Schlumberger et Frank Wenner (Burger, 1992). La mesure de la résistivité électrique peut s'effectuer au laboratoire sur des échantillons ou sur le terrain. Grâce à différentes combinaisons des positions des électrodes d'injection et des électrodes de mesure du potentiel électrique, il est possible de sonder la caractéristique de résistivité électrique à différentes profondeurs.

Un premier jeu d'électrodes crée un champ électrique artificiel dans le milieu. Sous l'effet de ce champ, les porteurs de charges (ions, électrons) se mettent en mouvement tentant de rétablir l'équilibre électrique du milieu. Ce déplacement de charges est une migration de charges libres qui est responsable d'un courant électrique. Une différence de potentiel dans le milieu est mesurée avec deux autres électrodes, dites passives. Par approximation au régime électrique stationnaire, la loi d'Ohm ( $U=RI$ ) est utilisée. Elle permet de caractériser le milieu par sa résistance  $R$  (ou sa résistivité tenant compte du volume du milieu investi) à partir de la mesure de la différence de potentiel  $U$  et de l'intensité du courant  $I$ . En imagerie de résistivité électrique, la mesure de résistivité brute est appelée la résistivité électrique apparente car elle donne une valeur calculée comme si le milieu était homogène. Si le milieu est réellement homogène, alors cette valeur de résistivité électrique apparente est égale à la résistivité électrique vraie (intrinsèque), sinon on peut calculer la résistivité électrique vraie par inversion des données.

Pour les mesures sur échantillons cylindriques de sol, différentes adaptations de la méthode ont été proposées (Kirkham et Taylor, 1950 ; Shea et Luthin, 1961 ; Keller et Frischknecht, 1966 ; Gupta et Hanks, 1982).

### 1.2.2.2. La méthode d'induction électromagnétique EM

L'étude des anomalies du champ électromagnétique moyen peut renseigner sur la structure interne de la Terre, sur les gisements d'eau, de pétrole et de minerais, ou sur la présence d'eau dans les premiers décimètres du sol. Une bobine localisée à une extrémité de l'appareil EM crée un courant induit dans le sol, dont l'intensité est proportionnelle à la conductivité électrique du sol au voisinage de la boucle. C'est donc une mesure active de la conductivité électrique apparente du sol, dont l'avantage est d'être totalement non-invasive (aucun contact avec le sol n'est nécessaire). En revanche, le traitement mathématique est beaucoup plus complexe que celui de la mesure par résistivité électrique. L'utilisation de mesures électromagnétiques en science du sol a débuté dans les années 1970 afin de mesurer la salinité du sol via la mesure de  $\sigma_a$ . Actuellement les appareils utilisés le plus couramment sont les Geonics EM-31 et EM-38 (6 m et 1,5 m d'investigation respectivement), ce dernier étant particulièrement adapté aux problèmes agricoles en raison de sa profondeur d'investigation qui correspond approximativement à la zone racinaire (Corwin and Lesch, 2005).

### 1.2.2.3. Réflectométrie en domaine temporel (TDR)

Le développement des sondes TDR (Time Domain Reflectometry) a apporté un moyen rapide et précis de mesurer la teneur en eau volumique du sol. Les principes théoriques et pratiques de cette mesure ont été largement étudiés et discutés par Topp et al. (1980), Dalton (1992) et Robinson et al. (2003), entre autres. Initialement utilisée pour mesurer  $\theta$ , la sonde TDR permet de mesurer aussi  $\sigma_a$ , en se basant sur l'atténuation du signal lorsqu'il traverse le sol. Le principe de la technique repose sur l'asymétrie de charge de la molécule d'eau qui est à l'origine du phénomène de permittivité diélectrique. Sous l'effet d'un champ électrique, les molécules s'alignent avec celui-ci. La permittivité diélectrique  $\varepsilon$  d'un matériau est le rapport  $D/E$  du déplacement électrique (aussi appelé induction électrique ou excitation électrique)  $D$  ( $C.m^{-2}$ ) et de l'intensité du champ électrique  $E$  ( $V.m^{-1}$ ).  $\varepsilon$  s'exprime donc en  $C.m^{-1}.V^{-1}$ , ce qui équivaut à des  $F.m^{-1}$ .

Bien que cette méthode possède l'avantage de mesurer simultanément  $\varepsilon$  et  $\sigma_a$ , et ce, de façon précise et continue, elle présente le défaut par rapport à l'ER et l'EM de ne représenter que des mesures ponctuelles. Ainsi, les possibilités de spatialisation des mesures de TDR sont beaucoup plus restreintes. L'inconvénient majeur des sondes TDR, comparées aux méthodes

électrique et électromagnétique, est la nécessité d'installer l'instrument de mesure dans le sol, ce qui perturbe le milieu.

### 1.2.3. Modèles prédictifs de la conductivité électrique apparente

On a vu précédemment que la conductivité électrique du sol dépend de beaucoup de facteurs. Cependant, dans le cadre de notre travail, il nous est nécessaire, pour pouvoir être en mesure d'utiliser la conductivité électrique du sol comme une mesure indirecte de la teneur en eau du sol, de supposer que certains paramètres sont invariants lors de l'expérience. Il s'agit de la température et de la quantité d'ions adsorbés sur les surfaces minérales. Il existe trois principaux modèles qui établissent une correspondance entre contenu en eau et conductivité électrique : ce sont les modèles d'Archie (1942), de Rhoades et al. (1976), et de Mualem et Friedman (1991).

#### 1.2.3.1. Loi d'Archie

La loi d'Archie (1942) est à la fois la relation la plus ancienne et l'une des plus utilisées pour relier, dans le cas d'un milieu poreux (consolidé ou non) et saturé en eau,  $\sigma_a$ ,  $\sigma_w$  et la porosité  $\phi$ :

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_w} = \frac{1}{F} = \phi^m \quad (21)$$

où  $F$  (sans dimension) est le facteur de formation, et  $m$  (sans dimension) est un paramètre empirique appelé facteur de cimentation, car il a été observé que sa valeur augmente avec le degré de cimentation du milieu. Le paramètre  $m$  correspond à la pente de la droite obtenue par régression linéaire entre le facteur de formation et la porosité. Archie (1942) a obtenu des valeurs de  $m$  proches de 1,3 pour des sables non consolidés et des valeurs comprises entre 1,8 et 2,0 pour des sables consolidés.

Cette loi empirique fait abstraction du courant qui se propage à la surface des grains  $\sigma_s$ , et par conséquent n'est pas utilisable dans le cas de sols contenant des particules argileuses ou

métalliques. Une généralisation de cette loi en milieu non saturé a été proposée par Keller (1994) :

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_w} = \frac{S^n}{F} = \phi^m S^n \quad (22)$$

où  $S$  (sans dimension) est l'indice de saturation tel que  $S = \theta/\theta_{\text{sat}}$ , et  $n$  (sans dimension) est l'exposant de saturation, égal à 2 le plus souvent. De même que précédemment cette relation n'inclut pas l'effet de conduction de courant à la surface des solides et par conséquent son utilisation dans le cas de sols ayant une capacité d'échange cationique importante (cas des sols argileux) conduit à surestimer la valeur de  $\sigma_w$ .

### 1.2.3.2. Modèles à 2 ou 3 éléments conducteurs disposés en parallèle

Waxman et Smits (1968), en assimilant la solution du sol et les surfaces des minéraux à deux conducteurs disposés en parallèle, proposent la relation suivante :

$$\sigma_a = \frac{\sigma_w + \sigma_s}{F} \quad (23)$$

La relation  $\sigma_a$  en fonction de  $\sigma_w$  est linéaire, sauf pour les faibles valeurs de  $\sigma_w$  pour lesquelles une augmentation légère de  $\sigma_w$  entraîne une augmentation importante de  $\sigma_a$  en raison de l'accroissement de la mobilité des cations échangeables.

Expérimentalement, ils calculent la valeur de  $F$  comme l'inverse de la pente d'un graphique représentant  $\sigma_a$  en fonction de  $\sigma_w$ , et obtiennent une corrélation avec la porosité (vérification de la loi d'Archie).

Rhoades et al. (1976), en conceptualisant à leur tour un modèle défini par deux conducteurs disposés en parallèle, proposent un modèle semi-empirique qui prend en compte le degré de saturation du sol, un effet de tortuosité lié à l'arrangement complexe des particules solides dans le sol, et la conductivité de surface :

$$\sigma_a = \theta T \sigma_w + \sigma_s \quad (24)$$

où  $T$  (sans dimension) est un coefficient de transmission ( $\leq 1$ ), qui corrige l'effet de tortuosité du milieu, variable en fonction du degré de saturation, et tel que :

$$T = A\theta + B \quad (25)$$

où  $A$  et  $B$  (sans dimension) sont deux constantes qui varient selon la texture des sols :

- $a = 2,1$  ;  $b = -0,25$  pour des sols argileux,
- $1,3 < a < 1,4$  ;  $-0,11 < b < -0,06$  pour des sols limoneux.

Le paramètre  $\sigma_s$  correspond à la contribution de la phase solide du sol au passage du courant électrique. C'est principalement les minéraux argileux hydratés qui l'assurent. L'équation (24) suppose donc que cette contribution est indépendante de la teneur en eau du sol, ce qui paraît raisonnable, excepté peut-être pour des conditions extrêmement sèches. L'équation (24) permet, en extrapolant les données expérimentales à  $\sigma_w = 0$ , de calculer  $\sigma_s$ . Les auteurs ont réalisé des mesures sur 4 sols, dans une gamme de  $\theta$  variable selon les sols et comprise entre 0,1 et 0,5  $\text{cm}^3 \text{cm}^{-3}$ , et dans une gamme de  $\sigma_w$  comprise entre 2,5 et 56  $\text{mS.cm}^{-1}$ . Rhoades et al. (1976) estiment  $\sigma_s$  à des valeurs comprises entre 0,18  $\text{mS.cm}^{-1}$  et 0,45  $\text{Ms.cm}^{-1}$  pour les sols possédant la CEC la plus faible et la plus élevée, respectivement. Dans ce modèle, qui est un des plus utilisés,  $\sigma_s$  est indépendant de  $\sigma_w$ , ce qui restreint l'utilisation de la relation à une gamme de salinité où cette approximation est acceptable, c'est-à-dire où la relation  $\sigma_a(\sigma_w)$  est quasi-linéaire (i.e.  $\sigma_w > 3,5 \text{ mS.cm}^{-1}$ ).

Bohn et al. (1982) ont vérifié par des mesures au champ et au laboratoire que la relation de Rhoades et al. (1976) est vérifiée avec des coefficients de corrélation compris entre 0,82 et 0,91 pour les mesures de laboratoire et entre 0,85 et 0,95 pour les mesures réalisées au champ. Bien que leurs sols contiennent de 3 à 36 % d'argile, leurs valeurs de  $\sigma_s$  obtenues en extrapolant le contenu en eau ou la salinité de l'eau à 0 sont non significatives. Ils proposent d'expliquer ce résultat par la large gamme de salinité utilisée qui a pu masquer les effets de  $\sigma_s$ . Sauer (1955), Shainberg et al. (1980), et Nadler et Frenkel (1980) suggèrent que la conductivité électrique d'un échantillon peut être représentée par un modèle à éléments disposés en parallèles dont les conductivités électriques équivalentes correspondent à : (i) la conductivité liée au passage du courant à travers les particules du sol qui sont jointives, (ii) la conductivité liée au passage du courant à travers la solution continue du sol, (iii) la conductivité liée au passage du courant à travers les particules solides et la solution alternativement.

Shainberg et al. (1980), en reprenant le modèle à deux conducteurs (équation 24), observent une relation linéaire entre  $\sigma_w$  et  $\sigma_a$  pour des valeurs de  $\sigma_w$  supérieures à 1 ou 3 mS.cm<sup>-1</sup>, et une relation curviligne en deçà de 1 et 3 mS.cm<sup>-1</sup> pour leurs sols Bonsall A et Bonsall B respectivement (8 % et 35,5 % d'argiles respectivement). En estimant la valeur de  $\sigma_s$  par l'interception de la tangente à la courbe au point  $\sigma_w = 0$ , ces auteurs ont montré que la valeur de  $\sigma_s$  croît avec la CEC. La pente de la droite est identique pour les 2 sols (0,23), car, selon les auteurs, le fait d'avoir préparé des échantillons à la même masse volumique apparente leur a conféré la même valeur de  $F$ .

Nadler et Frenkel (1980), en utilisant au laboratoire la méthode des 4 électrodes sur 6 types de sols, montrent que la relation entre  $\sigma_a$  et  $\sigma_w$  est linéaire et positive au dessus d'une valeur de  $\sigma_w$ , et qu'en dessous de cette valeur, la relation  $\sigma_a(\sigma_w)$  est non linéaire. Selon le type de sol utilisé, cette valeur varie dans la gamme 1-5 mS.cm<sup>-1</sup>. De plus, ils remarquent que la pente de droite  $\sigma_a(\sigma_w)$ , dans la partie linéaire de la relation, est d'autant plus forte que le contenu en argiles du sol est élevé (pentes variant entre 0,211 et 0,328).

Pour expliquer la partie non linéaire de la relation, ils proposent ceci : en réduisant la teneur en électrolyte de la solution, il se produit une expansion de la double couche électronique, et ainsi une augmentation de la conductivité de surface.

Rhoades et al. (1989), en utilisant l'analogie avec les 3 conducteurs disposés en parallèle, proposent un nouveau modèle, qui tient compte de la proportion d'eau mobile et d'eau immobile :

$$\sigma_a = \frac{(\theta_s + \theta_{ws})^2 \sigma_{ws} \sigma_s}{\theta_s \sigma_{ws} + \theta_{ws} \sigma_s} + (\theta - \theta_{ws}) \sigma_{wc} \quad (26)$$

où  $\theta_s$  et  $\sigma_s$  sont la fraction volumique de la phase solide et sa conductivité électrique respectivement,  $\theta_{ws}$  et  $\sigma_{ws}$  le contenu en eau volumique des éléments solides-liquides couplés en série et leur conductivité électrique respectivement, et enfin  $(\theta - \theta_{ws})$  et  $\sigma_{wc}$  la fraction volumique de la phase liquide continue, et sa conductivité électrique respectivement.

Ce modèle offre la possibilité d'une description plus fine de la fonction  $\sigma_w(\sigma_a, \theta)$ , mais nécessite une paramétrisation difficile.

### 1.2.3.3. Modèle de Mualem et Friedman

Mualem et Friedman (1991) ont développé un modèle semi-empirique en faisant l'hypothèse, que les lignes de flux des molécules d'eau sous un gradient de charge hydraulique et pour un sol et un potentiel hydrique donnés, sont similaires aux lignes de flux du courant électrique sous l'effet d'un gradient de potentiel électrique. De cette hypothèse découle que le même facteur géométrique de tortuosité peut être utilisé pour les 2 types de flux. Ce modèle s'appuie sur l'expression mathématique de la conductivité hydraulique définie par Mualem (1976). La relation obtenue, pour des sols où la conductivité électrique de surface peut être négligée, est la suivante :

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_w} = \frac{\theta^{n+2}}{\theta_{sat}} \quad (27)$$

où  $n$  est un paramètre d'ajustement. Si une calibration de  $n$  en laboratoire n'est pas possible, les auteurs recommandent d'utiliser la valeur  $n=0,5$  et donc d'utiliser la formule suivante :

$$\frac{\sigma_a}{\sigma_w} = \frac{\theta^{2.5}}{\theta_{sat}} \quad (28)$$

Il ne paraît pas correct d'utiliser cette relation pour des gammes de  $\sigma_w$  faibles (environ  $< 6 \text{ mS cm}^{-1}$ ), car, dès lors, la contribution de  $\sigma_s$  à  $\sigma_a$  ne peut être négligée (Shainberg et al., 1980 ; Nadler et Frenkel, 1980). En dehors de cette restriction, cette relation peut s'utiliser de plusieurs manières, c'est-à-dire pour déterminer  $\sigma_w(\sigma_a, \theta, \theta_{sat})$  ou  $\theta(\sigma_w, \sigma_a, \theta_{sat})$ . Liu et Yeh (2004) montrent que ce genre d'approche peut permettre d'obtenir des profils fiables de distribution de teneur en eau volumique  $\theta$  à partir de mesures de conductivité électrique apparente inversées, à condition d'effectuer des mesures directes de  $\theta$  en quelques points. Toutefois, le modèle de Mualem et Friedman (1991) trouve un faible écho dans la bibliographie. Weerts et al. (1999) qui le testent dans des expériences sur colonnes, trouvent des valeurs de  $n$  égales à  $-0,22$  et  $0,27$  pour la couche supérieure d'un sol sablo-limoneux, et pour un sable fin d'origine éolienne, respectivement.

Dans le même ordre d'idée (relation de type exponentielle), McCutcheon et al. (2006), qui ont mesuré des valeurs de  $\sigma_a$  dans un champ de 110 ha présentant des bandes alternées de cultures de blé et de jachère, à 5 dates différentes et à 198 endroits différents dans les bandes et en

dehors, trouvent une relation de type exponentielle reliant  $\sigma_a$  à  $\theta$ , avec un coefficient de détermination  $r^2 = 0,71$  :

$$\sigma_a = 4.504 \times \exp(8.2635 \theta) \quad (29)$$

#### 1.2.3.4. Quel modèle choisir ?

Parmi les modèles présentés ci-dessus, il nous semble que les modèles de Rhoades et al. (1976) et Rhoades et al. (1989) sont les plus corrects, et ce pour une raison conceptuelle. En effet, ils nous semblent représenter mieux la réalité du phénomène physique de la conduction électrique dans le sol (addition de deux courants qui emploient des chemins différents). Cependant le modèle de Rhoades et al. (1989) nous apparaît comme trop compliqué à calibrer en raison du nombre de paramètres trop élevé.

Le modèle de Mualem et Friedman (1991), qui, s'il est vrai, est très séduisant, car il repose sur la même conception du sol et de la tortuosité, a l'inconvénient de ne pas avoir de base physique éprouvée. L'hypothèse de même tortuosité pour le courant hydraulique et électrique n'est aucunement démontrée.

En définitive, c'est le modèle de Rhoades et al. (1976) qui a été retenu dans le cadre de ce travail.

### 1.3. Problème inverse

Il nous paraît nécessaire, avant d'aller plus loin, de rappeler ce qu'on entend par problème inverse, de citer les principales méthodes d'inversion, ainsi que leurs intérêts et inconvénients. Ainsi on pourra justifier le choix de la méthode qui a été fait pour ce travail. On donnera aussi dans cette partie des détails sur le calcul de la fonction objective.

#### 1.3.1. Définition du problème inverse

Par la suite on appellera 'système', le milieu poreux que l'on modélise et qui est le lieu des transferts d'eau. Les paramètres de ce système sont :  $K_s$ ,  $\theta_s$ ,  $\theta_r$ ,  $\alpha$ ,  $n$ . (équations 6 et 7). Les variables de sortie de ce système sont :  $\theta$ ,  $h$ ,  $C$  (équations 3 et 8)

Le problème qui consiste à identifier les paramètres du système à partir des valeurs des variables de sortie est un problème d'identification des paramètres (appelé aussi calibration). Ce problème est l'inverse de la simulation, ou problème direct, dans laquelle les paramètres du système modélisé sont connus et les valeurs des variables de sortie sont calculées.

D'une manière générale les différents types de problèmes inverses consistent à identifier les paramètres du système  $p$ , les termes sources ou puits  $s$ , et les conditions initiales ou aux limites  $f$ . L'identification simultanément de  $p$  et  $f$  est également possible. Dans notre cas, le problème inverse consiste à n'inverser que les paramètres du système, la condition initiale ainsi que les conditions aux limites étant supposées connues.

L'identification des paramètres se fait par le calcul d'une fonction écart entre la valeur des variables de sortie observées et celle des variables de sortie modélisées. Au minimum de cette fonction écart, appelée aussi 'fonction objective (FO)', correspond le jeu de paramètre optimal.

Le problème inverse est correctement posé si les trois conditions suivantes sont réunies :

- Existence : il existe une fonction qui satisfait les équations modélisant le système. En cas de surdétermination du problème, la condition d'existence n'est pas réalisée.
- Unicité : la solution est unique. En cas de sous-détermination du problème, c'est-à-dire lorsqu'il y a plus d'inconnues que d'équations, la condition d'unicité n'est pas réalisée.

- Stabilité : la solution est stable, c'est-à-dire que les variations de la solution sont aussi petites que l'on veut lorsque l'on choisit des variations des données d'entrée suffisamment faibles.

Les difficultés du problème inverse peuvent être de plusieurs ordres :

- La sous-détermination, qui entraîne une non-unicité de la solution et son instabilité par rapport aux observations.
- L'insuffisance des observations (quantité et qualité).
- Les erreurs de structure du modèle. Si l'expression mathématique du problème ne correspond pas bien à la réalité, il est possible que le modèle ne puisse pas faire de prédictions correctes. C'est une difficulté majeure pour les modèles à base empirique.

### 1.3.2. Méthodes d'inversion

Lorsque le problème est non-linéaire, ce qui est le cas du problème d'infiltration, traité numériquement par la résolution de l'équation de Richards, l'estimation des paramètres ne peut être obtenue par la résolution d'une équation matricielle de type :

$$X\mathbf{b} = \mathbf{c} \quad (30)$$

où  $\mathbf{X}$  est une matrice à  $m$  lignes et  $n$  colonnes représentant le système étudié,  $\mathbf{b}$ , vecteur d'ordre  $n$ , représente les paramètres du modèles et  $\mathbf{c}$ , vecteur d'ordre  $m$ , représente la réponse du système.

Ainsi, pour les problèmes non-linéaires, il convient de procéder par itérations successives afin de trouver le minimum global de la fonction objective.

Les différents algorithmes utilisés en ce sens peuvent être divisés en deux parties : d'une part il existe les méthodes dites locales, où la recherche du minimum global de la fonction objective s'effectue en partant d'un point dans l'espace des paramètres et en évoluant à partir de ce point au moyen d'une seule recherche itérative ; de l'autre coté, les méthodes dites globales, qui conduisent différentes recherches du minimum à travers l'espace des paramètres. Les premières méthodes sont heuristiques. Elles ne trouvent pas systématiquement le minimum global de la fonction objective, mais sont les plus rapides. L'utilisation de ces algorithmes basés sur la méthode du gradient peut aboutir à l'obtention d'une solution fausse (le minimum global n'est pas atteint et le processus d'optimisation s'arrête dans un minimum

local), le choix du jeu des paramètres initiaux ayant une forte influence sur le résultat de l'optimisation. Un défaut majeur de cette méthode est la dépendance de la solution aux estimations de départ, et ce en raison de la typologie de la fonction qui peut contenir, dans le cas des problèmes hautement non-linéaires de nombreux minimums locaux et des zones « vallées » où la FO est minimale dans plusieurs dimensions.

Les secondes méthodes sont stochastiques et, lorsqu'elles sont correctement paramétrées, obtiennent à chaque fois le minimum global de la fonction avec la précision voulue (par exemple la méthode du recuit simulé). Mais ces méthodes ont l'inconvénient de nécessiter beaucoup plus de temps de calcul que les méthodes heuristiques. Il existe une grande variété de méthodes stochastiques et de combinaisons de ces méthodes entre elles, et leur utilisation pour des problèmes d'estimation des propriétés hydrauliques de la zone vadose ne cesse de croître (voir l'article de synthèse de Vrugt et al., 2008).

Il existe aussi des algorithmes qui sont intermédiaires entre les méthodes purement heuristiques et purement stochastiques comme la méthode «Global Multilevel Coordinate Search» (Huyer and Neumaier, 1999). Ces nouvelles méthodes conduisent au minimum global de la fonction objective avec un temps plus bref que les méthodes stochastiques, mais encore nettement plus long qu'avec les méthodes heuristiques.

### **1.3.3. Méthode utilisée : Algorithme de Levenberg-Marquardt**

Nous avons choisi une méthode d'inversion locale (méthode heuristique), en raison du temps de calcul important du problème direct (le problème est en 3 dimensions avec un maillage fin). Il va de soi qu'une méthode stochastique aurait été préférable, mais la puissance de calcul nécessaire aurait largement dépassé nos possibilités (16 processeurs).

L'algorithme d'optimisation non-linéaire utilisé est celui de Levenberg-Marquardt (Marquardt, 1963). La méthode consiste à interpoler l'algorithme de Gauss-Newton et la méthode de descente du gradient. Cet algorithme d'optimisation non-linéaire utilise un facteur d'amortissement  $\lambda$  pour basculer, au fur et à mesure que la solution est approchée, de la méthode de descente du gradient à l'algorithme de Gauss-Newton. En effet, vers la fin de l'optimisation, lorsque la solution navigue dans une vallée étroite, la méthode de descente du gradient est inefficace. On a choisi d'utiliser le programme PEST (Doherty, 2003) qui implémente l'algorithme de Levenberg-Marquardt avec une certaine souplesse.

Si la topologie de la fonction objective, qui est à  $n$  dimensions, où  $n$  est le nombre de paramètres à optimiser, est complexe (présence de nombreux minimums locaux), il est utile, voire nécessaire, que l'on ait une idée a priori du domaine de la solution, afin d'éviter une convergence des calculs vers un minimum local.

Dans PEST, la fonction objective est la somme des carrés des différences pondérées entre les résultats observés et les résultats modélisés. Le poids des observations est calculé d'ordinaire comme inversement proportionnel à l'écart-type des observations.

### 1.3.4. Fonctionnement général de PEST

Revenons à l'équation (30) qui décrit un système linéaire, où  $\mathbf{b}$  représente le jeu de paramètre optimal. Le problème consiste à minimiser la fonction objective  $\Phi$  suivante :

$$\Phi = (\mathbf{c} - X\mathbf{b})'(\mathbf{c} - X\mathbf{b}) \quad (31)$$

où  $\mathbf{c}$  représente le jeu de données observées, et l'exposant 't' indique qu'il s'agit d'une matrice transposée. Le vecteur  $\mathbf{b}$  qui minimise  $\Phi$  est donné par :

$$\mathbf{b} = (X'X)^{-1} X' \mathbf{c} \quad (32)$$

Pour prendre en compte la confiance relative que l'on a en chaque observation, on peut faire intervenir un système de pondération. Si les coefficients de pondération sont rangés dans  $\mathbf{Q}$  qui est une matrice diagonale à  $m$  dimensions dont le  $i^{\text{ème}}$  élément diagonal  $q_{ii}$  est le carré du poids  $w_i$  affecté à la observation, l'équation (31) peut alors s'écrire :

$$\Phi = (\mathbf{c} - X\mathbf{b})' \mathbf{Q} (\mathbf{c} - X\mathbf{b}) \quad (33)$$

ou bien :

$$\Phi = \sum_{i=1}^m (w_i r_i)^2 \quad (34)$$

où  $r_i$  représente la différence entre la  $i^{\text{ème}}$  observation mesurée et la  $i^{\text{ème}}$  observation modélisée.

Ainsi l'équation (32) devient :

$$\mathbf{b} = (X'QX)^{-1} X'Q\mathbf{c} \quad (35)$$

### 1.3.5. Linéarisation du problème

Si le modèle n'est pas linéaire, il faut procéder à une linéarisation. Soit la fonction  $M$  qui fait correspondre à un espace des paramètres à  $n$  dimensions un domaine d'observation à  $m$  dimensions. Pour des raisons qui seront bientôt évidentes, il est nécessaire que cette fonction soit continûment différentiable par rapport à tous les paramètres du modèle pour lesquels une estimation est désirée. Supposons que, pour le jeu de paramètres  $\mathbf{b}_0$ , le jeu d'observations calculées par le modèle s'écrive :

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}_0 + M(\mathbf{b}_0) \quad (36)$$

Maintenant, pour générer un jeu d'observations  $\mathbf{c}$  correspondant à un jeu de paramètre  $\mathbf{b}$  qui diffère légèrement de  $\mathbf{b}_0$ , le théorème de Taylor indique que la linéarisation suivante est approximativement correcte si  $\mathbf{b}$  et  $\mathbf{b}_0$  sont proches :

$$\mathbf{c} = \mathbf{c}_0 + J(\mathbf{b} - \mathbf{b}_0) \quad (37)$$

où  $\mathbf{J}$  est la matrice jacobienne de  $M$ , c'est-à-dire la matrice qui comprend  $m$  lignes (une ligne par observation) et  $n$  colonnes, les  $n$  éléments de chaque ligne étant les dérivées de chaque observation par rapport à chacun des  $n$  paramètres.

Ainsi la fonction que l'on veut minimiser peut être écrite par :

$$\Phi = (\mathbf{c} - \mathbf{c}_0 - J(\mathbf{b} - \mathbf{b}_0))' Q(\mathbf{c} - \mathbf{c}_0 - J(\mathbf{b} - \mathbf{b}_0)) \quad (38)$$

où  $\mathbf{c}$  représente maintenant le jeu expérimental d'observations. Si l'on compare les équations (33) et (38), il devient apparent que les 2 équations sont équivalentes si  $\mathbf{c}$  est remplacé par

$(\mathbf{c}-\mathbf{c}_0)$  et si  $\mathbf{b}$  est remplacé par  $(\mathbf{b}-\mathbf{b}_0)$ . Ainsi on peut calculer  $(\mathbf{b}-\mathbf{b}_0)$  sur la base du vecteur  $\mathbf{c}-\mathbf{c}_0$  qui représente la différence entre les valeurs générées par le modèle et  $\mathbf{c}_0$  et les observations  $\mathbf{c}$ . Soit  $\mathbf{u}$  le nouveau vecteur des paramètres, alors l'équation (35) devient :

$$\mathbf{u} = (J'QJ)^{-1} J'Q(\mathbf{c} - \mathbf{c}_0) \quad (39)$$

Parce que l'équation (37) est approximative, le vecteur  $\mathbf{u}$  est aussi approximatif, et le minimum global ne sera pas atteint directement en ajoutant  $\mathbf{u}$  au vecteur des paramètres  $\mathbf{b}_0$ . Il faudra procéder par itérations successives, en ajoutant un nouveau vecteur  $\mathbf{u}$  au vecteur des paramètres  $\mathbf{b}_0$  à chaque itération jusqu'à l'obtention du minimum global (si elle a lieu !).

### 1.3.6. Le paramètre de Marquardt

On peut réécrire l'équation (39) sous une forme qui laisse apparaître le vecteur des résidus  $\mathbf{r}$  correspondant au jeu actuel des paramètres :

$$\mathbf{u} = (J'QJ)^{-1} J'Q\mathbf{r} \quad (40)$$

Si maintenant on appelle  $\mathbf{g}$  le vecteur qui représente le gradient de la fonction  $\Phi$ , le  $i^{\text{ème}}$  élément de  $\mathbf{g}$  peut s'écrire comme suit :

$$g_i = \frac{\partial \Phi}{\partial b_i} \quad (41)$$

Il apparaît ainsi que l'angle formé entre  $\mathbf{u}$  et  $-\mathbf{g}$  ne doit pas excéder  $90^\circ$ , sinon l'ajout de  $\mathbf{u}$  provoquerait une augmentation de  $\Phi$ . Il peut être montré qu'en dépit du fait que  $-\mathbf{g}$  représente la plus grande pente de  $\Phi$ ,  $\mathbf{u}$  est largement un meilleur estimateur du nouveau vecteur que  $-\mathbf{g}$  et ce spécialement dans les cas où les paramètres sont hautement corrélés. Dans de telles situations, suivre la direction de  $\mathbf{u}$  provoque de multiples sauts de part et d'autre de la vallée, ce qui conduit à évoluer le long de la vallée sans jamais descendre en son point le plus bas. Ainsi il a été remarqué qu'il est utile d'ajuster  $\mathbf{u}$  de telle sorte qu'il soit proche de  $\mathbf{g}$  en début d'optimisation et de s'en écarter par la suite à l'approche du minimum global. Ceci est réalisé par l'ajout du paramètre de Marquardt (1963) dans l'équation 40 :

$$\mathbf{u} = (J'QJ + \alpha I)^{-1} J'Q\mathbf{r} \quad (42)$$

Il peut être montré que le gradient  $\mathbf{g}$  peut se calculer par :

$$\mathbf{g} = -2J'Q\mathbf{r} \quad (43)$$

où  $\alpha$  est le paramètre de Marquardt et  $I$  est la matrice identité à  $n \times n$  dimensions.

D'après les équations (42) et (43), il apparaît que lorsque  $\alpha$  est élevé la direction de  $\mathbf{u}$  est proche  $-\mathbf{g}$  et que lorsque  $\alpha$  est égal à 0, l'équation (42) est équivalent à l'équation (40). PEST dispose de plusieurs paramètres qui permettent à l'utilisateur de choisir la manière dont  $\alpha$  décroît au cours du processus d'inversion. Ces paramètres sont notamment :

- la valeur du changement relatif que subit  $\alpha$  entre deux calculs de dérivées, sa valeur de départ.
- la valeur de la réduction relative de  $\phi$  à partir de laquelle aucun nouveau facteur  $\alpha$  n'est plus testé pour l'itération en cours.

### 1.3.7. Calcul des dérivées

A moins que le modèle puisse les calculer directement, les dérivées des observations par rapport aux paramètres sont calculées par PEST grâce à la méthode des différences finies. Durant chaque itération, le modèle est exécuté une fois pour chaque paramètre ajustable, un incrément défini par l'utilisateur ayant été ajouté à la valeur du paramètre étudié avant l'exécution. Le changement dans les résultats qui en découle est divisé par l'incrément dans le but de calculer leur dérivée par rapport au paramètre ajusté. Ceci est répété pour chaque paramètre. Cette technique de calcul des dérivées est appelée « méthode des différences directes ».

Les dérivées calculées de cette manière sont approximatives. Si l'incrément est trop grand, l'approximation est imprécise. Si l'incrément est trop petit, des erreurs d'arrondi surviennent et nuisent à la précision de la dérivée. Pour combattre ces inconvénients, PEST autorise une méthode de calcul des dérivées appelée « méthode des différences centrales ». Dans cette méthode, deux exécutions du modèle sont réalisées, pour la première, l'incrément est ajouté,

et, dans la seconde, il est retranché ; ainsi 3 paires observations-jeu de paramètres sont nécessaires pour cette méthode de calcul de la dérivée (la 3<sup>ème</sup> étant le jeu de paramètres courant et les observations associées). La dérivée est calculée de trois manières possibles (le choix est laissé à l'utilisateur) : par ajustement d'une parabole qui comprend les 3 points, par construction d'une droite qui ajuste le mieux possible les 3 points, ou par différence finie entre les 2 points extérieurs.

### 1.3.8. Fin de l'optimisation

Différents paramètres permettent de stopper l'optimisation. Ces paramètres sont notamment :

- la valeur minimum de la variation (changement relatif ou absolu) que doit subir un paramètre. Si cette valeur seuil n'est pas atteinte, le processus s'arrête.
- le nombre consécutif d'itérations pendant lesquelles il n'y a pas eu de baisse de  $\Phi$ .

### 1.3.9. Calcul de la sensibilité des observations

La sensibilité d'une observation  $o_j$  est calculée par :

$$s_j = \frac{\{Q(JJ^t)\}_{j,j}^{1/2}}{n} \quad (44)$$

La sensibilité de chaque observation est ainsi calculée par rapport à tous les paramètres optimisés lors du processus d'inversion. Cette sensibilité tient compte du coefficient de pondération (introduit par  $Q$ ).

## **CHAPITRE 2. Expérimentation numérique**

Dans cette partie, nous allons étudier la faisabilité de la méthode, c'est à dire tester sa capacité à optimiser correctement les paramètres. Le principe est d'obtenir par une simulation directe un jeu de données qui correspond au jeu de paramètres à tester, et ensuite, par inversion de tenter de les retrouver. Pour cela, naturellement, on devra proposer des paramètres initiaux différents, et suffisamment éloignés de la solution. Cette partie ne comportera donc que des résultats d'optimisations réalisées sur des données synthétiques.

### **2.1. Matériels et méthodes**

#### **2.1.1. Description de l'expérience**

L'expérience consiste en une infiltration depuis la surface plane du sol, sur une aire circulaire (8 cm de diamètre) avec une pression d'eau négative (Figure 2). Les points d'injection (électrodes) sont disposés tous les 5 centimètres. Les mesures électriques sont obtenues en injectant un courant électrique via 2 électrodes et en mesurant le champ électrique induit via 2 autres électrodes. Les lieux d'injection et de mesure du potentiel (électrodes) sont, dans notre modèle, positionnés sur des nœuds du maillage. Le protocole d'acquisition comprend un mélange de mesures gradient et dipôle-dipôle, incluant des mesures directes et des mesures réciproques (Tableau 1). Les mesures dipôle-dipôle permettent d'obtenir une profondeur d'investigation verticale importante et une bonne sensibilité sous les électrodes, alors que dispositif gradient possède une très bonne sensibilité sous les électrodes de mesure.