

# Estimation des imprécisions dans la modélisation du devenir des produits phytosanitaires dans les sols : une méthode fondée sur la logique floue

par Catherine Freissinet (1,2)\*

<sup>1</sup> Laboratoire d'Hydraulique de France

<sup>2</sup> Laboratoire d'Etude des Transferts en Hydrologie et Environnement

## I ■ INTRODUCTION

Les connaissances dont nous disposons aujourd'hui sur les phénomènes de transport et d'atténuation des pollutions dans le milieu naturel sont généralement imparfaites, soit parce que le milieu physique est très complexe et que nous ne sommes pas sûrs de connaître et de comprendre tous les processus qui interagissent sur les phénomènes à étudier, soit parce que les paramètres qui les caractérisent sont difficilement mesurables ou estimables. Nous sommes alors confrontés à deux grandes difficultés qui peuvent, d'une part, s'exprimer par un doute sur la validité de nos connaissances, de nos informations (c'est l'incertitude), et d'autre part, par la complexité pour connaître précisément une information, une valeur (c'est l'imprécision). Ces deux types d'imperfections sur la connaissance des phénomènes physiques et des informations liés au monde réel entraînent des incertitudes et des imprécisions sur les résultats de modélisation représentant les processus.

Les sources d'imperfection étant très nombreuses, nous avons concentré nos efforts sur un point particulier qui est l'évaluation des imprécisions sur les résultats de modèles dues aux imprécisions sur les variables d'entrée et sur les paramètres du modèle, et aux simplifications des relations mathématiques utilisées pour modéliser le devenir des produits phytosanitaires dans le sol.

## II ■ LA MODÉLISATION ET LES IMPRÉCISIONS

Du fait de l'importance de ces imprécisions dans les résultats de simulation, nous pouvons alors être amenés à douter de l'utilité de ces systèmes de modélisation et nous ne pouvons accorder aux résultats qu'une confiance limitée.

Il n'est pas question de rejeter les modèles mathématiques qui sont des outils prédictifs indispensables pour nous renseigner sur les conséquences des actions humaines ou des changements naturels, mais il est important d'évaluer et de prendre en compte l'imprécision des paramètres du modèle, afin de fournir une fourchette de valeurs et non pas une valeur unique comme résultat de simulation.

Ces imprécisions peuvent être estimées par des méthodes classiques (méthodes statistiques descriptives, méthode de

Monte Carlo, approche fondée sur l'analyse du premier ordre ou analyse Bayésienne). Mais ces méthodes sont soumises à de nombreuses hypothèses et conditions de mise en œuvre (nombreuses mesures, connaissances approfondies de fonctions de distribution de probabilité de chacune des variables, nombreuses simulations pour obtenir un échantillon représentatif du résultat répondant aux critères stricts de tests statistiques, impossibilité de prendre en compte les informations qualitatives...) et ne peuvent être utilisées dans des études qu'au cas par cas.

Ainsi, pour pallier un grand nombre de ces inconvénients, nous avons développé une nouvelle méthode, fondée sur les sous-ensembles flous et sur la logique floue [1], qui permet d'associer au résultat moyen issu de la modélisation mathématique, une fourchette de variation autour de la valeur moyenne, ainsi qu'un degré de confiance pour chacune des valeurs de la fourchette de variation.

## III ■ UNE MÉTHODE FONDÉE SUR LA LOGIQUE FLOUE

La méthodologie générale est fondée sur l'utilisation conjuguée d'un modèle mathématique qui fournit la valeur moyenne d'une simulation et de l'approche floue qui estime l'imprécision sur cette valeur moyenne à partir de celles sur les paramètres d'entrée du modèle (cf. Fig 1).

### ● 3.1 Analyse du problème physique

Le problème physique est analysé et décomposé en un ensemble de processus représentatifs de phénomènes élémentaires plus simples à traiter.

Par exemple, si nous souhaitons calculer le flux convectif ( $F_c$ ) d'atrazine qui traverse la zone non saturée du sol pour atteindre la nappe [2], nous chercherons les différents phénomènes et paramètres qui entrent en compte dans l'équation du calcul de  $F_c$  (cf. Eq 1) :

$$F_c = q' Cl \quad \text{avec } q' = q/R \text{ (Eq. 1) où :}$$

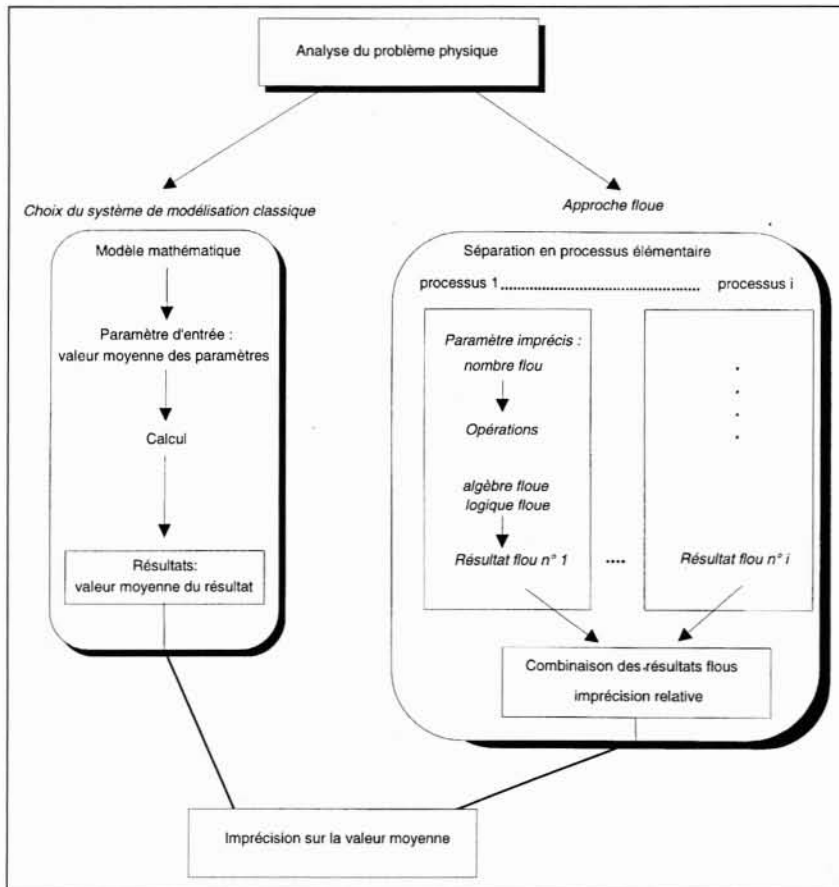
$F_c$  est le flux convectif massique d'Atrazine ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$Cl$  est la concentration de l'Atrazine en phase liquide ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ )

$q$  est la vitesse de Darcy ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ )

$R$  est le facteur retard (-).

\* La thèse de Catherine Freissinet lui a valu une lettre de félicitations du jury du prix Henri Milon.



**1. Schéma de principe d'estimation des imprécisions sur un résultat de modélisation.**

Le processus global de transport exprimé par l'équation 1 peut être décomposé en processus de la variation de la vitesse, des phénomènes d'adsorption-désorption du produit sur la matrice solide (représenté par le facteur retard), et de dégradation du produit. Ainsi, l'imprécision relative sur le flux convectif d'Atrazine sera déterminée par :

$$\Delta Fc/Fc = \Delta q/q + \Delta R/R + \Delta CI/CI \quad (\text{eq. 2})$$

$\Delta q/q$ ,  $\Delta R/R$ ,  $\Delta CI/CI$  et  $Fc$  sont alors évalués séparément pour calculer ensuite l'imprécision globale  $\Delta Fc$ .

### ● 3.2 Modélisation mathématique classique

Le choix du modèle mathématique dépend des phénomènes que nous souhaitons représenter, mais également des données disponibles. Ces données, renseignées généralement par des valeurs moyennes (par rapport à la plage de leurs valeurs possibles), alimentent le modèle mathématique qui fournit une valeur moyenne (dans le même sens que ci-dessus) comme résultat de simulation.

Dans l'exemple précédent, la valeur moyenne du flux convectif d'atrazine  $Fc$  est calculée en résolvant numériquement l'équation générale de transport.

### ● 3.3 Approche floue

L'objectif de l'approche floue est d'évaluer l'imprécision qui entoure la valeur moyenne issue du modèle mathématique.

Ainsi, le phénomène modélisé est décomposé en un ensemble de phénomènes élémentaires supposés indépendants pour lesquels une solution analytique peut être trouvée. Puis, les paramètres imprécis utilisés dans cette solution analytique sont transformés en nombres flous et manipulés selon les lois algébriques des sous-ensembles flous et de la logique floue [3]. Ainsi, pour chaque phénomène élémentaire, un résultat flou est obtenu (valeur moyenne propre au phénomène élémentaire et fourchette d'imprécision de chaque résultat). La combinaison de l'ensemble des solutions de chaque phénomène élémentaire nous permet donc d'obtenir l'imprécision relative globale sur le résultat de simulation [4].

Cette approche est illustrée ici pour le phénomène élémentaire "calcul de la concentration d'Atrazine en phase liquide,  $CI$ " décrit dans l'équation 2.

En supposant que la dégradation obéit à une cinétique du premier ordre, l'évolution dans le temps de la concentration est donnée par l'expression analytique suivante :

$$CI = Co \exp \left( -\frac{\ln 2 t}{T_{1/2}} \right) \quad (\text{eq.3})$$

avec :  $Co$  ( $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ) la concentration initiale d'Atrazine appliquée à la surface du sol,  $T_{1/2}$  (j), le temps de demi-vie de l'Atrazine.

L'imprécision sur  $CI$  dépend alors de celles sur  $Co$  et  $T_{1/2}$ . Or  $Co$  est sous l'influence de nombreux facteurs comme la

$F_{cmax}^{(1)}$ ( $mg.m^{-2}.j^{-1}$ )	$\theta^{(1)}$ ( $m^3.m^{-3}$ )	$\frac{\Delta q}{q}^{(2)}$	$\frac{\Delta R}{R}^{(2)}$	$\frac{\Delta C_I}{C_I}^{(2)}$	$\frac{\Delta F_{cmax}^{(2)}}{F_{cmax}}$	$\Delta F_{cmax}$ ( $mg.m^{-2}.j^{-1}$ )
$2.85 \cdot 10^{-5}$	0.20	1.0	0.968	7.6	9.57	$2.73 \cdot 10^{-4}$

**Tableau 1. Imprécision relative sur q, R et  $C_I$  et  $F_c$  maximum**

(1) calculé par LEACHMP  
(2) estimé par l'approche floue

volatilisation, le ruissellement, l'érosion, les transformations chimiques à la surface du sol, la reprise par les plantes. Cette grandeur dont la valeur est imprécise est représentée par un nombre flou de fonction d'appartenance triangulaire

$C_o$  (0,05 ; 0,1 ; 0,15)<sub>T</sub> (cf. Fig. 2a).

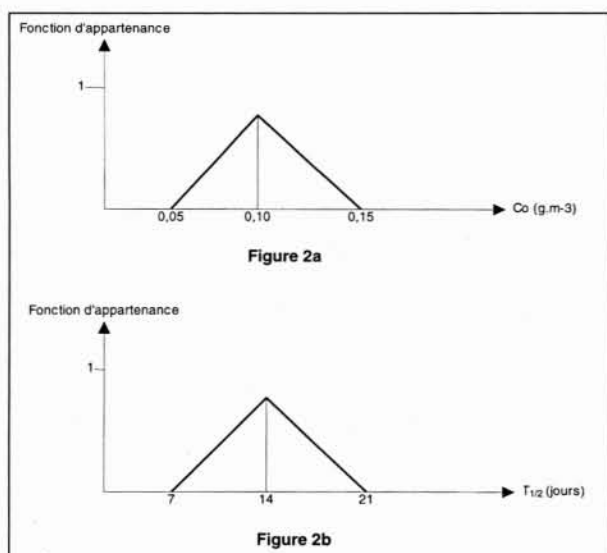
La valeur du temps de demi-vie de l'Atrazine dépend des caractéristiques du sol (pH, teneur en eau, température...), de l'activité de la biomasse microbienne... Ce paramètre imprécis est également représenté par un nombre flou de forme triangulaire  $T_{1/2}$  (10, 14, 18)<sub>T</sub> (cf. Fig. 2b).

La résolution de l'équation (3) avec les deux nombres flous  $C_o$  et  $T_{1/2}$ , par les opérateurs d'algèbre floue, permet d'évaluer l'imprécision relative sur la concentration d'Atrazine en phase liquide dans la zone non saturée du sol ( $\Delta C_I/C_I$ )

De la même façon,  $\Delta q/q$  et  $\Delta R/R$  (cf. Eq. 2) sont évalués à partir des solutions analytiques des équations simplifiées correspondantes (Loi de Darcy, facteur retard).

Puis, par des règles floues et des opérateurs de logique floue, nous combinons ces imprécisions relatives  $\Delta C_I/C_I$ ,  $\Delta q/q$ ,  $\Delta R/R$  auxquelles peuvent être ajoutés des jugements et connaissances d'experts sur la validité des solutions analytiques proposées, pour obtenir l'imprécision relative finale sur le phénomène complexe que l'on souhaite évaluer :  $\Delta F_c/F_c$ .

Puisque la valeur moyenne  $F_c$  a été calculée précédemment par le modèle mathématique déterministe LEACHMP [5], nous pouvons aisément en déduire à partir de l'équation 2,



**2. Représentation de la concentration en Atrazine appliquée à la surface du sol (2a) et du temps de demi-vie (2b) par des nombres flous triangulaires.**

l'imprécision sur la valeur moyenne du résultat de simulation  $\Delta F_c$ . Le tableau 1 présente les résultats des calculs d'imprécision sur le flux convectif (calculs détaillés dans [4]) et illustre l'approche floue.

## IV ■ CONCLUSION

Cette nouvelle méthode fondée sur la logique floue permet d'évaluer l'imprécision sur les résultats de simulation sans avoir besoin de modifier le code de calcul.

Elle a comme avantage de pouvoir prendre en compte :

- les imprécisions sur des paramètres aussi bien qualitatifs que quantitatifs,
- les imprécisions dues aux simplifications ou approximations des phénomènes élémentaires,
- les connaissances externes, comme les jugements d'experts, par un unique calcul simple à mettre en œuvre.

La difficulté consiste en la décomposition d'un processus complexe en processus physiques plus simples et dont les solutions peuvent être trouvées. Cela exige une bonne compréhension physique des phénomènes et fait appel aux connaissances et au talent d'ingénieur.

Cette méthode est complémentaire des modèles mathématiques déterministes. Elle permet d'associer aux résultats de simulation des fourchettes d'imprécision, et donc de fournir aux modélisateurs et aux décideurs une évaluation de la confiance à leur accorder.

## REMERCIEMENTS

Je souhaite exprimer ma profonde reconnaissance à Monsieur Michel Vauclin du LTHE et Messieurs Jean Cunge et Marc Erlich du LHF, qui ont suivi et encadré ces travaux de recherche.

## RÉFÉRENCES

- [1] Zadeh, L.A. 1965. Fuzzy sets, Information and Control, 8: 338-353.
- [2] Vauclin M., 1994. Modélisation du transport de solutés dans la zone non saturée du sol. Revue des Sciences de l'Eau, 7: 81-102.
- [3] Bardossy, A. et Duckstein, L. 1995. Fuzzy rule-based modeling with applications to geophysical, biological and engineering systems. CRC press, 232p.
- [4] Freissinet C. 1997 Estimation des imprécisions dans la modélisation du devenir des produits phytosanitaires dans les sols : une méthode fondée sur la logique floue. Thèse de doctorat de l'Université Joseph Fourier, Grenoble, France.
- [5] Wagenet R.J. et Hutson J.L., 1989. LEACHM : a process-based model of water and solute movement transformations, plant uptake and chemical reactions in the unsaturated zone - Dept. of Agronomy Report, Cornell Univ., Ithaca, New York.