

TRIBUNE LIBRE

Quelques réflexions sur l'utilisation des modèles en hydrologie

FREE OPINION

On the use of models in hydrology

G. de MARSILY¹

SUMMARY

This discussion article addresses the issue of the nature of models used in hydrology. Although its emphasis is on contaminant transport in groundwater, I believe it is relevant to most areas of hydrologic modelling. It proposes a minimalist classification of models into two categories: *models built on data from observations of the processes involved* and those for which there are *no observation data on any of these processes*, at the scale of interest.

The argument is that the former should (or rather, ought to, since the question seems to attract little interest) obey serious working constraints, well-known from classical tragedy:

- unity of place,
- unity of time,
- unity of action.

The meaning of these rules, in terms of model calibration, validation and extrapolation, is analysed. They impose very strong limitations on the applicability of such models.

As to the models in the latter category which, in my opinion, are the more interesting and useful ones, several suggestions are made for their development and application.

1. MODELLING OBSERVABLE OR OBSERVED PHENOMENA

Observable phenomena such as nitrate or pesticide pollution are there to be measured and observed, although this might in practice involve considerable effort. Modelling is then used to forecast future behaviour of these pollutants.

The archetypal model for observable phenomena is that of the « black box ». If one can provide the box with one or several inputs and outputs and place something numerical inside, it will produce results. The modeller's task is to introduce a serviceable « engine » into the box, if possible. However, the least demanding of approaches is probably the neural network method. Here, an engine is not

1. Laboratoire de Géologie appliquée, URA CNRS 1367, Université Paris VI.

even necessary: the series of observed inputs and outputs is given to the network which itself carries out a « weighting » of the input data resulting in the given output. The « engine » in the black box is created by the data, whereas in more familiar black boxes, the modeller decides on a form of relationship between the input and the output (e.g. a convolution equation, a groundwater model equation), and only tries to fit a limited set of parameters describing the black box. This phase of the fitting is called, in neural network terms, the « learning process » – it is modelling reduced to its bare essentials. Almost no physical understanding of the system is needed and the range of decisions left to the modeller is almost zero (e.g. number of neurons, of neural layers, forward or backward learning, etc.). This type of model looks simple but it must be remembered that most other models currently used in hydrology on series of observed data are actually quite similar. They may be called deterministic or even stochastic, conceptual or distributed but the basic principle of all these « fitted » models is the same: the « engine » in the box is created by the data set and its exact nature is irrelevant.

Validation of models fitted by the learning process

This important question is at present being debated by modellers. For a black-box model (as defined above), validation consists in testing it with a set of parameters that has not been used during the learning process but for which the output is known and then, comparing the real and calculated outputs. A number of criteria has been proposed for this comparison and many conflicting opinions aired as to the possibility of validating a theory, and the model which is its expression, from observations. A counter-argument holds that a model is not an expression of a theory but of universally accepted principles, e.g. mass conservation, and of experimental laws, e.g. Darcy's law. Moreover, although a model may be invalidated at some point, it represents the « least unsatisfactory » way of trying to forecast the future, and each successful validation attempt increases the confidence in the model. Therefore, it would seem a good idea to separate the learning data into two groups: one for fitting and the other for validating.

Unity of space

This means that the model only applies to the domain on which it has been fitted through the learning process. There are three examples of how this rule is infringed: (i) *Extrapolation in space*. The set of parameters derived at site A, said to be « representative » of the medium, are used at site B. To my knowledge, no evidence exists at present of the merits of this method nor has it been reliably validated by experience. Quite the opposite, except in rare cases of very uniform media. (ii) *Transposing in space through a formal link between the parameters obtained through the learning process for site A and the corresponding geometrical and geological data for site B*. A new set of parameters is derived characterizing the latter. This could prove a fruitful line of research but it has not, as yet, received much attention. (iii) *Method of « relay elements »*, which applies specifically to transport in porous media. As movement of strongly retarded solutes cannot be observed, a laboratory experiment is done with the solute in question and another weakly retarded « relay element ». The relay element is then used alone in the field, at the transport distance of interest. The difference in their retardation, measured at the laboratory scale, is then extrapolated to the real medium in order to make the prediction. This approach is certainly preferable to a simple extrapolation from the laboratory to reality of a retardation coefficient related to a perfect tracer, since it uses information of the retardation over the entire transport distance of interest. However, it is totally dependent on the similarity of retardation mechanisms affecting the two elements and on the « representativeness » of the tested sample.

Unity of action

This rule is simple and no exceptions should be tolerated. If the modelled action were to change, the model fitted by the learning process is dead. The learning

process is based on a given medium, driven by given mechanisms. It does not identify any general intrinsic characteristics.

Unity of time

If the system is modified by time, the model is no longer relevant. The changes may be seasonal, long-term or due to inherent nonstationary conditions. For example, nitrate transport depends on the type of winter soil cover, ploughing techniques, etc., and the representative parameter sets will change in consequence.

These constraints severely limit the use of black-box models.

2. MODELLING OF UNOBSERVABLE PHENOMENA

There are several reasons why certain phenomena cannot be observed. Consider nuclear waste disposal in deep repositories: if this becomes a source of pollution, it will happen untold years hence - the pollution phenomenon is therefore unobservable today. Predictive impact studies generally make use of this type of modelling.

Here, the important question is: what parameters to introduce? The decision must be based on the ability to describe the system and its behaviour without the benefit of observation. At present, the general tendency seems to be:

- (i) to identify the real geometry of the system,
- (ii) to thoroughly analyse and represent the physics of the underlying driving mechanisms,
- (iii) to analyse scenarios.

(i) *Identification of the real geometry.* Since it is impossible to blindly fit global coefficients by the learning process, the medium must be observed and described, starting with the geometry. This is an entirely new discipline in groundwater hydraulics. Several methods are being developed, genetic models (e.g. alluvium sedimentation in streams, diagenetic processes in pores), stochastic facies models (e.g. Boolean techniques, Indicator simulation techniques, Truncated Gaussian techniques) which produce a very detailed description of the geometry and properties of the medium. In general, an infinite number of possible « realizations » of the real medium is generated and the variability between them indicates the uncertainties on the medium under consideration. These realizations can be conditioned by available measurements of medium properties, e.g. at boreholes. These models usually function with a very small discretization (on the order of decimeters to meters) and produce descriptions which are coherent with what can be observed in the field at the sample scale. Then, a change of scale, as exact as possible, has to be made in order to provide a description of the medium that can be handled by the model. This is a difficult process on which much more work needs to be done.

(ii) *Analysis and representation of the underlying physical processes.* In the black-box models there is a tendency to globalize the processes. Here, the tendency is reversed: the individual, elementary mechanisms must be examined and their strength and kinetics studied and measured. This involves lengthy and expensive investigations but it is the only way to obtain physically significant parameters. However, this method results in extremely complicated models and although it seems to be the only rigorous one, it is, as yet, impossible to judge its success.

(iii) *Scenario analysis.* When the model is ready, it is used in forecasting. This is done through the development of scenarios which take into account all possible factors of change and evolution, natural and man-made. This by itself is a very demanding task, which requires considerable effort, both from the technical and the sociological viewpoint, considering all inter- and retroactions between the physical and the decision-making worlds.

The concluding passage suggests that somewhere in the scientific community, over and above the modelling work guided by « useful » aims, work must also continue on models that serve no particular purpose. Consider the lattice gas models, which are fascinating tools, although it is impossible, at this stage, to know if they will ever play a significant role in any facet of hydrology.

Key-words : models, black box, validation, prediction, uncertainty.

RÉSUMÉ

Cette réflexion sur la modélisation en hydrologie bien que se référant souvent à ce domaine précis de l'hydrologie, se veut d'ordre plus général, et propose une classification très réductrice des modèles en deux genres : ceux établis à partir de données d'observation des processus étudiés, et ceux pour lesquels il n'existe aucune observation du phénomène à modéliser, à l'échelle étudiée.

A partir de cette classification, et des règles bien connues de la tragédie classique (unité de lieu, de temps, d'action), une pratique de la modélisation est proposée, et des pistes de recherche sont dégagées.

On conclut en rappelant qu'il doit exister aussi, dans la communauté scientifique, en sus de recherches en modélisation à caractère « utilitaire », d'autres travaux portant sur des modèles qui ne servent à rien.

Ces quelques réflexions, à caractère quelques peu polémique, ont pour objet d'initier si possible une discussion ; d'où la rubrique « tribune libre » où elles paraissent.

Mots clés : modèles, boîtes noires, validation, prédiction, incertitudes.

Avec le souci de dégager des règles et contraintes d'emploi, je propose de classer les modèles utilisés en hydrologie en deux genres : ceux qui s'attaquent à des phénomènes pour lesquels on dispose d'observations du comportement du système, à l'échelle que l'on souhaite représenter, et ceux pour lesquels ces observations ne sont pas disponibles. Examinons tour à tour ces deux cas.

1 – MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES OBSERVÉS OU OBSERVABLES

Observables veut dire que, dans un temps raisonnable, on peut éventuellement observer un transfert (si l'on parle de polluants dans l'environnement) ou un effet hydraulique (si l'on parle de quantité) sur des distances et dans des domaines significatifs. L'exemple le plus clair est celui de la pollution de l'environnement par les nitrates ou par les pesticides, il y en a hélas partout ; il suffit d'ouvrir ses yeux, de regarder et de mesurer pour observer le phénomène que l'on veut pouvoir modéliser ; cette observation et cette mesure ne sont cependant pas toujours simples, et souvent incertaines. En général, la modélisation a pour but d'essayer de prévoir le devenir de ces polluants, ou de savoir ce qu'il faudrait faire pour éviter leur dissémination.

Je vais prendre quelques exemples de phénomènes observés pour exposer, dans la démarche générale de choix et de conception d'un modèle, ce qui me paraît être important. L'archétype des modèles de phénomènes observables est le modèle « boîte noire », c'est-à-dire celui pour lequel on dispose d'une ou plusieurs entrées et d'une ou plusieurs sorties ; il suffit de mettre quelque chose de numérique dans la boîte noire pour que l'entrée se transforme en sortie, plus ou moins bien. Le travail du modélisateur est de bien choisir, si possible, le « moteur » mis dans la boîte noire. L'approche peut-être la moins exigeante pour le modélisateur, dans cette optique, me semble être ce que l'on appelle les réseaux de neurones. Il n'y a même pas besoin de mettre un « moteur » dans la boîte, le réseau de neurones s'en charge tout seul. On lui fournit la série des entrées et des sorties observées, et le réseau se charge de trouver lui-même une « pondération » entre les données d'entrées qui puisse fournir la ou les sorties. Cette phase de calage du modèle porte le nom, en réseau de neurones, « d'apprentissage », vocable qui me semble évocateur et élégant. La relation qui existe entre les entrées et la sortie se trouve automatiquement calée par le modèle sans que le modélisateur n'ait à faire aucun choix. La modélisation est donc réduite à sa plus simple expression : il n'y a pas d'équations phénoménologiques à écrire, pas de géométrie, pas de paramètres ni de conditions aux limites, pas de vérification d'un algorithme ; on fait un calage (apprentissage du réseau) ; ensuite de quoi on peut utiliser le modèle en prévision, et fournir la sortie pour un nouveau jeu de données d'entrée.

Comment est-ce que ça marche ? C'est, à vrai dire, assez complexe ; il y a tout de même quelques paramètres ou d'options à choisir, tels que le nombre de neurones, le nombre de couches de neurones dans le réseau, si l'apprentissage se fait *per ascensum* ou *per descensum*, etc. Mais il n'est pas nécessaire que le fonctionnement réel du « moteur » soit connu de l'utilisateur, d'ailleurs les meilleurs réseaux de neurones disponibles sur le marché sont souvent confidentiels, il est interdit de lever le couvercle pour voir ce qu'il y a dans la boîte !

N'importe quel mathématicien vous dira qu'un tel outil est tellement rudimentaire que l'on peut toujours faire mieux en y mettant un peu de connaissance du système, en proposant à la boîte noire quelques règles de fonctionnement du « moteur » ; j'y reviendrai. Mais l'important est que de tels modèles existent, et qu'au fond, les autres modèles utilisés couramment en hydrologie sur des séries de données observées ne sont pas si différents.

Il est, en effet, possible de mettre un peu d'intelligence dans les modèles boîte noire ; on peut supposer que la relation entre entrée et sortie est de type convolution (relation pluie-débit, par exemple) et ne chercher à déterminer par apprentissage que les coefficients de ce noyau de convolution ; on peut supposer que la relation entre entrée et sortie s'apparente au remplissage et à la vidange de réservoirs en cascade, dont on déterminera par apprentissage le volume et les lois de vidange ; on peut imaginer qu'entrées et sorties soient liées par une équation différentielle ou aux dérivées partielles, dont les coefficients sont les paramètres à caler par apprentissage. On rend alors plus efficace le « moteur » dans la boîte, on augmente peut-être l'efficacité de l'apprentissage, tout en réduisant l'éventail des comportements possibles mais, au fond, on ne change rien au principe de ce type de modèle ; il est

entièrement déterminé par le processus d'apprentissage, et ne se justifie que par la qualité de l'ajustement obtenu sur l'historique passé. Parler de modèle déterministe, ou même stochastique¹, de modèle conceptuel, de modèle distribué, ne change rien au principe de base de ces modèles « calés » : le « moteur » de la boîte est créé par le jeu de données, la nature du moteur importe peu. La soi-disant « physique » introduite dans un tel modèle en qualifiant de conceptuelle la relation entre grandeurs introduites dans le « moteur » est une escroquerie. J'en donnerai un exemple limpide. Il existe au CEMAGREF un modèle hydrologique simple, appelé GR3 car il ne dépend que de trois paramètres (MICHEL, 1983, 1991). Il convertit la pluie en débit, sur un bassin versant. L'un des paramètres du modèle est le niveau de remplissage d'un réservoir, censé représenter l'humidité du sol superficiel, qui va déterminer la capacité d'infiltration et de ruissellement du sol en cas de pluie. S'étant ému des bons résultats qu'obtenaient les modélisateurs en utilisant un modèle conceptuel où l'on fait intervenir la notion d'aire contributive variable (BEVEN et KIRKBY, 1979) pour expliquer la plus ou moins grande contribution du ruissellement par rapport à l'infiltration dans le devenir de la lame d'eau tombée au sol, l'auteur de GR3 s'est aperçu un beau matin que s'il transformait son modèle GR3 en un modèle GR3bis, où l'on remplacerait le paramètre « humidité du réservoir sol » par un nouveau paramètre « pourcentage de surface du bassin saturée » pour calculer le devenir de la lame d'eau tombée au sol, les équations de son « moteur » restaient les mêmes : GR3bis est mathématiquement identique à GR3, seul le nom du paramètre dont il faut assurer l'apprentissage, a changé ! La prétendue « physique conceptuelle » sous-jacente à ces modèles boîte noire à « moteur » donné par l'utilisateur est vraiment très ténue...

Parlons un instant des modèles distribués, dont un excellent exemple est le modèle SHE (ABBOTT *et al*, 1986), qui représente l'ensemble du cycle hydrologique (ruissellement, infiltration, écoulements de surface et souterrains) de façon couplée sur un bassin versant, et même maintenant, le transport des éléments en solution. Le « moteur » de cette boîte noire est particulièrement complexe et très bien déterminé : y sont introduites toutes les équations connues de la circulation de l'eau sur et dans les sols : équations de Saint-Venant, équation de Richard, équation de Boussinesq, etc. L'ensemble de ces équations étant discrétisé, le nombre de paramètres à introduire dans un tel modèle est, a priori, phénoménal. Comme la valeur dans l'espace de ces paramètres est en pratique totalement inconnue (je parlerai plus loin du cas où certaines données sur les propriétés du milieu sont disponibles), on décide qu'il existe un petit nombre de paramètres « moyens » définis par zone, dont la valeur optimale va résulter d'un « apprentissage ». Ces paramètres optimaux moyens n'ont rien à voir avec des paramètres physiques réels mesurables du milieu, car ils ne représentent pas la même chose, même s'ils ont le même nom. Je m'explique : dans une maille du modèle, de taille par exemple 100 x 100 m, la relation $K(\theta)$ liant la perméabilité du sol à la saturation, donnée nécessaire pour la résolution des équations de Richard,

1. Rien n'interdit d'imaginer un modèle boîte noire stochastique, où les paramètres du « moteur » soient incertains et définis par une densité de probabilité, l'apprentissage étant chargé de déterminer cette densité, en lieu et place de valeurs déterministes ; on pourrait alors utiliser un tel modèle en mode prévisionnel en engendrant un ensemble de « réalisations » du « moteur » par simulation de Monte-Carlo.

n'a strictement rien à voir avec celle que l'on pourrait mesurer sur un échantillon de diamètre 5 cm en laboratoire, ou même déduire d'une mesure in situ par la méthode du plan de flux nul, à l'échelle du mètre. Le changement d'échelle fait que les deux paramètres, qui pourtant portent le même nom, n'ont, entre eux, que de très lointains rapports (la valeur « moyenne » étant probablement gouvernée par quelques hétérogénéités majeures du milieu à l'échelle de la maille). Il est d'ailleurs plus que probable que les équations de Richard, établies à l'échelle microscopique, ne gardent pas la même forme quand on les intègre à une échelle plus vaste. Il est bien connu par exemple, que le changement d'échelle conduit, dans l'équation de la dispersion, à l'émergence de termes nouveaux, appelés macrodispersion, dont les coefficients n'ont rien à voir avec ceux représentant la dispersion locale, qui sont les seuls mesurables à petite échelle (voir par exemple MATHERON et MARSILY, 1980, GELHAR et AXNESS, 1983, QUINTARD et WHITAKER, 1993).

En résumé, même les modèles dits « à base physique » comme le SHE ne sont, en réalité, que des réseaux de neurones améliorés, dont la seule justification est qu'ils sont capables de suivre un processus d'apprentissage, qui leur permet ensuite de traiter un nouveau jeu de données pour prédire une sortie non observée.

Ces propos, dira-t-on, sont excessifs ; on sait marier apprentissage et mesures physiques des paramètres. J'y reviendrai après avoir décrit l'autre type de modèle, pour les phénomènes dits non observables. Il nous faut auparavant regarder deux autres aspects : la validation de ce type de modèles, et les contraintes qu'impose leur utilisation.

Validation des modèles calés par apprentissage

Cette question essentielle fait l'objet, à l'heure actuelle, d'un débat de fond entre modélisateurs, par exemple KLEMES (1986), BEVEN (1986), ou plus récemment KONIKOW & BREDEHOEFT (1992) avec une discussion dans MARSILY, COMBES et GOBLET (1992). J'utiliserai ici une terminologie qui n'est pas universellement acceptée, mais fait l'objet d'un premier consensus parmi les modélisateurs du transport en milieu poreux :

– On appellera « vérification » d'un modèle la phase de contrôle de l'adéquation, précision et robustesse des algorithmes dont le modèle est constitué ; on effectue souvent cette vérification en comparant les sorties d'un modèle avec une solution analytique du même problème, dans les mêmes conditions.

– On appellera « validation » d'un modèle la phase de contrôle où l'on tente de s'assurer que l'ensemble construit représente bien le monde réel ; il est donc indispensable, pour valider, de comparer les sorties du modèle avec de vraies observations.

La validation consiste donc, pour les modèles de type « boîte noire » tels que je les ai définis, à tester sur le modèle un jeu d'entrée non utilisé pendant la phase d'apprentissage, mais pour lequel la sortie est connue, et de comparer sorties réelle et calculée. La validation mesure la similarité entre ces deux sorties, et de nombreux critères ont été proposés pour cela (voir par exemple KAWARK-LEITE, 1990).

Sur cette question de validation, KONIKOW et BREDEHOEFT (1992) adoptent un point de vue Popperien (POPER, 1973, 1985), et disent qu'une théorie (en l'occurrence ici le modèle, qui en est la traduction) ne peut jamais être validée, même si elle rend compte d'une expérience, tout au plus peut-elle ne pas être invalidée par l'expérience. Jusqu'à ce qu'un nouveau cas (ici un nouveau jeu de données d'entrée et de sortie) vienne démontrer que la théorie en vigueur ne résiste pas au fait, et doit être abandonnée, une tentative de validation, même réussie, ne possède aucun caractère probant en ce qui concerne la confiance à accorder au modèle en prédiction.

Il est certain que l'on peut imaginer que pour un jeu de données d'entrée différent, dans des plages de valeurs différentes de celles utilisées pour l'apprentissage, les prévisions du modèle puissent être mises en défaut. Cela m'amène à tenter de définir les conditions d'utilisation d'un modèle « boîte noire ».

Les trois unités de la tragédie classique

On se souvient de ces contraintes auxquelles est soumise la tragédie grecque : unité de lieu, unité d'action, unité de temps. Je voudrais montrer qu'il en va de même pour l'utilisation des modèles « boîte noire » au sens où je les ai définis.

Unité de lieu

Si le modèle satisfait à la contrainte d'unité de lieu, c'est qu'il est utilisé strictement pour le domaine d'espace sur lequel il a été calé par apprentissage. Mais ceci est rarement le cas en pratique ! Je considérerai trois entorses à l'unité de lieu :

(i) Extrapolation dans l'espace. Le modèle est calé sur des observations dans l'espace de A à B. On l'utilise sur des trajets A' à B', avec A' différent de A et/ou A'B' > AB. Un tel pari fait appel à l'hypothèse « d'émergence », à savoir que les paramètres a_i du modèle calés par apprentissage sur le trajet AB ont atteint leur valeur asymptotique en fonction de l'échelle, et dès lors sont représentatifs d'une autre portion du même système, ou d'une autre distance. L'existence de telles valeurs asymptotiques s'appuie sur la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER) prônée par BEAR (1972), entre autres. Rien ne permet de dire aujourd'hui que ce concept ait été fructueux ou validé par l'expérience, bien au contraire. Cette extrapolation est donc en fait gratuite et véritablement sans fondement scientifique. Elle est en général invalidée par l'expérience, sauf dans de rares cas de milieux très uniformes.

(ii) Une tentative de transposition, peut-être moins critiquable, serait de chercher à relier formellement les paramètres a_i issus de l'apprentissage sur le site A, à des données géométriques ou géologiques, permettant de caractériser le site A, puis de déterminer, sur le site A', les données géométriques ou géologiques qui lui correspondent, en déduire (sans apprentissage) un nouveau jeu de paramètres a'_i correspondant au site A', en transformant les paramètres a_i en paramètres a'_i grâce aux relations formelles identifiées. Il s'agit là d'une voie de recherche a priori fructueuse et qui n'a été abordée, jusqu'ici, que très partiellement. On peut penser à utiliser des données de pédologie, géologie, végétation, télédétection...

(iii) Une autre approche, proposée notamment par JAUZEIN (1988) est l'utilisation de « substances relais ». Il s'agit du cas particulier du transport en milieu poreux. Ne pouvant observer le transfert d'éléments fortement retardés dans un milieu (phénomène donc non observable), JAUZEIN propose d'effectuer un traçage sur le terrain avec une substance relais faiblement retardée (lithium par rapport au strontium, par exemple, qui va rendre le phénomène observable), pour disposer de données d'apprentissage et caler le modèle. En simplifiant, il identifie ensuite en laboratoire, sur une faible longueur, la différence de retard qu'il observe entre les deux métaux, et extrapole ce résultat au milieu réel. Cette démarche est certes préférable à l'extrapolation pure et simple de la mesure en laboratoire à l'échelle du terrain, dont on use et abuse trop souvent. Mais elle repose, comme le dit JAUZEIN lui-même, sur l'hypothèse de similarité des mécanismes de retard du lithium et du strontium, qui peut ne pas être vérifiée (adsorption sur des sites différents, selon des mécanismes différents...) et sur la fameuse « représentativité » de l'échantillon testé en laboratoire, que rien ne permet d'assurer.

En résumé, l'unité de lieu devrait être respectée dans l'utilisation de modèles, et toute extrapolation assortie de peines de réclusion à perpétuité...

Unité d'action

Cette règle est simple, et ne saurait souffrir d'exception. Si l'action modélisée vient à changer, le modèle calé par apprentissage doit être réduit au silence et ne saurait avoir une quelconque prétention à prédire. J'entends par là une modification des processus (exemples : passage de conditions oxydantes à des conditions réductrices dans le milieu ; changement de la nature des polluants dont on veut suivre le cheminement ; changement de la nature de l'écoulement, passage du mode radial au mode parallèle, du mode laminaire au mode turbulent, etc). La raison en est simple : l'apprentissage est fondé sur un milieu et des processus donnés. Il n'identifie pas des propriétés intrinsèques générales, mais des relations particulières de la série observée. Il ne peut donc prétendre représenter autre chose.

Unité de temps

Si le temps modifie le système, alors le modèle est à nouveau réduit au silence. Il peut s'agir de non stationnarité naturelle, saisonnière, ou liée à des évolutions à long terme, ou plus souvent, de modifications du milieu d'origine anthropique. Dès lors que le milieu a été modifié, sa réponse aux entrées a toutes les chances de l'être aussi, et conserver le même jeu de paramètres pour le représenter tient de l'acte de foi, non d'un raisonnement scientifique. Ainsi, dans un modèle de transfert des nitrates dans les sols de type « boîte noire », calé par apprentissage sur des données observées, toute modification de la profondeur des labours, par exemple, ou de la nature des états de surface en hiver, rendra caduque le modèle calé sur des états antérieurs.

Ces trois contraintes sont en effet « tragiques » dans le rétrécissement du domaine d'emploi qu'elles imposent, ou devraient imposer, aux modèles boîte noire, tels que définis ici, c'est-à-dire la majorité des modèles existants. Nous allons donc examiner maintenant le deuxième type de modèles, correspon-

dant aux phénomènes « non observables », d'où la démarche d'apprentissage est, par définition, exclue. Nous regarderons enfin s'il existe une « voie moyenne » entre ces deux extrêmes.

2 - MODÉLISATION DES PHÉNOMÈNES NON OBSERVABLES

Cette distinction entre phénomènes « observables » et « non observables » me semble extrêmement importante pour la conception et l'emploi des modèles ; les phénomènes que je qualifierais de non observables peuvent l'être pour diverses raisons. Le premier exemple qui vient à l'esprit, est le stockage profond des déchets nucléaires : on ne verra en principe jamais de notre vivant, ni même en mille an, sauf erreur grossière, le moindre radionucléide, issu d'un stockage situé à 500 m de profondeur, venir polluer l'environnement en surface. C'est donc un phénomène strictement non observable : on ne peut pas essayer de fonder la modélisation sur des observations directes du phénomène de type entrée-sortie, contrairement aux nitrates par exemple.

Un deuxième exemple, où le phénomène à modéliser n'est pas observable, est le cas où des changements très importants dans le fonctionnement du système vont être mis en place. Si l'on décide de construire, par exemple, un système de déphosphatation des eaux résiduaires à Paris, il n'existe aucun moyen d'observer les effets d'un tel changement sur le comportement biologique du système à l'avant, car il n'a pas encore eu lieu, et les effets éventuels ne sont pas encore présents. Or, il faut modéliser a priori ce qu'il va se passer, pour décider de l'utilité et dimensionner. Il en va de même pour les études d'impact, les analyses de risques, les rejets de polluants qui ne se sont pas encore produits, etc.

Les paramètres de tels modèles ne pouvant plus, par définition, être calés, la démarche de modélisation devient par essence plus cartésienne. L'outil informatique ou numérique utilisé peut ne pas être différent d'un modèle que j'ai qualifié de boîte noire précédemment ; c'est en fait l'usage du modèle qui est de type « boîte noire » avec apprentissage, ou de type « phénomène non observable » sans apprentissage. Pour reprendre l'exemple du modèle SHE, déjà cité, son emploi en prévision quand aucune donnée de calage n'est disponible, est un exemple du type de modélisation dont je veux parler. Tout le problème réside alors dans le choix des paramètres à introduire dans le modèle, qui doivent résulter d'une connaissance du milieu et des processus. En quelque sorte, le travail de modélisation est reporté en amont : il faut être capable de décrire le système et son fonctionnement indépendamment des observations de ce fonctionnement. Une telle démarche me semble caractérisée aujourd'hui par une triple tendance :

- (i) géométrisation du réel ;
- (ii) déglobalisation des processus ;
- (iii) analyse en scénarios.

Je les examinerai dans l'ordre.

Géométrisation du réel

Dès lors que l'on ne peut plus caler de façon aveugle, par apprentissage, des coefficients globaux, il faut bien s'attacher à décrire plus fidèlement le milieu étudié, et tout d'abord, à l'observer. Cette description est d'abord géométrique (forme des objets, des corps sédimentaires, des unités pédologiques, des fractures et des diaclases, des fentes de retrait des sols, etc, ou simplement, dans les eaux de surface, géométrie précise des cours d'eau). Il s'agit, en hydraulique souterraine, d'une discipline entièrement nouvelle, qui doit précéder la modélisation. On trouvera, par exemple, une brève revue des méthodes de représentation des objets géologiques naturels dans FAYERS & HEWETT (1992), GUERILLOT *et al* (1990), HALDORSEN et DAMSLETH (1990), HIRD et KELKAR (1992), MARSILY (1993), MACKAY et RILEY (1994). Ce type de représentation est en général stochastique, c'est-à-dire que l'on engendre un ensemble infini de « réalisations » possibles du milieu réel, toutes aussi plausibles, et dont la variabilité de l'une à l'autre indique l'incertitude existant sur le milieu étudié. Ces réalisations peuvent cependant être conditionnées par les mesures disponibles in situ des propriétés du milieu (en général des informations géologiques aux forages). Conditionné veut dire que les milieux engendrés possèdent, au droit des forages, les mêmes valeurs que celles observées. Ces modèles fonctionnent en général avec beaucoup de finesse, et donnent des descriptions géométriques sur des dimensions d'espaces décimétriques ou métriques, c'est-à-dire où la mesure de la valeur d'un paramètre sur le terrain a un sens. Il faut ensuite estimer, toujours par la connaissance du milieu ou des processus qui ont conduit à la mise en place du milieu, la valeur des paramètres (ou des lois de probabilités d'où on peut tirer la valeur de ces paramètres) pour chaque paramètre nécessaire à la modélisation. Ces paramètres doivent avoir été, autant que possible, mesurés à l'échelle réelle, sur le terrain.

On doit ensuite faire, de façon si possible exacte, le changement d'échelle, pour passer de cette description très fine du milieu à celle qui peut être traitée par le modèle. Ainsi, MACKAY et RILEY (1994) engendrent 1010 mailles géométriques, qu'ils intègrent en 105 mailles de modélisation ; les paramètres globaux résultent d'un calcul, le changement d'échelle est ici rigoureux car effectué mathématiquement, et non empiriquement. Je précise que cette démarche est difficile, et demande encore de nombreux travaux. La plus simple consiste à résoudre le problème réel avec la discrétisation la plus fine, puis de calculer, par des expérimentations numériques, la valeur du paramètre global qui produit le même comportement que le modèle finement discrétisé, maille par maille. On peut cependant espérer arriver, avec de l'expérience, à des règles heuristiques de changement d'échelle.

Déglobalisation des processus

Dans les modèles « boîte noire », la tendance naturelle est de globaliser les processus ; ainsi, le modèle hydrologique GR3 réussit à représenter l'ensemble des processus de transfert d'eau dans un bassin à l'aide de trois paramètres seulement, qui n'ont bien sûr aucune signification physique précise, on l'a déjà vu. Au contraire, dans le type de modélisation dont je parle maintenant, la tendance est inverse : il faut tenter de remonter aux méca-

nismes élémentaires, individuels, dont on peut tenter de connaître et mesurer les cinétiques, les constantes. Si le milieu est finement décrit géométriquement, ces constantes peuvent être intrinsèques et dépourvues de variabilité spatiale, laquelle est prise en compte par la géométrisation ; dans d'autres cas, ces constantes peuvent être définies par des distributions aléatoires.

Ainsi par exemple, pour représenter les interactions entre un élément en solution, transporté par le fluide, et le solide, à une approche globale utilisant un coefficient de partage K_d , on va préférer une représentation par échange d'ion défini par une constante thermodynamique générale, pour chaque type de minéral présent. Autre exemple, pour représenter la biodégradation de la matière organique dans une rivière, on va préférer à un coefficient de décroissance global d'une équation de Streeter et Phelps, qui ne peut qu'être calé, une mesure *in situ* de l'activité bactérienne en fonction de la température, de la classe de matière organique présente, du taux de croissance et de mortalité des bactéries, etc (BILEN, 1993).

Cette approche est évidemment lourde et onéreuse, mais c'est la seule qui permette d'aboutir à des paramètres ayant une signification physique, et non à des coefficients calés. Il n'est pas sûr, à ce jour, que cette démarche « converge » à tous les coups : en complexifiant le modèle, en descendant dans la finesse des processus décrits, de la géométrie du milieu, le nombre de paramètres et de constantes introduits croît presque exponentiellement. Est-il possible d'estimer toutes ces constantes dans l'ensemble du milieu ? Peut-on élaborer des règles pour les estimer, à partir d'un nombre limité de mesures, en quantifiant l'incertitude associée, par une paramétrisation stochastique ? Bien que cette approche me semble la seule rigoureuse, rien ne permet aujourd'hui d'affirmer qu'elle converge vers une approche réaliste.

Analyse de scénarios

Une fois le modèle construit, ses paramètres estimés, il faut l'utiliser en prédiction. La tendance actuelle est de le faire en formalisant la recherche de scénarios. On sait, en effet, que la prédiction demande de prévoir aussi l'évolution du milieu, sous influence naturelle ou anthropique, l'évolution des climats, la prise en compte des accidents, etc. Développée initialement dans le cadre de l'analyse des risques des stockages de déchets nucléaires en profondeur, la construction logique de scénarios n'est pas triviale. La raison en est la multiplication extrêmement rapide du nombre de cas à simuler, si toutes les sources d'incertitude sont prises en compte simultanément. La démarche générale implique qu'à partir d'une liste aussi exhaustive que possible des « événements » susceptibles de se produire pendant la durée de la simulation, l'on mesure leur dépendance, leur signification, leur probabilité d'occurrence, puis, par tri et combinaison successifs, l'on aboutisse à un nombre suffisamment restreint de scénarios pour qu'ils puissent être simulés par le modèle. Voir par exemple ANDERSON (1989), STENHOUSE *et al* (1993).

Il faut noter ici que par construction, les modèles du type que je décris ne sont pas liés par les règles de la tragédie, et peuvent ne pas en respecter les trois contraintes décrites plus haut : ils sont par construction capables de changer de lieu, d'action, de temps. C'est là une de leurs forces.

3 – RETOUR SUR CALAGE ET VALIDATION

Je vais essayer maintenant de faire le lien entre les deux types de modèles définis ci-avant. Supposons que nous ayons construit un modèle sur un cas de phénomène non observable, mais que nous disposions néanmoins de quelques données d'observation du fonctionnement, peut-être locales et partielles. Comment utiliser ces données ? En validation ? En calage ?

La réponse n'est pas évidente. Je pense que la meilleure utilisation de ces données serait en validation, pour tester si le modèle est effectivement capable, sans calage des paramètres, de se rapprocher du réel. Mais cette comparaison n'est elle-même pas facile. En effet, le modèle étant par essence stochastique, il va donner un ensemble de réponses possibles pour le jeu d'entrées unique. Comment qualifier la sortie unique observée par rapport à la distribution des sorties calculées ? Cela conduit à repenser le calage d'un modèle stochastique, voir par exemple CACAS *et al* (1990 a,b). Il est, tout d'abord, nécessaire de disposer de plusieurs jeux de données (plusieurs expériences de traçage, par exemple). Pour chaque jeu de données, on compare la réalité avec la simulation d'un ensemble de réalisations possibles du milieu. Une seule réalité peut tomber au centre de la distribution des réalisations, ou être fortement biaisée au-dessus ou au-dessous de la moyenne : on ne peut rien conclure. Mais si l'on dispose de plusieurs réalités, alors on peut commencer à s'interroger : sont-elles toutes systématiquement biaisées vers le bas, vers le haut ? Si oui, le modèle est invalidé ; si, au contraire, les quelques réalités dont on dispose se situent parfois au-dessus, parfois au-dessous de la moyenne des simulations qui leur correspondent, et si, dans 95 % des cas, elles se situent à l'intérieur de la fourchette de deux fois l'écart type des réalisations, alors le modèle peut être considéré comme validé. Une telle approche laisse inchangée la gamme d'incertitude donnée par le modèle stochastique, et n'utilise pas les données pour la réduire. Mais il donne beaucoup plus de poids à la validation obtenue, et permet l'extrapolation dans le lieu, le temps, l'action, ce qu'un calage ne permettrait pas.

On peut cependant envisager de caler le modèle, si la comparaison précédente n'est pas favorable. Mais ce calage ne doit pas être vu comme un choix de paramètres déterministes, comme on le fait sur un modèle boîte noire. Il faut le voir comme un conditionnement supplémentaire des propriétés du milieu, pour réduire la gamme de variation des paramètres. En effet, dans la génération des propriétés aléatoires des milieux que j'ai résumée ci-avant, j'ai indiqué qu'il était possible de conditionner les réalisations par les observations locales du milieu, par exemple aux forages. Mais des mesures supplémentaires du comportement du-dit milieu (charges hydrauliques, concentrations, débits...) peuvent être perçues comme des éléments conditionnants supplémentaires des réalisations. On trouvera quelques premiers exemples de tels conditionnements dans DEUTSCH (1991, 1992), qui utilise la méthode du « recuit simulé » pour engendrer les milieux, ou dans RAMARAO *et al* (1994), LAVENUE *et al* (1994), qui utilisent la méthode des « points pilotes » pour conditionner des champs de transmissivités sur des mesures de charge hydraulique permanente et transitoire dans une nappe. Les données servent alors à réduire la gamme des variations possibles du milieu, et non à

rechercher un hypothétique modèle « optimal ». On conserve ainsi la notion d'incertitude sur la constitution interne des milieux, qui en fait est très réelle, et que les calages « boîte noire » ont une forte tendance à sous-estimer.

CONCLUSION

J'ai voulu présenter, dans la classification proposée des modèles, une nouvelle approche de modélisation fondée sur une connaissance préalable des milieux, et surtout de l'incertitude avec laquelle ces milieux sont décrits. Cette approche nécessite évidemment une recherche fondamentale en amont, sur la genèse et la constitution des milieux naturels, recherche que l'industrie pétrolière commence à mettre en place. En refusant que ces modèles soient calés en utilisant les données d'observation sur le comportement, on redonne tout son sens à la démarche de validation du modèle.

Il reste à parler de la troisième catégorie de modèles, esquissée en introduction : les modèles « inutiles ». J'entends par là les essais, développements ou outils nouveaux que l'imagination féconde des chercheurs se met parfois à inventer. J'en prendrai comme exemple les modèles de gaz sur réseau (ROTHMAN *et al*, 1990 ; KARAPIPERIS, 1992 ; POT *et al*, 1994). On sait que cet outil, développé initialement pour résoudre les équations de Navier-Stokes, est actuellement testé en milieu poreux. Initialement, il n'était pas clair si ce modèle pouvait avoir une quelconque utilité pour comprendre le fonctionnement des milieux poreux. Il n'est aujourd'hui pas encore clair quelle est l'échelle (quelques pores, ou milieu continu équivalent), quels sont les problèmes (monophasiques, polyphasiques, changements de phase, mouillage, couplage géochimie-transport...) que ce type de modèle sera un jour en mesure de résoudre. Il est cependant certain que c'est un outil très puissant et dont on découvre peu à peu les potentialités. Cet exemple a pour but de dire ce que chacun sait : que la recherche scientifique ne progresse pas de façon linéaire. Ce n'est pas en décidant de financer un programme de recherche finalisé pour développer LE modèle de transport des polluants dans les milieux naturels, que la meilleure méthode de simulation sera nécessairement mise au point. Il faut accepter de financer en parallèle le développement de modèles a priori « inutiles », c'est peut-être d'eux que viendra la lumière...

REMERCIEMENTS

Je tiens à remercier les Editeurs de la Revue des Sciences de l'Eau de m'avoir proposé de publier cette « tribune libre » dans la Revue, et également MM. M. DESBORDES (Université de Montpellier II) et J.P. VILLENEUVE (INRS-Eau) de leurs critiques d'une version antérieure.

RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES

ABBOTT M.B., BATHURST J.C., CUNGE J.A., O'CONNELL P.E., RASMUSSEN J. (1986) An introduction to the European Hydrological System – Système Hydrologique Européen « SHE », 1: History and Philosophy of a physically-based, distributed modelling system. 2: Structure of a physically-based distributed modelling system. *J. of Hydrology*, 87, p. 45-59 and 61-77.

ANDERSSON J. (ed) (1989) The joint SKI/SKB scenario development project. SKI Technical report 89 : 14, Stockholm.

BEAR J. (1972) Dynamics of fluids in porous media. Amer. Elsevier, New-York.

BEVEN K., KIRKBY M.J. (1979) A physically-based, variable contributing area model of basin hydrology. *Hydrol. Sci. Bull.* 23, 4, 419-438.

BEVEN K. (1986) Hillslope runoff processes and flood frequency characteristics. *In* : Hillslope processes, edited by A.D. ABRAHAM, 187-202, Alan and Unwin, Winchester, Mass.

BILEN G. (1993) The PHISON river system : a conceptual model of C, N, and P transformation in the aquatic continuum from land to sea. *In* : Interactions of C, N, P and S biogeochemical cycles and Global Change. Wollast, R., Mackenzie, F.T., Chou, L, Eds, NATO ASI S.14, 521 p, Springer Verlag, Berlin.

CACAS M.C., LEDOUX E., MARSILY G. de, TILLIE B., BARBREAU A., DURAND E., FEUGA B., PEAUDE CERF P. (1990a) Modelling fracture flow with a discrete fracture network : calibration and validation. 1. The flow model. *Water Resour. Res.* 26 (1), 479-489.

CACAS M.C., LEDOUX E., MARSILY G. de, BARBREAU A., CALMELS P., GAILLARD B., MARGRITA R. (1990b) Modelling fracture flow with a discrete fracture network : calibration and validation. 1. The transport model. *Water Resour. Res.* 26 (1), 491-500.

DEUTSCH C. (1991) The application of simulated annealing to stochastic reservoir modelling. SCRF Report 3, Stanford University, Stanford, May 1991.

DEUTSCH, M. (1992) Annealing techniques applied to the integration of geological and engineering data. SCRF Report 5, Stanford University, Stanford, May 1992.

FAYERS, F.J., HEWWETT, T.A. (1992) A review of current trends in petroleum reservoir description and assessing the impacts on oil recovery. *In* : Computational Methods in Water Resources IX, T.F. RUSSEL *et al*, Ed, Vol. 2: Mathematical Modelling in Water Resources, p. 3-33, Elsevier Applied Sciences, London New-York.

GELHAR, L.W., AXNESS, C.L.(1983) Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resour. Res.* 19 (1), 161-180.

GUERILLOT D., RUDKIEWICZ J.L., RAVENNE C., RENARD, G., GALLI, A. (1990) An integrated model for computer-aided reservoir description : from outcrop study to fluid flow simulations. *Revue de l'IFP*, 45 (1), 71-77.

HALDORSEN, H.H., DAMSLETH, E. (1990) Stochastic modelling. *J. Pet Tech.*, 42, 404-412, et discussion avec SALERI, N.G., 929-930.

HIRD K.B., KELKAR M.G. (1992) Conditional simulation method for reservoir description using spatial and well- performance constraints. *Soc. Petrol. Eng. J. SPE* 24750, 887- 902

JAUZEIN M. (1988) Méthodologie d'étude du transport transitoire de solutés dans les milieux poreux : outils théoriques et numériques, méthodes expérimentales, application à l'étude du transport transitoire du césium sous forme cationique (Cs⁺) dans un aquifère alluvial. Thèse, Insitut National Polytechnique de Lorraine, Nancy.

KARAPIPERIS T. (1992) Comparaison of cellular automata and differential equation approaches to reaction-transport processes. Workshop on Cellular Automata Models for Astrophysical Phenomena, Hansur-Lesse, Belgium, 19-21/10/1992. To appear.

KAWARK-LEITE A. (1990) Réflexions sur l'utilité des modèles mathématiques dans la gestion de la pollution diffuse d'origine

- agricole. Thèse Ecole des Ponts & Chaussées, 342 p.
- KLEMES V. (1986) Dilettantism in hydrology : transition or destiny ? *Water Resour. Res.* 22, 9, 177s-188s.
- KONIKOW L.F., BREDEHOEFT J.D. (1992) Ground-water models cannot be validated. *Adv. in Water Resour.* 15, 75-83.
- LAVENUE A.M., RAMARAO B.S., MARSILY G. de, MARIETTA M.A. (1994) Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields : Part 2 – Application. Accepté dans *Water Resour. Res.*
- MACKAY R., RILEY M. (1994) A method for geological media generation, Part 1. To appear, *J. of Contaminant Hydrology*.
- MARSILY G. de (1993) Quelques méthodes d'approche de la variabilité spatiale des réservoirs souterrains. *Hydrogéologie, BRGM Orléans*, 4, 10 p.
- MARSILY G. de, COMBES P., GOBLET P. (1992) Comments on « Ground-water models cannot be validated », by Konikow and Bredehoeft. Answer, by the authors. *Adv. in Water Resources*, 15, 367-369. Reply, 371-372.
- MATHERON G, MARSILY G de (1980) Is transport in porous media always diffusive ? A counter-example. *Water Resour. Res.* 16 (5), 901-917.
- MICHEL C. (1983) Que peut-on faire en hydrologie avec un modèle conceptuel à un seul paramètre ? *La Houille Blanche*, 1, 39-43.
- MICHEL C. (1991) Communication orale.
- POPPER K. (1973) La logique de la découverte scientifique, préface de Jacques Monod, Payot.
- POPPER K. (1985) Conjectures et réfutations : la croissance du savoir scientifique. Payot.
- POT V., APPERT C., MELAYAH A., ROTHMAN D.H., ZALESKY S., (1994) Modelling water flow in unsaturated porous media by interacting lattice gas-cellular automata : I. Evaporation. Soumis à *Water Resour. Res.*
- QUINTARD M., WHITAKER S. (1993) One- and two-equation models for transient diffusion processes in two-phase systems. *Adv. in Heat Transfer*, 23, 369-464. Academic Press, Orlando.
- RAMARAO B.S., LAVENUE A.M., MARSILY G. de, MARIETTA M.A. (1994) Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields : Part 1 – Theory and Computational experiments. Accepté dans *Water Resour. Res.*
- ROTHMAN D.H. (1990) macroscopic laws for immiscible two-phase flow in porous media : results from numerical experiments. *J. of Geophys. Res.*, 95, 8663.
- STENHOUSE M., CHAPMAN N., SUMERLING T. (1993) Scenario development. FEP audit list preparation : Methodology and presentation. SKI Technical Report 93 : 27, Stockholm.