



HAL
open science

Modélisation du transfert sol-plante des Eléments Traces Métalliques

Christophe Nguyen

► **To cite this version:**

Christophe Nguyen. Modélisation du transfert sol-plante des Eléments Traces Métalliques. Master. Université de bordeaux 1, France. 2021. hal-04679223

HAL Id: hal-04679223

<https://hal.inrae.fr/hal-04679223v1>

Submitted on 27 Aug 2024

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



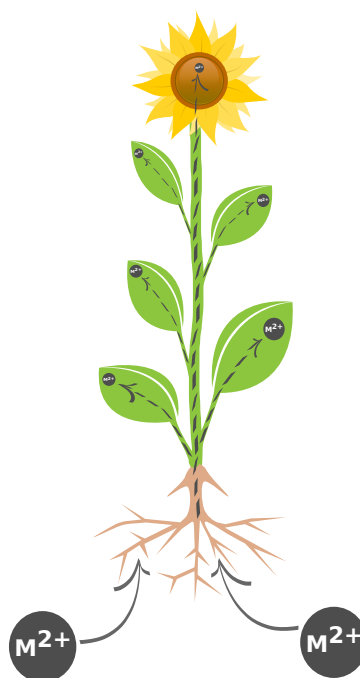
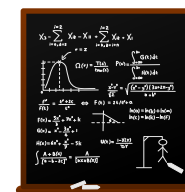
Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0
International License

Modélisation du transfert sol-plante des Éléments Traces Métalliques

Pourquoi



Comment ?



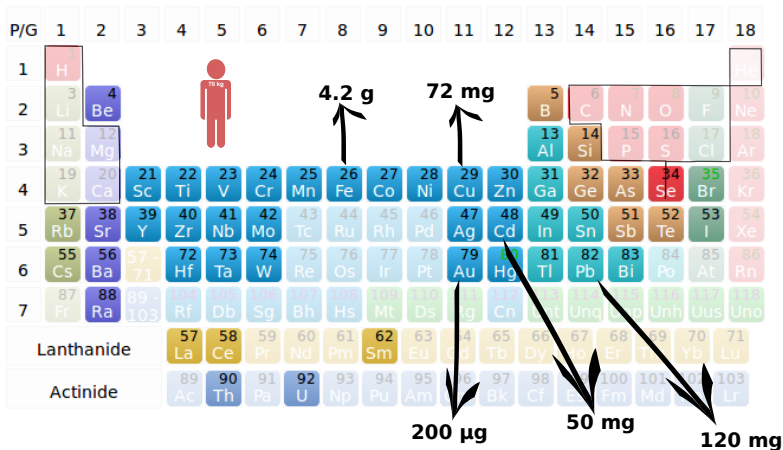
Christophe NGUYEN
DR INRA
christophe.nguyen@inra.fr





université
BORDEAUX

Eléments Traces métalliques

mg / kg ppm ppb μM nM



Oligoéléments

<p>Chrome</p> <p>Selenium</p> <p>Iode</p> <p>Fluor</p> <p>Cobalt</p> <p><i>Nickel</i></p> <p><i>Etain (Stannum)</i></p> <p><i>Silicium</i></p> <p><i>Vanadium</i></p> <p><i>Arsenic</i></p>		<p>Fer</p> <p>Zinc</p> <p>Cuivre</p> <p>Manganèse</p> <p>Molybdène</p>		<p>Bore</p> <p>Nickel</p> <p><i>Cobalt</i></p> <p><i>Silicium</i></p> <p><i>Selenium</i></p> <p><i>Vanadium</i></p>
---	---	--	--	---

Mason, 2012. Vitamins, Trace Minerals, and Other Micronutrients.

In Goldman's Cecil Medicine (Twenty Fourth Edition)

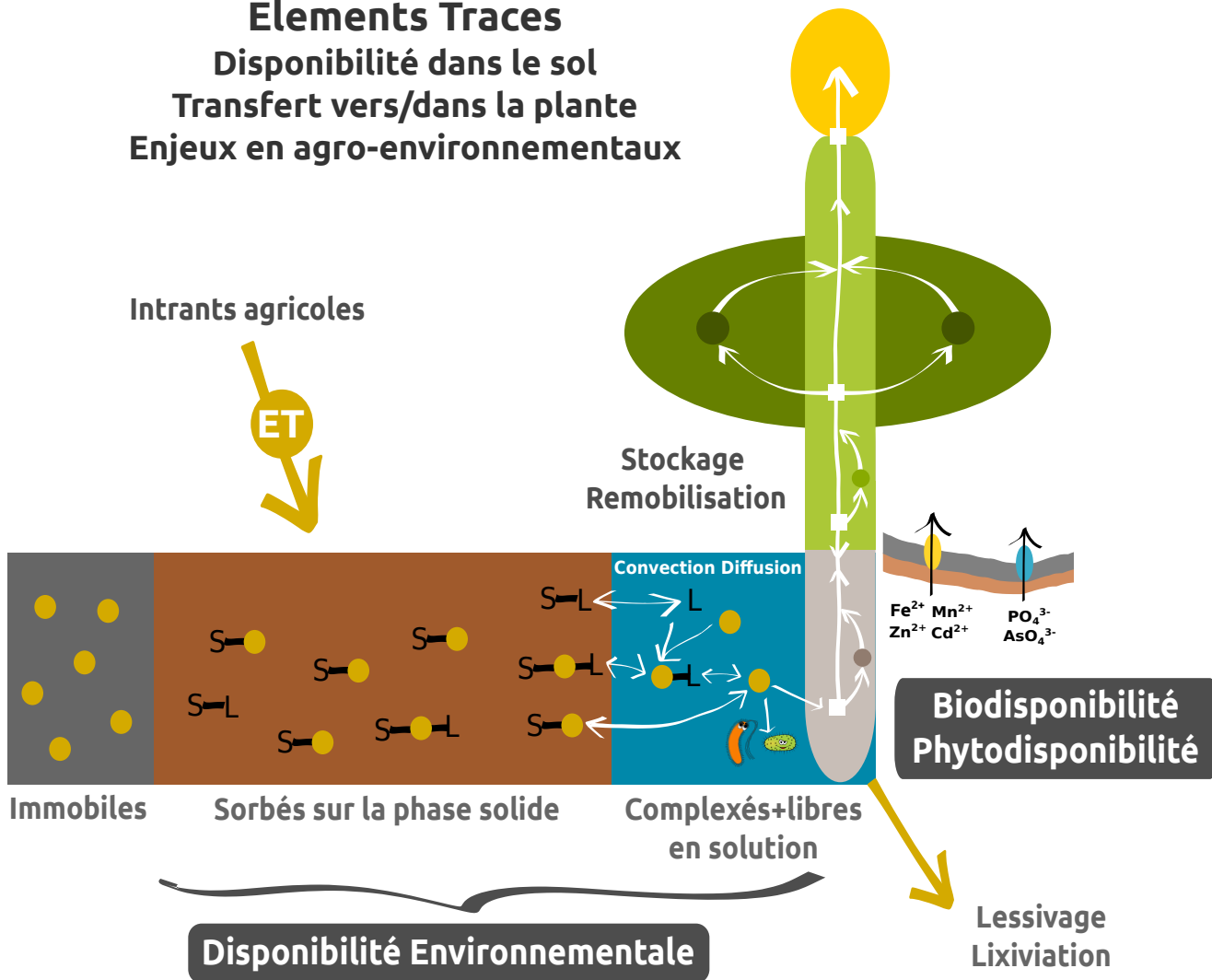
Marschner, H., Marschner, P., 2012. Marschner's Mineral Nutrition of Higher Plants.


Elements Traces


Disponibilité dans le sol

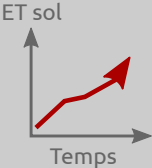
Transfert vers/dans la plante


Enjeux en agro-environnementaux



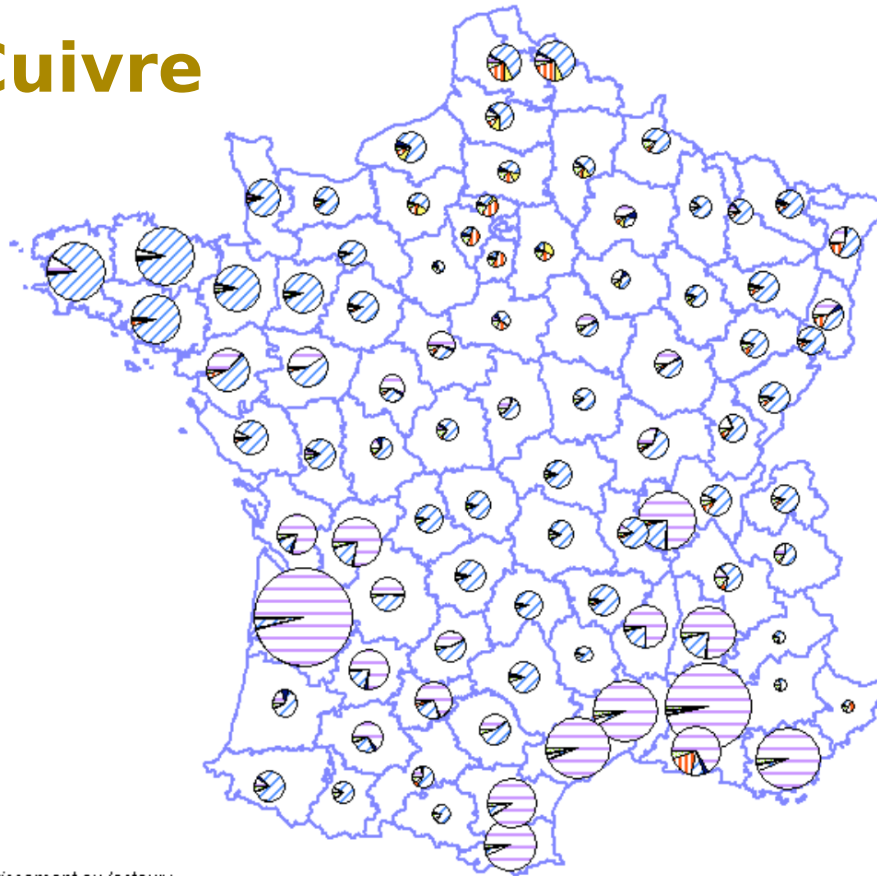
 **Conformité réglementation contaminants**

 **Valeur nutritionnelle**

 **Accumulation dans les sols**

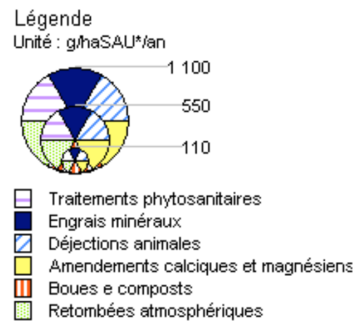
 **Toxicité**

Cuivre



Avertissement au lecteur :
 Les résultats illustrés dans cette carte ne doivent être interprétés qu'en connaissance de l'ensemble des hypothèses associées à leur calcul.

Rapport Sogreah,
 2007



Toxicité cuprique sur blé dur (Michaud et al., 2007)

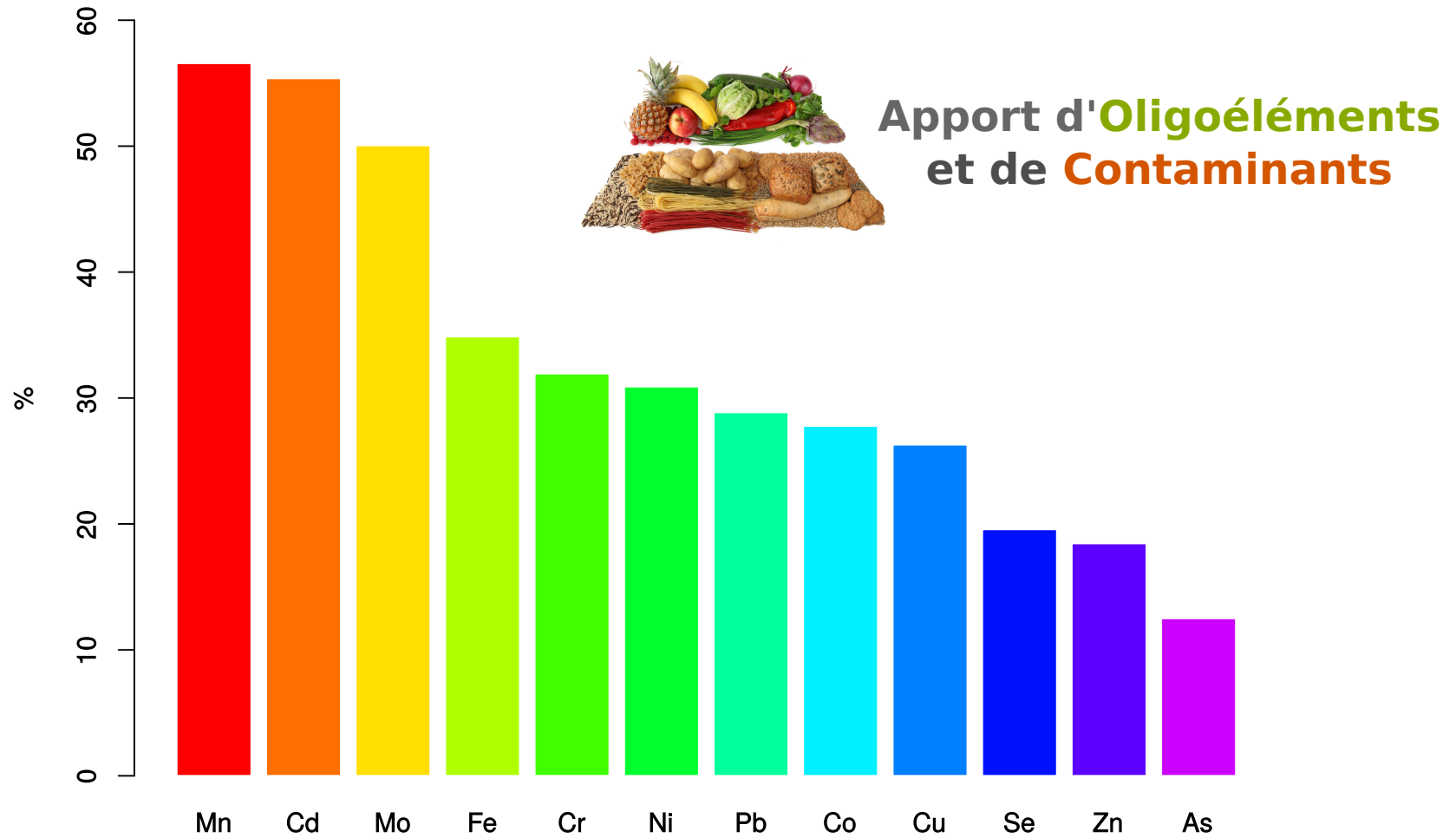


Tank de stockage de fongicide Cu



Toxicité Cu sur blé dur au niveau des anciens rangs de vigne

**Fruits, légumes et céréales :
Contribution à l'exposition alimentaire en ETM des adultes français**



Source : EAT2, Anses, 2011

RÈGLEMENT (UE) 2021/1323 DE LA COMMISSION

du 10 août 2021

modifiant le règlement (CE) n° 1881/2006 en ce qui concerne les teneurs maximales en cadmium dans certaines denrées alimentaires

(Texte présentant de l'intérêt pour l'EEE)

Denrées alimentaires ⁽¹⁾		Teneur maximale (mg/kg de poids à l'état frais)
3.2	Cadmium	
3.2.1	Fruits ⁽²⁾ et fruits à coque ⁽²⁾	
3.2.1.1	Agrumes, fruits à pépins, fruits à noyau, olives de table, kiwis, bananes, mangues, papayes et ananas	0,020
3.2.1.2	Baies et petits fruits, à l'exclusion des framboises	0,030
3.2.1.3	Framboises	0,040
3.2.1.4	Fruits, à l'exclusion de ceux énumérés aux points 3.2.1.1, 3.2.1.2 et 3.2.1.3	0,050
3.2.1.5	Fruits à coque ^(*)	
3.2.1.5.1	Fruits à coque, à l'exclusion de ceux énumérés au point 3.2.1.5.2	0,20
3.2.1.5.2	Pignons	0,30
3.2.2	Légumes-racines et légumes-tubercules ⁽²⁾	
3.2.2.1	Légumes-racines et légumes-tubercules, à l'exclusion de ceux énumérés aux points 3.2.2.2, 3.2.2.3, 3.2.2.4, 3.2.2.5 et 3.2.2.6. Dans le cas des pommes de terre, la teneur maximale s'applique aux produits pelés.	0,10
3.2.2.2	Radis	0,020
3.2.2.3	Racines et tubercules tropicaux, persil à grosse racine, navets	0,050
3.2.2.4	Betteraves	0,060
3.2.2.5	Céleris-raves	0,15
3.2.2.6	Raiports, panais, salsifis	0,20
3.2.3	Légumes-bulbes ⁽²⁾	
3.2.3.1	Légumes-bulbes, à l'exclusion des aulx	0,030
3.2.3.2	Aulx	0,050
3.2.4	Légumes-fruits ⁽²⁾	
3.2.4.1	Légumes-fruits, à l'exclusion des aubergines	0,020
3.2.4.2	Aubergines	0,030
3.2.5	Légumes du genre <i>Brassica</i> ⁽²⁾	
3.2.5.1	Légumes du genre <i>Brassica</i> , autres que les choux feuilles	0,040
3.2.5.2	Choux feuilles	0,10
3.2.6	Légumes-feuilles et fines herbes ⁽²⁾	
3.2.6.1	Légumes-feuilles, à l'exclusion de ceux énumérés au point 3.2.6.2	0,10
3.2.6.2	Épinards et feuilles similaires, plants de moutarde et herbes fraîches	0,20
3.2.7	Légumineuses potagères ⁽²⁾	0,020

3.2.8	Légumes-tiges ⁽²⁾	
3.2.8.1	Légumes-tiges, autres que ceux énumérés aux points 3.2.8.2 et 3.2.8.3	0,030
3.2.8.2	Poireaux	0,040
3.2.8.3	Céleris	0,10
3.2.9	Champignons ⁽²⁾	
3.2.9.1	Champignons de couche, autres que ceux énumérés au point 3.2.9.2	0,050
3.2.9.2	<i>Lentinula edodes</i> (shiitaké) et <i>Platanus ostratus</i> (pleurote)	0,15
3.2.9.3	Champignons sauvages	0,50
3.2.10	Légumineuses séchées et protéines provenant de légumineuses séchées	
3.2.10.1	Légumineuses séchées, à l'exclusion des protéines provenant de légumineuses séchées	0,040
3.2.10.2	Protéines provenant de légumineuses séchées	0,10
3.2.11	Graines oléagineuses ^(*)	
3.2.11.1	Graines oléagineuses, à l'exclusion de celles énumérées aux points 3.2.11.2, 3.2.11.3, 3.2.11.4, 3.2.11.5 et 3.2.11.6	0,10
3.2.11.2	Graines de colza	0,15
3.2.11.3	Arachides et fèves de soja	0,20
3.2.11.4	Graines de moutarde	0,30
3.2.11.5	Graines de lin et graines de tournesol	0,50
3.2.11.6	Graines de pavot	1,20
3.2.12	Céréales ^(**)	
3.2.12.1	Céréales, autres que celles énumérées aux points 3.2.12.2, 3.2.12.3, 3.2.12.4 et 3.2.12.5	0,10
3.2.12.2	Seigle et orge	0,050
3.2.12.3	Riz, quinoa, son de blé et gluten de blé	0,15
3.2.12.4	<i>Triticum durum</i> (blé dur)	0,18
3.2.12.5	Germe de blé	0,20
3.2.13	Produits spécifiques à base de cacao et de chocolat, énumérés ci-dessous ^(**)	
3.2.13.1	— chocolat au lait avec < 30 % de matière sèche totale de cacao	0,10
3.2.13.2	— chocolat avec < 50 % de matière sèche totale de cacao; chocolat au lait avec ≥ 30 % de matière sèche totale de cacao	0,30
3.2.13.3	— chocolat avec ≥ 50 % de matière sèche totale de cacao	0,80
3.2.13.4	— poudre de cacao vendue au consommateur final ou comme ingrédient dans la poudre de cacao sucrée vendue au consommateur final (boisson chocolatée)	0,60

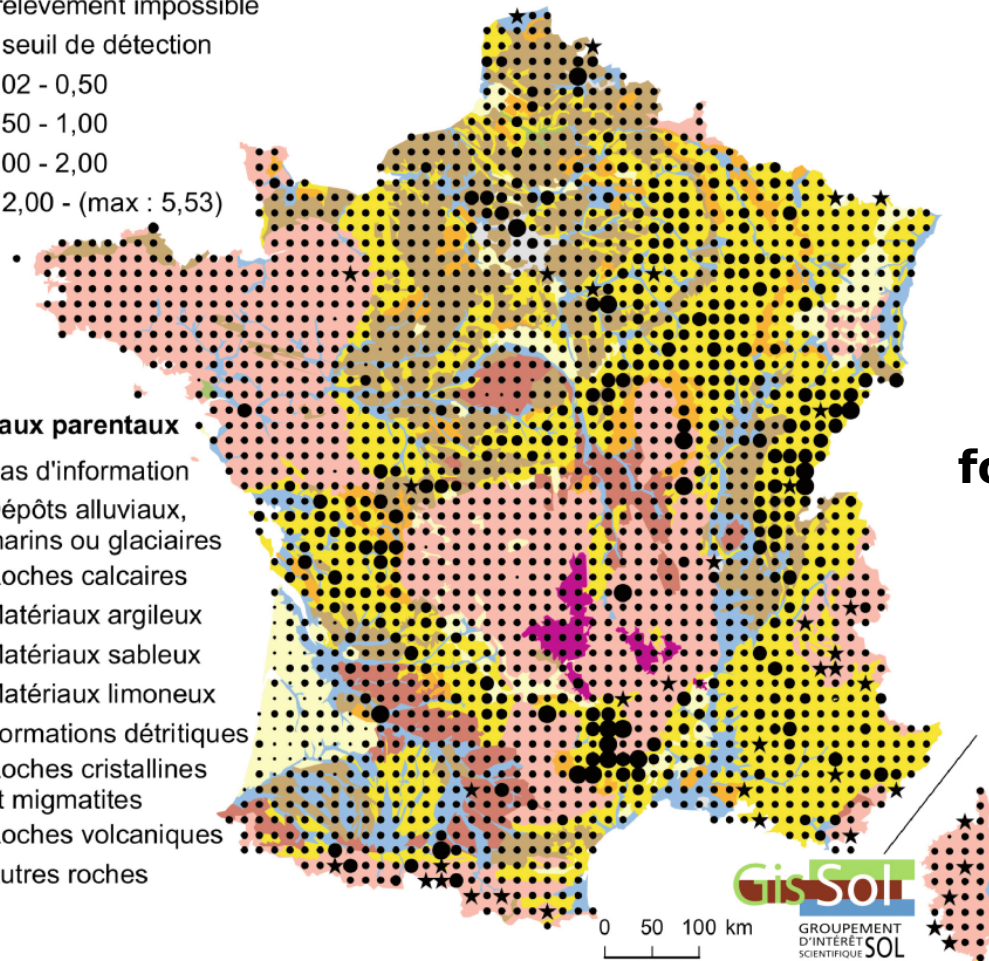
Cadmium

Teneur en cadmium total en mg.kg^{-1}

- ★ prélèvement impossible
- < seuil de détection
- 0,02 - 0,50
- 0,50 - 1,00
- 1,00 - 2,00
- > 2,00 - (max : 5,53)

Matériaux parentaux

- Pas d'information
- Dépôts alluviaux, marins ou glaciaires
- Roches calcaires
- Matériaux argileux
- Matériaux sableux
- Matériaux limoneux
- Formations détritiques
- Roches cristallines et migmatites
- Roches volcaniques
- Autres roches

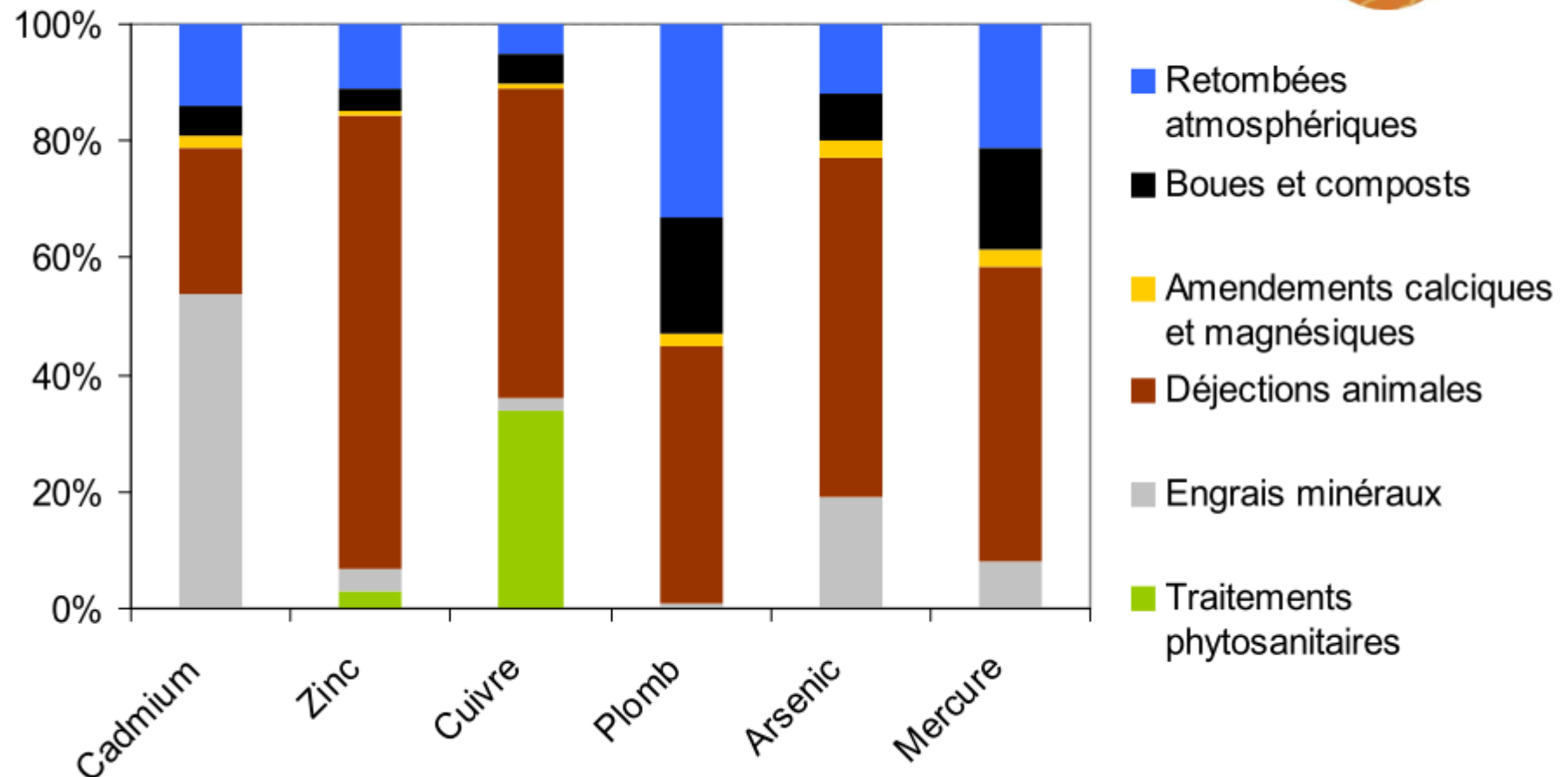


Importance du
fond géochimique

Source : Gis Sol, RMQS, 2011 ; Inra, BDGSF, 1998.

Ce qui arrive sur les parcelles agricoles

Les déjections animales sont une source importante d'ETM avec les engrais et les boues/composts



Accumulation du Cd dans les sols et impact sur la qualité des récoltes

Evolution du Cd du sol résultant des dépôts atmosphériques et des engrais P (Essai Rothamsted, UK)

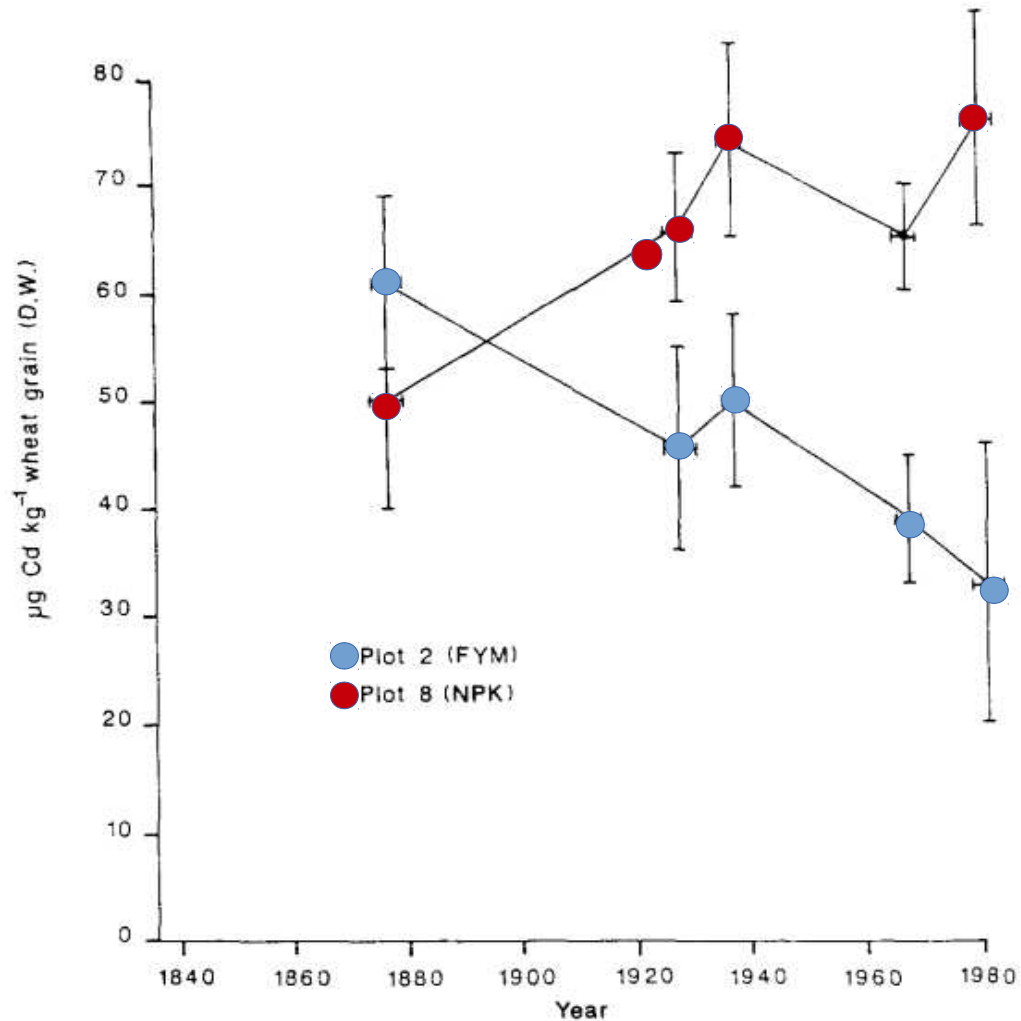
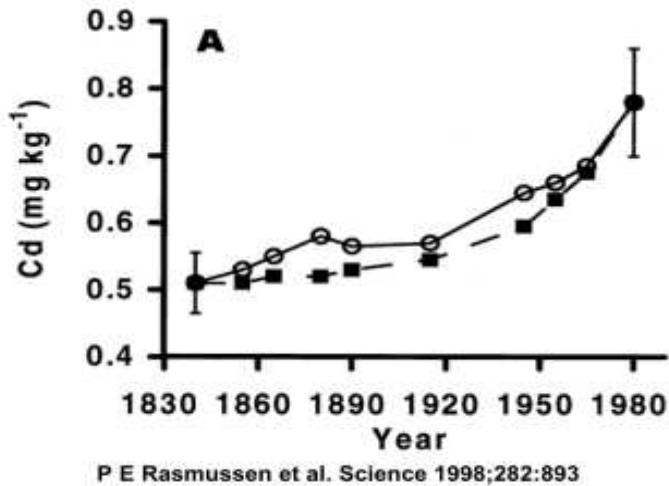
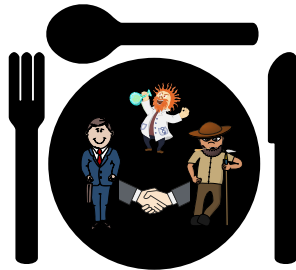


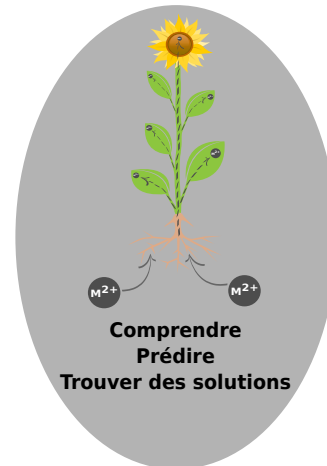
Fig. 2. Changes in wheat grain Cd at Broadbalk with time. Error bars are \pm Std. Dev.

Modélisation du transfert sol-plante des Eléments Traces Métalliques

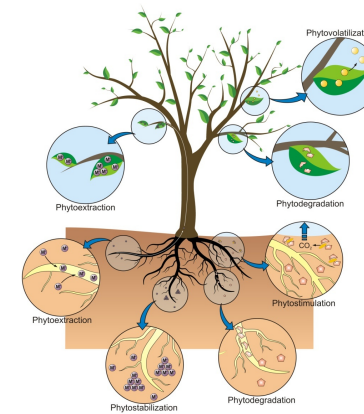
Qualité sanitaire des produits
végétaux alimentaires



Concilier les exigences des filières
la réglementation pour garantir
la sécurité sanitaire



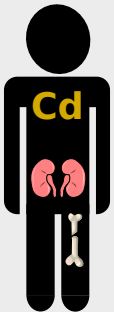
Phytomanagement
des sols pollués



Utilisation du végétal pour
reconquérir les sols pollués

Cadmium

1/2 vie : 10 - 30 ans



Cancérogène
Dégénérescence rénale
Décalcification

Sources d'exposition



Cd urinaire

18-74 ans
2419 individus

48%
des individus
> seuil
toxicologique

2006-2007

x 1.76

2014-2016

France
versus
Etats-unis, Italie



Recommandation
Exposition
alimentaire au Cd



µg Cd /kg poids /semaine

1985



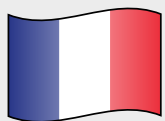
7

2009



2.5

EAT2, Anses, 2011



µg Cd /kg poids /semaine

1.12

1.68

mg Cd /an

28.6

18.4

Dépassement

0.6 %

14.9 %



Pâtes Semoule



8.1

1.3

kg / an / personne

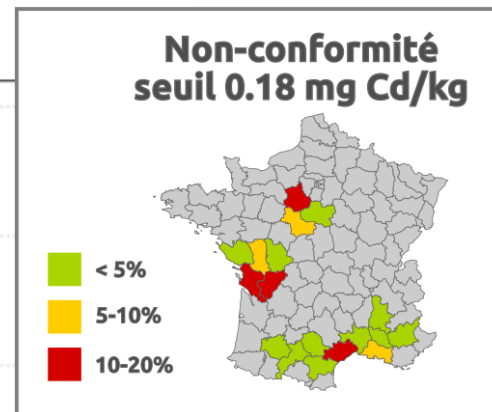
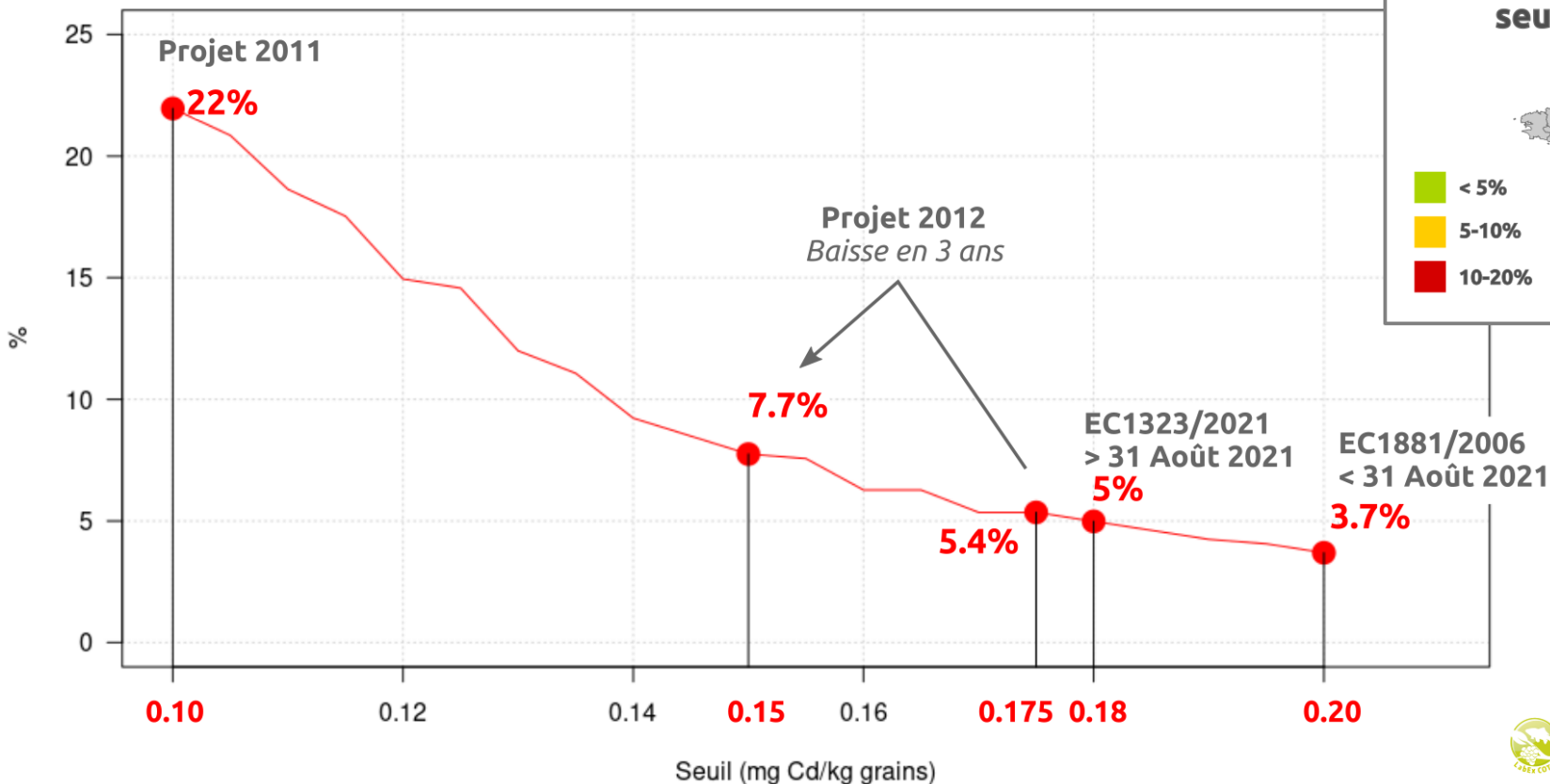


9.2%

de la dose
de Cd annuelle
admissible



Non-conformité des parcelles Françaises de blé dur aux seuils réglementaires pour le Cd



Définition d'un objectif



Objectif



Prédire la concentration du
contaminant métallique
dans l'organe récolté en
fonction des conditions de
l'environnement de la
culture

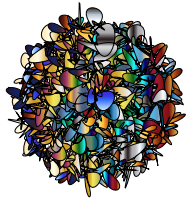
Sortie : Concentration
du contaminant dans
l'organe récolté



Modèle

*Représentation simplifiée de la réalité
qui ne conserve que les éléments
nécessaires et suffisants pour répondre à l'objectif*

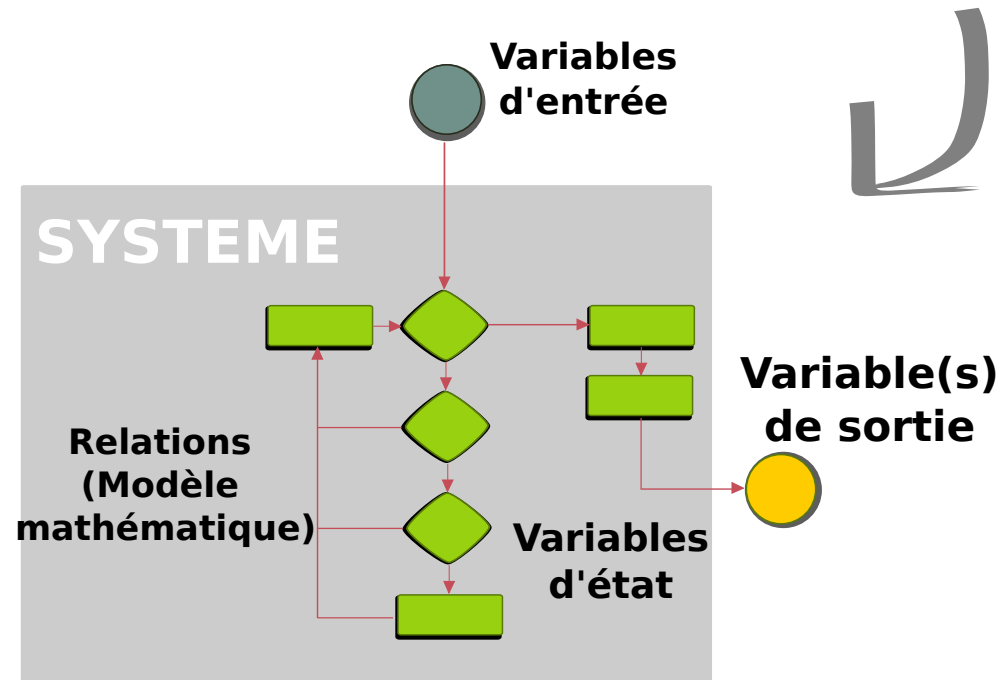
**Réalité
complexe**



Connaissances
+
Hypothèses

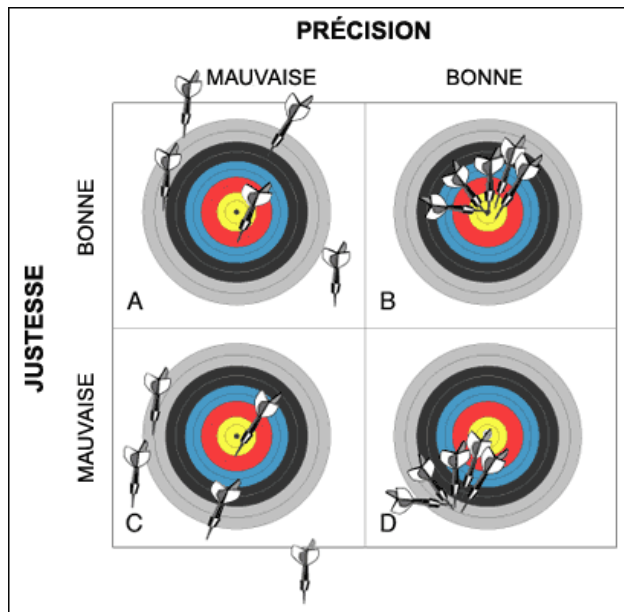


Simplification



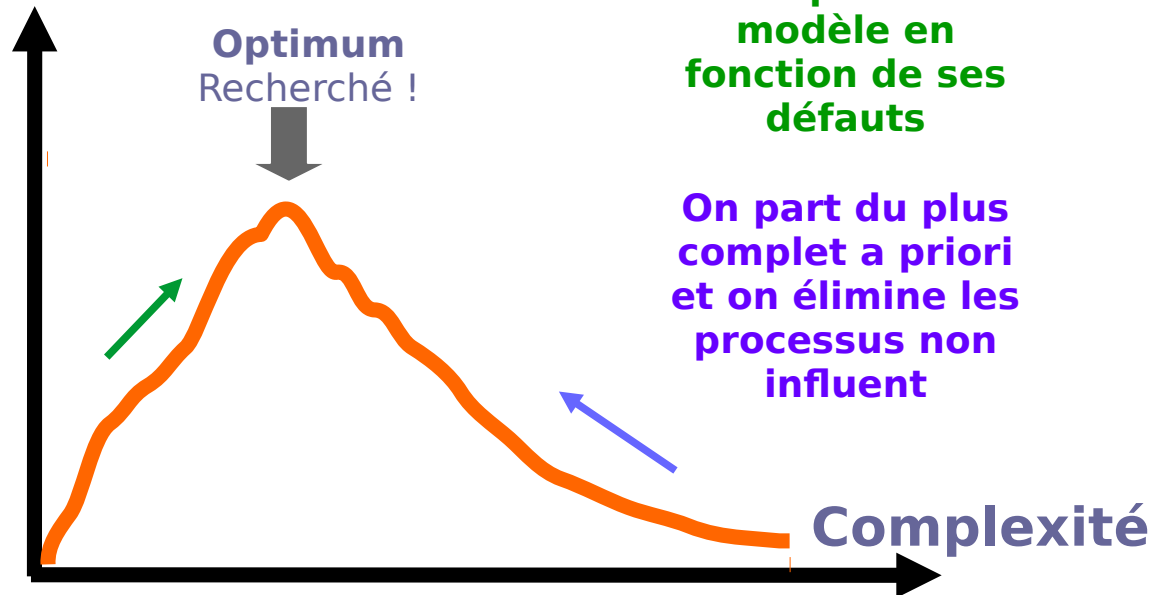
Modélisation : Complexité versus Utilité

Utilité du modèle :
Modèle juste, précis



Modèle
robuste, non
spécifique à
un contexte

Utilité



On part du plus
simple et on
complète le
modèle en
fonction de ses
défauts

On part du plus
complet a priori
et on élimine les
processus non
influent

Modèle simpliste

Les processus majeurs ne
sont pas représentés

Modèle insoluble

Le paramétrage est trop
complexe, incertain, le
modèle comporte des
incohérences, etc..



Cadur

ISPA-INRA Arvalis

Le modèle le plus simple : les observations !

Au niveau national
30 % de la
production
seraient non
conforme au seuil
de 0.1 mg/kg

Mais dans certaines
régions c'est
beaucoup plus
70 % !!

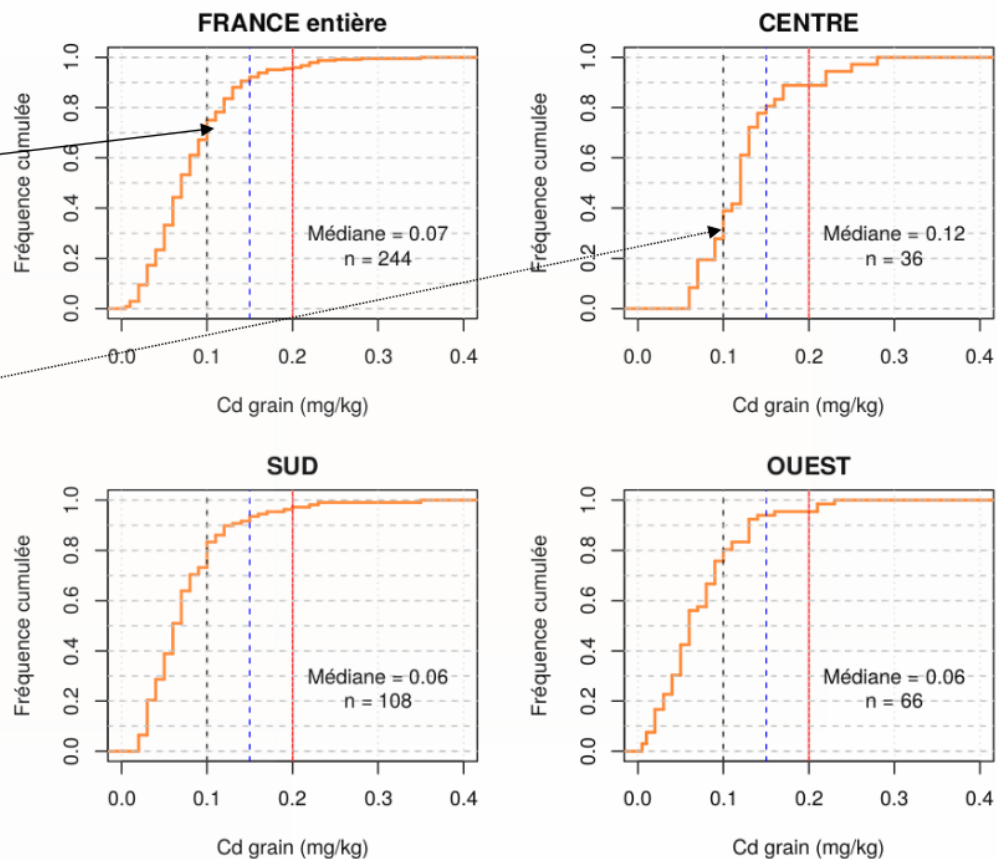


FIGURE 7 – Distribution des teneurs en Cd dans le grain de blé dur en fonction de la classification des régions selon Arvalis (Voir le tableau 2). Données issues des enquêtes parcelaires portant sur différentes variétés. La ligne rouge indique le seuil réglementaire de 0.2 mg Cd/kg et les lignes bleue et noire en pointillés indique le projet de révision à la baisse de ce seuil à 0.15 et 0.1 mg Cd/kg, respectivement.

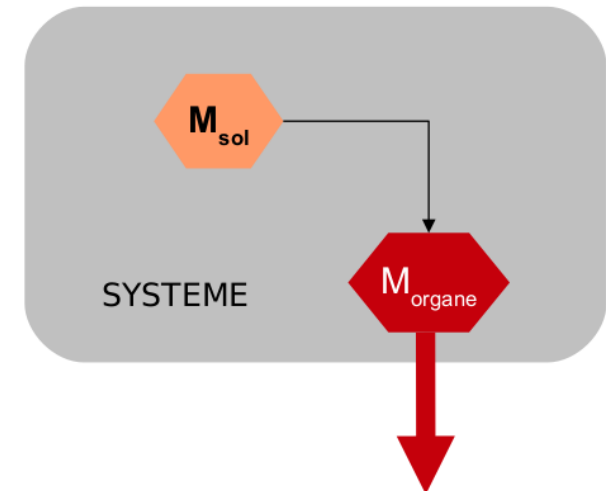
Modèle statistique de bioaccumulation



La concentration du contaminant dans l'organe est proportionnelle à la concentration dans le sol

$$M_{\text{plante}} = (\text{BCF}, \text{PUF}) * M_{\text{sol}}$$

Approche dérivée du facteur de bioaccumulation en milieu aquatique



M_{sol} peut être :

le métal total

le métal en solution

le métal 'biodisponible' (extraction, DGT, cinétique d'échange isotopique)

$$(\text{BCF}, \text{PUF}) = M_{\text{plante}} / M_{\text{sol}}$$



BCF : bioconcentration factor

PUF : plant uptake factor

Modèle statistique de bioaccumulation

W. Chen et al. / Agriculture, Ecosystems and Environment 129 (2009) 212–220

Base de données

Crop	Cadmium		
	Mean	Range	<i>n</i>
Potato ^a	1.05	0.029–6.28	305
Peanut ^a	2.41	0.13–32.00	320
Onion ^a	0.27	0.23–2.22	255
Tomato ^b	1.76	0.17–32.00	182
Cabbage ^b	0.77	0.028–5.38	206
Lettuce ^b	1.55	0.061–12.54	145
Sweet Corn ^c	0.088	0.004–1.18	244
Soybean ^c	0.39	0.046–7.50	339
Wheat ^c	0.21	0.014–1.38	315
Corn ^c	0.15	0.003–4.20	256
Rice ^c	0.13	0.003–3.40	142
Root crops	1.32	0.029–32.00	880
Vegetable crops	1.32	0.028–32.00	533
Grain crops	0.21	0.003–7.50	1296

^a For the purpose of this study, they are considered as root crops.

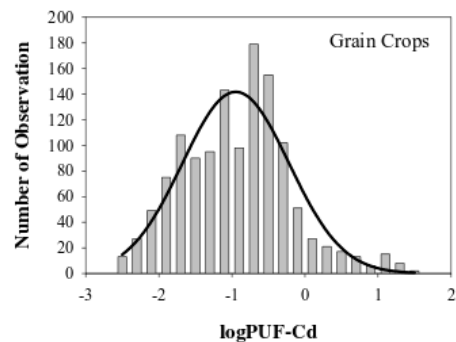
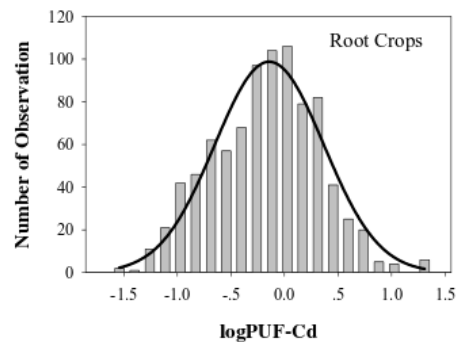
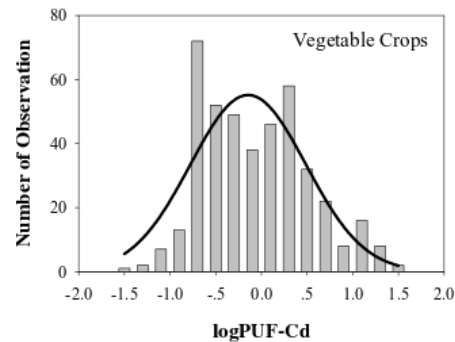
^b For the purpose of this study, they are considered as vegetable crops.

^c For the purpose of this study, they are considered as grain crops.

Ajustement d'une distribution Log-Normale

Crops	Cadmium		
	x_0^a	b^b	R^2
Vegetable	-0.145 (-0.062)	0.633 (0.583)	0.71
Root	-0.142 (-0.172)	0.509 (0.496)	0.93
Grain	-0.947 (-0.932)	0.730 (0.734)	0.85

^a Numbers in parentheses refer to the logarithmic mean of the data set.



Les grains accumulent moins que les autres organes

Modèle statistique de bioaccumulation

$$M_{\text{plante}} = \text{PUF}_{\text{total}} * M_{\text{sol}} * (1 - \% \text{eau})$$

Var. sortie → M_{plante} ← Paramètre $\text{PUF}_{\text{total}}$ ← Var. entrée M_{sol}

Table 4.3. Plant uptake factor ($\text{PUF}_{\text{total}}$) of Cd and Pb for root, vegetable, and grain crops grown in California (based on data provided by Dr. Rufus L. Chaney)

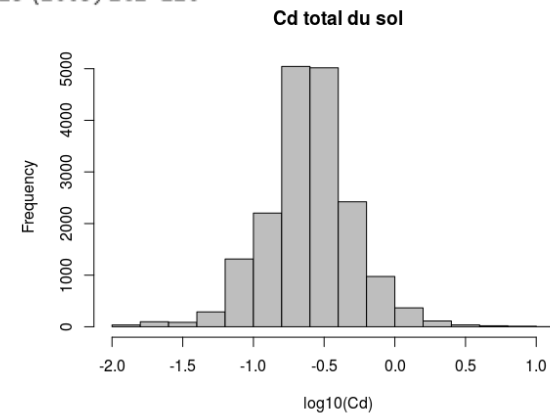


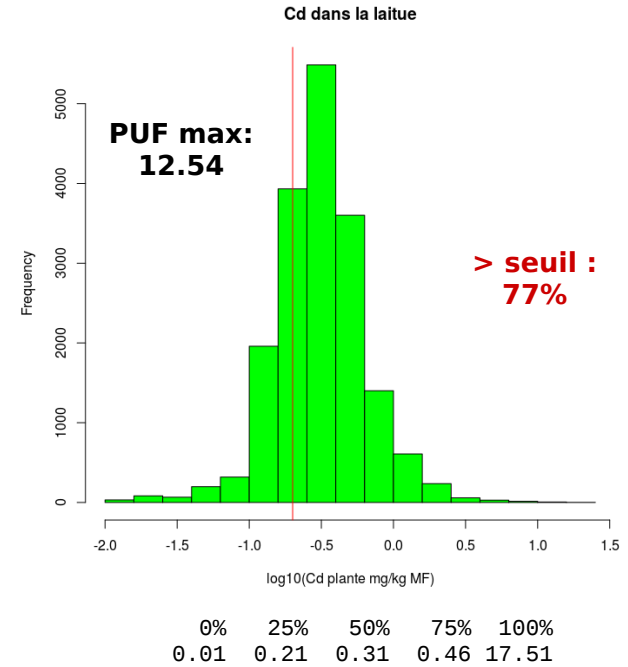
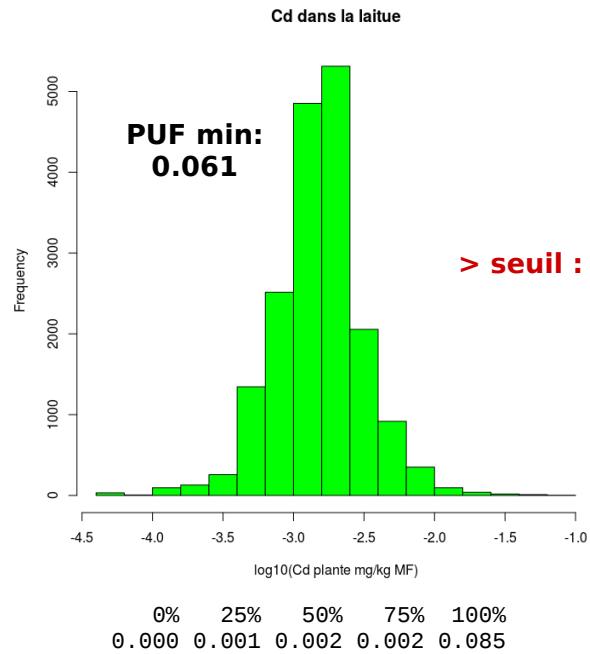
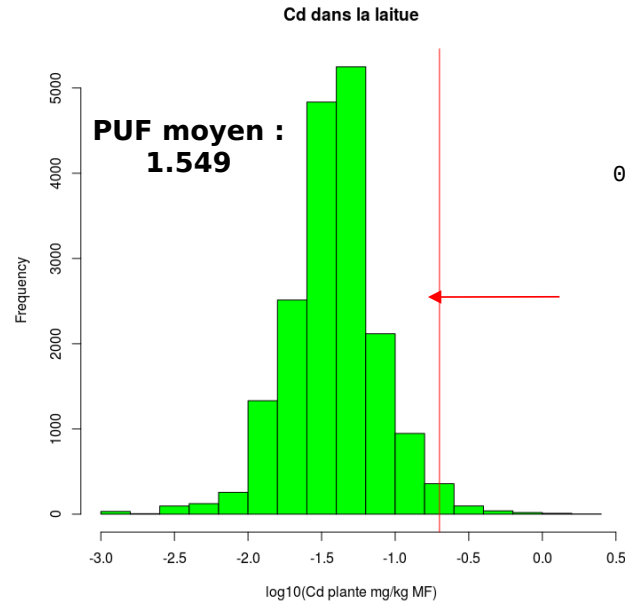
Crop	Cadmium				Lead			
	Mean	Min	Max	n	Mean	Min	Max	n
Potato ¹	1.051	0.029	6.279	305	0.0072	0.0004	0.367	305
Peanut ¹	2.408	0.1304	32.00	320	0.0021	0.0001	0.033	306
Onion ¹	0.265	0.23	2.222	255	0.007	0.047	0.577	255
Tomato ²	1.763	0.167	32.00	182	0.003	0.0001	0.064	179
Cabbage ²	0.771	0.028	5.375	206	0.0076	0.0008	0.122	206
Lettuce ²	1.549	0.061	12.54	145	0.036	0.0002	0.485	145
Sweet Corn ²	0.088	0.0042	1.179	244	0.0025	0.0001	0.0432	252
Soybean ³	0.390	0.046	7.500	339	0.004	0.0002	0.0269	338
Wheat ³	0.205	0.014	1.375	315	0.004	0.0001	0.04	298
Corn ³	0.153	0.0026	4.200	256	0.0025	0.001	0.4	281
Rice ³	0.128	0.0027	3.4	142	0.0008	0.0001	0.007	148

W. Chen et al./Agriculture, Ecosystems and Environment 129 (2009) 212–220

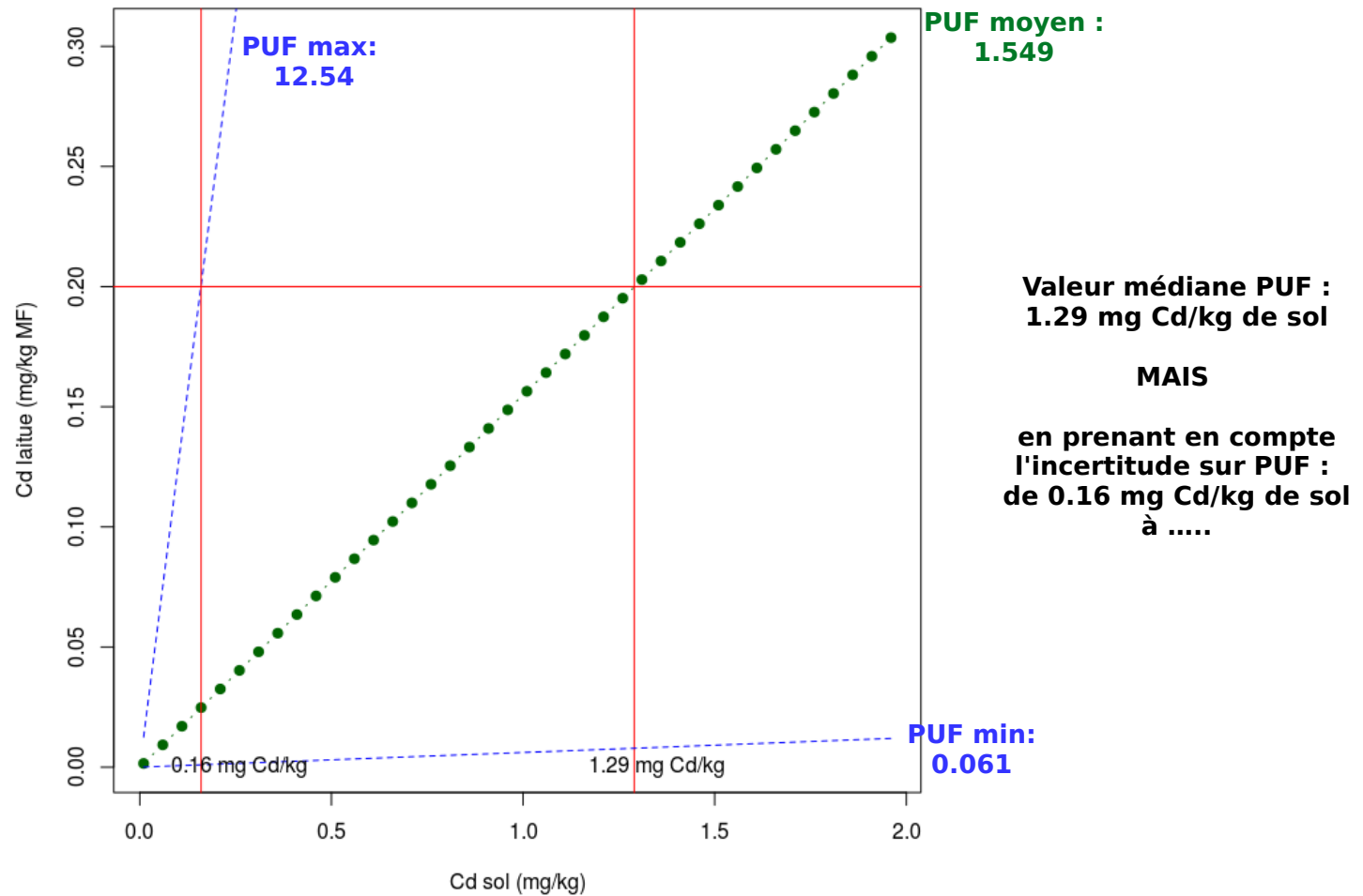
- Sols agricoles français : base de données : RMQS, BDETM

0% 25% 50% 75% 100%
0.01 0.17 0.25 0.37 13.96





Quelle teneur max en Cd du sol pour ne pas dépasser le seuil pour la laitue?



Modèle statistique de bioaccumulation

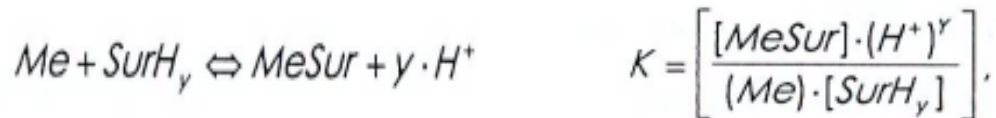
La concentration dans l'organe consommé est essentiellement déterminée par la concentration du métal libre dans la solution sol et par le pouvoir tampon de la phase solide



$$M_{\text{plant}} = kMe^{2+}$$

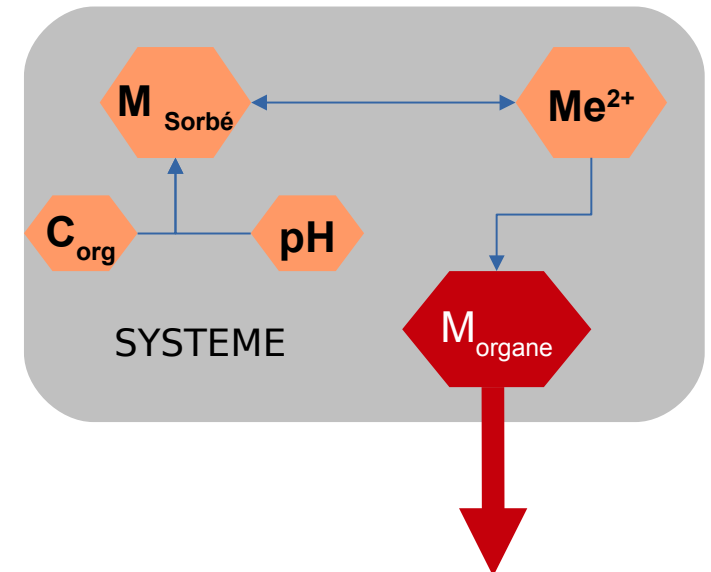
Le métal libre se sorbe sur des surfaces des constituants du sol :

Essentiellement la matière organique
Le H^+ est est compétiteur pour la sorption



$$pMe^{2+} = -\log Me = \log K - \log \left(\frac{[MeSur]}{[SurH_y]} \right) + y \cdot pH$$

$$pMe^{2+} = a + b \cdot pH + c \cdot \log(\text{Total Metal}) + d \cdot \log(Sur)$$



$$\log(M_{\text{plant}}) = a' + b \cdot pH + c \cdot \log(M_{\text{total}}) + d \cdot \log(C_{\text{org}}) + e \cdot \log(\text{Argile})$$



TABLE 7 – Meilleurs modèles prédictifs de la phytodisponibilité pour la variété Miradoux cultivée la même année (2013) sur 9 sites différents

Modèle	R^2_{aj}	RMSE	BIC	Nombre de variables
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, CEC, Mn_{Tamm})$	0.905	0.013	-26.45	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, CEC, K_{ss})$	0.84	0.018	-12.07	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, Arg, Mn_{Tamm})$	0.828	0.016	-24.85	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, CEC, Mg_{ss})$	0.814	0.02	-12.57	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, Lim, K_{ss})$	0.809	0.02	-12.52	4
$Cd_{grain} = f(Cd^{2+}, pH_{CaCl_2}, CEC, Mn_{Tamm})$	0.808	0.02	-14.38	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, Arg, Mg_{ss})$	0.777	0.021	-11.1	4
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, CEC)$	0.635	0.026	-6.71	3
$Cd_{grain} = f(Cd^{2+})$	0.502	0.027	5.58	1
$Cd_{grain} = f(Cd_{tot}, pH)$	0.477	0.027	16.58	2
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble})$	0.265	0.035	6.92	1
$Cd_{grain} = f(Cd_{soluble}, pH_{CaCl_2}, Mn_{Tamm})$	0.219	0.044	5.97	3

Il faut choisir ' judicieusement'

- Nb de variables
- Leur sens
- la variance expliquée

$$\begin{aligned} \log_{10}(Cd_{grain}) = & -3.637 (\pm 1.0599) \\ & + 0.553 (\pm 0.1092) \log_{10}(Cd_{soluble}) \\ & - 0.347 (\pm 0.1318) pH_{CaCl_2} \\ & + 1.63 (\pm 0.2094) \log_{10}(CEC) \\ & - 0.685 (\pm 0.1258) \log_{10}(Mn_{Tamm}) \end{aligned}$$

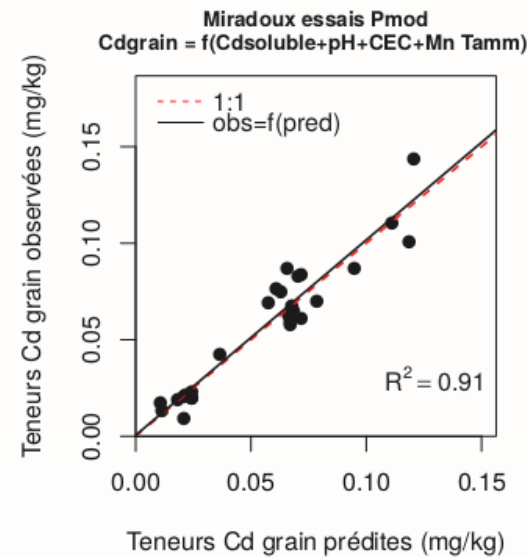


FIGURE 24 – Valeurs observées de teneurs en Cd du grain de Miradoux en fonction des valeurs prédites par un modèle fondé sur la concentration en Cd soluble du sol, le pH, la CEC et la teneur du sol en Mn extrait par le réactif Tamm (voir le texte, équation 10). La droite montre la régression linéaire entre les valeurs observées et les valeurs prédites associée à son R^2 . La droite en pointillés rouges est la droite $x=y$.



Démarche itérative :

- Comprendre les défaut et les qualité du modèle
- Rectifier

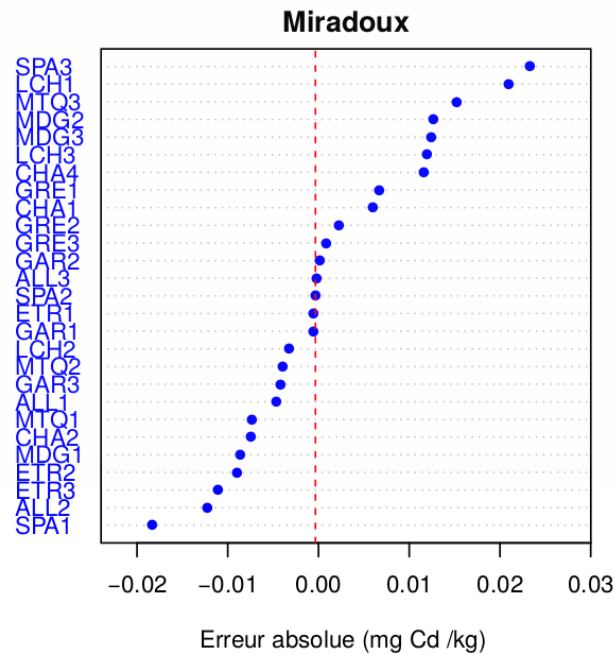


FIGURE 25 – Erreur de prédiction (valeurs observées - valeurs prédites) du modèle reliant la teneur en Cd du grain de Miradoux avec la teneur en Cd soluble du sol, le pH, la CEC et la teneur en Mn extraite par le réactif Tamm en fonction des points de prélèvement en ordonnées (voir le texte, équation 10).



Cadur

Contamination du blé dur par le Cd

ISPA-INRA Arvalis

BONNE Utilisation du modèle statistique

Toujours avoir à l'esprit :

- le **domaine de validité du modèle**
- les hypothèses sous-jacentes.
- Le modèle est pour une variété de blé dur (Miradoux)
- La gamme de pH n'est pas uniformément représentée
- Attention aux variables corrélées entre elles

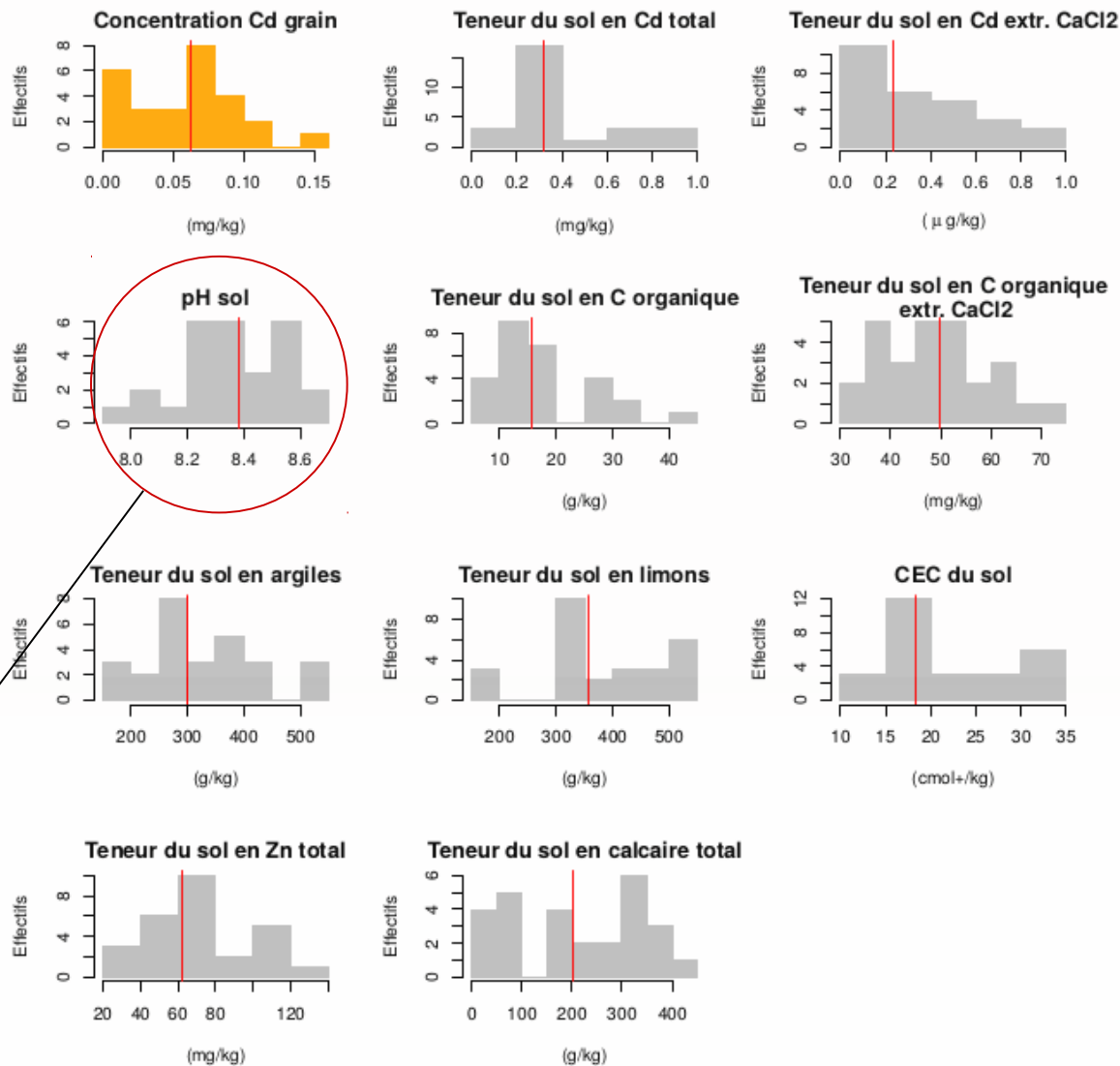
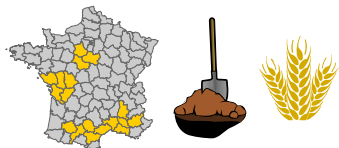


FIGURE 23 – Contamination du grain par le Cd chez la variété Miradoux pour 27 points de prélèvement réalisés en 2013 (différents essais et différents blocs d'un même essai, voir le texte). Distribution des valeurs de contamination du grain et des variables de l'analyse de terre correspondant aux points de prélèvements. La ligne verticale rouge indique la médiane.

Prélèvements



2016-2018



Agriculteurs Bassins de production
Echantillons appariés terre + grains

Cd: n=561

As, Ni, Pb, Fe, Zn: n=245

Analyses



Variété

Argiles, limons

pH Calcaire

Cd, As, Ni, Pb, Fe, Zn

C_{organique} C:N

terre + grains

Modélisation statistique

$$\text{Proba}(ET_{\text{grain}} > \text{seuil}) = f(\text{Variables sol} + \text{Variété})$$

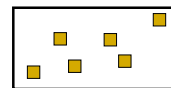
Machine learning

Régression logistique

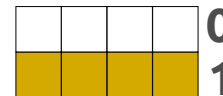
Random Forest

Validation croisée

Test prédictions



Calibration



Sélection des meilleurs modèles

Maximisent la détection

Modèle 1

Modèle 2

...

Modèle n

Prédiction de la conformité

Agrégation des meilleurs modèles

Prédiction médiane

Développement Internet

ANR-10-LBX-45



Bléssûr



<https://ispa.bordeaux.inra.fr/services/blesur/>



Performances

Détection

Fiabilité

Régression logistique

$$y = \{0, 1\} \quad p = \text{proba}(y=1)$$

$$\log\left(\frac{p}{1-p}\right) = a_0 + a_1X_1 + \dots + a_nX_n$$

odd ratio

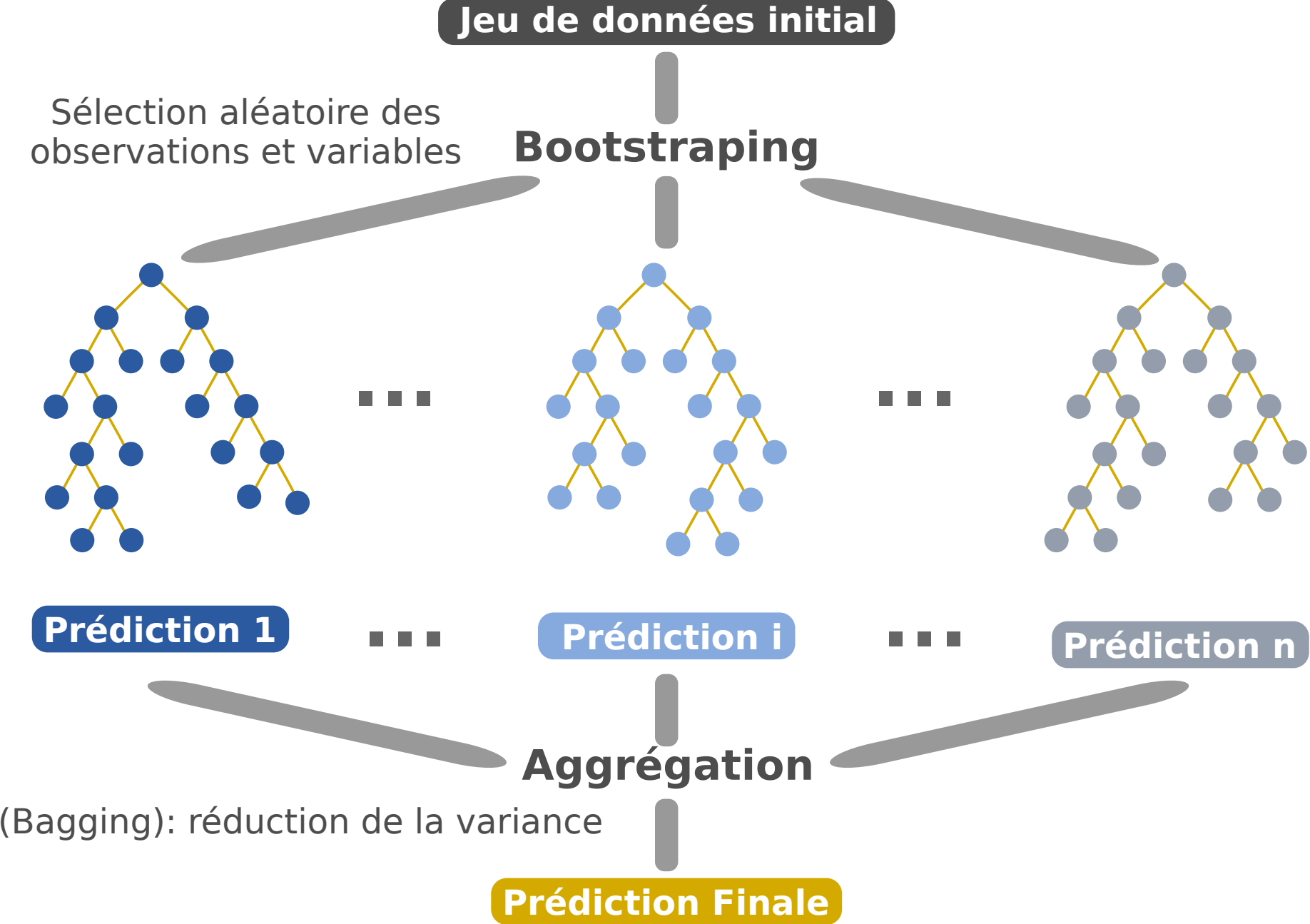
Ajustement aux données expérimentales
Distribution de Bernouilli
Maximum de vraisemblance

Ce qui est prédit: p

$p > 0.5$ alors $Y=1$

Optimisation de la proba seuil
 $p > p_{\text{seuil}}$ alors $Y=1$

Random Forests



5. La valeur prédictive du modèle

$$Y = \{0, 1\}$$

Modèle de prédiction :

$$p(Y=1) = f(X_1, X_2, \dots, X_n)$$

Observation

		Prédiction		
		$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	
y=1	True Positive TP	False Negative FN	TP+FN	
	False Positive FP	True Negative TN	FP+TN	
		TP+FP	FN+TN	$n = TP + FP + TN + FN$

Proba que le modèle détecte dépassement seuil : $p(\hat{y}=1|y=1) : TP/(TP+FN)$

Proba que le modèle détecte le non-dépassement seuil : $p(\hat{y}=0|y=0) : TN/(FP+TN)$

Précision du modèle : $(TP+TN)/n$

Proba que le modèle surestime la contamination : $p(\hat{y}=1|y=0) : FP/(FP+TN)$

Proba que le modèle sous-estime la contamination : $p(\hat{y}=0|y=1) : FN/(TP+FN)$

Taux d'erreurs : $(FP+FN)/n = (1-\text{Précision})$

6. Indices de confiance du modèle

		Prédiction		
		$\hat{y}=1$	$\hat{y}=0$	
Observation	$y=1$	True Positive TP	False Negative FN	TP+FN
	$y=0$	False Positive FP	True Negative TN	FP+TN
		TP+FP	FN+TN	$n=TP+FP+TN+FN$

Proba que le seuil soit dépassé sachant que le modèle le prédit : $p(y=1|\hat{y}=1) : TP/(TP+FP)$ **S1P1**

Proba que le seuil ne soit pas dépassé sachant que le modèle le prédit: $p(y=0|\hat{y}=0) : TN/(FN+TN)$ **S0P0**

Proba que le seuil soit dépassé sachant que le modèle prédit le contraire: $p(y=1|\hat{y}=0) : FN/(FN+TN)$ **S1P0**

Proba que le seuil ne soit pas dépassé sachant que le modèle prédit le contraire: $p(y=0|\hat{y}=1) : FP/(TP+FP)$ **S0P1**

Performances de

	Cas détectés		Cas correctement prédits	
	Non conformité	Conformité	Non conformité	Conformité
As (0.1 mg/kg)	50%	94%	20%	98%
Cd (0.18 mg/kg)	82%	88%	75%	89%
Pb (0.2 mg/kg)	33%	91%	14%	95%
Ni (0.2 mg/kg)	52%	93%	46%	69%

Faibles performances:

- pas assez de données
- pas assez de non conformités

Entrez votre analyse de terre

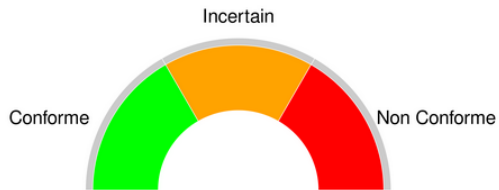
Il faut renseigner *a minima* le pH eau, la teneur en carbone organique (50% de la teneur en MO), le rapport C/N et au moins un des ETM parmi As, Cd, Ni, Pb. Vous pouvez également renseigner la teneur en Fe et Zn du sol pour avoir une estimation de la teneur de ces éléments dans les grains

Si vous avez connaissance de la texture de votre terre vous pouvez la renseigner en plus: teneur en argiles et en limons totaux **OU** fins

Choisissez ensuite une variété dans la liste déroulante. Si votre variété n'apparaît pas choisissez *Ma variété n'est pas dans la liste* et la prédiction se fera pour la variété **Miradoux**

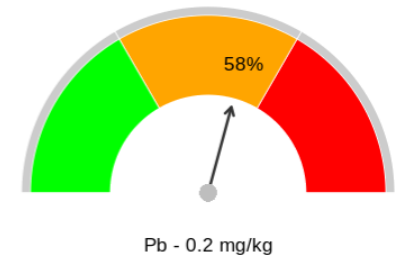
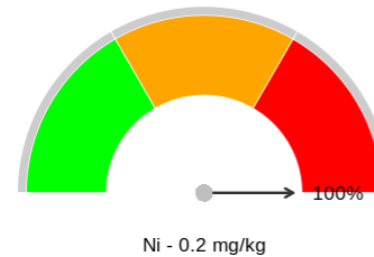
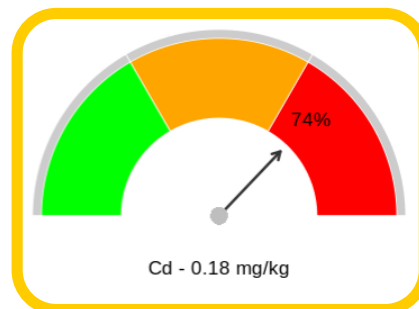
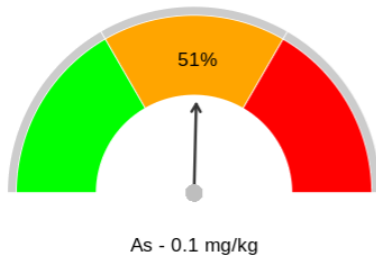
pH (eau) 6.5	Rapport C/N 10	Limons (%) 10	Cd total 0.8	Pb total 15	Fe total (%) 5
C organique (%) 1,3	Argilles (%) 20	Limons fins (%) 	As total 14	Ni total 20	Zn total 30
Ma variété DAKTER					

Résultats pour les contaminants



Si vous constatez que le risque de non-conformité est fort vous pouvez:

- Vérifier que votre pH est au moins égal à 7
- Consulter l'onglet **Choisir sa variété** pour sélectionner une variété peu accumulatrice



Entrez votre analyse de terre

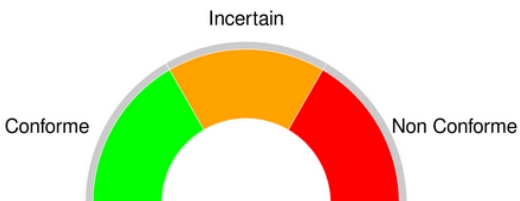
Il faut renseigner *a minima* le pH eau, la teneur en carbone organique (50% de la teneur en MO), le rapport C/N et au moins un des ETM parmi As, Cd, Ni, Pb. Vous pouvez également renseigner la teneur en Fe et Zn du sol pour avoir une estimation de la teneur de ces éléments dans les grains

Si vous avez connaissance de la texture de votre terre vous pouvez la renseigner en plus: teneur en argiles et en limons totaux **OU** fins

Choisissez ensuite une variété dans la liste déroulante. Si votre variété n'apparaît pas choisissez *Ma variété n'est pas dans la liste* et la prédiction se fera pour la variété **Miradoux**

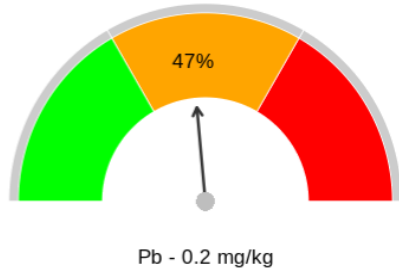
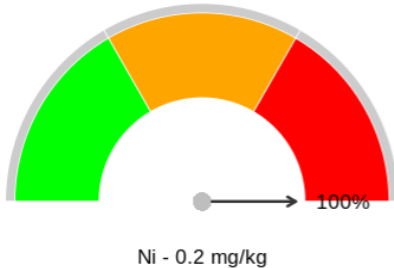
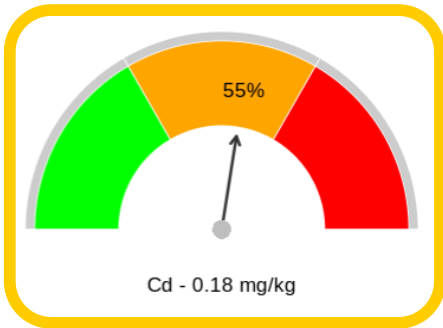
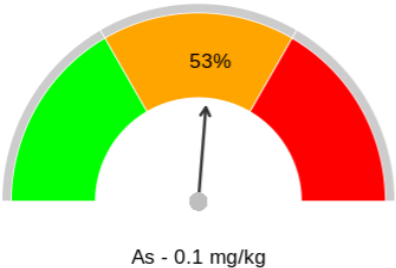
pH (eau) 7	Rapport C/N 10	Limons (%) 10	Cd total 0.8	Pb total 15	Fe total (%) 5
C organique (%) 1,3	Argiles (%) 20	Limons fins (%) 	As total 14	Ni total 20	Zn total 30
Ma variété DAKTER					

Résultats pour les contaminants

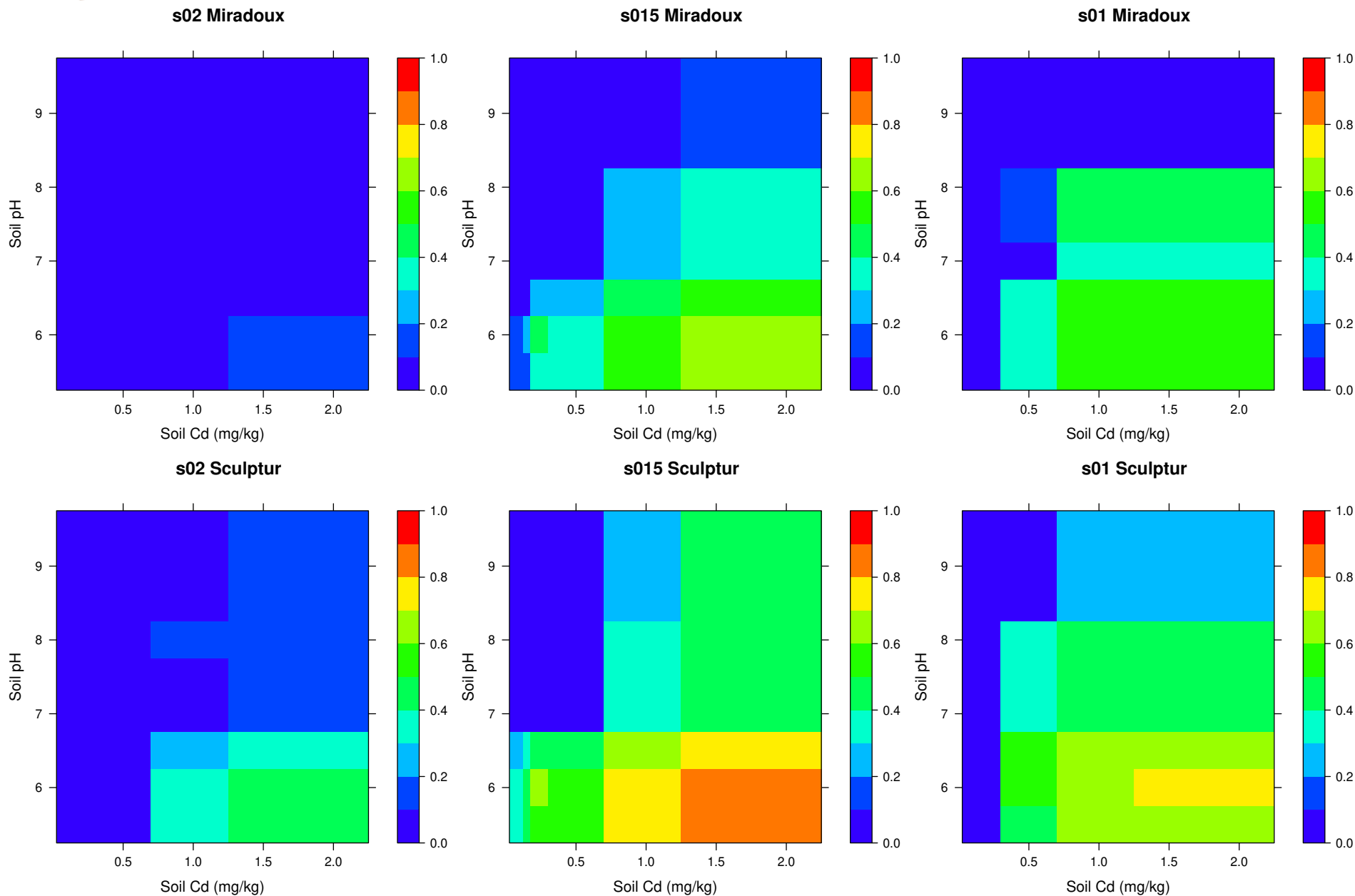


Si vous constatez que le risque de non-conformité est fort vous pouvez:

- Vérifier que votre pH est au moins égal à 7
- Consulter l'onglet **Choisir sa variété** pour sélectionner une variété peu accumulatrice



Les modèles permettent de prédire la probabilité de non conformité en fonction du Cd du sol et du pH



Même à pH >7 le risque peut être non négligeable (fort Cd du sol, variété 'sensible')

Entrez votre analyse de terre

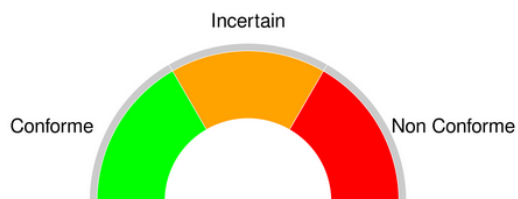
Il faut renseigner *a minima* le pH eau, la teneur en carbone organique (50% de la teneur en MO), le rapport C/N et au moins un des ETM parmi As, Cd, Ni, Pb. Vous pouvez également renseigner la teneur en Fe et Zn du sol pour avoir une estimation de la teneur de ces éléments dans les grains

Si vous avez connaissance de la texture de votre terre vous pouvez la renseigner en plus: teneur en argiles et en limons totaux **OU** fins

Choisissez ensuite une variété dans la liste déroulante. Si votre variété n'apparaît pas choisissez *Ma variété n'est pas dans la liste* et la prédiction se fera pour la variété **Miradoux**

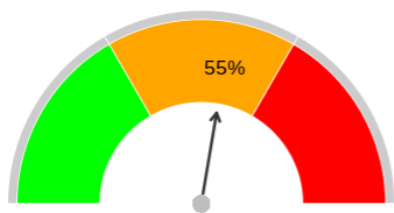
pH (eau) 7	Rapport C/N 10	Limons (%) 10	Cd total 0.8	Pb total 15	Fe total (%) 5
C organique (%) 1,3	Argilles (%) 20	Limons fins (%) 	As total 14	Ni total 20	Zn total 30
Ma variété ANVERGUR					

Résultats pour les contaminants

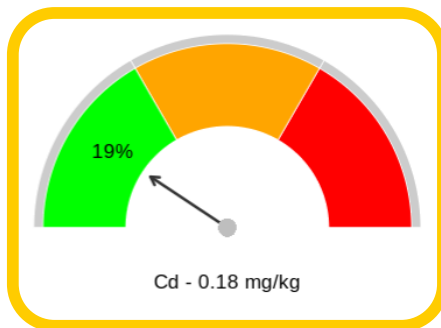


Si vous constatez que le risque de non-conformité est fort vous pouvez:

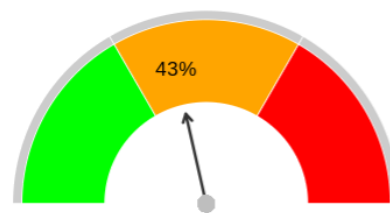
- Vérifier que votre pH est au moins égal à 7
- Consulter l'onglet **Choisir sa variété** pour sélectionner une variété peu accumulatrice



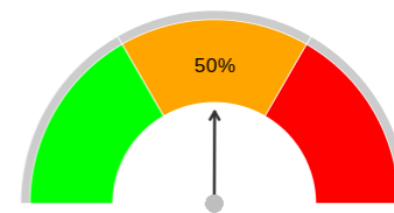
As - 0.1 mg/kg



Cd - 0.18 mg/kg

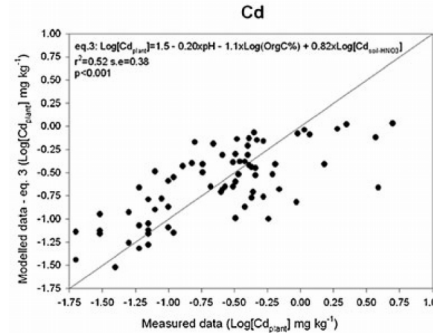


Ni - 0.2 mg/kg



Pb - 0.2 mg/kg

Fonctions de transfert



Facile à lire/utiliser

Auto-apprentissage si + de données

Identifie bien les variables influentes



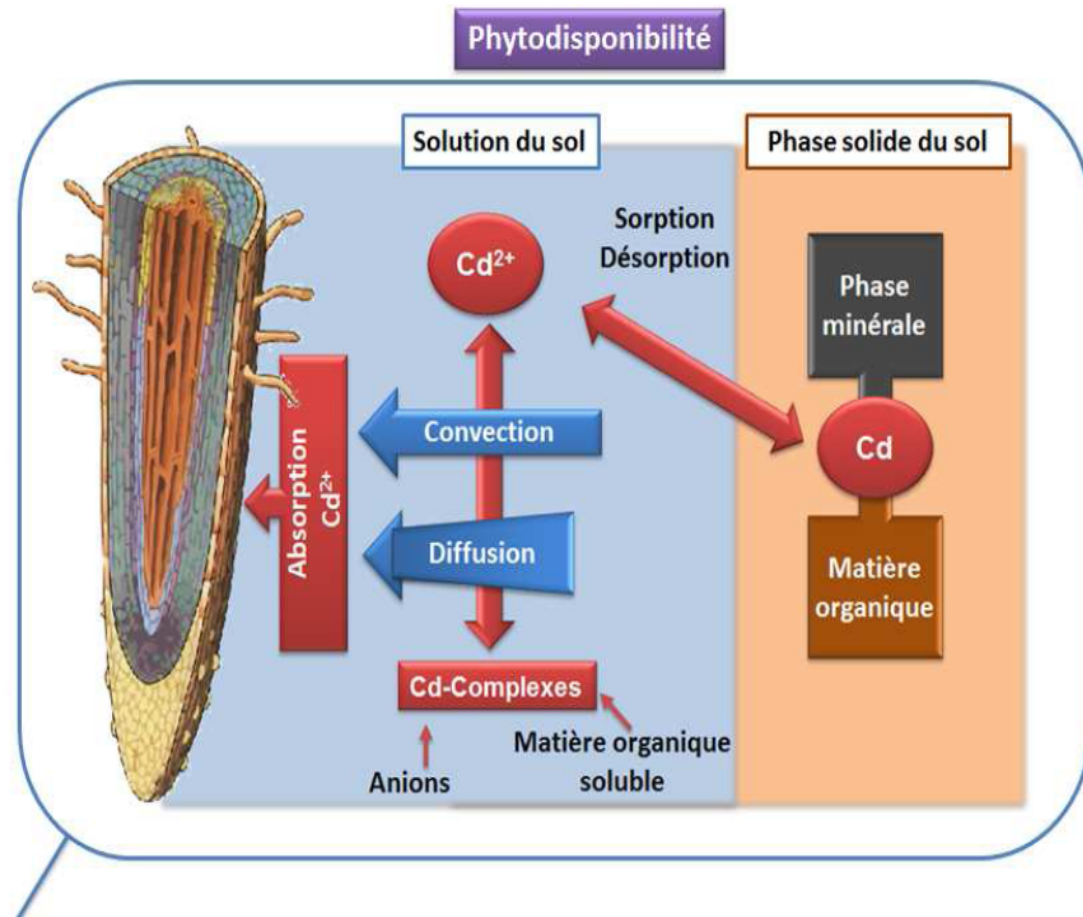
Peu générique = dépend des données initiales

Gain de connaissance sur mécanismes faible

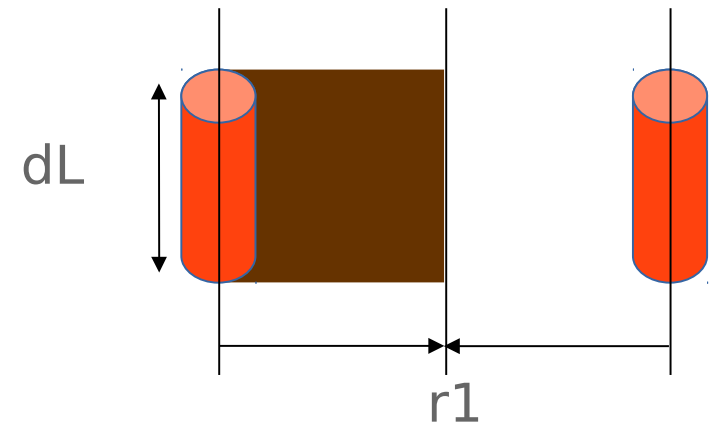
Nécessite de beaucoup de données

Physiologie de la plante non explicitée

Modélisation de la biodisponibilité



- 3 espèces M, L, ML
- Transport par diffusion et advection
- Sorption avec cinétique **pour M, L, ML**
- **Complexation avec cinétique**
- Absorption racinaire suivant une cinétique Michaelienne



Racine= cylindres verticaux équirépartis



Elaboration du modèle : intégration des connaissances, hypothèses simplificatrices

Le modèle mathématique

Diffusion
Convection
Complexation
Sorption

$$\theta \frac{\partial C_M}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r f \theta D_M \frac{\partial C_M}{\partial r} + r_0 v_0 C_M \right] + \theta (k_d C_{ML} - k_{a(\text{cond})} C_M C_L) + (k_{\text{desM}} C_{MS} - \theta k_{\text{adsM}} C_M)$$

↔
↔
↔
↔

$$\theta \frac{\partial C_{ML}}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r f \theta D_L \frac{\partial C_{ML}}{\partial r} + r_0 v_0 C_{ML} \right) + \theta (k_{a(\text{cond})} C_M C_L - k_d C_{ML}) (k_{\text{desML}} C_{MLS} - \theta k_{\text{adsML}} C_{ML})$$

$$\theta \frac{\partial C_L}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r f \theta D_L \frac{\partial C_L}{\partial r} + r_0 v_0 C_L \right) + \theta (k_d C_{ML} - k_{a(\text{cond})} C_M C_L) (k_{\text{desL}} C_{LS} - \theta k_{\text{adsL}} C_L)$$

$$\frac{\partial C_{MS}}{\partial t} = \theta k_{\text{adsM}} C_M - k_{\text{desM}} C_{MS}$$

$$\frac{\partial C_{MLS}}{\partial t} = \theta k_{\text{adsML}} C_{ML} - k_{\text{desML}} C_{MLS}$$

$$\frac{\partial C_{LS}}{\partial t} = \theta k_{\text{adsL}} C_L - k_{\text{desL}} C_{LS}$$

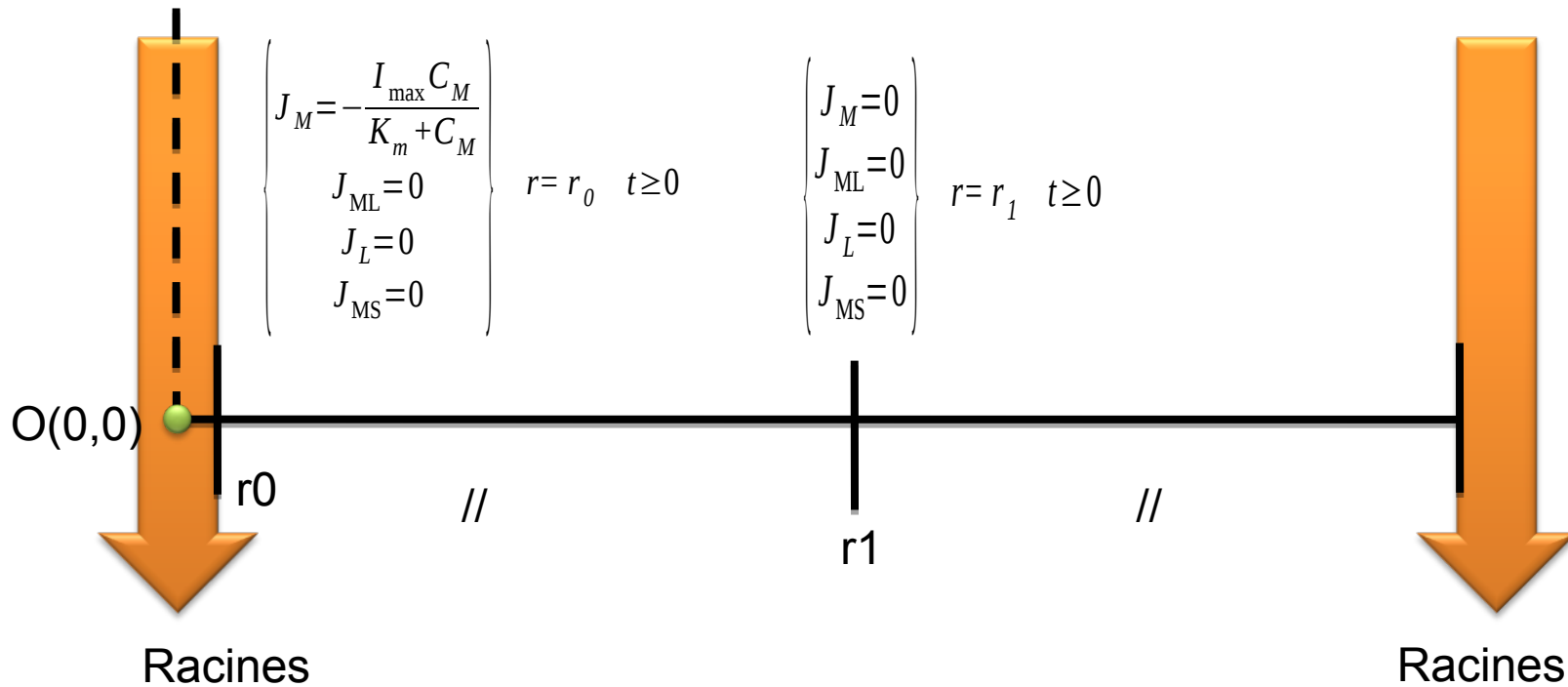
Variables & paramètres

C_M, C_{ML}, C_L	Soil concentration of soluble metal ²⁺ , complex and ligand in the soil solution	$\mu\text{moles cm}^{-3}$ soil solution
C_{MS}, C_{MLS}, C_{LS}	Soil concentration of sorbed metal, complex and ligand onto the soil solid phase	$\mu\text{moles cm}^{-3}$ soil
θ	Soil volumetric water content	cm^3 solution cm^{-3} soil
f	Soil tortuosity factor	$\text{cm}^2 \text{cm}^{-2}$ solution
D_M	Diffusion coefficient for M	cm^2 solution s^{-1}
$D_L = D_{ML}$	Diffusion coefficient for L and ML	cm^2 solution s^{-1}
k_d	Dissociation rate constant for ML	s^{-1}
k_a	Association rate constant for M+L	cm^3 solution $\mu\text{moles}^{-1} \text{s}^{-1}$
$k_{\text{des}_M}, k_{\text{des}_{ML}} = k_{\text{des}_L}$	Desorption rate constant for M, ML and L	s^{-1}
$k_{\text{ads}_M}, k_{\text{ads}_L} = k_{\text{ads}_{ML}}$	Sorption rate constant for M, ML and L	s^{-1}
v_0	Water velocity at the root surface	cm^3 solution cm^{-2} soil s^{-1}

Les conditions aux limites du domaine

Conditions Initiales

$$\left\{ \begin{array}{l} C_M = C_{M0} \\ C_L = C_{L0} \\ C_{ML} = C_{MLO} \\ C_{MS} = C_{MS0} \\ C_{MLS} = C_{MLS0} \\ C_{LS} = C_{LS0} \end{array} \right. \quad r_0 \leq r \leq r_1 \quad t=0$$



Renseigner les conditions initiales

Concentration en solution : mesure ou bien estimation

$$Kd_{TOT} = \frac{Cd_{totalsol}}{Cd_{ensolution}}$$



$$\log_{10}(K_{d_{TOT}}) = -1.04 + 0.55 \text{ pH} + 0.7 \log_{10}(SOC) \quad (\text{Degryse et al., 2009})$$



Cd
total en solution

- pH,
- $C_{organique}$ en solution (L)
- Constante de complexation (Ks)
- Calcium en solution



Calcul de spéciation

CdL, Cd²⁺, L

On fait varier les paramètres du modèle dans des gammes qui ont un sens (littérature) : 99 087 situations simulées

Evaluation de la phytodisponibilité du Cd : simulation du prélèvement de Cd²⁺ par 1 cm² de racine pendant 30 jours

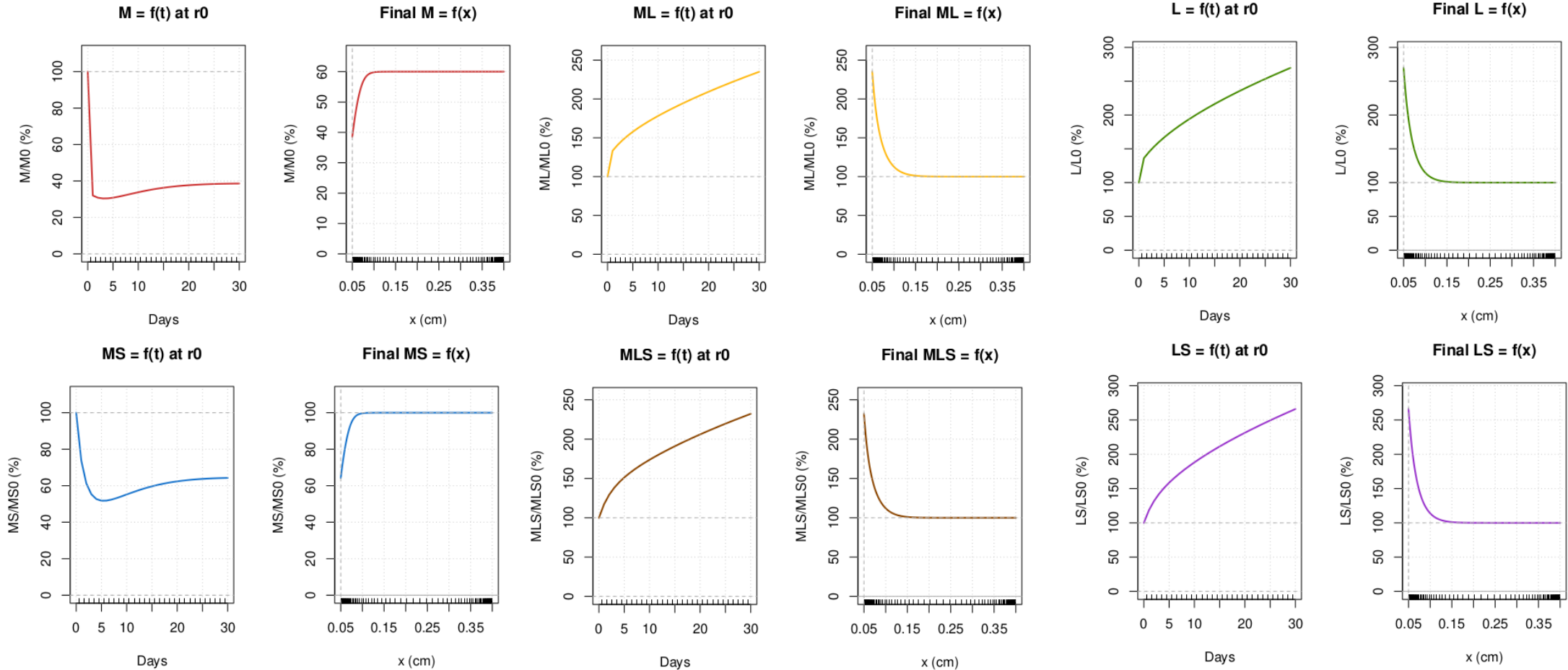
Table 1 Parameter domain of the Cd phytoavailability model in non-polluted agricultural soils

Parameters	Descriptions	Min	Max	log ₁₀ (Min) [†]	log ₁₀ (Max) [†]	Units
D_M^{\ddagger}	diffusion coefficient of Cd ²⁺ in water	7.07×10^{-6}				cm ² s ⁻¹
T^{\ddagger}	uptake duration	2592000				s
θ	soil volumetric water content	0.05	0.45			cm ³ cm ⁻³
f	soil impedance factor	0.01	0.55			cm ² cm ⁻²
D_L	diffusion coefficient of ligand in water	10^{-8}	7.07×10^{-6}	-8	-5.151	cm ² s ⁻¹
ρ	soil bulk density	1.3	1.7			g cm ⁻³
K_d^L	soil/solution partitioning coefficient of ligand	1	50			cm ³ g ⁻¹
k_{des}^M	desorption rate constant of Cd ²⁺	10^{-6}	5.5×10^{-4}	-6	-3.260	s ⁻¹
k_{des}^L	desorption rate constant of ligand	10^{-6}	5.5×10^{-4}	-6	-3.260	s ⁻¹
k_d	dissociation rate constant of complex in solution	10^{-6}	10^{-2}	-6	-2	s ⁻¹
I_{max}	maximum absorption rate of Cd ²⁺ by plant root	10^{-8}	10^{-6}	-8	-6	μmol cm ⁻² s ⁻¹
K_m	affinity coefficient	10^{-6}	10^{-3}	-6	-3	μmol cm ⁻³
v_0	water velocity at root surface	10^{-9}	5×10^{-6}	-9	-5.301	cm s ⁻¹
r_0	plant root radius	0.005	0.05			cm
r_1	half distance between plant roots	0.1	1			cm

[†] Maximum and minimum values were applied in log₁₀-transformed form

[‡] D_M and T were constants in the model

Situation témoin



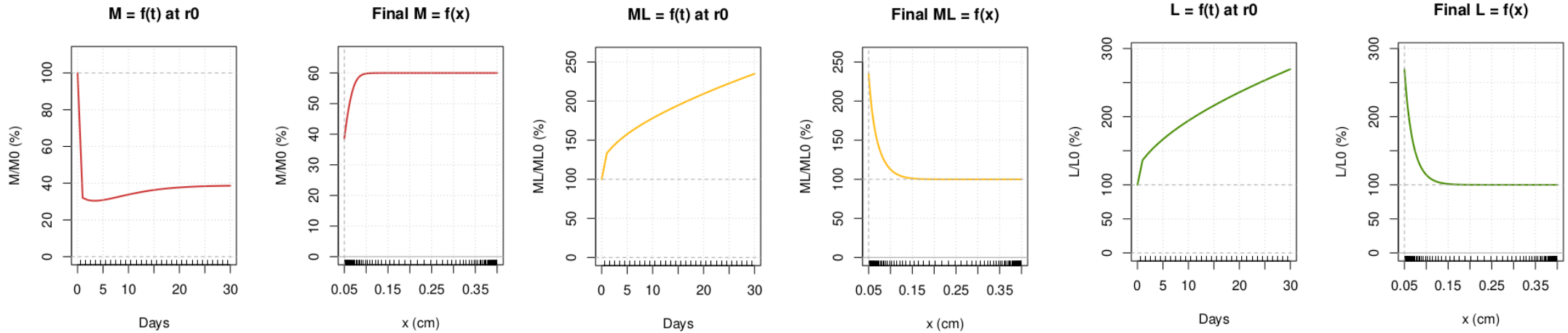
Déplétion de M

Déplétion de ML

Accumulation de L

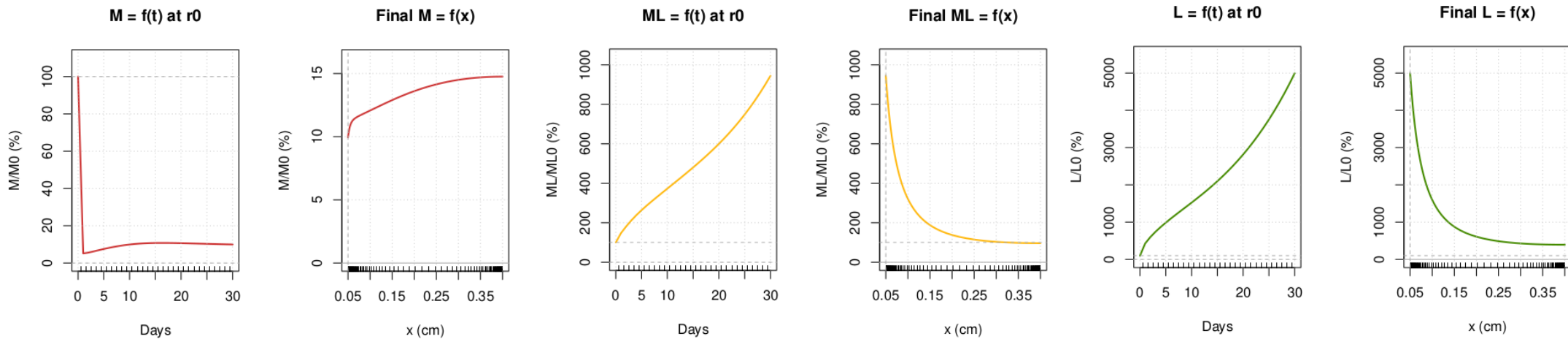
Prélèvement pour 30j: **$3.2 \cdot 10^{-6}$** $\mu\text{moles/cm}^2$

Situation témoin



Prélèvement pour 30j: **$3.2 \cdot 10^{-6}$** $\mu\text{moles/cm}^2$

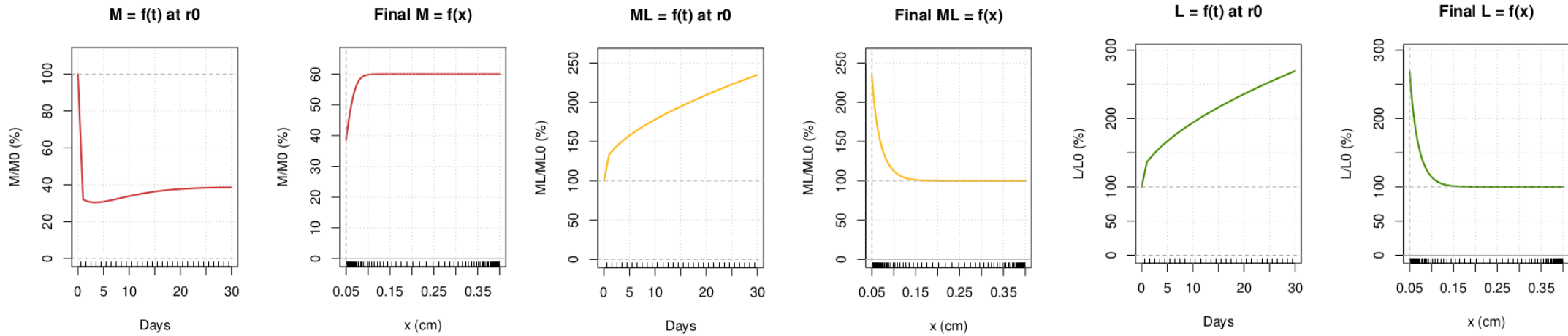
Pas de pouvoir tampon phase solide



Forte déplétion de M, accumulation de ML et L

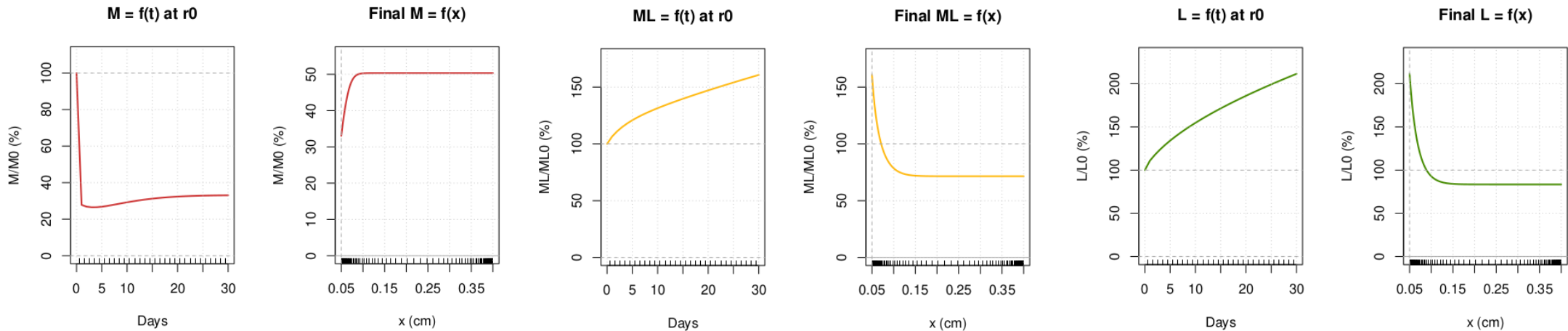
Prélèvement pour 30j: **$7.8 \cdot 10^{-7}$** $\mu\text{moles/cm}^2$: **5.6%** du témoin

Situation témoin



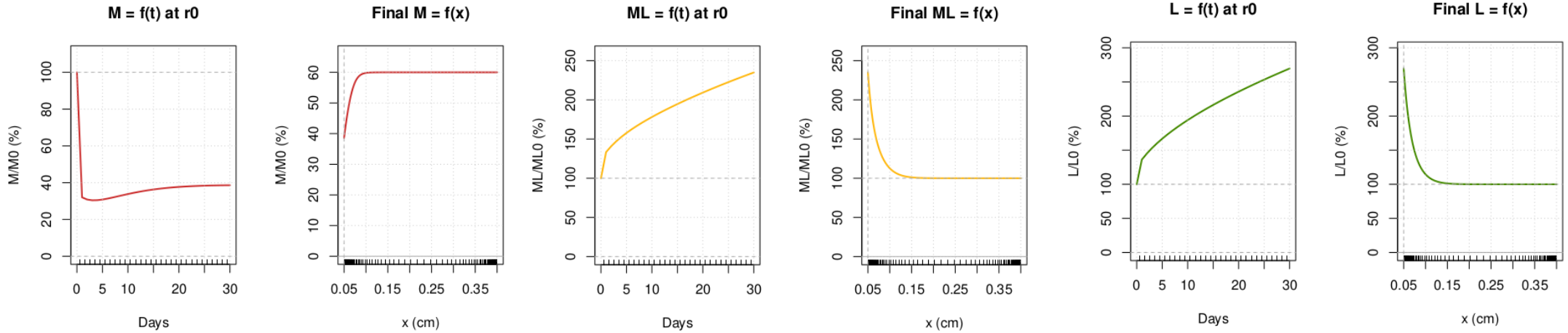
Prélèvement pour 30j: **$3.2 \cdot 10^{-6}$** $\mu\text{moles/cm}^2$

Pouvoir tampon phase solide x1.2 celui du témoin



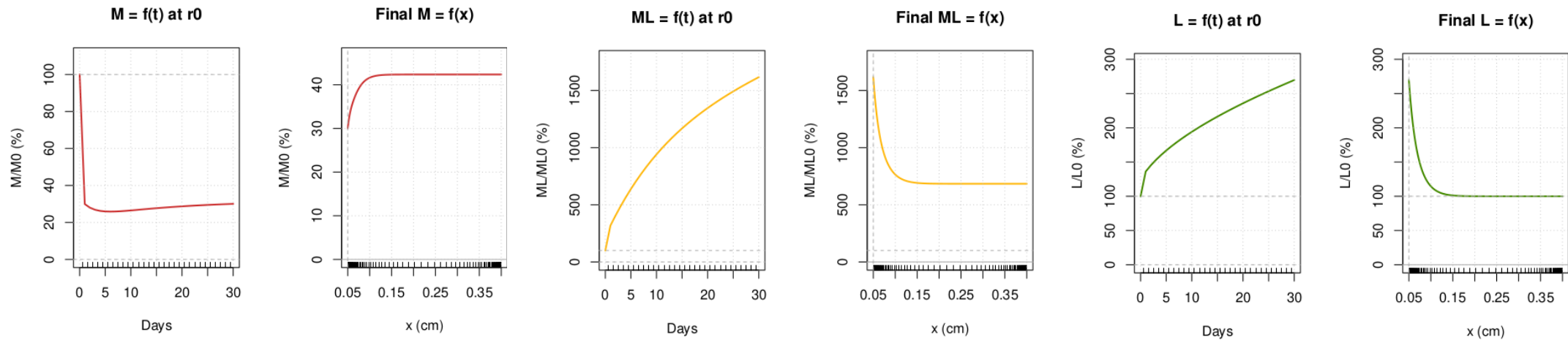
Prélèvement pour 30j: **$2.8 \cdot 10^{-6}$** $\mu\text{moles/cm}^2$: **87.5%** du témoin

Situation témoin



Prélèvement pour 30j: $3.2 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$

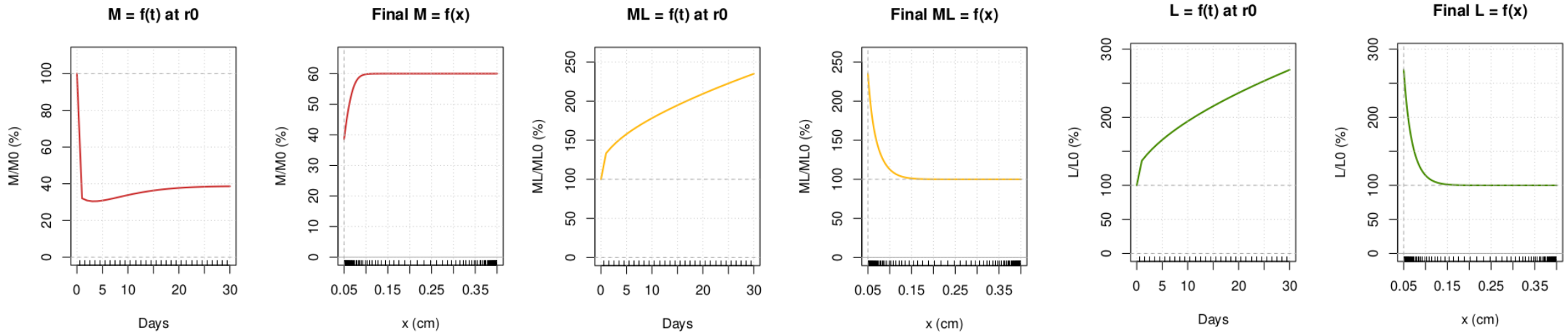
Constante de stabilité des complexe $KM=ML/(M.L)$: x10 celle du témoin



Forte déplétion de M, accumulation de ML

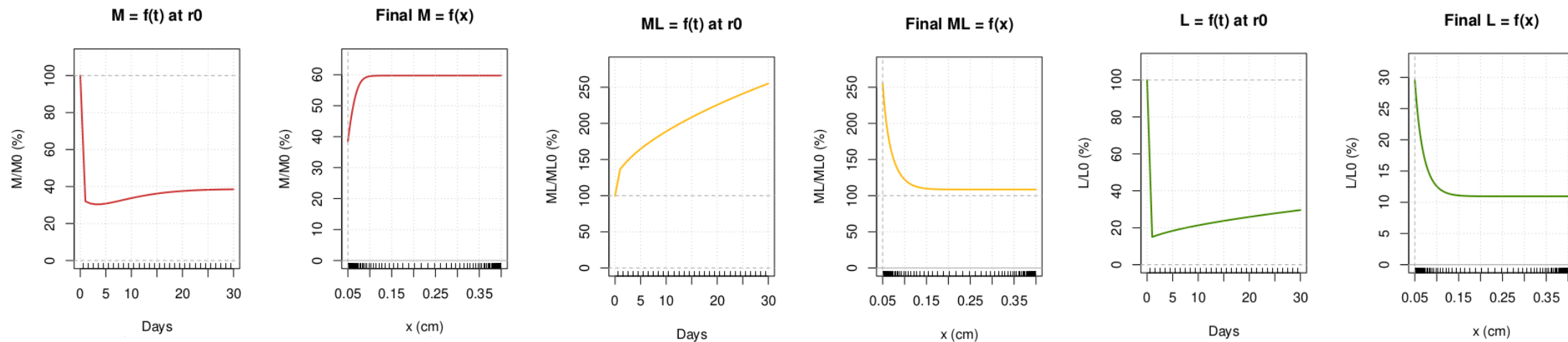
Prélèvement pour 30j: $2.7 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$: 84% du témoin

Situation témoin



Prélèvement pour 30j: $3.2 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$

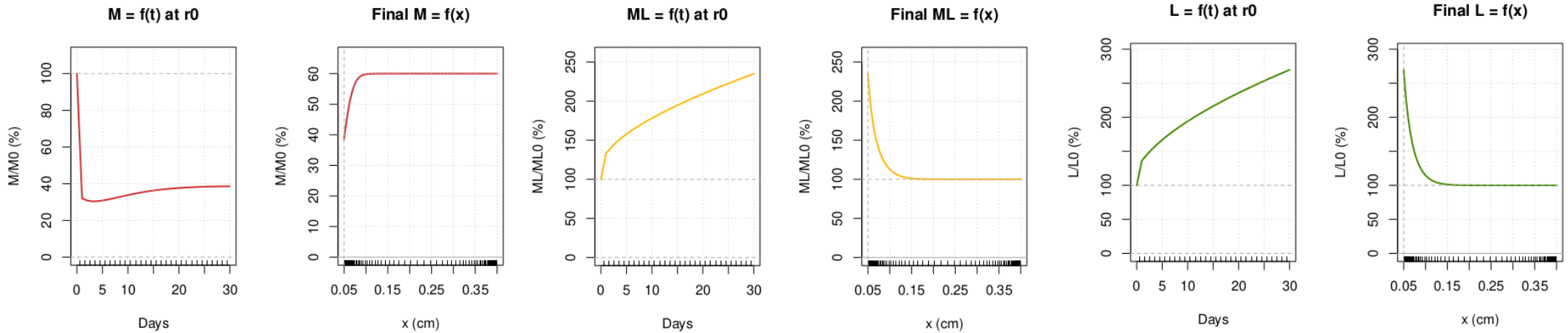
Apport de ligand: $L_0 = 10x$ la valeur du témoin



Prélèvement pour 30j: $3.2 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$: **100%** du témoin

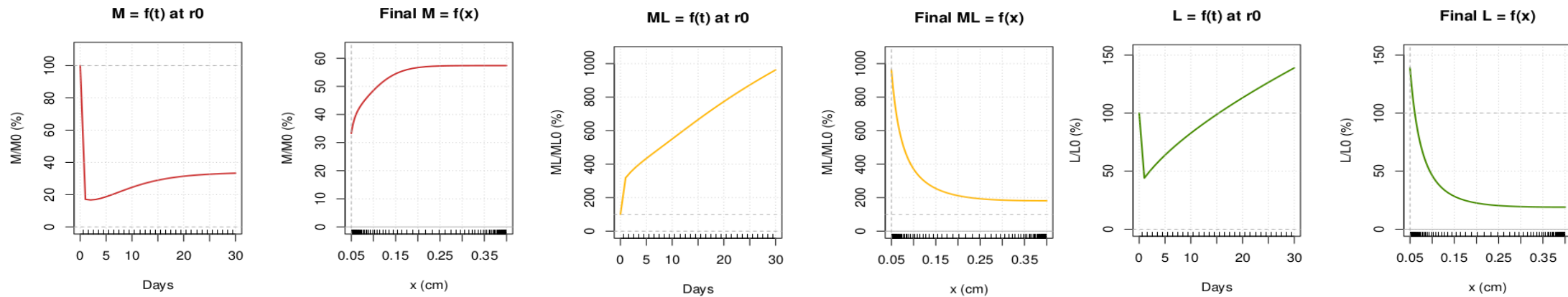
Pas d'effet car la phase solide tamponne la baisse de M liée à la formation de complexes

Situation témoin



Prélèvement pour 30j: $3.2 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$

Apport de ligand: $L_0 = 10x$ la valeur du témoin, pouvoir tampon divisé par 100



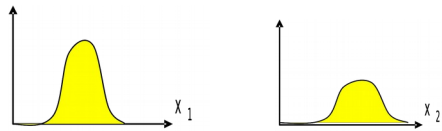
Prélèvement pour 30j: $2.2 \cdot 10^{-6} \mu\text{moles/cm}^2$: **68.8%** du témoin

Forte déplétion car la phase solide tamponne beaucoup moins la baisse de M liée à la formation de complexes

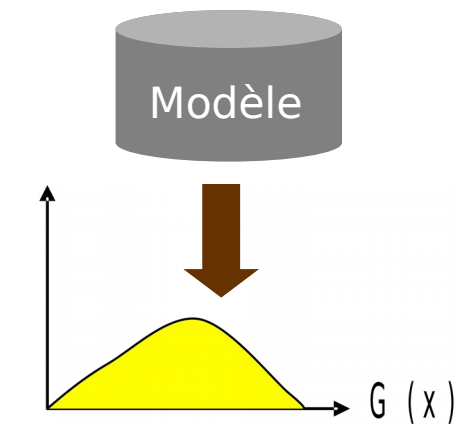
Analyse de sensibilité

Quel est l'effet d'une variation de la variable V_i sur la sortie du modèle ?

Analyse d'incertitude

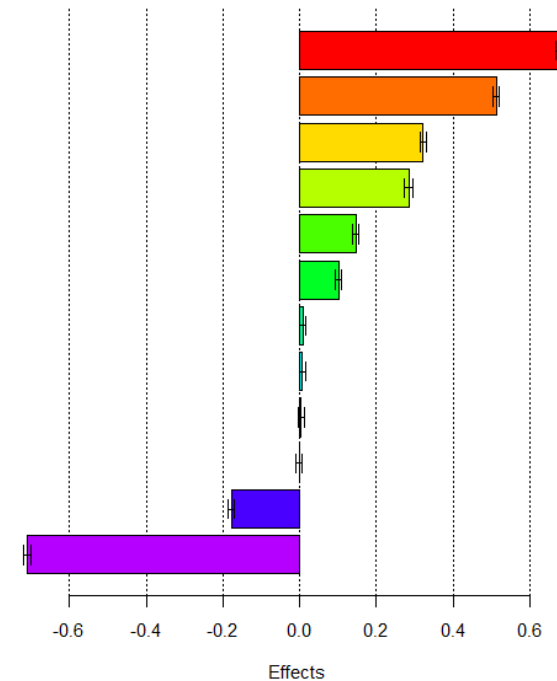


Incertitude sur les paramètres / variables du modèle



Quelle incertitude sur la prédiction?

Importance des facteurs



Hierarchisation
Comprendre ce qui conditionne le comportement du modèle

Simplification
Les facteurs non importants sont fixés, certains processus non influents négligés

Hiérarchisation des variables du modèle

Coefficient de regression normalisés 'k':

de combien de variance de Y varie Y lorsque X varie d'une variance

$$\rightarrow \Delta(\text{var}Y)/\text{var}(X) = k$$

Permet de comparer les effets de variables ayant des gammes de variation différentes

Diffusion de Cd^{2+} = processus dominant

Coef. tortuosité du sol ← f
 Humidité du sol ← θ
 Pouvoir tampon Cd^{2+} ← $\log_{10}(K_d^M)$
 Conc. initiale Cd^{2+} ← $\log_{10}(C_{M0})$

$\log_{10}(k_a^{\text{cond}})$
 r_1

$\log_{10}(D_L)$

$\log_{10}(k_{\text{des}}^M)$

$\log_{10}(k_{\text{des}}^L)$

$\log_{10}(C_{ML0})$

$\log_{10}(v_0)$

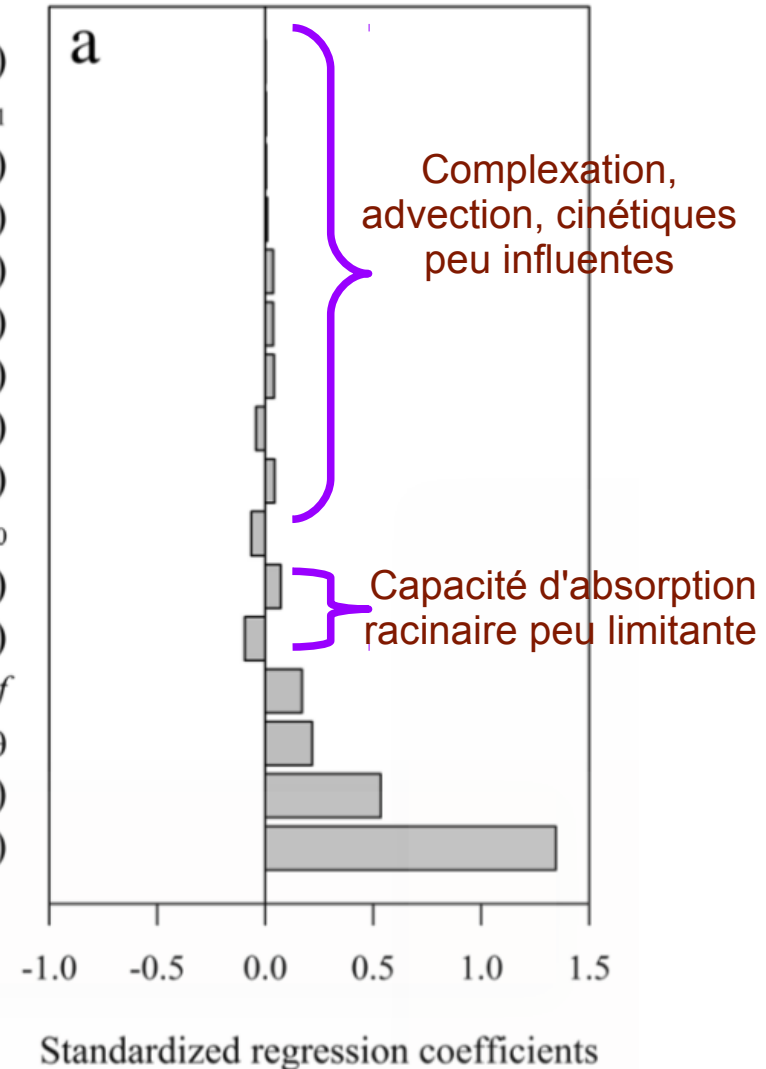
$\log_{10}(k_{\text{ads}}^L)$

$\log_{10}(k_d)$

r_0

$\log_{10}(I_{\text{max}})$

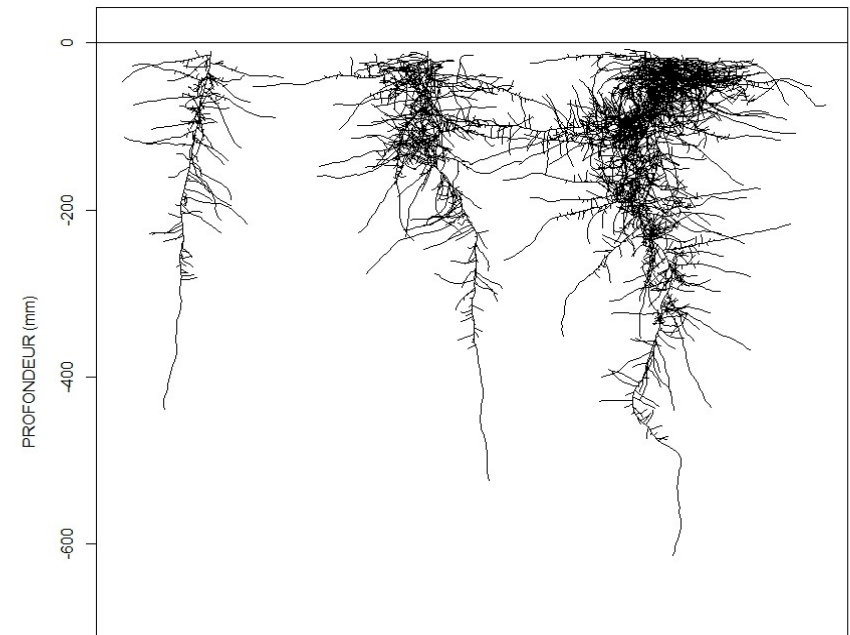
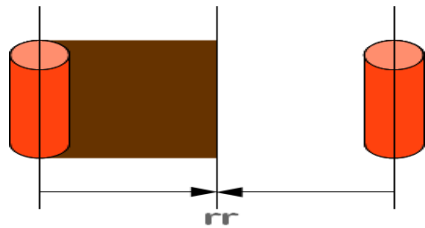
$\log_{10}(K_m)$



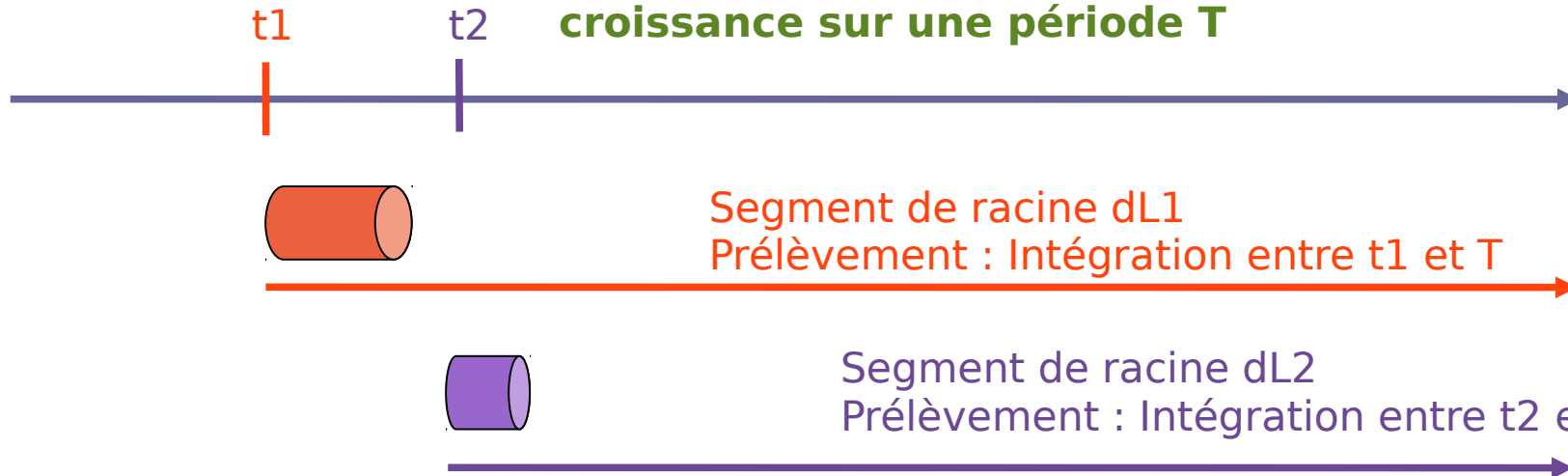
Modélisation du prélèvement

Comment passer de l'absorption par un segment de racine à l'absorption totale de la plante ?

Tournesol à 15, 18, et 21 jours

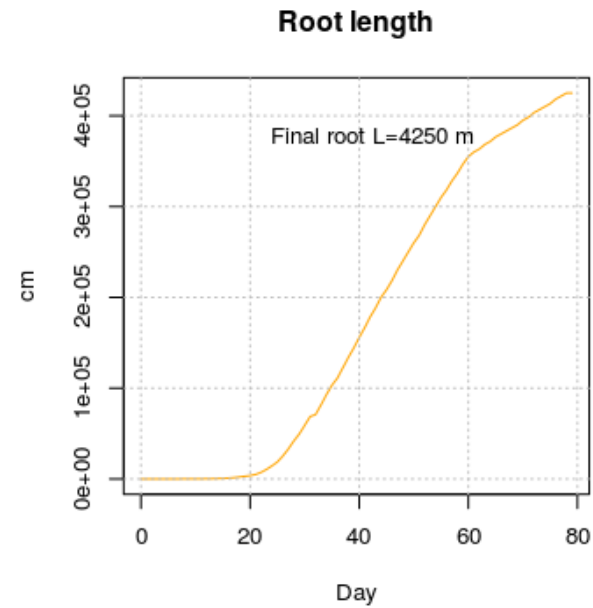
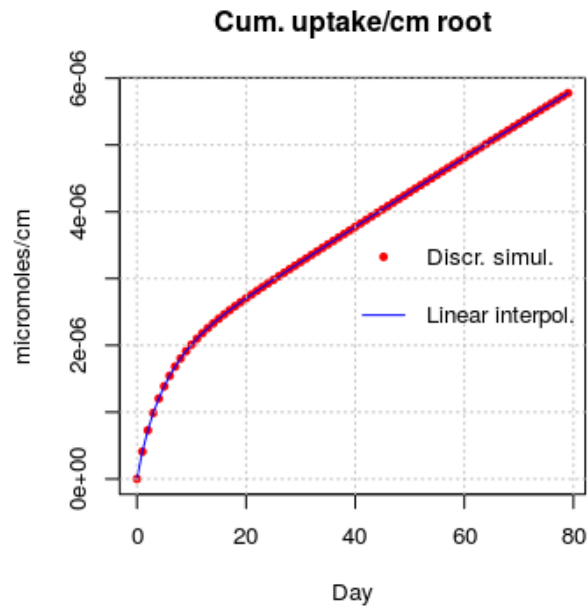


Simulation de l'absorption d'un élément par un système racinaire en croissance sur une période T

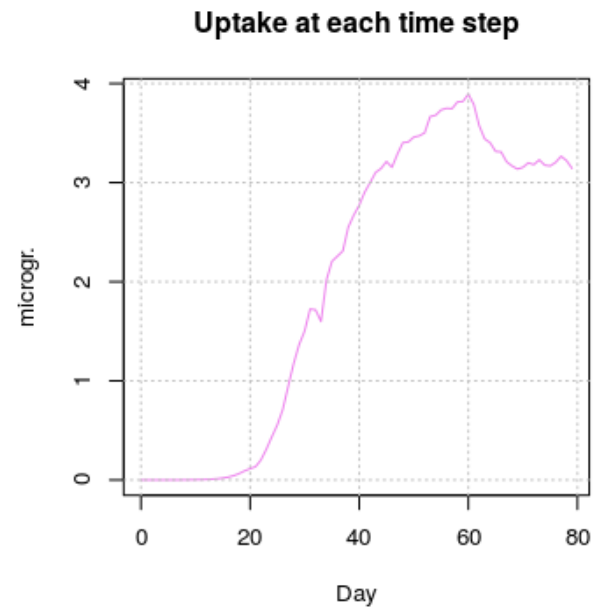
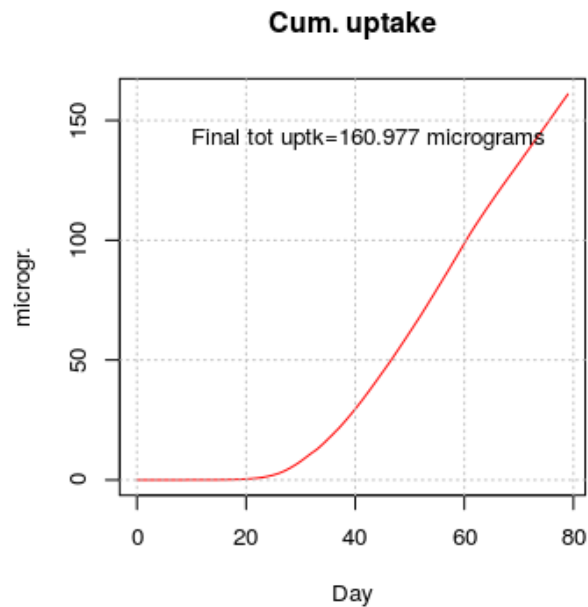


Modélisation du prélèvement

Modèle de
phytodisponibilité
(cf infra)

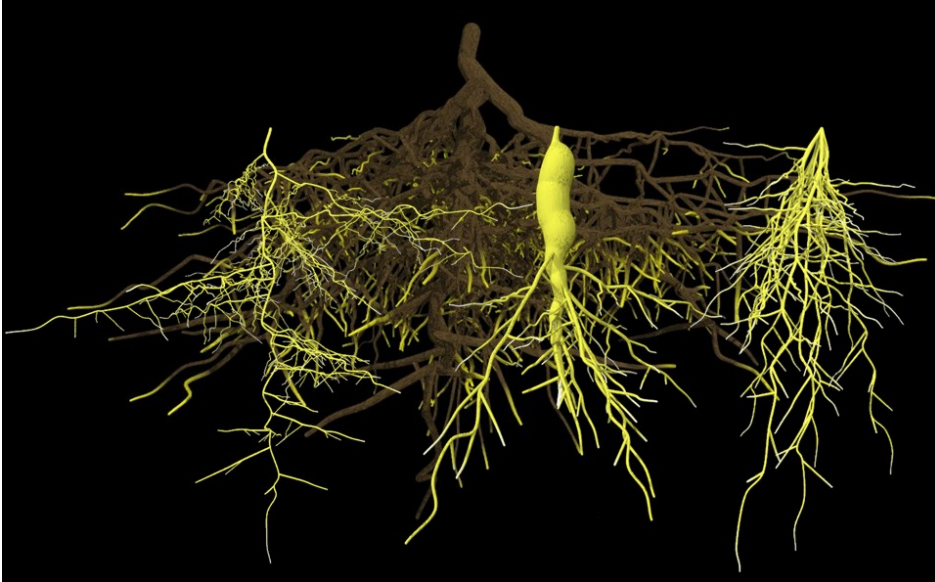


Mesurée,
Modélisée



Modélisation du prélèvement

Comment faire pousser le système racinaire ?



Modélisation de l'architecture racinaire

- Nombre, longueur des racines / ordre = $f(\text{temps})$
- Localisation des racines en 3D

Règles de développement :

- *Physiologie,*
- *Contraintes sol (température, densité du sol, gravité...)*



Mécaniste = possibilité de rendre compte de processus

- Spatialisation des ressources dans le sol
- Propriétés d'absorption variables



C'est un modèle avec des hypothèses, des lois et des paramètres à déterminer

Répartition dans la plante

Autoradiographie de la répartition du Cd chez deux cultivars de riz accumulant peu (Koshihikari) ou beaucoup (BIL48) le Cd dans les grains

Différences de répartition entre cultivars

Forte rétention dans les racines et les nœuds

Pourquoi ??

Ishikawa, S., Suzui, N., Ito-Tanabata, S., Ishii, S., Igura, M., Abe, T., Kuramata, M., Kawachi, N., Fujimaki, S., 2011. Real-time imaging and analysis of differences in cadmium dynamics in rice cultivars (*Oryza sativa*) using positron-emitting Cd-107 tracer. *Bmc Plant Biology* 11. doi:10.1186/1471-2229-11-172

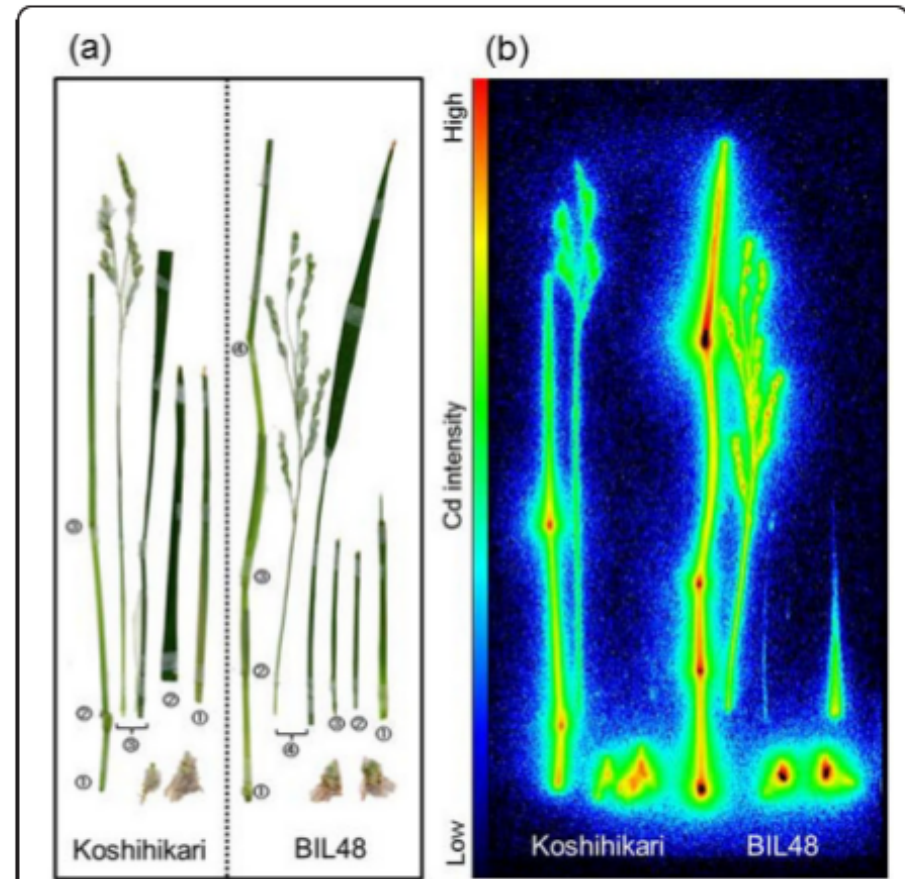
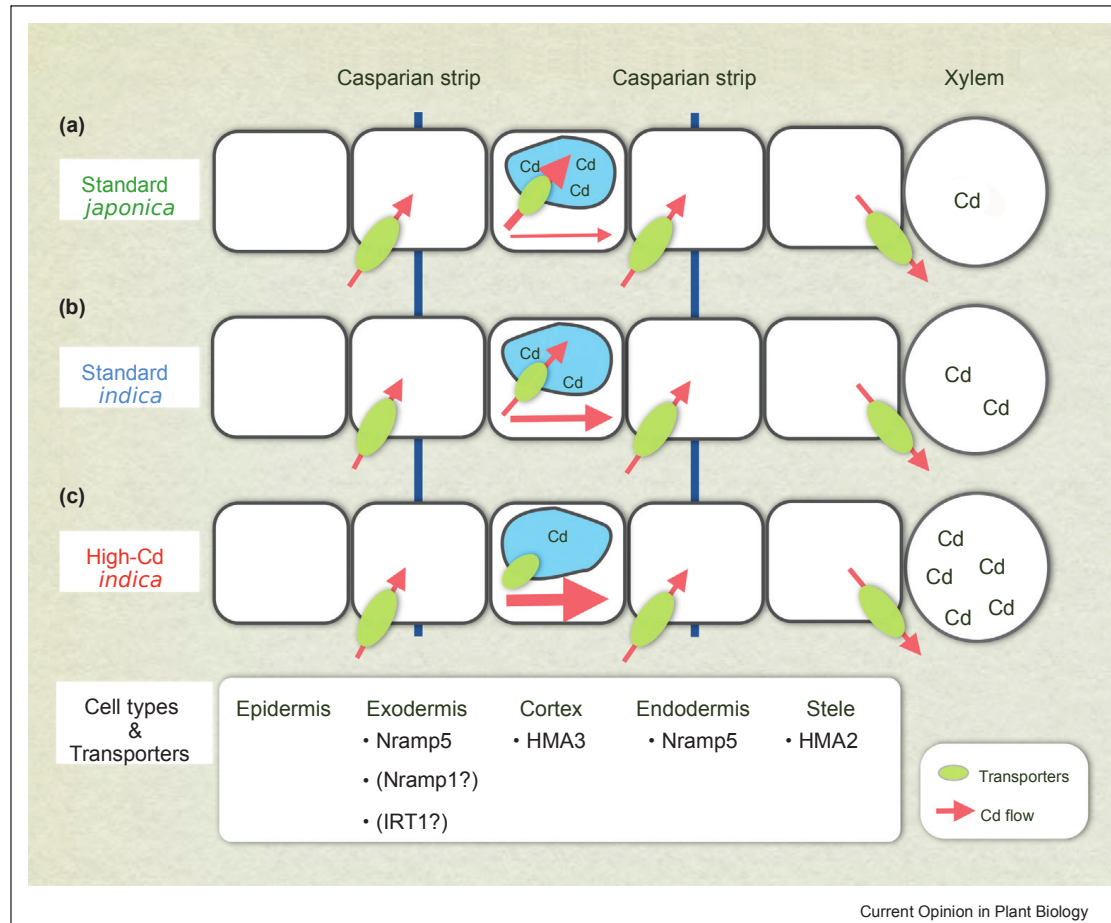


Figure 5 Autoradiography of detached parts of shoots at grain-filling stage 36 h after supplementation with tracer. After the PETIS experiment and the sufficient decay of ^{107}Cd within the test plants, autoradiography was carried out to obtain the static ^{109}Cd distribution in detached parts. (a) Photograph of test plants. (b) Autoradiograph of test plants. The same views are shown in (a) and (b). The pair of circled numbers indicates the nodal portions where the leaf was cut.

Séquestration racinaire



Des transporteurs plus ou moins actifs stockent le Cd dans les vacuoles



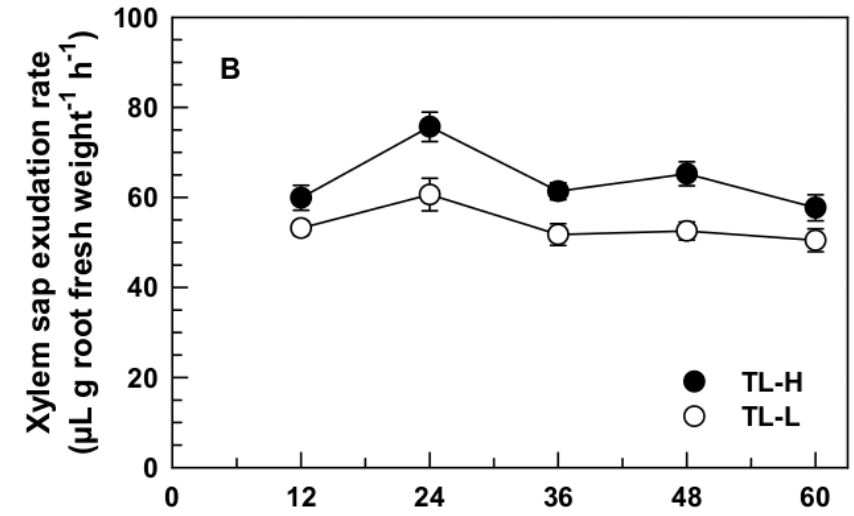
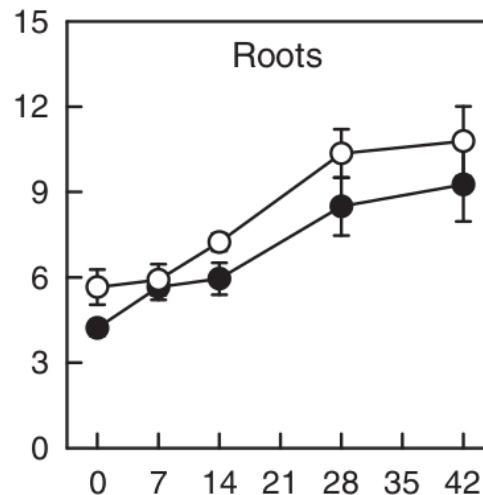
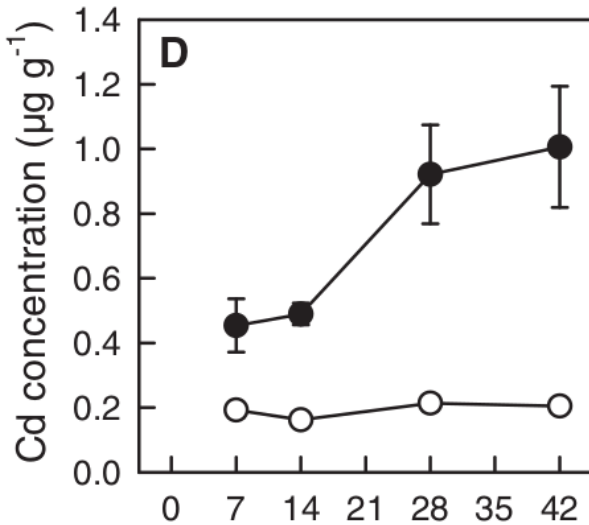
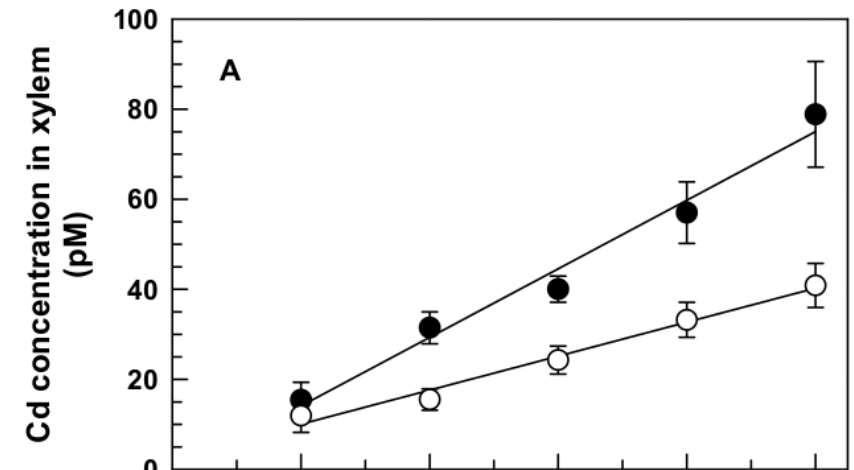
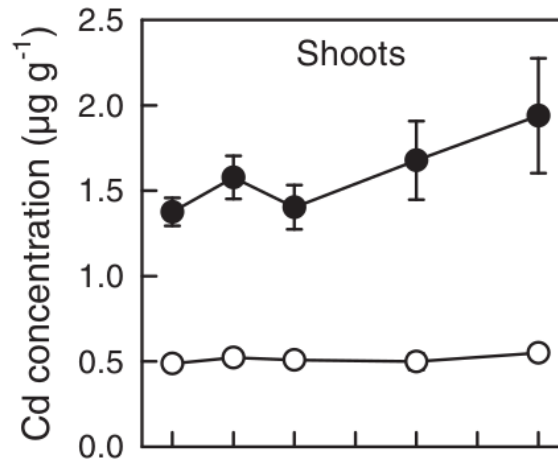
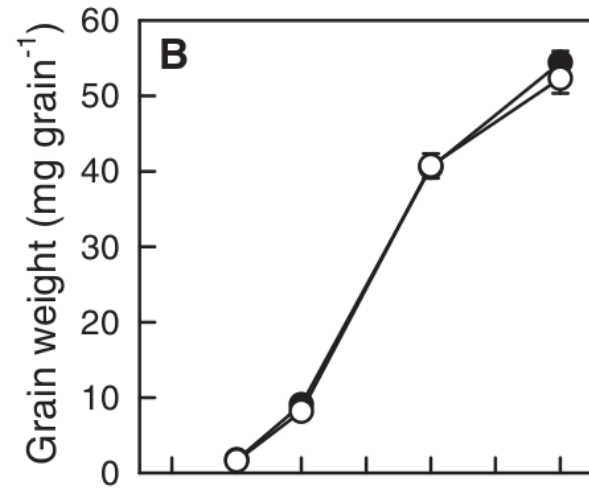
Plus forte séquestration du Cd dans les vacuoles racinaires contrôlée par l'allèle Cdu1

Harris & Taylor, 2004, 2013

Moins de Cd dans le grain sans impacter le rendement

Plus forte séquestration racinaire du Cd

Moindre concentration du Cd dans la sève brute



Days after anthesis

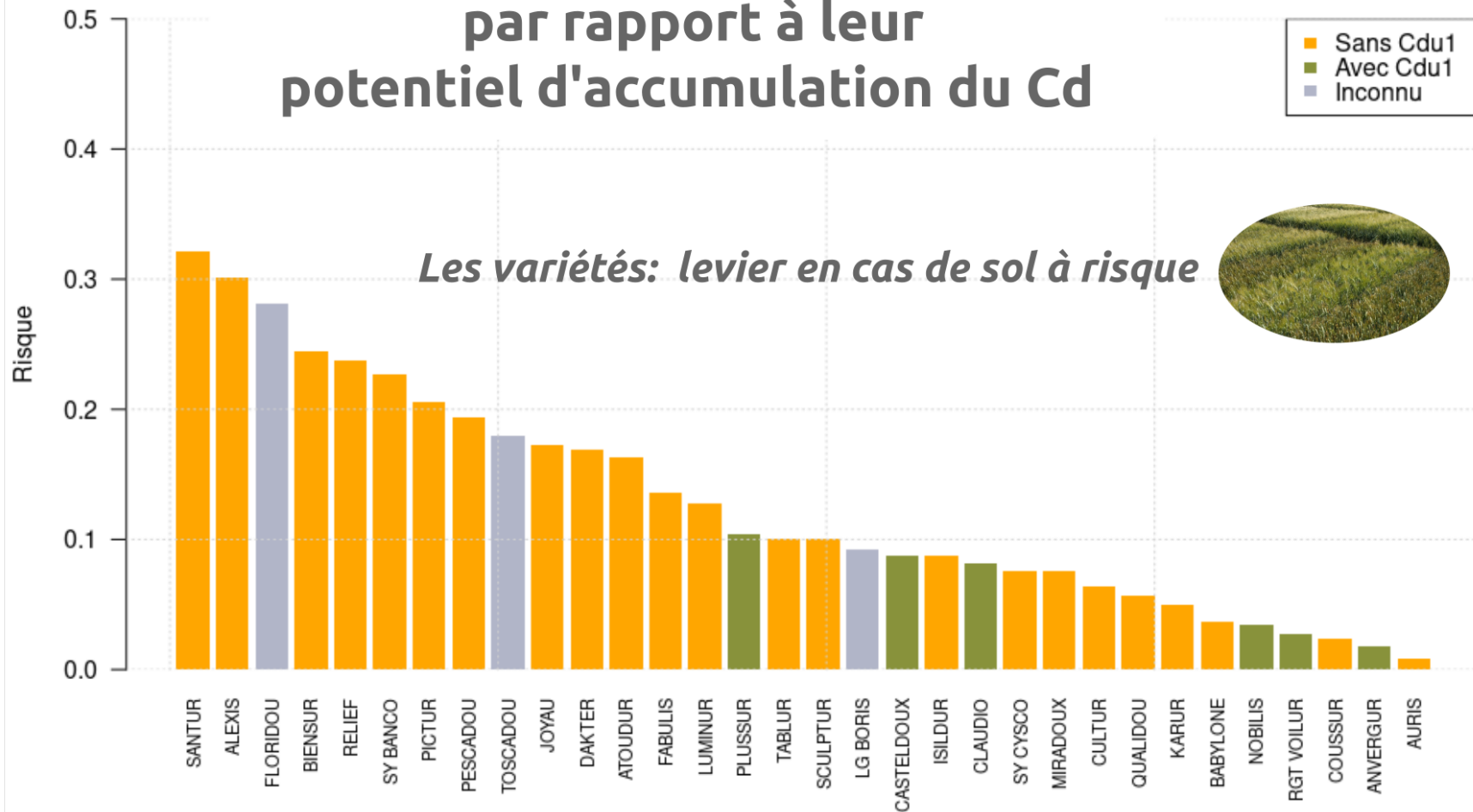
Days after anthesis

Time (h)

● TL-H
○ TL-L

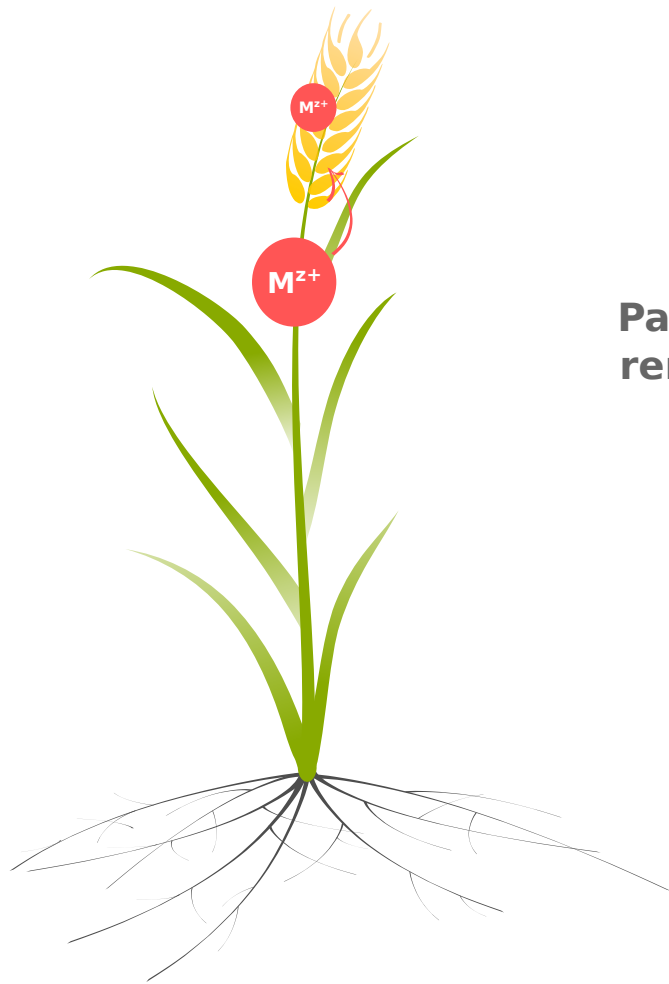
Classement des variétés de blé dur par rapport à leur potentiel d'accumulation du Cd

Bléssûr

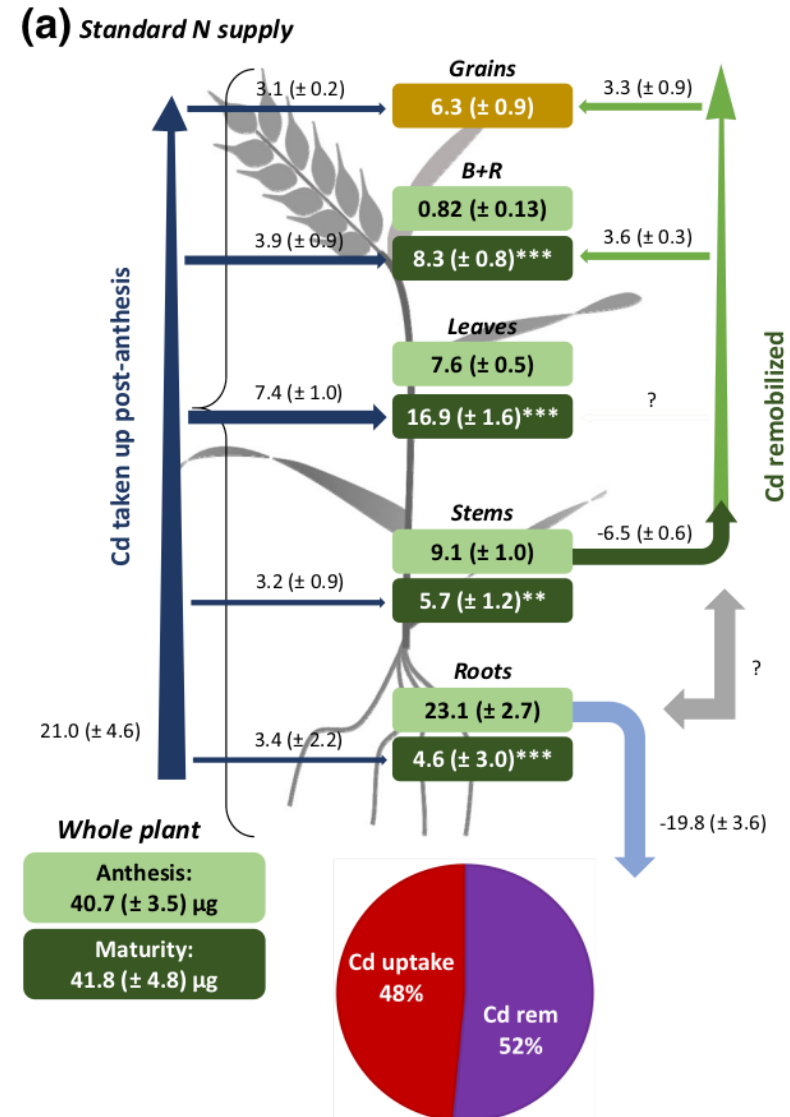


Remobilisation des ETM dans la plante

Quantification et recherche des règles de régulation





Pas de lien avec remobilisation N



Yan et al., 2018. Plant Soil

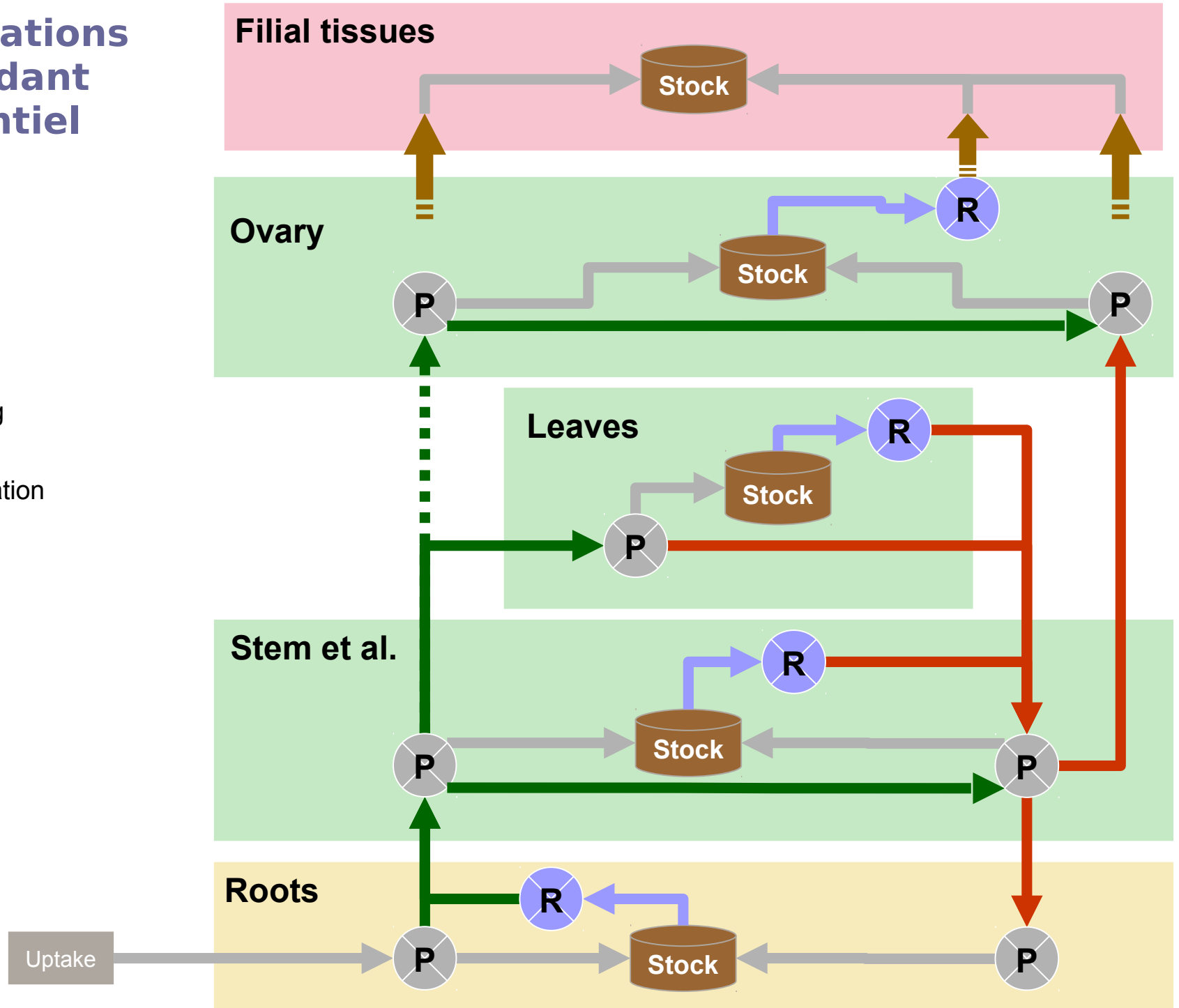
Yan et al., 2019, Ecotoxicology and Environmental Safety

Simplifications En gardant l'essentiel

-  Partitioning equations
-  Remobilisation equations

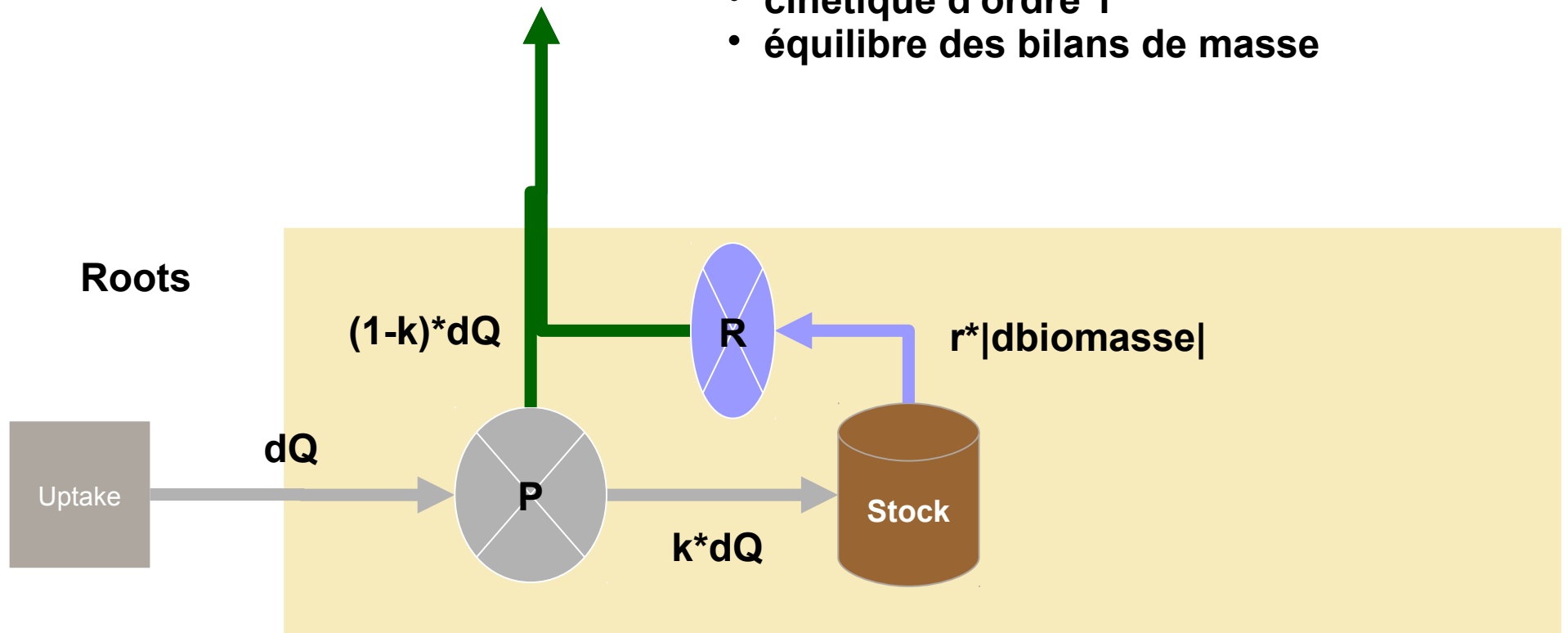
 Xylem

 Phloem



Formalisation mathématique

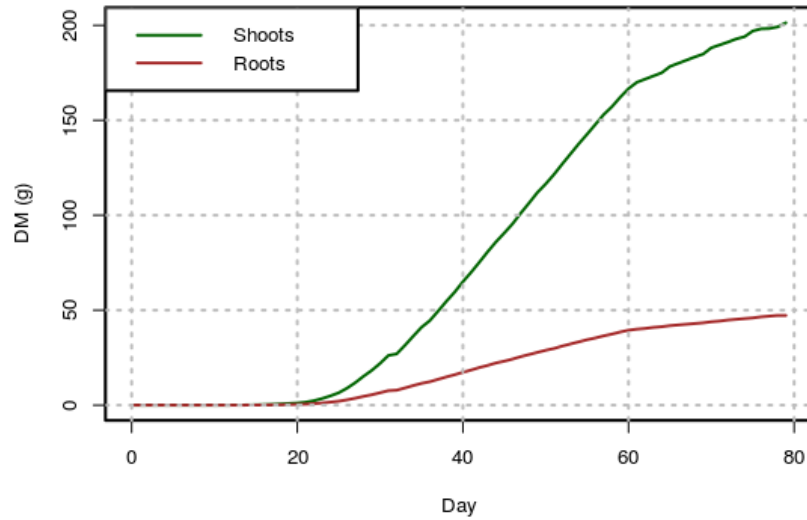
- calculs pas de temps/pas de temps
- cinétique d'ordre 1
- équilibre des bilans de masse



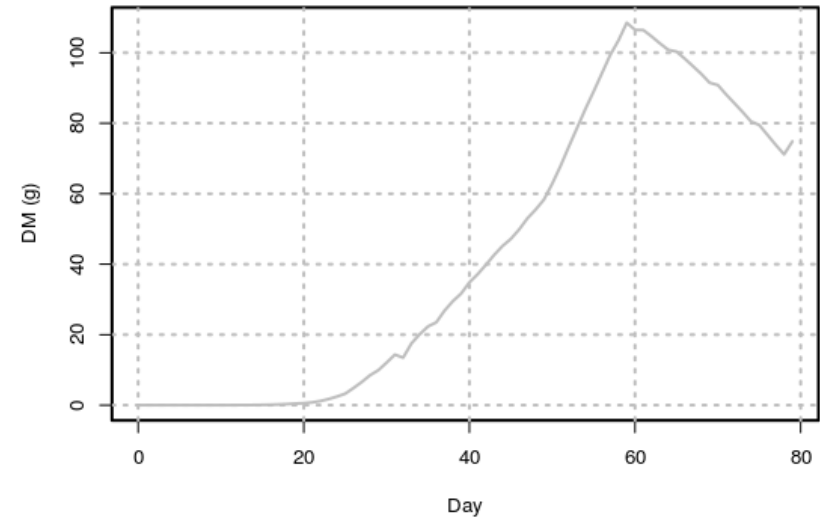
Simulation de la répartition du Cd chez le tournesol



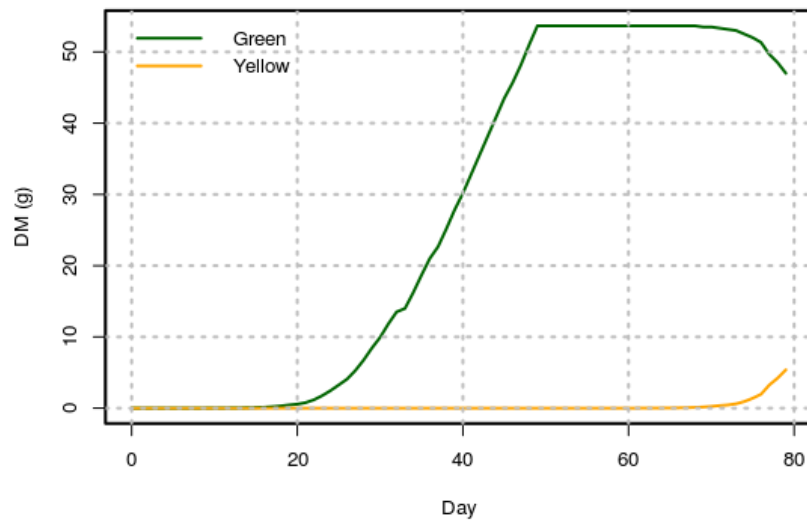
Roots + shoots



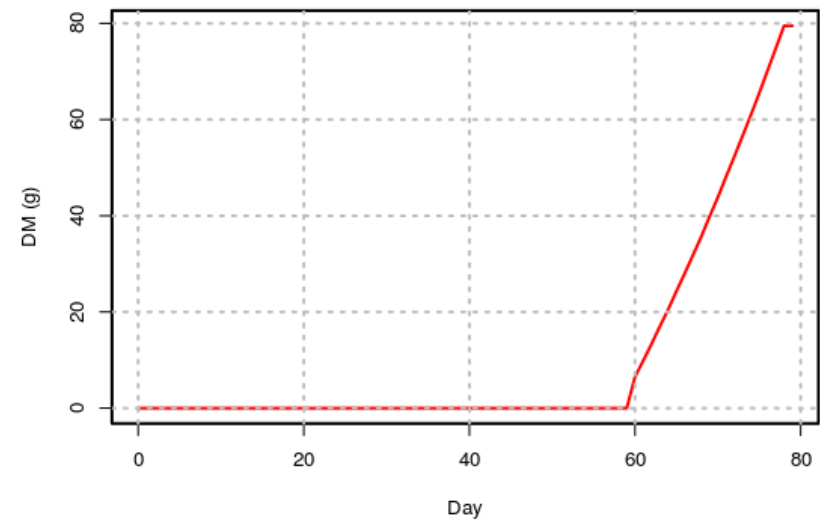
Stem+receptacle



Leaves



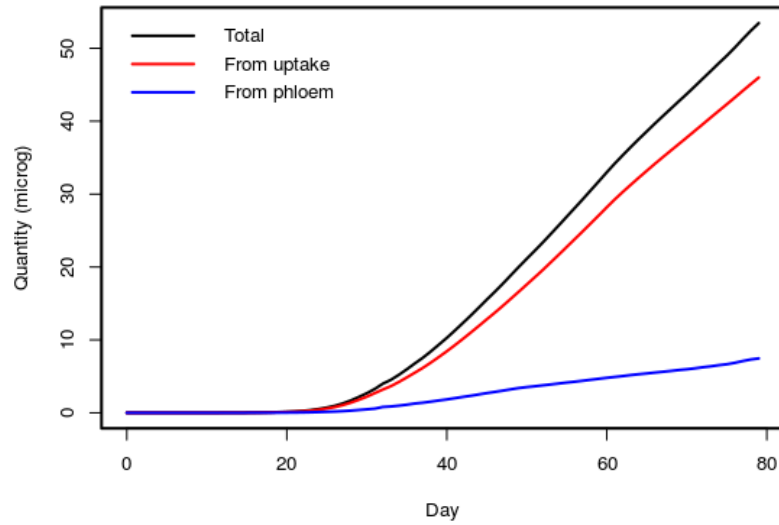
Seeds



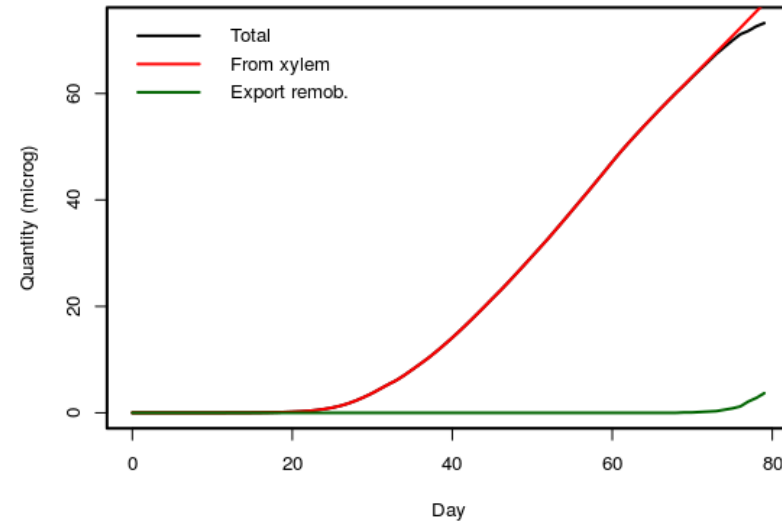
Simulation de la répartition du Cd chez le tournesol



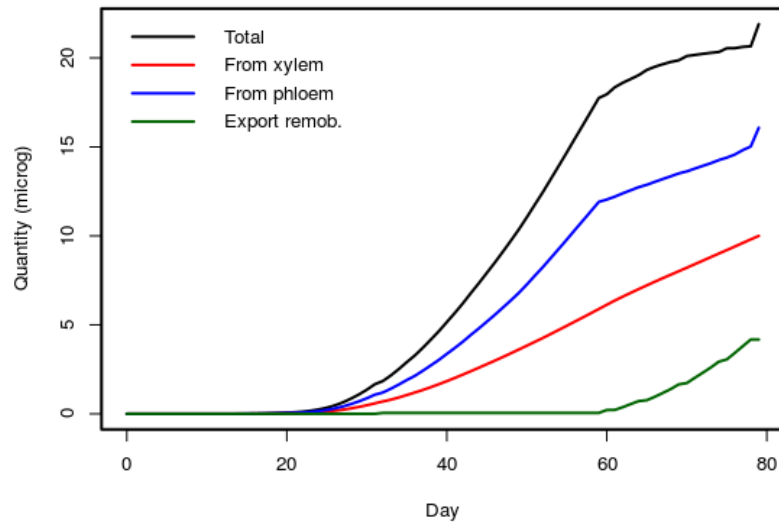
Roots



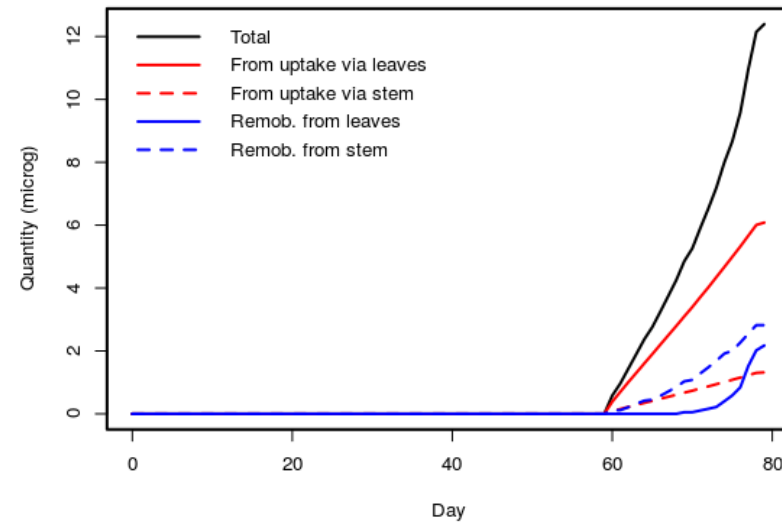
Green leaves



Stem+receptacle



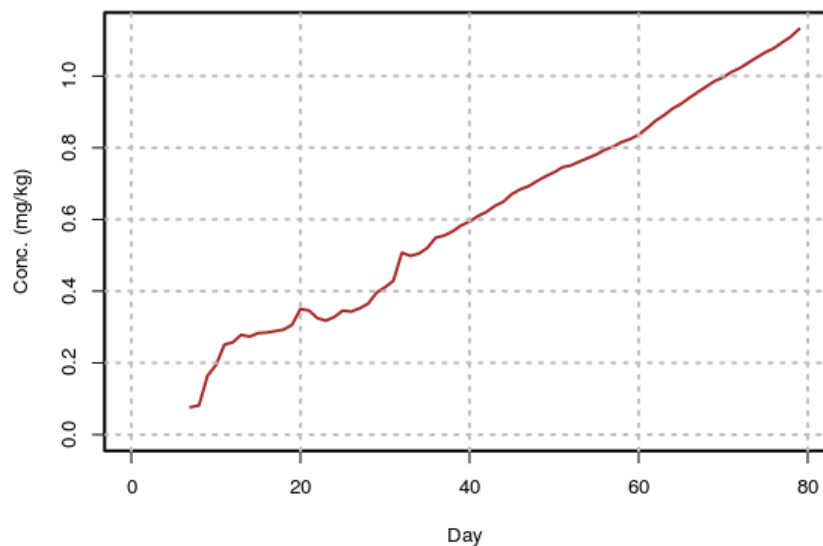
Seeds



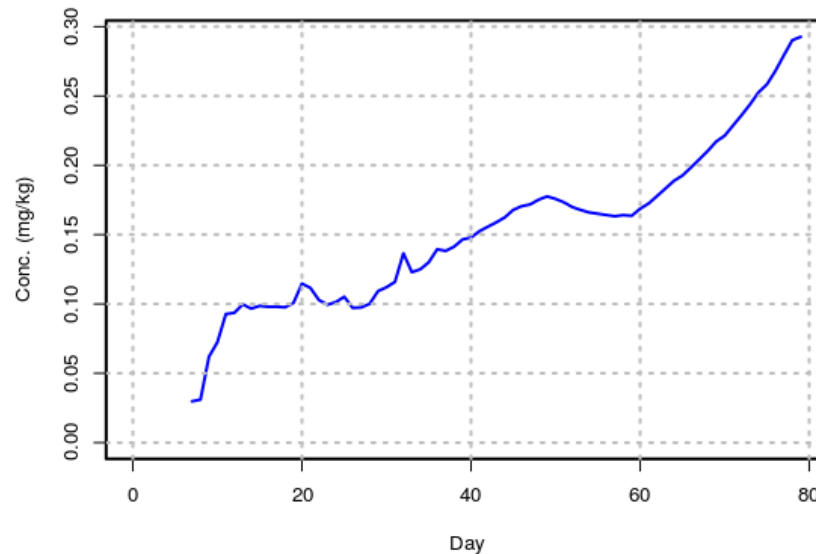
Simulation de la répartition du Cd chez le tournesol



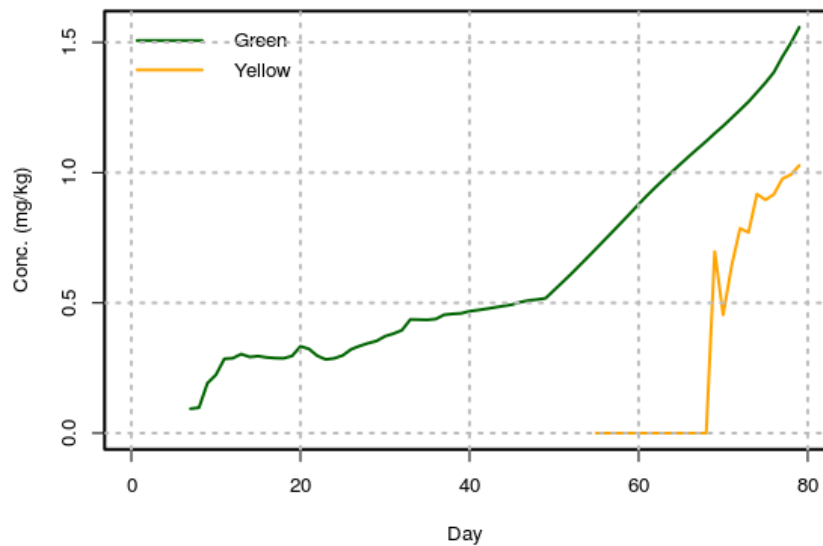
Roots



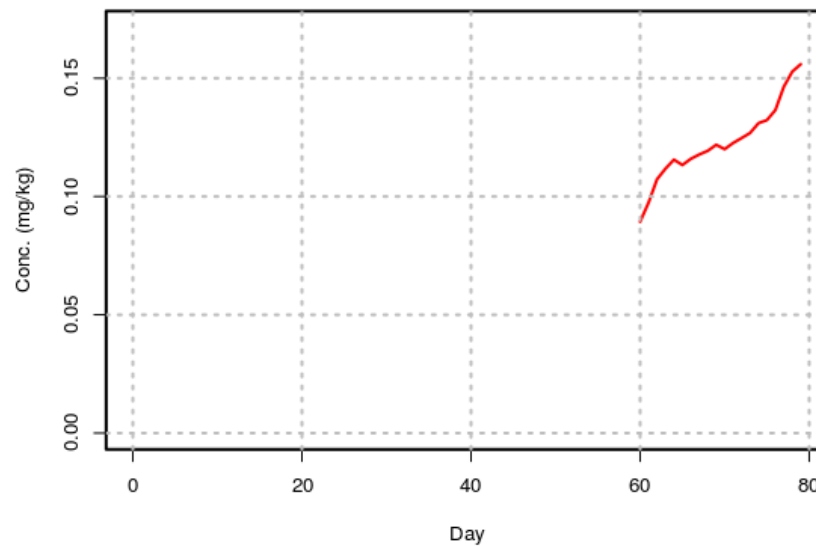
Stem+receptacle



Leaves

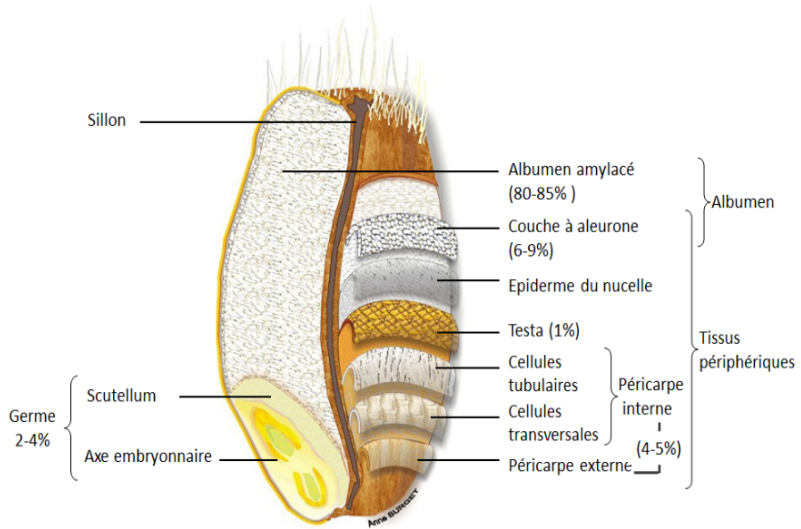


Seeds

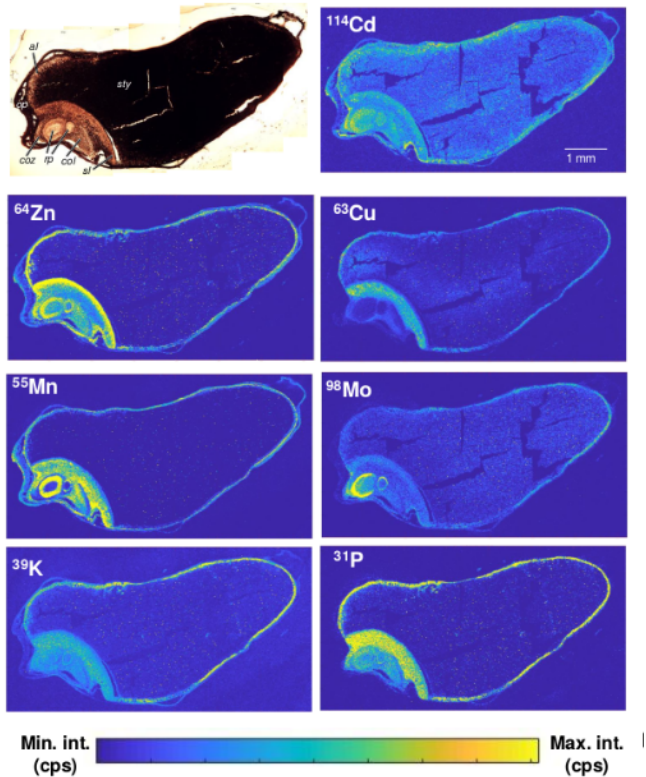


Co-Localisation des éléments dans le grain de blé dur

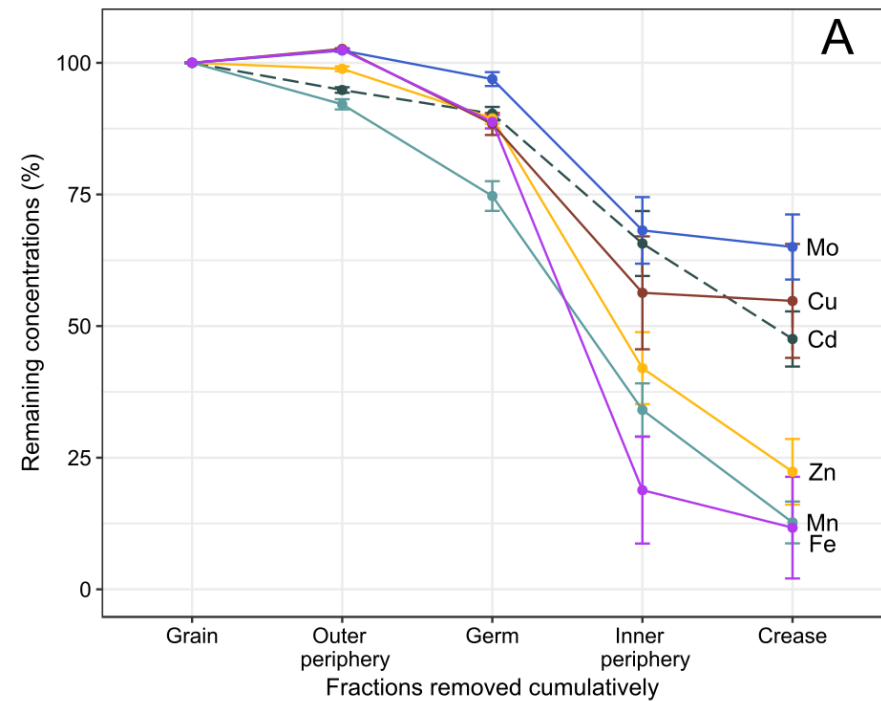
- * Compréhension des voies d'accumulation
- * Impact sur la qualité nutritive et sanitaire



Cartographie par Laser Ablation ICPMS
MP Isaure S. Mounicou, Iprem, Pau

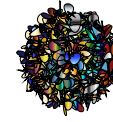


Analyse de fractions après dissection du grain



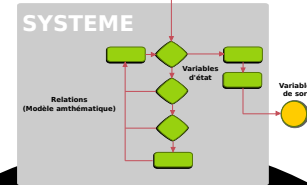
(Yan et al., 2020, *Envir. Pollut.*)

Réalité complexe



Simplification

Connaissances
+
Hypothèses



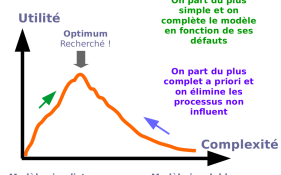
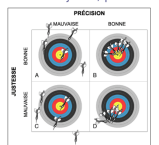
Modèle
Représentation simplifiée de la réalité
qui ne conserve que les éléments
nécessaires et suffisants
pour répondre à l'objectif

1 Définition d'un objectif



Modélisation : Complexité versus Utilité

Utilité du modèle :
Modèle juste, précis



Modèle robuste, non spécifique à un contexte

Analyse (Cohérence)



Test (Prédits versus Observations)



Paramétrage (Calibration)

$$5+a=15$$

Analyse de sensibilité

