

12^{ème} journée Cascimodot, 1^{er} juillet 2010, Tours

PEST (Parameter ESTimation) **et SENSAN (SENSitivity ANalysis)**

Logiciels de calage et d'analyse de sensibilité

B.Cheviron - bruno.cheviron@gmail.com
Université Paris VI

SENSAN et PEST

SENSAN → calcul direct

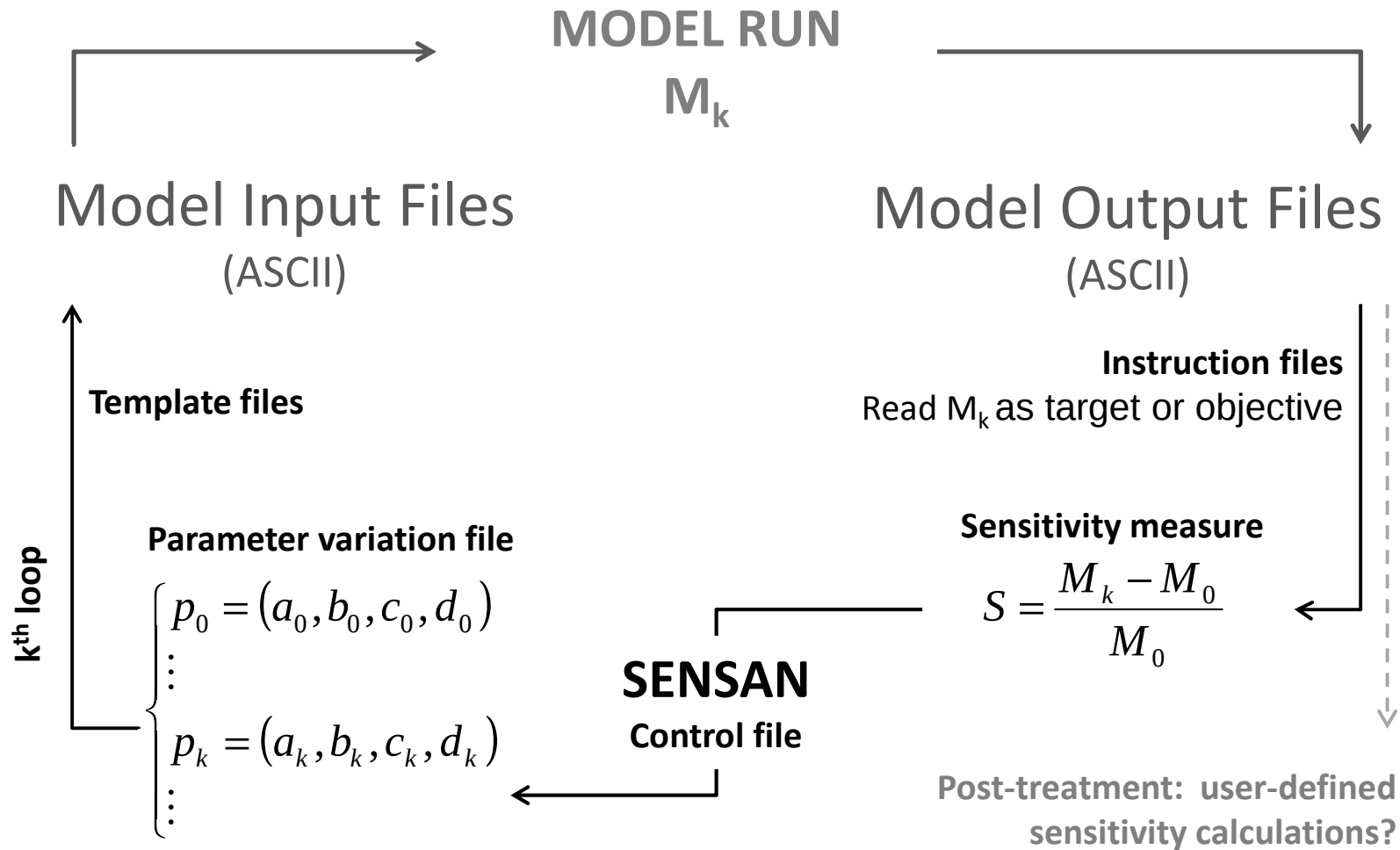
- Impose au modèle les jeux de paramètres choisis par l'utilisateur
- Enregistre les variations des sorties du modèle
- Permet les calculs de sensibilité de type var.sortie/var.entrée

PEST → calcul inverse

- L'utilisateur donne un jeu de paramètres de départ
- PEST ajuste les paramètres selon les observations disponibles
- Il s'agit de minimiser l'écart entre observations et prédictions

Manuel et addendum: Doherty (2004, 2008)

Schéma direct (SENSAN)



Exemple (1) avec SENSAN

Contamination de la nappe par un pesticide

Paramètres

$$p = (\dots, kd_s, kd_p, \dots)$$

Adsorption
en surface

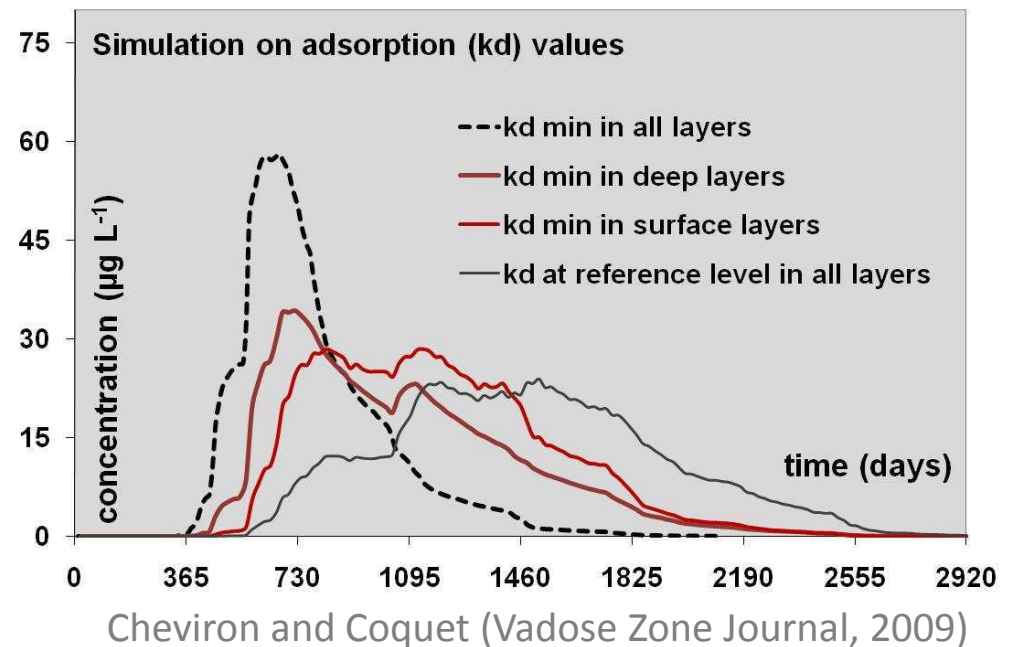
Adsorption
en profondeur

Parameter variation file

Valeurs associées aux tests des paramètres d'adsorption:

- un à la fois (kd_s ou kd_p)
- ou bien les deux à la fois (kd_s et kd_p)

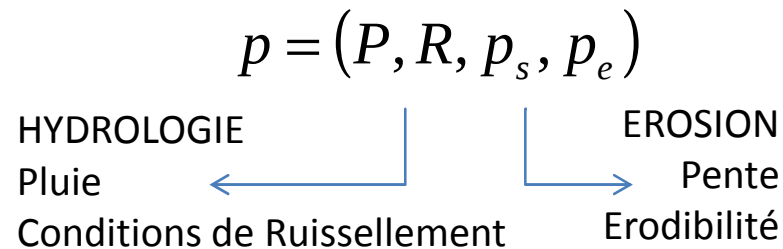
Concentration dans la nappe



Exemple (2) avec SENSAN

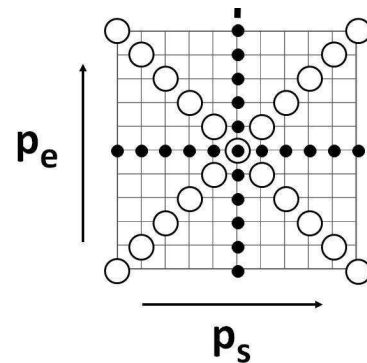
Sensibilités comparées de quatre modèles d'érosion

Paramètres

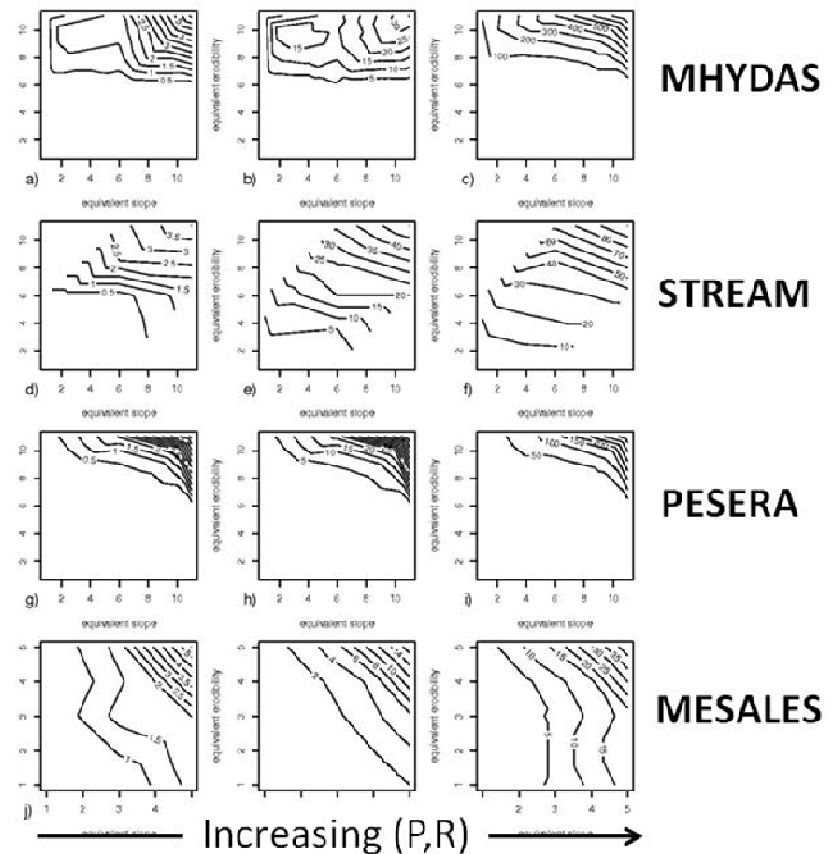


Parameter variation file

- Valeurs des paramètres associées à des trajectoires choisies dans le plan (p_s, p_e)
- Trajectoires répétées pour différentes valeurs de (P, R)

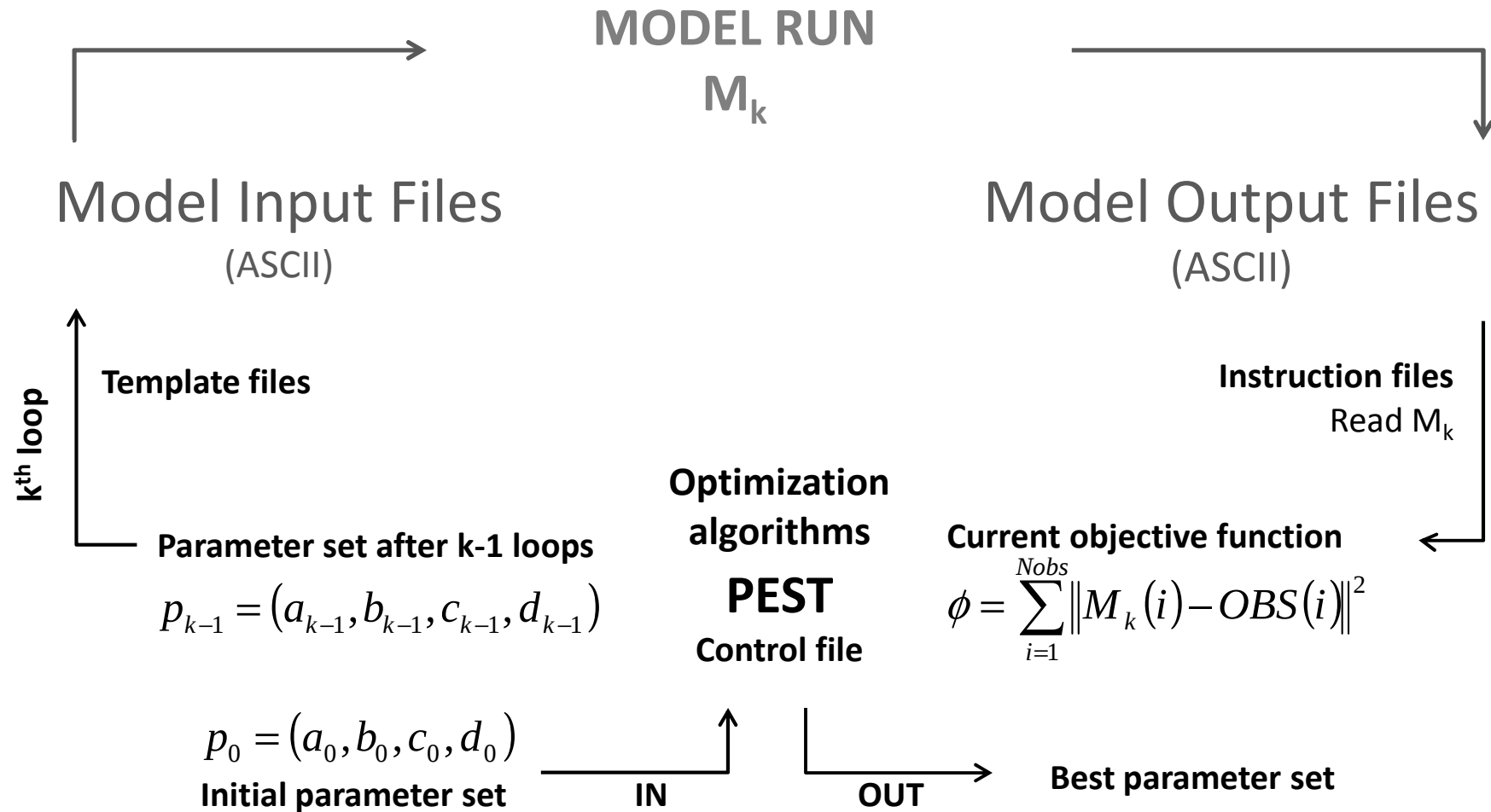


Isovaleurs de « perte en terre »



Cheviron et al. (Water Resources Research, 2010)

Schéma inverse (PEST)



Exemple avec PEST

Calage d'une loi puissance entre débit et concentration

Relation à caler

$c = aQ^b$

↓ ↘
Concentration Débit de la
en sédiments rivière

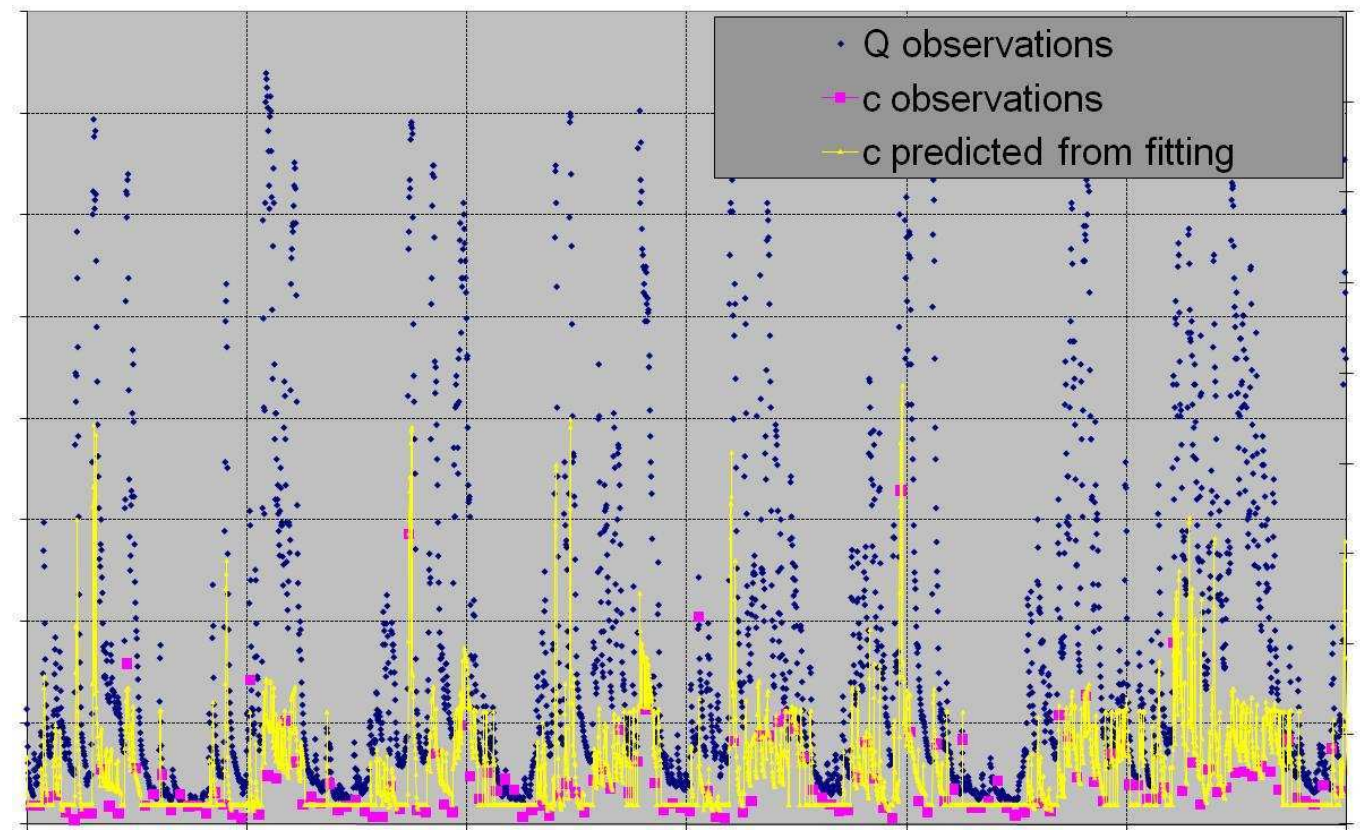
Paramètres

a: préfacteur

b: exposant

Observations

Une série de mesures de Q et de c sur une longue période, à intervalles irréguliers



Delmas et al. (Hydrological Processes, 2010, *submitted*)

La fonction objectif ϕ

Lien formel entre problème direct et problème inverse

FORME GENERALE DE ϕ

Souvent scalaire
mais peut être
vectorielle

$$\phi = \int_{t_0}^{t_f} F(p, X(p), t) dt$$

Vecteur des paramètres

Vecteur des variables d'état

ANALYSE : **SENSAN**

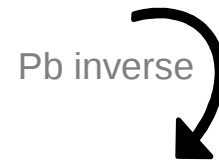
ϕ est du type « PREDICTION »

Analyse de sensibilité
Analyse d'incertitude
*Etudier l'influence des
modifications de p*



CONTRÔLE/OPTIMISATION : **PEST**

ϕ est du type « FONCTION COUT »

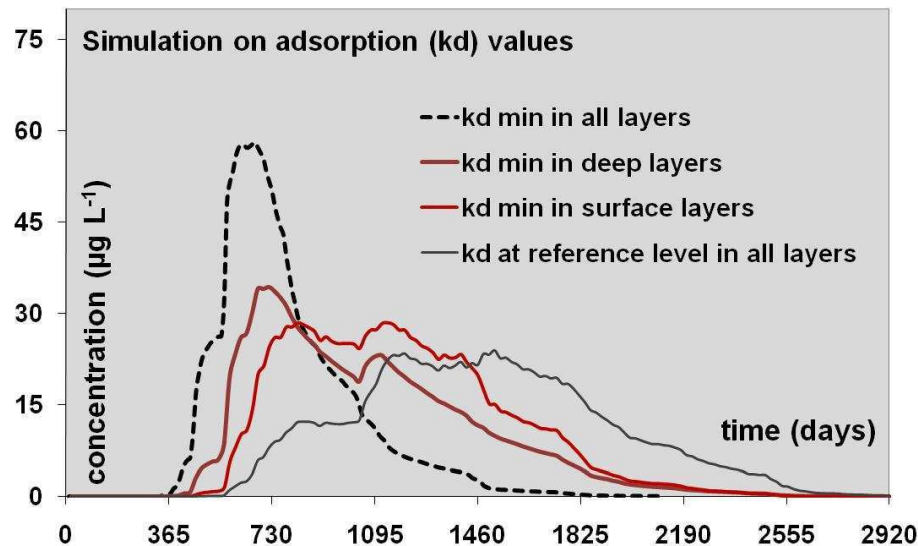


Estimation de paramètres
Assimilation de données
*Chercher l'optimum de p pour
des contraintes données*

Point-clefs

- 1/ Définition ad hoc de ϕ par l'utilisateur**
- 2/ Calcul des variations de ϕ avec p**

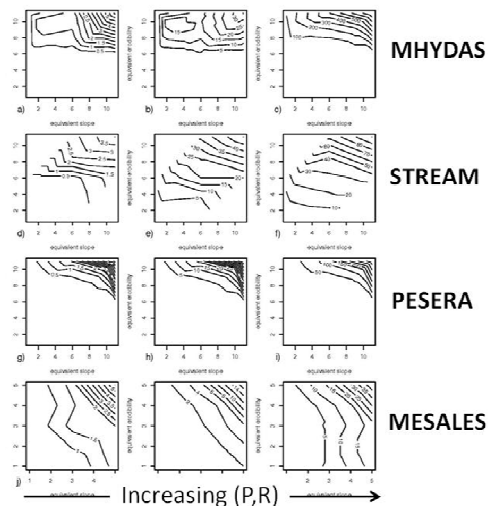
Fonctions ϕ *ad hoc* pour SENSAN



Dans l'analyse, ϕ a intégré la concentration au pic et le maximum en moyenne glissante annuelle



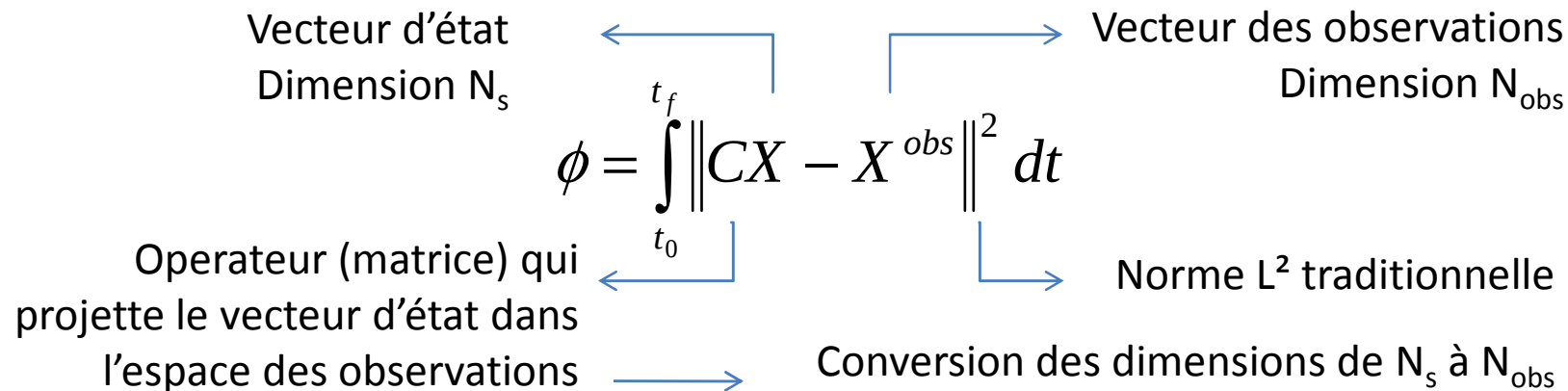
La définition de ϕ a intégré les éléments jugés pertinents pour décrire la sensibilité du modèle



Dans cet exemple, c'est la perte en sol cumulée qui a été retenue comme cible de l'analyse, pas son évolution dans le temps.

Fonctions ϕ ad hoc pour PEST

FORME CLASSIQUE DE ϕ



Selon le contexte...

$$\phi = \int_{t_0}^{t_f} \|CX(p, t) - X^{obs}(t)\|^2 dt$$

Observations continues en temps
à N_{obs} points dans le domaine

$$\phi = \sum_{i=0}^N \|CX(p, t_i^{obs}) - X^{obs}\|^2$$

N_{obs} observations disponibles
à N instants dans le domaine

↳ Inclure C.L. et C.I. dans les paramètres:
assimilation de données et contrôle optimal des systèmes
(éventuellement avec un terme additif dans ϕ)

Calcul des variations de ϕ avec p

Petit aperçu des algorithmes d'optimisation de PEST

Variations représentées par le gradient de ϕ

Gradient $\leftarrow$

$$\nabla \phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial \phi}{\partial p_k}, \dots, \frac{\partial \phi}{\partial p_{N_p}} \right)$$

Dérivée partielle par rapport à p_k $\leftarrow$ $\frac{\partial \phi}{\partial p_k}$

Le vecteur a N_p composantes, autant que de paramètres dans le problème $\leftarrow$ $\frac{\partial \phi}{\partial p_{N_p}}$

Gradient estimé par la méthode des perturbations

Pour la $k^{\text{ième}}$ composante $\leftarrow$

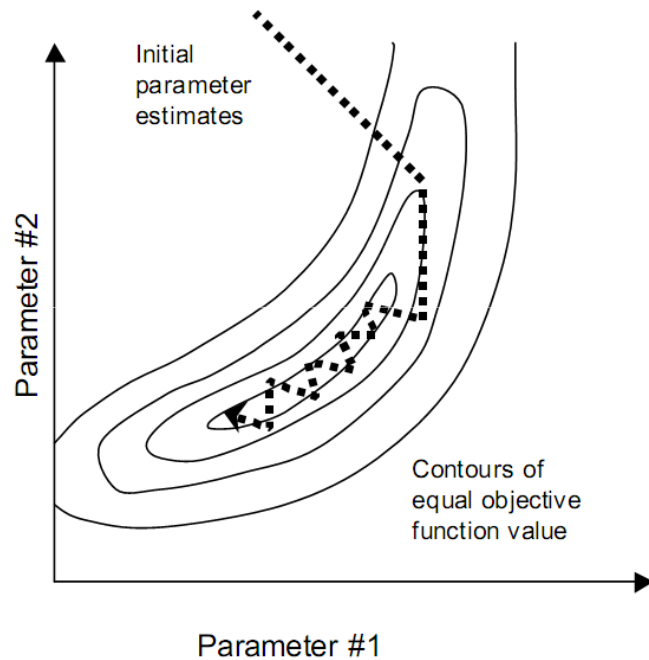
$$\left[\frac{\partial \phi}{\partial p_k} \right] \approx \frac{\phi(p_1, \dots, p_k + \varepsilon, \dots, p_{N_p}) - \phi(p)}{\varepsilon}$$

Perturbation, choix crucial:
 ε trop grand brise l'hypothèse de linéarité
 ε trop petit conduit à des erreurs d'arrondi $\leftarrow$ ε

Ordre 1, DF progressive, mais PEST s'adapte tout seul du schéma centré à 3 pts au progressif à 2 pts $\leftarrow$

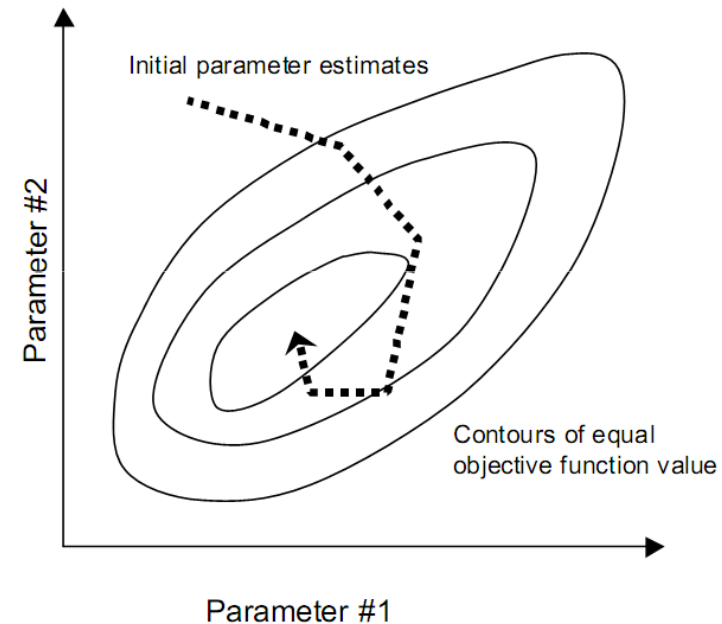
Convergence vers le minimum de ϕ

Le risque avec les algorithmes de descente de gradient



Descente de gradient → trajectoire orthogonale aux isovaleurs de ϕ et amplitude de l'ajustement non contrôlée → « sauts » autour de la solution

PEST : algorithmes de Marquardt-Levenberg



PEST agit sur la direction de la descente et sur l'amplitude des ajustements, ces réglages étant contrôlables par l'utilisateur.