

12<sup>ème</sup> journée Cascimodot, 1<sup>er</sup> juillet 2010, Tours

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

Logiciels de calage et d'analyse de sensibilité

B.Cheviron - [bruno.cheviron@gmail.com](mailto:bruno.cheviron@gmail.com)  
Université Paris VI

# SENSAN et PEST

## SENSAN → calcul direct

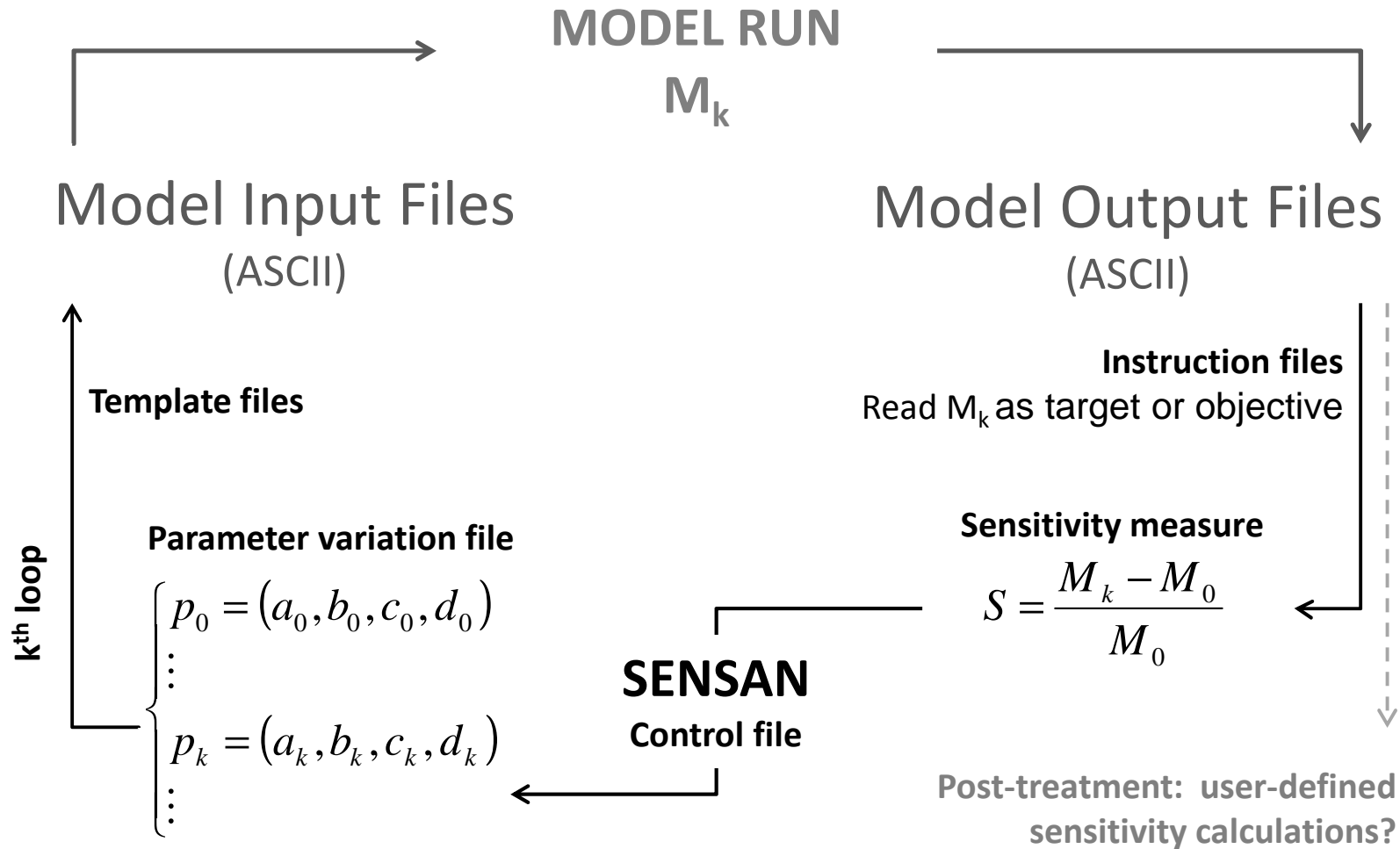
- Impose au modèle les jeux de paramètres choisis par l'utilisateur
- Enregistre les variations des sorties du modèle
- Permet les calculs de sensibilité de type var.sortie/var.entrée

## 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

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

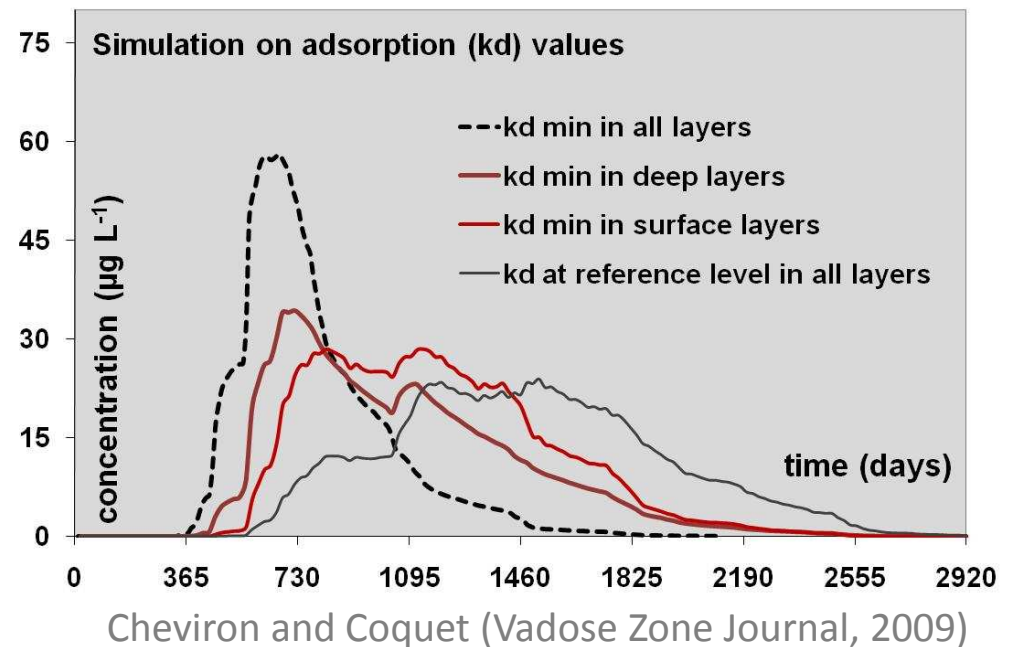
Adsorption en surface ←      → Adsorption en profondeur

### 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

$$p = (P, R, p_s, p_e)$$

HYDROLOGIE

Pluie

Conditions de Ruissellement

EROSION

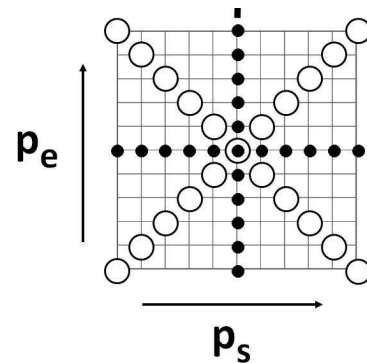
Pente

Erodibilité

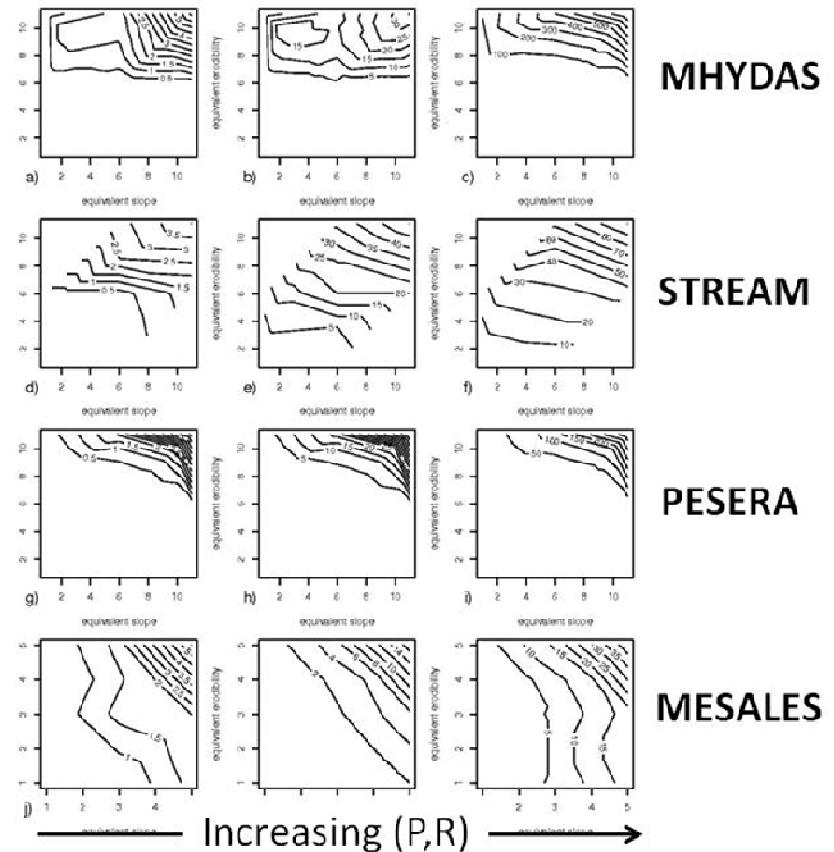
## Parameter variation file

➤ Valeurs des paramètres associées à des trajectoires choisies dans le plan ( $p_s, p_e$ )

➤ Trajectoires répétées pour différentes valeurs de (P,R)

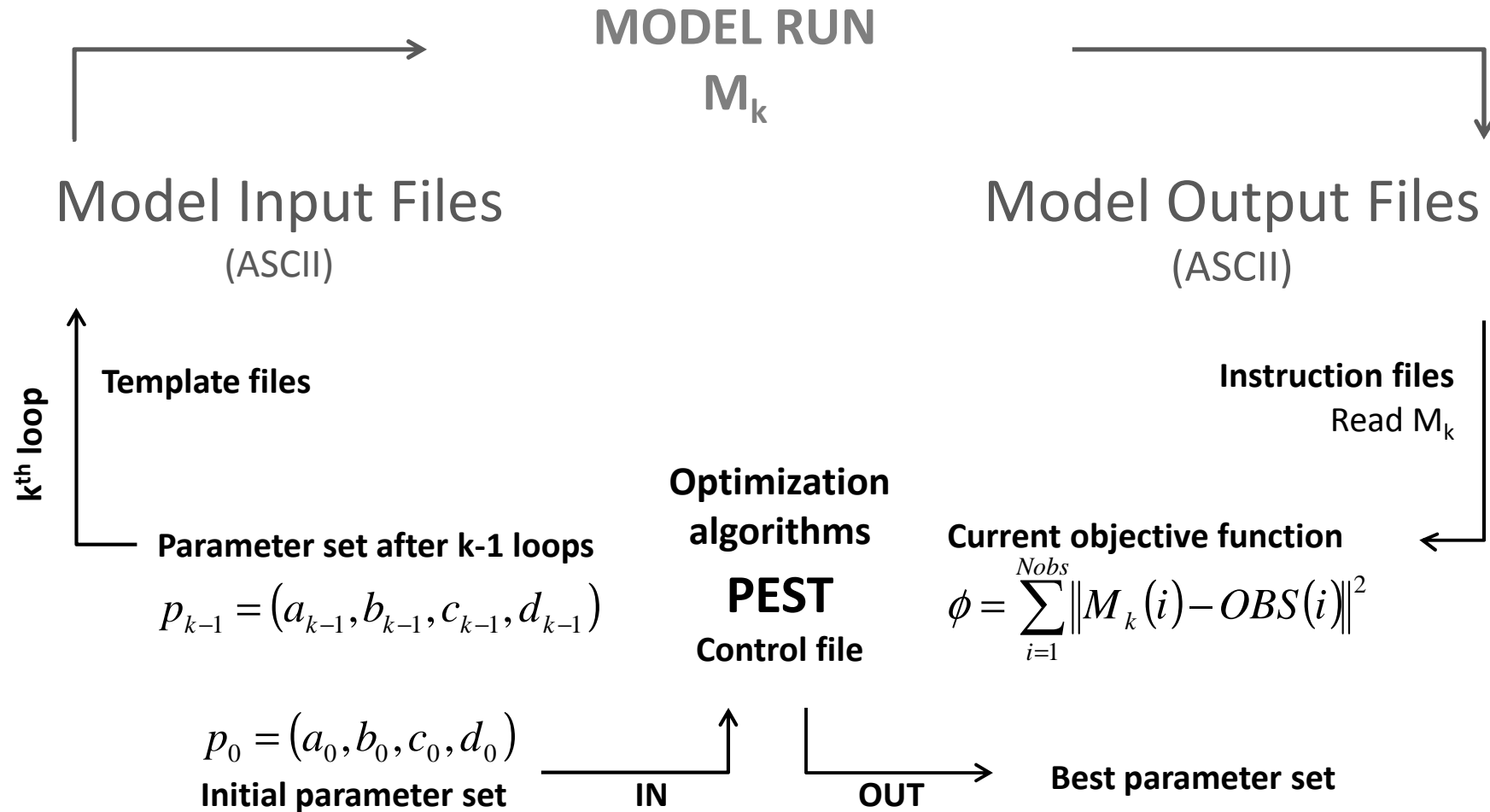


## Isovaleurs de « perte en terre »



Chevron et al. (Water Resources Research, 2010)

# Schéma inverse (PEST)



# Exemple avec PEST

Calage d'une loi puissance entre débit et concentration

## Relation à caler

$c = aQ^b$

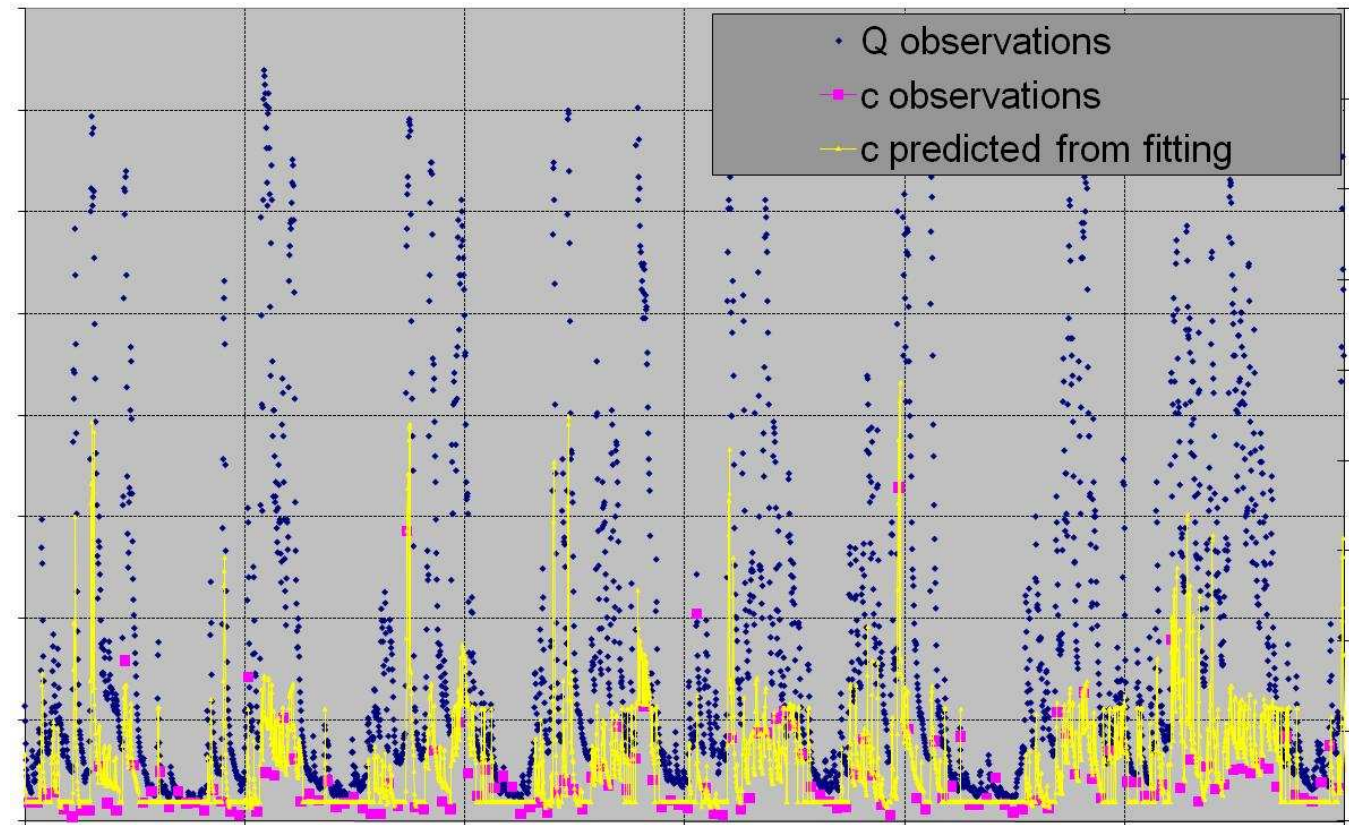
↓ Débit de la  
Concentration rivière  
en sédiments

## 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 $\phi$

Lien formel entre problème direct et problème inverse

## **FORME GENERALE DE $\phi$**

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**

**$\phi$  est du type « PREDICTION »**

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



## CONTRÔLE/OPTIMISATION : **PEST**

**$\phi$  est du type « FONCTION COUT »**

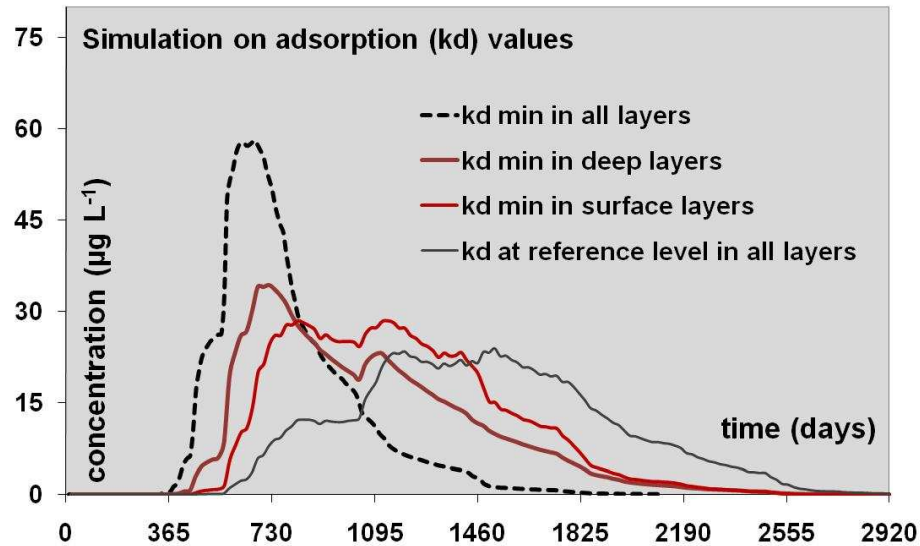
Estimation de paramètres  
Assimilation de données  
*Chercher l'optimum de  $p$  pour  
des contraintes données*



Point-clefs

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

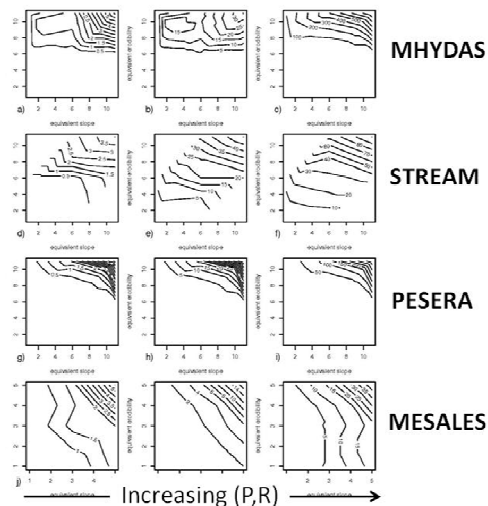
# Fonctions $\phi$ ad hoc pour SENSAN



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



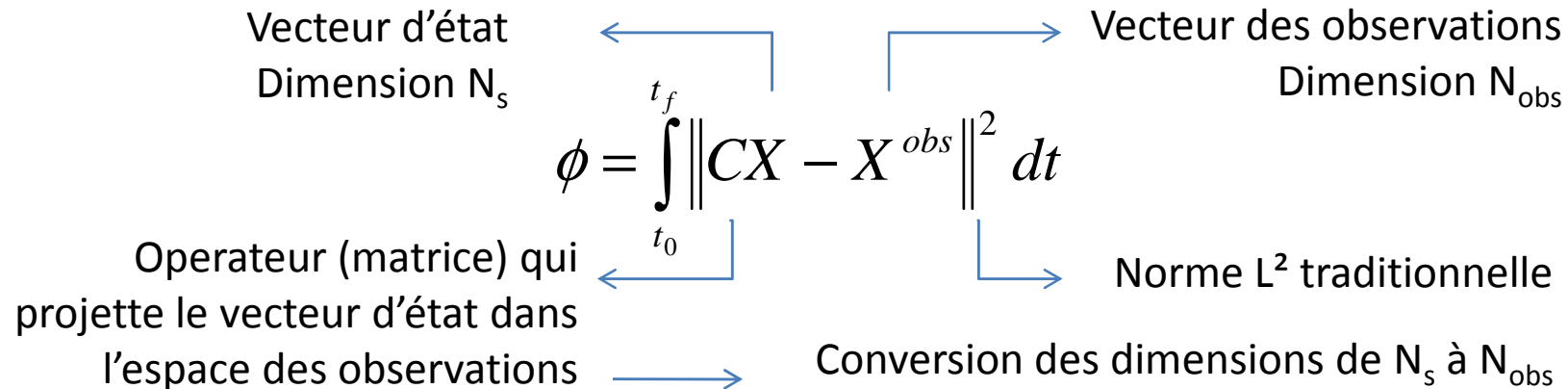
La définition de  $\phi$  a intégré les éléments jugés pertinents pour décrire la sensibilité du modèle



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 $\phi$ ad hoc pour PEST

## FORME CLASSIQUE DE $\phi$



## 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

Incline C.L. et C.I. dans les paramètres:  
 assimilation de données et contrôle optimal des systèmes  
 (éventuellement avec un terme additif dans  $\phi$ )

# Calcul des variations de $\phi$ avec $p$

Petit aperçu des algorithmes d'optimisation de PEST

## ***Variations représentées par le gradient de $\phi$***

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  $p_k$   $\leftarrow$

Le vecteur a  $N_p$  composantes, autant que de paramètres dans le problème  $\leftarrow$

## ***Gradient estimé par la méthode des perturbations***

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

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

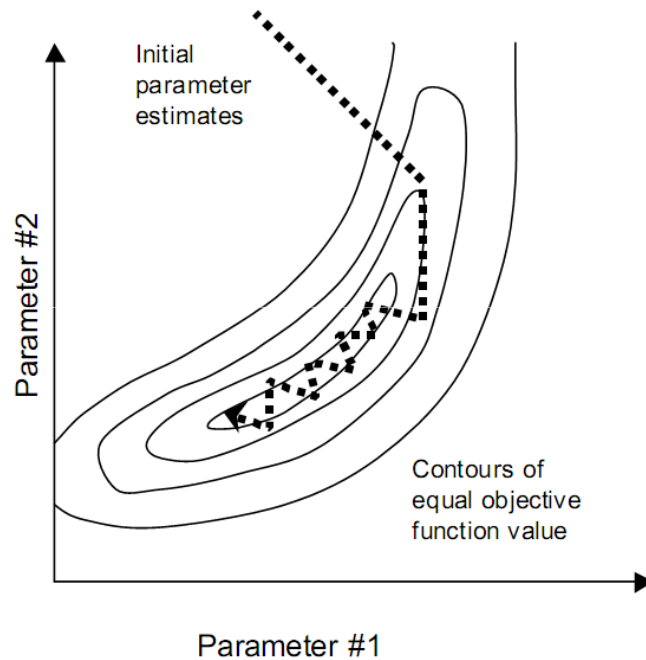
Perturbation, choix crucial:  $\leftarrow$

$\varepsilon$  trop grand brise l'hypothèse de linéarité  
 $\varepsilon$  trop petit conduit à des erreurs d'arrondi

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

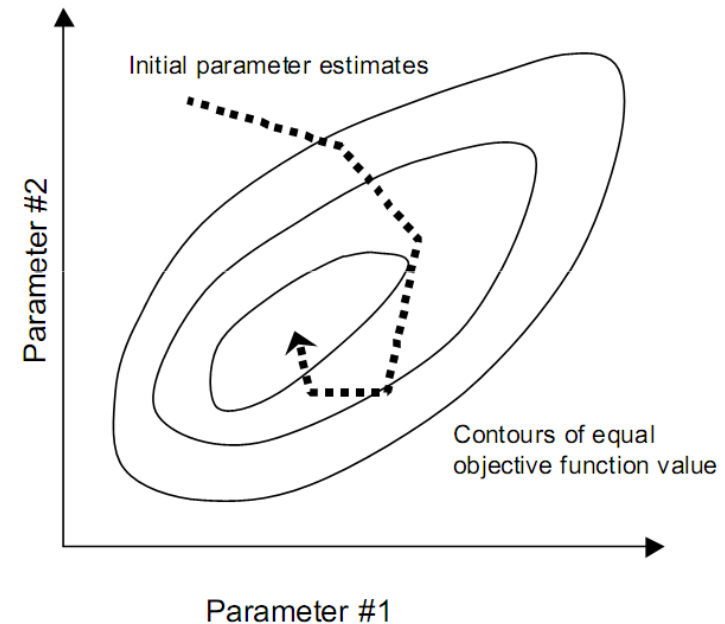
# Convergence vers le minimum de $\phi$

***Le risque avec les algorithmes de descente de gradient***



Descente de gradient → trajectoire orthogonale aux isovaleurs de  $\phi$  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.