Annexe A

Résultats de la procédure d'optimisation des paramètres

A la fin du processus d'optimisation des paramètres, le logiciel PEST enregistre plusieurs résultats dans un fichier consultable, qui reprend non seulement la fonction objectif minimum et les valeurs des paramètres optimisés, mais aussi les intervalles de confiance à 95% correspondant à chacun de ces paramètres, la matrice de covariance des paramètres estimés, la matrice des coefficients de corrélation entre paramètres et les valeurs et vecteurs propres associés, qui permettent de déceler d'éventuelles corrélations entre les paramètres estimés.

A.1 Matrice de covariance des paramètres

La matrice de covariance des paramètres à estimer est une matrice symétrique carrée (n x n) ayant autant de lignes (et de colonnes) que de paramètres à estimer. Ses éléments diagonaux sont les variances des paramètres correspondants. Les éléments non-diagonaux sont les covariances entre chaque paire de paramètres.

$$\underline{\underline{C}}(\underline{b}) = \sigma^2 \, (\underline{\underline{J}}^T \underline{\underline{Q}} \, \underline{\underline{J}})^{-1} \qquad \text{avec } \sigma^2 = \frac{\Phi}{m-n} \tag{A.1}$$

La matrice de covariance sert de base au calcul de la matrice des coefficients de corrélation, des vecteurs et valeurs propres de la matrice de covariance. En effet, il n'est pas aisé de déceler des corrélations entre paramètres à l'aide de cette matrice.

A.2 Matrice des coefficients de corrélation

La matrice des coefficients de corrélation est une matrice symétrique carrée (n x n) dont les éléments, dérivés de la matrice de covariance, s'écrivent :

$$\rho_{ij} = \frac{\sigma_{ij}}{\sqrt{\sigma_{ii}\sigma_{jj}}} \tag{A.2}$$

avec σ_{ij}, l'élément de la $i^{\text{ème}}$ ligne et $j^{\text{ème}}$ colonne de la matrice de covariance des paramètres.

Les éléments diagonaux ρ_{ii} sont toujours égaux à l'unité, les autres ρ_{ij} varient entre –1 et 1. Plus la valeur de ces éléments non-diagonaux se rapproche de ces extrêmes, plus les paramètres respectifs sont corrélés. Il est généralement admis que des valeurs inférieures à –0,95 ou supérieures à 0,95 indiquent une forte corrélation entre les paramètres considérés.

A.3 Valeurs et vecteurs propres

Une deuxième matrice intéressante pour évaluer la corrélation entre paramètres est la matrice dont les colonnes sont formées par les vecteurs propres normés de la matrice de covariance $\underline{\underline{C}}(\underline{b})$. Lorsque chaque vecteur propre est dominé par un seul élément, les paramètres sont relativement bien estimés par le processus d'optimisation. Cependant, si plusieurs éléments dominent un vecteur propre (en particulier pour les vecteurs propres dont les valeurs propres sont grands), les paramètres correspondants sont fortement corrélés entre-eux. Plus la valeur propre correspondant au vecteur propre dont la dominance est partagée par plus d'un élément est grande, moins la valeur des paramètres individuels respectifs déterminés par l'estimation est fiable.

A.4 Intervalle de confiance à 95%(*)

L'intervalle de confiance à 95% fourni un moyen utile de détermination de la certitude avec laquelle les différentes valeurs de paramètres sont estimées.

- Si le modèle contient trop peu de paramètres pour simuler un système particulier avec précision, la fonction objectif sera grande. Par l'équation (A.1), les éléments de la matrice de covariance des paramètres seront également élevés, ce qui induira d'importants intervalles de confiance des paramètres.
- Inversement, si le modèle contient trop de paramètres, la fonction objectif sera plus faible mais le nombre insuffisant d'observations induira alors de fortes corrélations entre ces paramètres, provoquant une augmentation de la valeur de la covariance pour les paramètres corrélés et donc de larges intervalles de confiance.

Un paramètre est déterminé de façon d'autant plus précise qu'il a une forte influence sur la valeur de la fonction objectif. La détermination de l'intervalle de confiance est basée sur l'approximation linéaire (équation 2.5) et dépend directement de la valeur des éléments de la matrice de covariance des paramètres. De plus, cet intervalle dépend fortement des hypothèses faites sur la répartition des zones de conductivité hydraulique : la conductivité hydraulique d'une zone libre de points de mesure ne pourra être déterminée avec la même précision que celle d'une zone contenant un ou plusieurs points d'observation.

(*) Cet intervalle de confiance se rapporte à la probabilité qu'a une valeur de conductivité hydraulique, déterminée par l'algorithme, d'être effectivement celle qui minimise Φ. Il ne faut absolument pas le confondre avec un intervalle de confiance se rapportant à la conductivité hydraulique réelle de l'aquifère.