HAL
open science

Assimilation variationnelle d'observations de télédétection dans les modèles de fonctionnement de la végétation : utilisation du modèle adjoint et prise en compte de contraintes spatiales

Claire Lauvernet

To cite this version:

Claire Lauvernet. Assimilation variationnelle d'observations de télédétection dans les modèles de fonctionnement de la végétation : utilisation du modèle adjoint et prise en compte de contraintes spatiales. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 2005. Français. NNT : . tel-00010443

HAL Id: tel-00010443

https://theses.hal.science/tel-00010443

Submitted on 6 Oct 2005

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.

THÈSE

présentée par

Claire Lauvernet

pour obtenir le titre de

DOCTEUR de l'UNIVERSITÉ JOSEPH FOURIER - GRENOBLE I

(Arrêtés ministériels du 5 Juillet 1984 et du 30 Mars 1992)

Spécialité : Mathématiques Appliquées

Assimilation variationnelle d'observations de télédétection dans les modèles de fonctionnement de la végétation : utilisation du modèle adjoint et prise en compte de contraintes spatiales.

Date de soutenance : 25 avril 2005

Composition du jury :

Laurent Hascoët	INRIA - TROPICS	Président
Isabelle Herlin	INRIA - CLIME	Rapporteur
Robert Faivre	INRA - BIA	Rapporteur
Stéphane Jacquemoud	Université Paris 7 - LED	Examinateur
François-Xavier Le Dimet	Université Joseph Fourier - LMC	Directeur de thèse
Frédéric Baret	INRA - CSE	Directeur de thèse

Thèse préparée au sein du Laboratoire de Modélisation et Calcul (IMAG - projet IDOPT) et de l'Unité Climat, Sol et Environnement (INRA - projet ADAM)

Remerciements

Si une thèse porte la signature d'un seul chercheur qui la soutient, j'ai pu découvrir à l'INRA d'Avignon et au LMC de Grenoble que mener à bien un tel travail n'était possible que grâce à l'aide de directeurs de thèse, d'équipes de chercheurs et grâce à un environnement favorable, ce qui a constitué pour moi une révélation relativement inattendue. En outre, je mesure aujourd'hui combien la qualité de l'encadrement et la richesse de l'environnement dont j'ai bénéficié ont été exceptionnelles. C'est pourquoi il est important pour moi de pouvoir adresser mes sincères remerciements à toutes les personnes qui m'ont aidées à soutenir cette thèse, que ce soutien soit de nature professionnelle ou amicale, qu'il soit régulier ou occasionnel, de près ou de loin, sans parfois même qu'elle s'en soient rendues compte.

∴

Merci d'abord à mes deux directeurs de thèse qui m'ont encadrée avec professionnalisme associé à une grande chaleur humaine, tout en me laissant l'autonomie dont j'avais besoin. Frédéric Baret m'a aidée à aborder le monde de l'agronomie et de la télédétection avec un enthousiasme permanent et communicatif, que ce soit au bureau ou sur un télésiège ! François-Xavier Le Dimet m'a fait découvrir la théorie de l'assimilation de données et ses subtilités, qu'il soit remercié pour toutes ces discussions toujours enrichissantes. Tous deux m'ont également fortement encouragée et soutenue pour valoriser et communiquer mes résultats lors de congrès internationaux, ce dont je leur suis particulièrement reconnaissante. Merci également à tous les autres membres de mon jury de thèse : Laurent Hascoët pour avoir accepté d'en être le président ; Isabelle Herlin et Robert Faivre, pour avoir accepté d'en être les rapporteurs et pour la richesse de leurs rapports qui m'ont permis de prendre du recul sur ce travail par des points de vue très différents ; Stéphane Jacquemoud pour avoir examiné ce manuscrit et pour ses remarques et corrections efficaces, ainsi que sa curiosité relative à mes travaux.

Ce travail a pu être réalisé dans le cadre du projet ADAM financé par le CNES : je remercie en particulier Jean-Claude Favard pour l'intérêt constant qu'il a manifesté à mes travaux et Hélène De Boissezon pour son dynamisme et la sympathie dont elle a fait preuve à chacune de nos rencontres. Dans le cadre de ce projet, j'ai eu la chance de découvrir la Roumanie et d'y rencontrer des collègues roumains très attachants. Je pense en particulier à Roxana Vintila, je lui dois des souvenirs inoubliables, que ce soit lors des expérimentations à Fundulea, de nos débats sur la télédétection ou à l'occasion de notre collocation très agréable à Avignon...

Cette thèse s'est déroulée dans deux laboratoires très différents tant par leurs domaines d'application que par leur localisation géographique (Avignon l'été, Grenoble l'hiver...) et dont je remercie les responsables respectifs pour leur accueil : André Chanzy pour l'unité CSE à l'INRA d'Avignon, Georges-Henri Cottet pour le LMC à Grenoble, Eric Bonnetier pour l'équipe EDP. Au cours de mes comités de pilotage, j'ai été conseillée et soutenue par plusieurs chercheurs : merci à David Makowski, Albert Olioso, Nadine Brisson, et Jean-Claude Favard, pour ces réunions pluridisciplinaires

si enrichissantes. Dans le cadre de ces comités, je tiens à remercier particulièrement Martine Guérif, que je pourrais qualifier de troisième responsable de thèse tant le soutien moral et l'intérêt à mes travaux ont été essentiels durant ces trois années.

L'avancement de mon travail a été possible en grande partie grâce à l'aide concrète des créateurs, développeurs ou responsables des modèles et logiciels que j'ai utilisés. Je pense bien sûr aux STICSiennes Dominique Ripoche, Nadine Brisson et Marie Launay : leur patience, leur présence et leurs dépannages ont été indispensables à la novice en modélisation des cultures que j'étais. Merci encore à Laurent Hascoët et Valérie Pascual, pour leur aide sur TAPENADE, leurs réponses pédagogiques et approfondies ainsi que leurs débuggages toujours très rapides et efficaces, même dans les périodes les moins propices ! Je remercie vivement Jean-Charles Gilbert, pour les discussions fructueuses et ses explications détaillées qui m'ont permis de résoudre mes problèmes avec M1QN3 et d'aller beaucoup plus loin dans ma compréhension théorique et pratique de l'optimisation, ainsi que Jean-Pierre F. Drucbert pour son aide indispensable sur le package minitoc. Je dois à toutes ces personnes une reconnaissance extrême pour leur aide désintéressée, qui s'est révélée pour moi indispensable, ainsi que pour la grande sympathie dont j'ai pu apprécier tout le prix dans les moments difficiles... Et bien sûr, mes pensées vont tout naturellement aux "secouristes" du LMC, Brigitte Bidegaray, Bruno Rusconi, Jacques Laurent, et aux SOSIS de l'INRA, Patrice, Philippe, Sylvain, Marie-Odile : merci pour tous leurs dépannages informatiques et leur patience infinie envers les thésards !

Que je me trouve au LMC, à l'INRA, lors de séminaires ou de répétitions de soutenance, j'ai bénéficié du soutien, des conseils et de l'intérêt de chercheurs agronomes, mathématiciens, télédétecteurs, ou informaticiens qui m'ont permis d'avancer et en particulier : merci à André Chanzy pour son écoute et ses conseils sur l'avenir, Andrew Benett pour ces heures mémorables passées sur la théorie de l'assimilation au café de Corvallis, Pierre Ngnepieba pour son aide sur le second ordre, Éric Blayo pour m'avoir éclairé sur le filtrage, Robert Faivre et Gérard Dedieu pour leur présence à la fois professionnelle et conviviale aux congrès, Laurent Prévot pour les manips RITAS, Pierre Saramito pour m'avoir ouvert la porte à cette thèse après le DEA passé ensemble, Carine Hue, Daniel Wallach pour le groupe *assimilation dans les modèles de culture*, Isabelle Charpentier pour son aide en différentiation automatique, mais également Yves Dudal, Jean-Pierre Vila, Yann Kerr et bien d'autres encore venant d'un domaine différent et dont les questions ou remarques pertinentes m'ont sans aucun doute permis de prendre du recul. Parmi les non-permanents, un grand merci à mes co-bureaux du LMC : Cyril Mazauric (pour qui je pourrais remplir une page entière de remerciements !), William Castaings et Wu Lin pour nos discussions très enrichissantes sur l'assimilation, pour leur aide précieuse toujours dans la bonne humeur même dans les périodes les plus tendues et également pour les excellents souvenirs hors du LMC, que ce soit en surf, en raquettes, en hélicoptère ou en Chine... A Avignon, je tiens à souligner l'aide et les conseils très utiles sur l'inversion, l'assimilation, le transfert radiatif, les modèles de culture ou Matlab prodigués par Bruno Combal, Cédric Bacour, Marie Weiss, Jérôme Demarty, Clement Atzberger et Vianney Houlès.

Je tiens également à exprimer ma gratitude envers mes professeurs de l'université Jean Monnet, sans qui mon choix d'évoluer vers la recherche en mathématiques n'aurait certainement pas été aussi évident : Guy Diaz, Sylvie Champier, Jacques Berruyer, Alain Largillier (merci pour la Gateaux-dérivée !), Alain Faisant et Roland Berger.

Si ces années de thèse se sont bien déroulées, c'est aussi grâce au soutien administratif de Claudine du LMC et d'Odile et Rosy de l'INRA : qu'elles soient remerciées mille fois pour leur aide et leur compréhension dans ces démarches inévitables que constituent les montages de dossiers divers, obtention de visas, ordres de missions, renouvellement de contrats... avec lesquels j'ai quelque propension à m'y prendre au dernier moment ! Je tiens à leur associer ces personnes qui m'ont offert un accueil chaleureux à l'INRA : Marie L. pour ses encouragements dynamiques (et son humour 5e degré !), Domi pour tous ses gâteaux tellement bons pour le moral, Marie W., Nadine et Kathy

pour leur don d'égayer la cafèt', Bernard Seguin pour ses histoires à dormir debout, Françoise Ruget pour m'avoir régulièrement motivée pour la gym, Véro pour nos footings-Feng-Shui, Hugues pour ses imitations et le labo photo, Jean-François pour le fabuleux vol au-dessus de la Camargue et des Alpilles, Olivier M., Roland, Jacques & Jacqueline, et tous les autres qui ont valu au bâtiment "climat" d'Avignon cette réputation de convivialité si amplement méritée.

Je n'aurais jamais réussi à gérer ces trois années sans les bons moments de détente que nous avons vécus à l'INRA : club footing, club basket, pauses-cafés et pauses-bancs, pauses-bureaux, barbecues, apéros et soirées ; un grand merci à tous ceux qui y ont participé et m'ont ainsi soutenue de près ou de loin, car même par e-mail cela m'a beaucoup aidée ! Je pense en particulier à Inaki & Camille, Cédric, Eva, Vianney, Jérome & Caro, pour nos si sympathiques moments passés ensemble et surtout pour leur soutien sans faille, sans parler des corrections de la thèse pour certains et de la désormais légendaire organisation basque pour l'impression du fameux manuscrit le jour J ! Merci également à Vincent et Erwann pour leur encouragement en particulier sur les skis de rando juste avant la soutenance, Sébastien et Stéphanie pour le réconfort mutuel de fin de thèse, Gaël et Boris les grenoblois pour leur discrétion célèbre quand ils trichent aux jeux de plateau, Olivier B., Marjorie et Mickaël pour leur bonne humeur, le Mont Ventoux en vélo et les pauses-cafés traditionnelles, Sophie la Corrézienne pour le bureau-philo, Mohammed, Mehrez, Fred J., Fred. H., Noël, Yu Tao, Tom, Paul, Frank, Christina, Wouter, Anne-Isabelle et tous les stagiaires pour ces souvenirs agréables. Nadia, Clément, Christian et Claire ont été de supers co-bureaux avec le soutien et l'amitié qu'ils m'ont manifestée. Une pensée bien sûr aux deux demoiselles indispensables du bâtiment "sol" Manue et Kawtar pour leur fraîcheur et leur zenitude. Enfin, au LMC, je remercie très chaleureusement Claire pour nos conversations philosophiques nocturnes et son accueil inconditionnel (même au dernier moment !), Céline pour sa bonne humeur contagieuse (et les dépannages LaTeX...), Erwann, Jocelyn, Sophie et le reste de l'équipe des thésards que j'ai rencontrés pendant mes séjours grenoblois.

Bien sûr, je n'aurais garde d'oublier ceux qui ont tout fait pour me changer les idées, qui ont su être très compréhensifs pour cette dernière année de thèse intensive, rester dans l'ombre mais être toujours présents pour une petite détente stéphanoise, m'offrir leur amitié inaltérable alliée à un très gros effort de patience que je sais apprécier à sa juste valeur ;-) : Lydie, Véro, Christelle & Jérémie, Delphine & Stéphane, Chrystelle & Greg, Charlotte, Caro, Greg, Johan. Enfin, je tiens à exprimer mon affection à TOUTE ma famille qui m'a tant épaulée... Merci en particulier à mes grands-parents pour leur compréhension accompagnée d'apports culinaires très efficaces dans les moments de déprime !, à Bernard (pour les relectures aussi !), à Sophie & Thomas, Caro & Cédric, Sandrine, à Anne & Fany et leurs petites troupes, à Micheline ainsi qu'à la famille Béal. Merci à Thierry et Géraldine pour les moments de détente montagnards ou provençaux, et une pensée particulière à mes rayons de soleil pendant cette période parfois un peu trop sérieuse : ma petite sœur Charlotte et ma toute fraîche nièce Louise. Enfin et surtout, je remercie mes parents pour m'avoir soutenue dans tous mes choix avec une confiance absolue. Merci à David d'avoir été là, tout simplement, et pour tout le reste que lui seul peut m'apporter.

∴

La quantité même des gens à qui je tiens à exprimer de la reconnaissance me permet de mesurer la chance que j'ai eue de pouvoir faire mes premiers pas dans l'univers professionnel de la recherche avec un accompagnement aussi favorable. Grâce à eux la notion d'"équipe" ne sera jamais pour moi un concept vide et je suis sûre que le souvenir de cette période de ma vie qui a constitué mon entrée dans la communauté des chercheurs sera toujours marqué d'une pointe de nostalgie.

Mieux vaut essuyer la larme du paysan,
Que d'obtenir cent sourires du ministre.
(proverbe chinois)

Liste des principaux sigles et abrévations

ADAM Assimilation des Données de télédétection dans les AgroModèles
ASR Agentia Spatiala Romana
AVHRR Advanced Very High Resolution Radiometer
BRDF Bidirectional Reflectance Distribution Function
CNES Centre National d'Etudes Spatiales
CRUTA Centrul Roman pentru Utilizarea Teledetectiei in Agricultura
ESAP École Supérieure d'Agriculture de Purpan
fAPAR fraction of Absorbed Photosynthetically Active Radiation
FAO Food and Agriculture Organization
GLUE Generalized Likelihood Uncertainty Estimation
IAP Information *a priori*
ICPA Institutul de Cercetari pentru Pedologie si Agrochimie
ICCPT Institutul de Cercetari pentru cereale si Plante Tehnice-Fundulea
IFPRI International Food Policy Research Institute
INRA Institut National de Recherche Agronomique
IV Indice de Végétation
LAI Leaf Area Index (Indice de surface foliaire)
LAD Leaf Angular Distribution. Distribution des directions normales foliaires
LUT Look Up Table
MCIP Multi-objective Calibration Iterative Procedure
MERIS MEdium Resolution Imaging Spectrometer Instrument
MFC Modèle de Fonctionnement du Couvert
MISR Multiangle Imaging SpectroRadiometer
MODIS Moderate Resolution Imaging Spectroradiometer
MTR Modèle de Transfert Radiatif
NDVI Normalized Difference Vegetation Index
NN Neural Network
MISR Multiangle Imaging SpectroRadiometer
MST Matière Sèche Totale
MTR Modèle de Transfert Radiatif
PIR et R Proche InfraRouge et Rouge

POLDER POLarization and Directionality of the Earth's Reflectances

PROSPECT PROpriétés SPECTrales

SAIL light Scattering by Arbitrarily Inclined Leaves

SPOT Satellite Probatoire d'Observation de la Terre

STICS Simulateur mulTIdisciplinaire pour les Cultures Standard

SUCROS Simple and Universal Crop Growth Simulator

TM Thematic Mapper

TOA Top Of the Atmosphere

TOC Top Of Canopy

Table des matières

Remerciements **i**

Liste des principaux sigles et abrévations **v**

Résumé étendu **xi**

Introduction **1**

1 De l'observation spatiale au fonctionnement du couvert : éléments bibliographiques **5**
1.1 Introduction sommaire à la télédétection 8
1.1.1 Définition générale 8
1.1.2 Acquisition de données de télédétection 8
1.1.3 Notion de réflectance 9
1.2 Des données de télédétection aux variables biophysiques du couvert végétal 9
1.2.1 La réflectance du couvert végétal : déterminisme et modélisation 9
1.2.2 Variables observables par télédétection optique 10
1.2.3 Processus biophysiques liés aux variables observables 12
1.2.4 Estimation des variables observables par télédétection 14
1.3 Des variables observables par télédétection aux variables agronomiques 24
1.3.1 Classification générale 24
1.3.2 Approche empirique 25
1.3.3 Utilisation de modèles de fonctionnement 27
1.3.4 Approche par forçage 28
1.3.5 Assimilation de données 31
1.4 Objectifs du travail 43

2 La méthode variationnelle d'assimilation de données **47**
2.1 Assimilation de données variationnelle 49
2.1.1 Principe de la théorie dans un modèle généralisé 49
2.1.2 Description de la méthode sur les équations discrètes 51
2.2 Analyse de sensibilité 54
2.2.1 Définition générale 54
2.2.2 Description des différentes méthodes 55
2.2.3 Analyse de sensibilité utilisant l'adjoint au premier ordre 58
2.2.4 Analyse de sensibilité prenant en compte les observations 59
2.2.5 Analyse de sensibilité du vecteur de contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations 63
2.3 Différentiation et modèle adjoint 66
2.3.1 Les différentes méthodes de différentiation 66
2.3.2 Les opérateurs adjoints 67

2.3.3 Différentiation automatique 69
2.3.4 Conclusion 77
2.4 Les algorithmes de minimisation 77
2.4.1 Introduction à l'optimisation sans contrainte 77
2.4.2 Le module d'optimisation M1QN3/N1QN3 79
2.5 Conditionnement et préconditionnement 84
2.5.1 Importance du Hessien 84
2.5.2 Conditionnement du Hessien 84
2.5.3 Préconditionnement et adimensionnalisation 85
2.5.4 Conclusion 88
2.6 Évaluation des résultats d'assimilation 88
2.6.1 Diagnostics sur le comportement de l'algorithme de minimisation 88
2.6.2 Diagnostic sur les résultats d'assimilation 89
2.6.3 Conclusion 91

3 Modèles et données 93
3.1 Le modèle de transfert radiatif PROSAIL 94
3.1.1 Le modèle de propriétés des feuilles PROSPECT 94
3.1.2 Le modèle de réflectance SAIL 95
3.2 Les modèles de fonctionnement de la végétation 96
3.2.1 Le modèle BONSAÏ-BIO 96
3.2.2 Le modèle STICS de fonctionnement de la végétation 98
3.3 La base de données ADAM 101
3.3.1 Présentation générale du projet ADAM 101
3.3.2 Description du site 102
3.3.3 Le climat de Funduléa 103
3.3.4 Les mesures au sol 104
3.3.5 Les données de télédétection 105
3.3.6 Les données de LAI utilisées 106

4 Analyse de sensibilité de Bonsaï et assimilation de données 107
4.1 Estimation du LAI à partir de données radiométriques 109
4.1.1 Les différentes méthodes d'estimation 109
4.1.2 Comparaison des trois méthodes sur les 40 unités d'expérimentation 110
4.1.3 Création de la "grande base" par extraction de pixels 118
4.2 Étapes préliminaires à l'assimilation dans BONSAÏ 118
4.2.1 Information *a priori* sur les paramètres de BONSAÏ 118
4.2.2 Préconditionnement du Hessien 119
4.2.3 Calcul de l'adjoint de BONSAÏ-BIO 119
4.3 Analyse de sensibilité aux paramètres 120
4.3.1 Analyse de sensibilité locale au voisinage des valeurs *a priori* des paramètres . 120
4.3.2 Analyse de sensibilité multi-locale (sur 1000 voisinages) 124
4.3.3 Sensibilité du LAI et de la biomasse à chaque pas de temps 128
4.4 Assimilation de données utilisant l'adjoint 130
4.4.1 Estimation des paramètres avec les expériences jumelles 130
4.4.2 Assimilation de pseudo-observations de télédétection de la base ADAM 136
4.4.3 Amélioration de l'estimation de biomasse par assimilation du LAI 140
4.4.4 Conclusion 143
4.5 Conclusion 146

5 Prise en compte de contraintes spatiales pour l'assimilation de données de télédétection 149
5.1 Introduction . . . 151
5.1.1 Les structures spatiales exploitées . . . 151
5.1.2 Le schéma d'assimilation . . . 152
5.1.3 Les différentes expériences et observations proposées . . . 153
5.2 Évaluation des contraintes spatiales par les expériences jumelles . . . 154
5.2.1 Choix des contraintes et simulation d'observations . . . 154
5.2.2 Évaluation de la méthode sur les valeurs de LAI estimées . . . 156
5.2.3 Évaluation de la méthode sur l'identification des paramètres de MACRO-BONSAÏ . . . 156
5.2.4 Vitesse de convergence de la méthode . . . 160
5.2.5 Conclusion . . . 162
5.3 Extraction des données sur les images de la base ADAM . . . 162
5.3.1 Protocole de l'extraction pour la prise en compte des contraintes spatiales . . . 162
5.3.2 Création de pseudo-observations de LAI par inversion des réflectances . . . 163
5.3.3 Validation de l'estimation de LAI . . . 164
5.4 Apport des contraintes spatiales pour l'assimilation de données ADAM . . . 165
5.4.1 Choix et mise en place des contraintes spatiales . . . 165
5.4.2 Résultats de l'assimilation avec contraintes spatiales . . . 167
5.4.3 Comparaison des deux méthodes d'assimilation . . . 168
5.4.4 Faible quantité d'observations assimilées . . . 170
5.5 Sensibilité de l'assimilation à la fréquence de revisite . . . 171
5.5.1 Apport des contraintes sur l'estimation du LAI . . . 172
5.5.2 Apport des contraintes sur l'identification des paramètres . . . 172
5.5.3 Conclusion . . . 174
5.6 Synthèse des résultats et perspectives . . . 176

6 Faisabilité de l'application de la méthode variationnelle au modèle Stics 179
6.1 Étalonnage du modèle STICS sur les variétés roumaines . . . 180
6.1.1 Choix des paramètres à calibrer . . . 180
6.1.2 Méthode d'étalonnage . . . 181
6.1.3 Résultats . . . 181
6.1.4 Conclusion . . . 181
6.2 Faisabilité de la mise en œuvre de la méthode d'assimilation variationnelle dans STICS 183
6.2.1 Difficultés de calcul du modèle adjoint de STICS . . . 183
6.2.2 Première validation des modèles tangent et adjoint . . . 186
6.3 Analyse de sensibilité de STICS . . . 186
6.3.1 Sélection des paramètres d'entrée pour l'analyse de sensibilité des variables de sorties . . . 187
6.3.2 Validation des modèles tangent et adjoint par rapport au LAI et la biomasse 188
6.3.3 Résultats de sensibilité du LAI et de la biomasse . . . 189
6.3.4 Conclusion et perspectives sur l'analyse de sensibilité . . . 193
6.4 Conclusion . . . 193

Conclusion 197

Annexes 207

A Compléments du chapitre 1 i
A.1 Exemples de réflectance d'autres surfaces . . . i
A.2 Les méthodes d'estimation des variables observables . . . iii

A.2.1 Indices de végétation iii
A.2.2 Le recuit simulé iv

B Compléments du chapitre 2 **vii**
B.1 Rappels de calcul différentiel vii
B.2 Exemple de calcul des équations adjointes sur le modèle de biomasse ix
B.2.1 Différentiation manuelle ix
B.2.2 Différentiation automatique avec TAPENADE x

C Compléments du chapitre 3 **xiii**
C.1 Liste des variables et paramètres d'entrée de STICS xiv
C.2 Liste des variables et paramètres de sortie de STICS xxi

D Compléments du chapitre 4 : Résultats d'assimilation dans le cadre des expériences jumelles **xxv**

Références bibliographiques **xxxi**

Résumé étendu

L'utilisation conjointe d'observations satellitaires et de modèles de fonctionnement des cultures est une technique pertinente pour le diagnostic et le pronostic de l'état des cultures, dans l'objectif à long terme d'une gestion durable des ressources et de la préservation de l'environnement. En particulier, l'assimilation de données permet d'estimer des paramètres d'entrées du modèle et/ou des variables d'état, en améliorant la cohérence des simulations du modèle avec les variables de sortie accessibles par télédétection. Ces travaux consistent à adapter au domaine agronomique une méthode variationnelle de contrôle optimal, utilisée de façon opérationnelle dans différentes disciplines (météorologie, océanographie) et basée sur le calcul du modèle adjoint. La modélisation du couvert végétal ne repose pas sur des lois exactes connues et les processus décrits ne sont pas différentiables, ce qui peut générer de nombreux problèmes théoriques et pratiques que nous nous sommes proposé d'étudier. Ce manuscrit s'articule en deux grandes phases : une première phase relativement descriptive et synthétique (synthèse bibliographique, méthodes, modèles, données) avec les trois premiers chapitres, et une deuxième phase numérique concentrant l'ensemble des résultats.

Le premier chapitre de ce manuscrit a pour objectif de comprendre les principales relations entre les données de télédétection, les variables d'état du couvert végétal observables depuis l'espace et les variables agronomiques d'intérêt. Une revue des différentes méthodes d'assimilation employées jusqu'à nos jours en agronomie est ensuite proposée. Cet état de l'art permettra de préciser les objectifs de ce travail centré sur l'utilisation de l'assimilation variationnelle et du modèle adjoint. Cette technique d'optimisation, qui utilise le gradient d'une fonction coût représentant l'écart entre les valeurs de LAI simulées et observées, dépend moins de la quantité de paramètres du modèle que les méthodes de recherche directe. De fait, elle est particulièrement adaptée au problème des modèles spatialisés, pour lesquels la multiplication des instances rend l'espace de contrôle important.

Dans un second temps, la théorie de l'assimilation variationnelle basée sur le modèle adjoint est développée, ainsi que les outils nécessaires associés : différentiation automatique, algorithmes de minimisation. Une attention particulière est portée au conditionnement du problème, notamment par l'introduction de l'information *a priori*. L'analyse de sensibilité locale en mode inverse est également abordée de façon théorique.

La troisième partie du manuscrit aborde les modèles exploités (transfert radiatif : PROSPECT, SAIL ; fonctionnement du couvert : BONSAÏ-BIO, STICS) ainsi que le projet ADAM, qui constitue le contexte de cette thèse. L'expérimentation ADAM, appliquée sur des parcelles de blé dans la plaine du Danube a fourni des données satellitaires et terrain exploitées dans de nombreuses parties de ce travail.

Afin de contrôler au possible chacune des étapes et les erreurs associées, nous choisissons d'assimiler des pseudo-observations (variables du couvert estimées par télédétection) dans le modèle de fonctionnement plutôt que d'assimiler directement les radiances observées depuis l'espace dans un modèle couplé "fonctionnement de la végétation-transfert radiatif". De fait, la première étape de la phase numérique consiste à tester différentes méthodes d'estimation du LAI (indice foliaire) du couvert végétal à partir des radiances mesurées : fonction de transfert empirique, utilisation d'indices de végétation et inversion de modèle de transfert radiatif. Ceci est réalisé sur la base de données ADAM à partir d'une série temporelle d'images SPOT. Les résultats montrent de bonnes

performances générales des méthodes testées, avec une supériorité des approches empiriques dans ces conditions particulières. Pourtant, nous préférerons les estimations provenant de l'inversion qui sont opérationnelles dans d'autres conditions. Ces pseudo-observations sont alors assimilées dans le modèle de végétation semi-mécaniste BONSAÏ. Ce modèle relativement simple a été développé dans le cadre de cette étude afin de mieux définir et évaluer l'approche proposée. Nous pouvons confirmer l'importance de l'information *a priori* dans le processus d'estimation des paramètres par l'utilisation d'expériences jumelles. Celles-ci montrent les bonnes performances de la méthode dans le cas où un nombre d'observations suffisant est disponible. Enfin, nous proposons de tester l'apport de l'assimilation du LAI pour estimer une autre variable d'intérêt, la biomasse. Dans ce cas, les résultats obtenus sur deux bases de données très différentes révèlent que l'assimilation du LAI n'améliore l'estimation de la biomasse finale que de façon marginale. En effet, l'hypothèse d'invariance spatiale de l'efficience photosynthétique n'est pas vérifiée. Ceci constitue la limite majeure des modèles semi-mécanistes utilisés. L'emploi de modèles plus sophistiqués et prenant en compte explicitement l'action des stress sur l'efficience, tels que le modèle STICS, s'avère nécessaire.

L'application de la méthode à des données réelles pixel par pixel met également en évidence un manque de robustesse face au nombre faible d'observations disponibles, entraînant une sous-détermination du système. Afin de résoudre ce problème mal posé, nous proposons alors une nouvelle méthode d'assimilation simultanée des données sur un ensemble de pixels. Elle consiste à imposer des contraintes de dépendance spatiale aux paramètres, en fonction de différents niveaux hiérarchiques : pour chaque pixel, l'espèce ou la variété considérée (paramètres de la végétation), l'appartenance à une parcelle (techniques culturales identiques), ou la classe de sol associée (caractéristiques du sol similaires). A partir d'expériences jumelles, nous montrons que cette technique améliore et stabilise la précision d'estimation des paramètres. Sur des données réelles, l'ajustement aux observations est également plus robuste pour une faible quantité d'observations assimilées. Enfin, les contraintes spatiales autorisent une fréquence de revisite du satellite inférieure au cas d'assimilation pixel par pixel tout en conservant des performances d'estimation similaires.

Après avoir défini la stratégie d'assimilation dans BONSAÏ et le développement de contraintes spatiales, nous évaluons l'applicabilité d'une telle approche sur un modèle beaucoup plus complexe : STICS. Le modèle adjoint est calculé, après de nombreuses difficultés liées à l'écriture du modèle, ses fortes non-linéarités et discontinuités, et les limitations des premières versions du différentiateur automatique non adaptées à ce type de modèle. Le modèle adjoint une fois obtenu et validé, nous réalisons des analyses de sensibilité locales de certaines variables d'état de STICS, dans des conditions très différentes et sur plusieurs variétés de blé. Ces études permettent de hiérarchiser localement les paramètres gérant la dynamique du LAI et de la biomasse.

Ce travail de faisabilité a nécessité une forte cohésion entre les mathématiques appliquées, la différentiation automatique et la modélisation agronomique. Il ouvre de nombreuses perspectives d'utilisation de l'approche variationnelle basée sur le modèle adjoint pour l'analyse de sensibilité, l'inversion des modèles de transfert radiatif et l'assimilation de données dans les modèles de fonctionnement de la végétation. En particulier, cette méthode efficace pour traiter de gros problèmes permet de prendre en compte les contraintes spatiales et d'exploiter au mieux l'information spatiale contenue dans une série temporelle d'images. Elle devrait permettre d'aider à interpréter efficacement les données issues des futures missions spatiales combinant haute répétitivité temporelle et haute résolution spatiale.

Introduction

Depuis un demi-siècle, le développement permanent du domaine agricole a permis de quadrupler la production céréalière dans le monde. Selon des études effectuées en 1995 par la FAO, la Banque Mondiale et l'IFPRI, la production mondiale de ces cultures devrait augmenter de plus de 500 millions de tonnes d'ici 2010. Cependant, ces progrès indispensables à la demande croissante des populations ont des conséquences alarmantes sur l'écosystème : perte de fertilité des sols, pollution des nappes phréatiques par les engrais, pollution atmosphérique par les pesticides, défrichements des forêts... La constatation d'un épuisement progressif des ressources a mis en évidence la nécessité d'une "Révolution Doublement Verte", où la productivité serait assurée tout en optimisant la gestion des ressources naturelles et en limitant les impacts environnementaux non désirés. Ce sont ces principes qui régissent l'agriculture durable. Dans ce contexte, il est devenu nécessaire de raisonner chaque intervention réalisée sur les cultures pour réduire les intrants et les possibles nuisances sur l'environnement.

Un effort de recherche important est donc consacré à la compréhension et l'évaluation des impacts environnementaux, notamment par le développement d'outils d'aide à la décision en agriculture. Ces outils doivent fournir un diagnostic de l'état des cultures voire un pronostic sur la production et les bilans environnementaux, sous différents scénarios de conduite des cultures et de climat. Enfin, ils peuvent éventuellement être combinés à des modèles économiques pour considérer cette contrainte lors de la prise de décision de l'agriculteur.

Par ailleurs, le besoin d'évaluation de l'état des cultures et de l'environnement s'exprime à différentes échelles :
- l'échelle de l'intra-parcellaire, qui correspond au grain élémentaire de gestion par l'agriculteur,
- l'échelle de la parcelle et de l'exploitation, où les contraintes logistiques et économiques peuvent être intégrées,
- l'échelle du paysage et de la région, pour la prise en compte de certains impacts environnementaux.

Les deux outils principaux répondant à l'ensemble de ces besoins sont d'une part les modèles de fonctionnement des cultures, et d'autre part les observations de télédétection qui permettent l'accès aux différentes échelles spatiales considérées.

⇝ L'outil modélisation des cultures

Les modèles de fonctionnement des cultures fournissent à la fois un diagnostic de l'état de la culture (besoin en eau ou en azote) et un pronostic, notamment en termes de production et de bilans environnementaux. Toutefois, leurs performances sont limitées :
- par la difficulté à modéliser les déterminismes en jeu,
- ainsi que par l'état de nos connaissances relatives aux nombreux paramètres et variables d'entrée caractéristiques de la plante, du sol ou des pratiques culturales.

Les expérimentations permettent de mesurer certaines variables et d'estimer certains paramètres. Elles demandent cependant un investissement économique et humain très important,

notamment par la dépendance spatiale et temporelle d'un certain nombre de variables. L'utilisation opérationnelle des modèles de culture nécessite donc l'acquisition de ces informations par un moyen indépendant.

⇝ **L'outil télédétection**

La télédétection spatiale présente de nombreux avantages pour notre problématique :
- elle permet de caractériser le type de culture et d'accéder à certaines de ses variables d'état. Elle permet également d'accéder à des caractéristiques du sol et d'identifier des pratiques culturales ;
- les observations peuvent être acquises à l'échelle d'une région comme à l'échelle intra-parcellaire ;
- la répétition des observations permet de suivre la dynamique des cultures.

Jusqu'à maintenant, la modélisation et les observations satellitaires ont été utilisées essentiellement de manière indépendante pour les applications agronomiques. Pourtant, la synergie entre ces deux outils apparaît d'un intérêt évident.

Elle peut être réalisée au travers de l'assimilation, qui consiste à combiner de façon optimale des observations et des modèles. L'assimilation est appliquée opérationnellement dans d'autres disciplines telles que la météorologie ou l'océanographie. En agronomie, on observe depuis une dizaine d'années le développement de techniques combinant des données de télédétection et des modèles de fonctionnement des cultures. Toutefois, le stade de l'application opérationnelle n'est pas encore atteint. Ceci peut s'expliquer par la dispersion de la communauté scientifique concernée et la difficulté de la modélisation des phénomènes biologiques. De plus, les observations de télédétection pertinentes pour cette application ont été jusqu'à présent peu disponibles, du fait de l'absence cruelle de capteurs dédiés à la végétation et capables d'allier à la fois haute résolution spatiale et haute répétitivité temporelle. Les progrès technologiques autorisent maintenant la réalisation de telles missions spatiales consacrées à l'agriculture.

Ainsi, les agences spatiales, en particulier le CNES, se sont tournées vers la communauté des agronomes afin de mieux définir les caractéristiques d'une mission "agriculture". Le développement de techniques d'assimilation des observations de ces futurs satellites dans les modèles de fonctionnement des cultures constitue un objectif de recherche majeur. C'est dans ce contexte qu'est apparu le projet ADAM, dans lequel s'inscrit ce travail de thèse.

Le **projet ADAM** (Assimilation des Données de télédétection dans les AgroModèles) a pour vocation de contribuer au développement des méthodes d'interprétation d'observations à haute répétitivité temporelle et à haute résolution spatiale. Il doit permettre d'évaluer l'intérêt de telles méthodes pour l'aide à la décision en agriculture, l'estimation de la production et la caractérisation de l'environnement. Ce projet est basé sur une expérimentation unique par la combinaison des résolutions temporelles et spatiales qui simule les observations susceptibles d'être transmises par les futurs capteurs dédiés à l'agriculture. Cette expérimentation constitue donc le premier ingrédient nécessaire à l'assimilation. D'autre part, la communauté a développé différents modèles de fonctionnement des cultures, des plus simples aux plus complexes, constituant le deuxième ingrédient de l'assimilation.

Nous proposons donc de développer une méthode d'assimilation des observations de télédétection dans ces modèles de fonctionnement des cultures en nous appropriant les techniques mathématiques utilisées dans d'autres communautés scientifiques. Il s'agit d'une méthode d'assimilation variationnelle, dont la mise en œuvre nécessite le calcul du modèle adjoint. Du fait de nombreuses différences de déterminisme entre les modèles disponibles dans le domaine agronomique et ceux dans lesquels cette méthode est opérationnelle (météorologie, océanographie), ceci représente une approche originale dont nous démontrerons la faisabilité. En effet, on retrouve un aspect commun dans le fait

que les équations des écoulements océaniques ou de l'atmosphère sont issues de lois de comportement ou de lois de conservation. Ceci n'est pas le cas du fonctionnement de la végétation, dont la modélisation ne s'appuie sur aucune loi exacte et n'est pas immédiatement adaptée à la théorie du contrôle optimal. Afin de répondre aux problèmes conséquents de sous-détermination, l'outil télédétection nous permettra d'exploiter les possibles dépendances spatiales de certains processus. Nous participerons ainsi par une nouvelle approche à la spatialisation d'un modèle dynamique de culture.

$\therefore$

Le premier chapitre, à partir d'éléments bibliographiques, décrira les approches empruntées par la communauté scientifique pour l'utilisation, d'une part de l'observation de télédétection, d'autre part des modèles de fonctionnement, et enfin pour leur exploitation combinée.

Cet état de l'art nous aidera à préciser les objectifs de ce travail centré sur l'utilisation de l'assimilation variationnelle et du modèle adjoint et à proposer une stratégie de recherche pour cette thèse. Nous comprendrons pourquoi cette méthode est particulièrement adaptée au problème des modèles spatialisés. La structure du manuscrit sera ainsi justifiée et présentée de façon précise, en se basant sur l'architecture suivante : le développement théorique de la méthode d'assimilation variationnelle (chapitre 2), puis la description des modèles et données exploités au chapitre 3. Le chapitre 4 présentera les résultats de cette méthode sur un modèle d'étude, dans le cadre d'expériences jumelles et de données réelles. L'application de la méthode d'assimilation pixel par pixel sur le modèle d'étude mettra en évidence l'aspect mal posé du problème. Nous proposerons alors une nouvelle méthode d'assimilation simultanée des données sur un ensemble de pixels et étudierons l'impact de cette technique sur la fréquence de revisite du satellite (chapitre 5). Le chapitre 6 démontrera la faisabilité de l'application d'une telle méthode sur un modèle de culture plus complexe.

1

De l'observation spatiale au fonctionnement du couvert : éléments bibliographiques

Sommaire du chapitre

1.1 Introduction sommaire à la télédétection . . . 8
1.1.1 Définition générale . . . 8
1.1.2 Acquisition de données de télédétection . . . 8
1.1.3 Notion de réflectance . . . 9
1.2 Des données de télédétection aux variables biophysiques du couvert végétal . . . 9
1.2.1 La réflectance du couvert végétal : déterminisme et modélisation . . . 9
1.2.2 Variables observables par télédétection optique . . . 10
a. LAI : l'indice de surface foliaire . . . 11
b. Cab : le contenu en chlorophylle . . . 11
c. fCover : la fraction de couverture . . . 11
d. fAPAR : la fraction de PAR absorbé . . . 12
e. l'albédo . . . 12
1.2.3 Processus biophysiques liés aux variables observables . . . 12
a. Les processus principaux intrinsèques au couvert . . . 12
b. Relations entre variables observables et processus . . . 13
c. Conclusion . . . 14
1.2.4 Estimation des variables observables par télédétection . . . 14
a. Classification des méthodes d'estimation . . . 14
b. Minimisation dans l'espace des données radiométriques . . . 15
b.i/ Inversion de modèles par optimisation itérative . . . 15
Description générale. . . . 15
Quelques méthodes d'optimisation et applications au transfert radiatif. . . . 16
Conclusion. . . . 18
b.ii/ Les tables de correspondance . . . 18
Description de la méthode. . . . 18
Quelques applications au couvert végétal. . . . 19
c. Minimisation dans l'espace des variables biophysiques . . . 19
c.i/ Les réseaux de neurones . . . 19
Description de la méthode. . . . 19
Quelques applications au couvert végétal. . . . 21
c.ii/ Approche semi-empirique : les indices de végétation (IV) . . . 21
Définition des IV. . . . 21
Limites des IV. . . . 21
Passage des IV à des variables observables. . . . 22

c.iii/ Approche empirique : la régression linéaire multiple pas à pas . 22
Description de la méthode. 22
Quelques applications au couvert végétal. 23
d. Conclusion 23
1.3 Des variables observables par télédétection aux variables agronomiques 24
1.3.1 Classification générale 24
1.3.2 Approche empirique 25
a. LAI et biomasse 25
b. Indices de végétation et production primaire 25
c. LAI, nombre de grains par unité de surface et production 26
d. Conclusion 26
1.3.3 Utilisation de modèles de fonctionnement 27
a. Variables, paramètres et erreurs associées 27
b. Les modèles de fonctionnement de la surface 27
b.i/ Modèles de processus de surface 27
b.ii/ Modèles de fonctionnement du couvert 27
1.3.4 Approche par forçage 28
a. Description générale 28
b. Applications à des modèles d'efficience 29
c. Applications à des modèles mécanistes 30
d. Conclusion 31
1.3.5 Assimilation de données 31
a. Définition générale de l'assimilation 31
b. Classification globale des méthodes d'assimilation 31
b.i/ Dans un cadre stochastique 32
Description générale. 32
Quelques applications. 33
b.ii/ Dans un cadre déterministe 33
Description générale. 33
Quelques applications. 36
b.iii/ Conclusion 36
c. L'assimilation de données pour l'étude du fonctionnement de la végétation 37
c.i/ Assimilation dans les modèles de processus de surface 38
c.ii/ Assimilation dans les modèles de culture 39
Classification proposée dans le domaine agronomique 39
Utilisation de méthodes de correction. 40
Utilisation de méthodes de re-calibrage. 40
d. Conclusion 42
1.4 Objectifs du travail 43

La télédétection mesure le rayonnement réfléchi ou émis par la surface et permet d'accéder à certaines caractéristiques biophysiques du couvert végétal. La connaissance de ces variables observables par télédétection et de leur variabilité spatiale et temporelle nous aide à identifier les processus liés au fonctionnement du couvert végétal et certaines variables agronomiques (Fig. 1.1). L'ensemble de ces étapes peut s'effectuer à l'aide de trois grands types de modèles.

1. L'acquisition des données nécessite en premier lieu diverses interprétations du signal utilisant la physique de la mesure, ainsi que des modèles de correction, afin de déterminer la réflectance de la surface du couvert végétal (réflectance TOC[1]).
2. Les modèles de transfert radiatif, basés sur une description physique de l'interaction rayonnement - couvert, caractérisent les relations entre la réflectance du couvert et ses variables biophysiques : LAI, fAPAR...
3. Enfin, les modèles de fonctionnement de la végétation décrivant les processus intrinsèques au couvert végétal (photosynthèse, transpiration, respiration, allocation...) relient ces caractéristiques biophysiques aux variables agronomiques (biomasse, phénologie, production...).

Le présent travail est consacré aux étapes 2 et 3, les images de télédétection utilisées ayant déjà subi les traitements nécessaires pour les transposer à la surface.

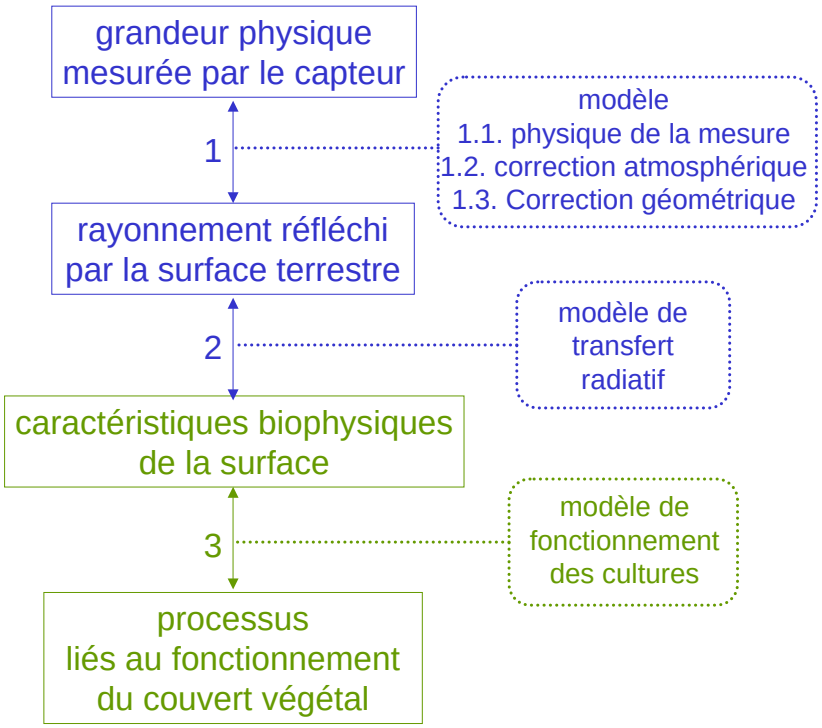

Fig. 1.1 – *Principales étapes de l'utilisation des mesures effectuées par le capteur dans l'interprétation des processus intrinsèques au couvert végétal.*

La première partie de ce chapitre introductif propose une description sommaire de l'outil qu'est la télédétection et des données qu'elle permet d'acquérir. Dans un second temps, nous décrirons quelques méthodes d'estimation des variables biophysiques observables par télédétection, après avoir caractérisé les principales relations entre celles-ci et les processus liés au fonctionnement du couvert végétal. Enfin, dans un objectif de suivi des cultures, une dernière partie reliera ces variables biophysiques caractérisées par satellite aux variables agronomiques du couvert végétal. Elle s'attachera en particulier aux méthodes d'assimilation de données dans les modèles de fonctionnement du couvert végétal.

[1]TOC : Top Of Canopy

1.1 Introduction sommaire à la télédétection

1.1.1 Définition générale

La télédétection est l'ensemble des connaissances et techniques développées pour caractériser les propriétés physiques et biologiques d'objets par des mesures effectuées à distance, sans contact matériel avec ceux-ci. Si le terme télédétection devrait étymologiquement concerner tous les phénomènes détectés à distance (*télé* signifie *à distance*), la télédétection n'étudie en pratique que les phénomènes mettant en jeu les ondes électromagnétiques, et elle se limite dans la plupart des travaux à une prise de données d'avion ou de satellite.

1.1.2 Acquisition de données de télédétection

L'acquisition de données de télédétection pour l'étude de la végétation cultivée se caractérise par :

- la résolution spatiale, qui est fonction de la dimension du plus petit élément qu'il est possible de détecter. Elle se définit par la taille au sol des pixels, c'est-à-dire les éléments de base d'une image. On peut distinguer :
  - la très haute résolution spatiale, inférieure à 10m (IKONOS, HRG) ;
  - la haute résolution spatiale, inférieure à 100m (HRVIR, TM) ;
  - la moyenne résolution spatiale, inférieure à 1000m (MERIS, MODIS) ;
  - la basse résolution spatiale, au-delà de 1 km (VEGETATION, AVHRR, METEOSAT, POLDER) ;
- la résolution temporelle, qui correspond à la fréquence d'acquisition des données au-dessus d'une même cible.
- la résolution spectrale, qui décrit le centre et la largeur des bandes spectrales caractérisant le capteur.

Les principaux domaines spectraux utilisés pour l'étude de la végétation (photosynthèse) sont ceux du visible [400 - 700 nm] aux micro-ondes [1 mm - 1 m] (Fig. 1.2). En particulier, le domaine optique réflectif [400-2500 nm] fournit une grande quantité d'informations sur la végétation. Il est composé des trois parties principales suivantes :

- **le visible** : 400-700 nm
- **le proche infrarouge** : 700-1300 nm
- **l'infrarouge moyen** : 1300-2500 nm

En raison de contraintes techniques, haute résolution spatiale et haute résolution temporelle vont rarement de pair. Le choix des résolutions spectrale, temporelle et spatiale optimales ne dépend donc pas uniquement de l'objet que l'on souhaite étudier. On doit être capable de déterminer comment récupérer le maximum d'informations en fonction des caractéristiques spectrales du couvert, des conditions climatiques (une forte couverture nuageuse nécessite une haute répétitivité temporelle), et de la dépendance temporelle et spatiale (étude à l'échelle de la parcelle agricole ou à la région) des phénomènes que l'on souhaite étudier.

Dans le cadre du suivi des cultures, la haute résolution spatiale et temporelle représenterait l'outil idéal, mais il n'existe actuellement pas de mission dédiée à l'agriculture et caractérisée par ces deux types d'observations. La nécessité de définir de nouvelles missions adaptées à cette application apparaît ainsi nettement, mais également le besoin de développer des méthodologies et des stratégies d'exploitation des observations correspondantes.

En particulier, le système SPOT présente plusieurs avantages par rapport aux autres capteurs spatiaux : une résolution spatiale haute à très haute, ainsi que la propriété de dépointage des capteurs, qui permet, par des visées obliques, d'augmenter la répétitivité temporelle des images. L'utilisation d'images SPOT se retrouve dans divers domaines d'étude qui nécessitent des images fréquentes, tels que la gestion des parcelles agricoles ou forestières. Ce système est donc bien adapté à notre projet.

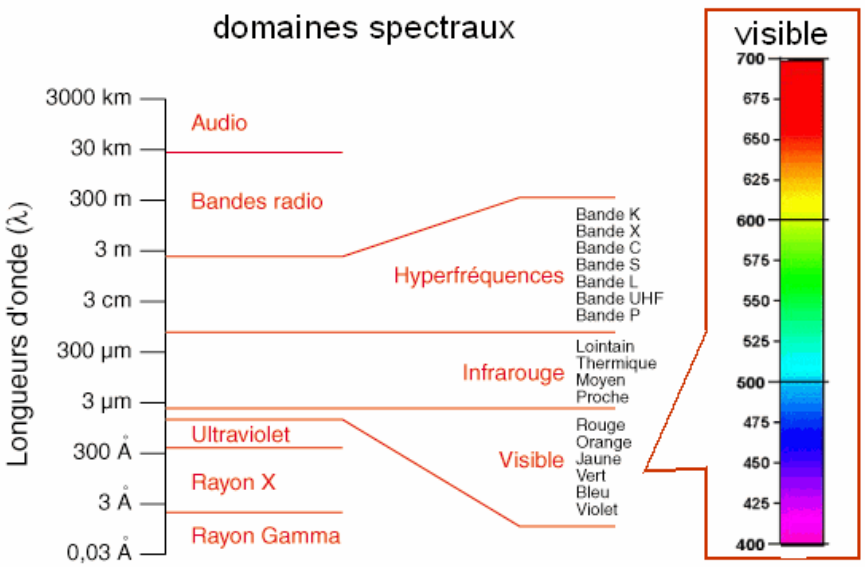

FIG. 1.2 – *Spectre du rayonnement électromagnétique (Pouchin [208]) et son détail dans le domaine visible.*

1.1.3 Notion de réflectance

La réflectance est la fraction d'énergie lumineuse incidente réfléchie par la cible.

De nombreux capteurs embarqués (sur satellites ou sur avions) schématiquement représentés FIG. 1.3 sont sensibles à l'énergie émise par le soleil et réfléchie par le système Terre-Atmosphère. Avant que le rayonnement solaire n'atteigne la surface terrestre, il traverse une certaine épaisseur d'atmosphère et est affecté en conséquence par des phénomènes de diffusion et d'absorption. Le rayonnement solaire atteint donc le couvert végétal sous deux formes :

- une composante directe, qui provient d'un petit angle solide centré sur le disque solaire ;
- une composante diffuse, qui provient de la diffusion (multidirectionnelle) de l'atmosphère, ainsi que d'une partie du rayonnement réfléchi par le sol.

Les objets renvoient de manière différente les radiations lumineuses. Ceci les rend identifiables et permet de déterminer certaines de leurs caractéristiques. La réflectance mesurée par le capteur nous renseignera donc par sa signature spectrale, temporelle et directionnelle sur les caractéristiques optiques des éléments de chaque pixel. Partant de cette hypothèse, la télédétection spatiale dédiée à l'agriculture consiste à **exploiter la variation de la réflectance mesurée pour caractériser les propriétés biophysiques du couvert**.

Ainsi, au cours de ce travail destiné à l'exploitation des données de télédétection pour le suivi des cultures, nous travaillerons sur la réflectance du couvert végétal dans le domaine optique, afin de déterminer ses caractéristiques biophysiques. Nous proposons de décrire dans un premier temps les aspects intervenant dans la réflectance du couvert, les variables observables auxquelles elle permet d'accéder et par quels moyens.

1.2 Des données de télédétection aux variables biophysiques du couvert végétal

1.2.1 La réflectance du couvert végétal : déterminisme et modélisation

Le couvert végétal, en fonction de sa structure horizontale et verticale et des différents objets qui le composent, réfléchit une partie dans la direction du capteur, l'autre partie pouvant être absorbée ou diffusée au sol (FIG. 1.3). La réflectance enregistrée au niveau du capteur dépend à la fois de

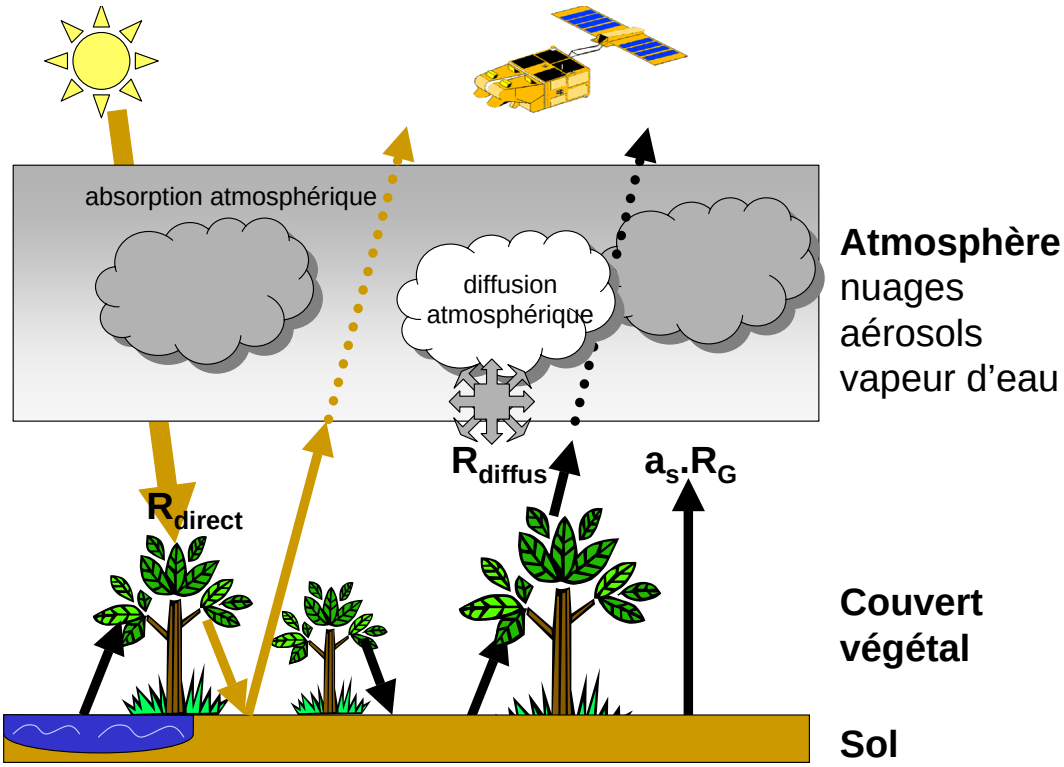

Fig. 1.3 – R_{diffus} = *rayonnement solaire diffus par l'atmosphère ;* R_{direct} = *rayonnement solaire direct ;* R_G = *rayonnement solaire spectral = rayonnement global =* R_{diffus} + R_{direct} *;* a_s = *albédo de surface.*

la surface et de l'atmosphère. Dans cette étude, nous ne considérerons pas explicitement les effets atmosphériques pour lesquels une abondante littérature existe (*e.g.* King [155] ; Kaufman and Tanré [152]) et préférons nous concentrer sur le signal mesuré au niveau de la surface de la végétation.

Les feuilles constituent le principal élément (parmi ceux du couvert) affectant la réflectance, par rapport aux autres organes végétaux. Cependant, un couvert végétal ne peut pas être assimilé à une feuille de taille infinie (Jacquemoud [140]) et sa réflectance ne dépend pas seulement des propriétés optiques propres de ses éléments constitutifs. Sur le terrain, en opposition au comportement d'un feuillage en laboratoire, s'ajoutent l'influence de l'angle de prise de vue, l'architecture du couvert et le sol sous-jacent.

La modélisation des propriétés optiques des couverts végétaux nécessite donc la prise en compte des trois niveaux : le sol, le couvert, et la feuille. Les modèles de transfert radiatif (MTR) prennent peu en compte les autres organes végétaux même s'ils peuvent jouer un rôle important à certaines saisons. L'étude des propriétés optiques des feuilles (*e.g.* Guyot [119]) et leur modélisation (*e.g.* Jacquemoud and Baret [143]) font l'objet de beaucoup de travaux, dont un état de l'art est donné par Jacquemoud and Ustin [145]. Il en est de même pour l'étude de l'effet de l'architecture du couvert (*e.g.* Rochdi [220]) et la réflectance du sol sous-jacent (*e.g.* Stoner and Baumgardner [231]).

1.2.2 Variables observables par télédétection optique

Par télédétection dans le domaine spectral solaire, on peut accéder à certaines caractéristiques du couvert végétal. Ce sont les caractéristiques qui influent le plus sur la signature spectrale et/ou directionnelle de la végétation. Les caractéristiques biophysiques observables les plus utilisées pour la compréhension du fonctionnement des écosystèmes sont l'indice de surface foliaire (LAI), le contenu

en chlorophylle (Cab), la fraction du rayonnement photosynthétiquement actif absorbé par le couvert (fAPAR), le taux de couverture (fCover) et enfin l'albédo.

a. LAI[2] : l'indice de surface foliaire

Définition 1.1. LAI

Le LAI est défini par la surface totale d'éléments de végétation verts (ne considérant qu'un seul côté des feuilles) par unité de surface au sol horizontal (Privette [212]).

Le LAI est sans doute l'élément observable par télédétection le plus important du couvert. En effet, comme les feuilles sont considérées comme les principales interfaces avec l'atmosphère pour les transferts de masse et d'énergie (Rosenberg *et al.* [221]), le LAI décrit à la fois :

- une quantification directe de la végétation verte et indirecte de la biomasse sur la surface observée ;
- la potentialité de la photosynthèse disponible pour la production primaire ;
- la quantification de la respiration des plantes ;
- une caractérisation de l'évapotranspiration (H_2O) et des flux de carbone entre la biosphère et l'atmosphère ;
- une mise en évidence des zones gravement affectées (zones brûlées, attaquées par des parasites...).

Ainsi, le LAI est une variable très couramment utilisée, par exemple :

- pour la prédiction de rendement en cours de culture (Guérif *et al.* [113]),
- dans les modèles de transfert Sol-Végétation-Atmosphère (*e.g.* Olioso *et al.* [198]),
- dans les modèles de fonctionnement du couvert (*e.g.* Brisson *et al.* [37] [38]),
- dans les modèles de transfert radiatif pour le calcul de la réflectance (*e.g.* Verhoef [238]).

Ses valeurs peuvent varier de 0 pour un sol nu à 6-7 pour une culture au cours du cycle, jusqu'à 15 dans les cas extrêmes (forêts tropicales).

b. Cab[3] : le contenu en chlorophylle

Le contenu en chlorophylle, exprimé en masse par unité de surface de feuille ($\mu g.cm^2$ typiquement) est un très bon indicateur de stress du couvert végétal (stress azotés, hydriques...) et est responsable de la couleur verte des feuilles. Sa quantité peut se calculer au niveau de la feuille et au niveau du couvert en multipliant la quantité de chlorophylle dans une feuille par le LAI. Elle se cartographie facilement par télédétection de par sa forte influence sur la réflectance aux longueurs d'onde avoisinant 550 nm : une augmentation du contenu en chlorophylle implique une diminution de la réflectance et de la transmittance des feuilles, d'un effet maximum dans les bandes d'absorption de la chlorophylle.

c. fCover[4] : la fraction de couverture

Le taux de couverture correspond à la fraction de trou dans la direction du nadir. Cette variable représente donc la probabilité pour que le rayonnement solaire atteigne le sol sans avoir été intercepté par les feuilles. Elle est utilisée pour distinguer le sol de la végétation pour certains processus tels que l'évapotranspiration. La fraction de couverture dépend de certaines caractéristiques du couvert comme l'indice de surface foliaire (elle diminue lorsque le LAI augmente), et en général de sa structure.

[2] Leaf Area Index
[3] Chlorophylle a et b
[4] Cover fraction

d. fAPAR[5] : la fraction de rayonnement photosynthétiquement actif absorbé

Le fAPAR représente la fraction de rayonnement photosynthétiquement actif (le PAR) du domaine spectral [400 - 700 nm] absorbé par la chlorophylle du couvert végétal. Cette variable résulte du bilan radiatif en fonction des réflectances hémisphériques du sol R_g, du couvert R_C, et de la transmittance hémisphérique du couvert T_C :

$$fAPAR = 1 - R_C - (1 - R_g) \cdot T_C,$$

mais elle se calcule généralement à partir du LAI, de propriétés de structure du couvert, et des propriétés optiques des feuilles et du sol. Elle dépend typiquement des conditions géométriques d'illumination, contrairement au fCover, donc de l'heure de la mesure, et n'est pas une variable intrinsèque au couvert. Le fAPAR est souvent utilisé dans les modèles de fonctionnement de la végétation pour estimer la production de biomasse et le rendement (Monteith [186], voir §1.3.4).

e. l'albédo

L'albédo d'une surface représente la valeur de sa réflectance spectrale hémisphérique intégrée sur une gamme de longueur d'onde. Cette variable prenant ses valeurs entre 0 et 1 a une très grande importance dans les échanges énergétiques entre le couvert et l'atmosphère. C'est une variable qui se détermine par les caractéristiques de structure du couvert, de propriétés optiques des feuilles et du sol, et de la géométrie d'éclairement. De nombreux travaux ont eu pour but de l'estimer à partir de mesures de télédétection à différentes échelles spatiales et temporelles (par exemple Dedieu *et al.* [68] ; Cabot [40] ; Weiss [245]). Enfin, elle n'est pas intrinsèque au couvert du fait de sa dépendance aux conditions d'illumination.

1.2.3 Processus biophysiques liés aux variables observables

Les variables observables décrites précédemment interviennent dans les processus biophysiques du couvert végétal. Elles doivent donc également permettre de les caractériser. Les **modèles de transfert radiatif** décrivent les relations entre ces variables d'état et les flux mesurés par les capteurs : ils simulent la réflectance du couvert végétal en fonction de ces variables, et sont basés sur des lois physiques. On peut alors lier chacune de ces variables d'état aux processus (Frossard *et al.* [90]) intervenant dans le fonctionnement du couvert et que l'on souhaite caractériser.

a. Les processus principaux intrinsèques au couvert

- **la photosynthèse** (diurne) : elle consiste en une transformation par la plante de l'énergie lumineuse en énergie chimique pour la *fabrication de matière sèche* et pour alimenter la *respiration*. Elle se traduit très globalement par ces trois étapes (Fig. 1.4) :
  1. absorption de gaz carbonique ;
  2. production de glucides (énergie chimique) par réduction du gaz carbonique ;
  3. rejet d'oxygène.
- **la respiration** (diurne et nocturne) : elle consiste en une transformation de l'énergie chimique obtenue par photosynthèse, pour l'*entretien* des structures déjà existantes de la plante, et pour la synthèse de futures structures permettant sa *croissance*. Elle se traduit (Fig. 1.4) par :
  1. absorption d'oxygène ;
  2. production d'électrons et de protons (pouvoir réducteur) et de liaisons riches en énergie ;
  3. rejet de gaz carbonique.

[5] Fraction of Absorbed Photo-synthetically Active Radiation

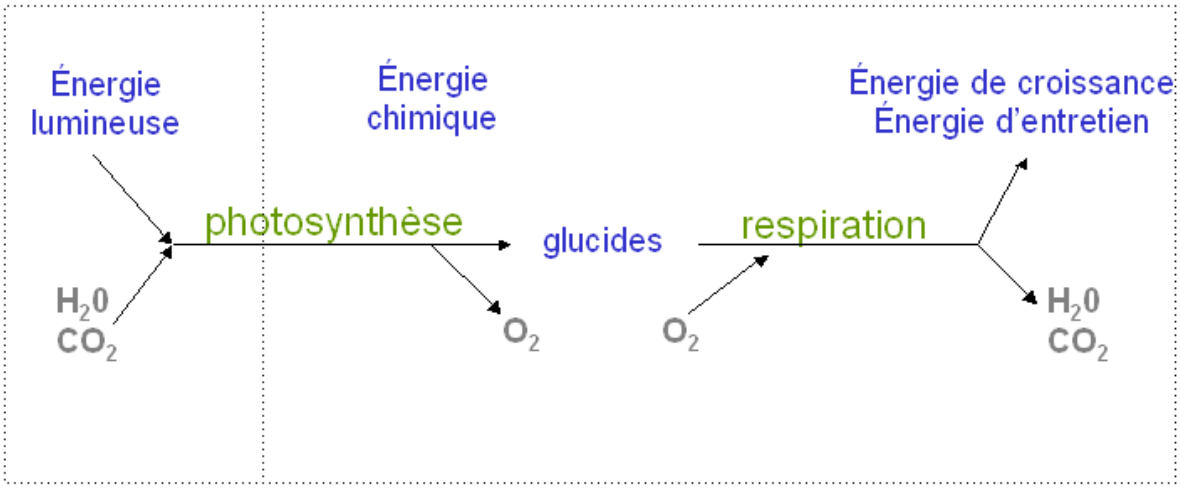

FIG. 1.4 – *Représentation schématique simplifiée des processus de conversion de l'énergie lumineuse en énergie chimique par la photosynthèse, et de sa transformation par la respiration dans la plante.*

- la **transpiration**, liée à l'alimentation hydrique de la plante correspondant à l'évaporation de l'eau liquide des feuilles, en général compensée par un flux d'eau liquide en provenance des racines. Le changement de phase de l'eau pendant l'évaporation libère la chaleur latente qui permet de tempérer le couvert en le refroidissant. L'alimentation en eau de la végétation est déterminante pour sa croissance. En effet, les échanges de carbone avec l'atmosphère pour la photosynthèse se font par les mêmes voies que les échanges d'eau pour la transpiration : les stomates.
- l'absorption des éléments minéraux et en particulier l'azote est nécessaire pour la croissance, et influe indirectement sur l'état de l'appareil photosynthétique notamment sur les pigments tels que la chlorophylle.

b. Relations entre variables observables et processus

Le LAI, intervenant directement dans les processus, est à la fois une conséquence de l'historique du fonctionnement -tout stress joue sur le LAI- et une cause du fonctionnement puisqu'il est l'interface entre les échanges gazeux. Il joue également un rôle dans l'interception de l'eau avant l'arrivée au sol.

Le fCover est une bonne mesure de la quantité de végétation présente. Sa dynamique peut être, par exemple, utilisée pour décrire la phénologie.

L'albédo permet de quantifier les échanges d'énergie radiative, et détermine donc en partie la température du couvert et le flux de chaleur latente.

La chlorophylle (Cab) est principalement présente dans les chloroplastes -organes de la photosynthèse qui se situent essentiellement dans les feuilles- et est liée à la teneur en azote. Cependant, la teneur en azote, facteur limitant de la croissance, se divise en deux parties distinctes : l'azote de structure, qui peut varier selon l'espèce, la variété... , et l'azote des protéines intervenant dans la photosynthèse. Seule cette deuxième fraction de l'azote est liée à la teneur en chlorophylle.

On résume ces relations entre processus et variables observables dans le tableau 1.1.

Variables observables	**Processus associés**
indice foliaire : **LAI** PAR intercepté : **fAPAR** structure du couvert : **fCover**	photosynthèse, respiration, transpiration, quantification de la végétation
contenu en Chlorophylle : **Cab**	assimilation azote, photosynthèse
albédo	bilans d'énergie et hydrique

Tab. 1.1 – *Relations entre variables accessibles par télédétection dans le domaine optique et les principaux processus du couvert végétal.*

c. Conclusion

Nous avons mis en évidence les relations entre les processus caractérisant le fonctionnement de la végétation et les variables observables par télédétection. Une description optimale des relations entre ces caractéristiques biophysiques et la réflectance du couvert végétal s'avère alors indispensable (étape 2, Fig. 1.1). Ces relations se décrivent de manière générale par différentes méthodes d'estimation.

1.2.4 Estimation des variables observables par télédétection

a. Classification des méthodes d'estimation

On distingue Tab. 1.2 les approches d'estimation des caractéristiques biophysiques du couvert à partir des données de télédétection selon l'espace où elles s'appliquent :

- ⇝ **l'espace des données radiométriques** $\rho = (\rho_i)_{i=1,\dots,n}$
  Dans cet espace, les méthodes consistent essentiellement à minimiser une fonction coût représentant l'écart entre les réflectances observées et celles simulées par un modèle de transfert radiatif. Il existe un grand nombre de méthodes possibles, dont les tables de correspondance (LUT), les méthodes d'optimisation itérative si le modèle est inversible, les algorithmes génétiques...
- ⇝ **l'espace des variables biophysiques du couvert végétal** $\theta = (\theta i)_{i=1,\dots,p}$.
  Les méthodes travaillant dans l'espace des variables biophysiques sont apparues les premières dans l'utilisation des données satellites puisqu'elles ne nécessitaient pas de modèle de transfert radiatif. Elles sont basées sur un apprentissage de la relation entre les caractéristiques biophysiques et les données de réflectance. Cette relation se comporte ainsi comme un modèle paramétrique jouant le rôle d'un MTR inverse : il utilise la réflectance mesurée en entrée pour calculer les variables biophysiques du couvert végétal. Cette définition regroupe les méthodes basées sur la régression empirique utilisant des mesures effectuées au sol, des réseaux de neurones entraînés par exemple sur des simulations de MTR, et les indices de végétation (IV).

Enfin, on considère deux types d'observations permettant l'estimation des paramètres biophysiques du couvert : on peut avoir accès à des mesures provenant d'une expérimentation (effectuées au sol par exemple), ou à des réflectances simulées par un modèle de transfert radiatif.

Minimisation sur / Type de données	réflectances	variables d'état
modèle	LUT inversion de MTR	réseaux de neurones indices de végétation
expérimentation	LUT	régression empirique

Tab. 1.2 – *Classification des principales méthodes permettant l'accès aux observables par télédétection : inversion de modèle de transfert radiatif, LUT (Look Up Table ou table de correspondance), réseaux de neurones, régressions empiriques ou indices de végétation.*

La théorie de ces différentes approches est décrite succinctement dans les parties suivantes. Nous mettrons en évidence les performances de trois d'entre elles (IV, inversion, régression linéaire) dans le cadre de la base ADAM § 4.1.2. Les LUT et les réseaux de neurones appartiennent au groupe des méthodes hybrides, c'est-à-dire conciliant des relations empiriques et physiques entre la réflectance mesurée et les caractéristiques biophysiques du couvert (Weiss [243]). Notons que ces deux méthodes n'ont pas été appliquées dans ce travail.

b. Minimisation dans l'espace des données radiométriques

Les équations du transfert radiatif permettent de déterminer la réflectance du couvert si l'on connaît les propriétés optiques et géométriques de ses éléments constitutifs. Par contre, il n'existe pas de relation univoque entre les caractéristiques biophysiques d'un couvert végétal et sa réflectance. Pour cette raison, on procède souvent, après un choix optimal des paramètres que l'on souhaite estimer, à une inversion de modèle de transfert radiatif.

Ceci se fait généralement par des méthodes de minimisation de l'écart entre simulations et observations de réflectance utilisant des algorithmes d'optimisation itérative (i) ou une approche discrète avec les tables de correspondance (ii).

On utilisera pour cette classification les notations suivantes : ρ la réflectance du couvert végétal est observée par télédétection (ρ_{mes}) ou simulée (ρ_{est}) par un modèle de transfert radiatif (MTR) en fonction de variables biophysiques réelles que l'on souhaite estimer (θ) et de paramètres auxiliaires (β) :

$$\rho_{est} = MTR(\theta, \beta)$$

b.i/ Inversion de modèles par optimisation itérative

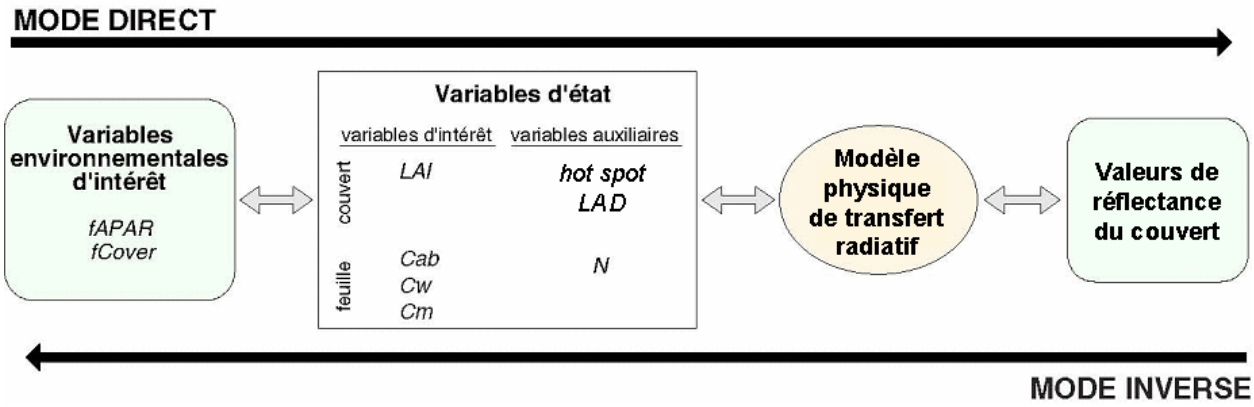

FIG. 1.5 – *Représentation schématique d'un modèle physique de transfert radiatif dans les modes direct et inverse (inspirée de Bacour [5]). LAD (LAD : Leaf Angular Distribution, distribution des directions normales foliaires) est une fonction de distribution d'angles foliaires ; N détermine la structure des feuilles ; Cms, Cab et Cw sont respectivement les contenus en matière sèche, chlorophylle et eau.*

Description générale. L'inversion de modèles de transfert radiatif, représentée sur le schéma 1.5, consiste à résoudre le problème suivant :

$$\text{trouver } \theta \text{ tel que } (\theta, \beta) = MTR^{-1}(\rho_{mes}) \tag{1.1}$$

Cette approche utilise des algorithmes d'optimisation itérative pour minimiser l'écart entre simulations et observations de réflectance. En pratique, elle nécessite 4 ingrédients principaux :

$\rightsquigarrow$ **des observations de réflectance du couvert végétal** ρ_{mes} ;

⇝ **une fonction coût** f représentant principalement l'écart quadratique entre les réflectances simulées par le MTR et les réflectances mesurées par le capteur, que l'on souhaite minimiser à l'aide de l'estimation de paramètres optimaux ;

⇝ **un jeu de variables** θ que l'on souhaite estimer et dont la fonction coût dépend ; dans notre cas, cela peut être les variables LAI, LAD...

⇝ **un ensemble de contraintes** (θ_0, σ_0) sur les paramètres à estimer, qui peut être interprété soit comme une *information a priori* (IAP) pour éviter que l'algorithme ne converge vers des solutions non physiques ou non acceptables, soit comme des *contraintes* qu'on souhaite imposer aux paramètres lors de l'identification, pour des raisons particulières à la situation spatiale.

La fonction coût dont l'algorithme détermine le minimum peut typiquement s'exprimer par la somme d'un terme exprimant l'écart entre réflectances simulées et mesurées, et un terme représentant les contraintes :

$$f(\theta) = (\rho_{mes} - \rho_{est})^T W^{-1} (\rho_{mes} - \rho_{est}) + (\theta - \theta_0)^T C^{-1} (\theta - \theta_0) \tag{1.2}$$

où :

- θ est le vecteur de paramètres biophysiques d'entrée du MTR que l'on cherche à estimer, avec comme valeur *a priori* θ_0 ;
- ρ_{est} sont les réflectances simulées par le MTR en fonction de θ et de paramètres additifs non estimés (configuration géométrique par exemple) ;
- ρ_{mes} sont les réflectances mesurées ;
- Le poids que l'on associe à chacun des deux termes, en fonction de la confiance et de la connaissance que l'on accorde aux mesures ou à l'information *a priori*, est exprimé par l'inverse des matrices de covariance d'erreur associées aux réflectances (W) et à l'information *a priori* (C).

Les deux matrices de covariance W et C, ainsi que les valeurs *a priori* θ_0 seront définies de façon appropriée à cette étude § 4.1.2.

Quelques méthodes d'optimisation et applications au transfert radiatif. Pour minimiser la fonction coût, on distingue deux grands groupes de méthodes : les méthodes déterministes (algorithmes d'optimisation à direction de descente, méthode du simplexe), et les méthodes de recherche aléatoire (ou stochastiques) telles que le recuit simulé.

- Les **méthodes à direction de descente**, de type gradient conjugué ou Quasi-Newton, qui consistent à explorer l'espace de l'ensemble des variables estimées simultanément. Cette exploration s'effectue le long d'une direction de descente calculée à chaque itération en utilisant la fonction et son gradient, ou une approximation du gradient, ou même une approximation du Hessien. Étant également utilisées pour l'assimilation de données dans les modèles de fonctionnement du couvert végétal, elles seront détaillées § 2.4.1.

  Avant les années 1980, peu de travaux ont envisagé d'utiliser l'inversion de modèles de transfert radiatif (et de surcroît à l'aide des méthodes à direction de descente) pour estimer les caractéristiques biophysiques du couvert à partir de mesures de réflectance : l'inversion avait pour objectif premier la validation des MTR. La première application en 1984 fût l'inversion de SAIL (Verhoef [238]) par Goel et Thompson [102], puis du modèle couplé PROSPECT+SAIL par Jacquemoud *et al.* [144] pour estimer le LAI, la LAD, la structure des feuilles, le contenu en chlorophylle (Cab) ou encore le contenu en matière sèche.

  Jacquemoud *et al.* [142] proposent une comparaison des performances de l'inversion de trois modèles de transfert radiatif issus du couplage de PROSPECT (modèle de propriétés optiques des feuilles) et des modèles de réflectance des couverts végétaux SAIL, KUUSK (Kuusk [158]), IAPI (Iaquinta et Pinty [134]). Leurs résultats, utilisant un algorithme de type Quasi-Newton, montrent globalement que les paramètres de structure des feuilles et la teneur en

matière sèche ne sont pas identifiables par inversion. L'estimation de Cab et de LAI est en revanche cohérente avec la vérité terrain, les performances des modèles ne présentant pas de différence significative.

- D'autres méthodes telles que le **le Simplexe de Nelder-Mead** ne nécessitent que le calcul de la fonction coût, et non de son gradient. Cette technique de minimisation, développée par Nelder et Mead [192], appartient en effet aux méthodes de minimisation sans contrainte de recherche directe. Elle est à ne pas confondre avec la méthode du simplexe (Dantzig) qui résout les problèmes de programmation linéaire *avec contrainte*.

  Elle consiste en une exploration géométrique du domaine des paramètres à estimer par un simplexe de P+1 sommets, où P est le nombre de paramètres que l'on souhaite estimer. À chaque pas de la recherche, un nouveau point est généré dans ou près du simplexe actuel. La valeur de la fonction au nouveau point est comparée à celle aux sommets du simplexe, et si le nouveau point minimise plus la fonction que le point du simplexe comparé, ce dernier est éliminé du simplexe et remplacé par le nouveau point.

  Plus précisément, l'algorithme procède ainsi (Fig. 1.6) :
  Commençant par le sommet donnant la valeur de la fonction coût la plus importante, l'algorithme l'élimine, et détermine un nouveau sommet situé à l'opposé par *réflexion* (point X_r). Si ce point donne une valeur suffisamment faible à la fonction coût, le simplexe subit une *expansion* de facteur 2 (point X_e). Si ce n'est pas le cas, il subit une *contraction* et considère le sommet X_c, milieu de X_3 et X_{ce}. Si X_c minimise plus la fonction coût que X_3, il élimine X_3 pour le remplacer par X_c, puis reprend les étapes à partir de la réflexion. Sinon, c'est-à-dire si X_3 satisfait plus le critère que X_c, le simplexe subit une réduction des P moins bons sommets en les remplaçant par un nouveau sommet à mi-chemin entre ceux-ci (sur la figure : $X_{2'}$ et $X_{3'}$) et le meilleur (non éliminé, X_1).

  Le renouvellement des sommets du simplexe est effectué par ces étapes de réflexion, expansion, contraction et réduction jusqu'à ce que la taille du simplexe soit inférieure au critère choisi. La solution finale minimum de f est alors le barycentre de ses P+1 sommets.

  La méthode du simplexe de Nelder-Mead appliquée aux modèles de transfert radiatif en mode inverse, simple de mise en œuvre, a fait ses preuves dans les années 1990 sur plusieurs modèles et types de couverts végétaux : par exemple, Shultis-Myneni sur du soja (Myneni *et al.* [190]), DISORD sur des prairies (Privette *et al.* [211]), Kuusk+PROSPECT sur divers couverts céréaliers (Bicheron et Leroy [25]), PROSPECT sur la forêt (Demarez [71]) pour estimer le LAI, la LAD, le Cab, la réflectance du sol ou l'épaisseur des feuilles.

- le **recuit simulé**, appartenant à la famille des algorithmes de Monte-Carlo est une méthode stochastique, c'est-à-dire que la recherche du minimum de la fonction coût se fait de façon aléatoire. Il est particulièrement intéressant pour la minimisation d'une fonction comportant de nombreux minima locaux profonds dans lesquels les méthodes du gradient se trouvent piégées. En effet, cet algorithme favorise les descentes sur la fonction coût, mais sans interdire tout à fait les remontées, tout en diminuant progressivement la probabilité des remontées à des valeurs lointaines d'être testées. Il explore ainsi les minima locaux sans rester piégé et tend vers un minimum local assez proche de la solution. Cette méthode de recherche globale est décrite plus en détail en annexe A.2.2

  Dans le domaine du transfert radiatif visant à déterminer les propriétés du couvert végétal, le recuit simulé a été peu utilisé en raison de ses temps de calcul prohibitifs. Une application récente par Bacour *et al.* [7] utilise le recuit simulé pour explorer aléatoirement l'espace directionnel des réflectances pour éliminer les directions de visée non optimales (mauvaise adéquation modèle-mesure), avec pour objectif l'inversion de PROSAIL pour l'estimation des variables de structure du couvert. Cette étude a permis de montrer la nécessité d'une certaine quantité de directions de visée (entre 10 et 20) pour estimer les variables structurales, et une préférence pour les angles de visée situés en diffusion avant et autour du nadir pour l'estimation du LAI.

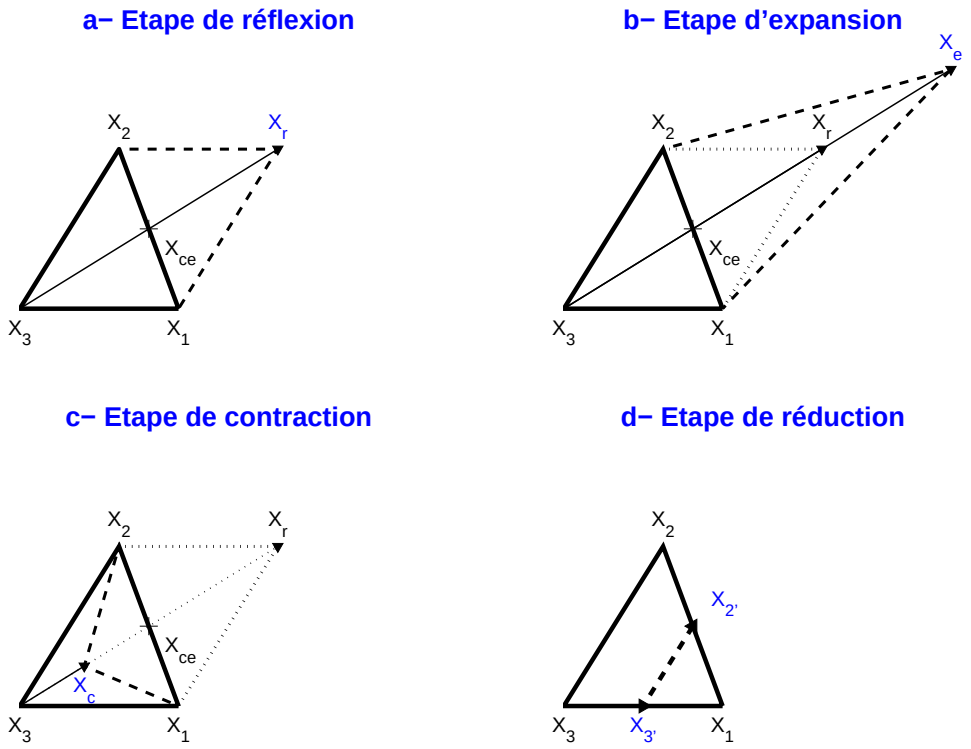

Fig. 1.6 – *Algorithme de recherche du simplexe. X1 : point représentant le vecteur donnant la plus faible valeur de la fonction coût ; X2 : point représentant le vecteur donnant la seconde plus faible valeur de la fonction coût ; X3 : point représentant le vecteur donnant la plus forte valeur de la fonction coût ; Xce : barycentre des deux meilleurs points X1 et X2 ; Xr : point obtenu par réflexion de X3 par rapport à Xce ; Xe : point obtenu par expansion d'un facteur 2 de Xr ; Xc : point obtenu par contraction, situé entre X3 et Xce ; X2' et X3' : points obtenus par réduction de X2 et X3 respectivement vers X1. Extrait de Houlès, 2004 [129] d'après Sorooshian et Gupta, 1993 [228].*

Conclusion. La méthode d'inversion non-linéaire la plus couramment utilisée sur les modèles de transfert radiatif dans le but d'estimer les caractéristiques du couvert végétal reste l'optimisation itérative avec calcul du gradient de la fonction coût, relativement robuste et rapide mais tendant parfois vers des minima locaux. Bien sûr, l'information *a priori* choisie dans la fonction coût joue un rôle considérable à ce niveau (Combal *et al.* [58]). De plus, on peut tenter d'éviter ces solutions locales en démarrant l'algorithme de plusieurs valeurs initiales des paramètres.

Si le gradient de la fonction coût ne peut vraiment pas se calculer de façon fiable, on a en général recours à du simplexe de Nelder-Mead qui présente une approche tout aussi cohérente que le Quasi-Newton comme l'ont montré Iaquinta *et al.* [135] sur des données synthétiques.

Pour des problèmes possédant trop de solutions locales proches de l'optimum, le recuit simulé se place en meilleure alternative, mais il est cependant moins rapide et plus difficile à implémenter du fait du nombre de ses paramètres (la température initiale, la loi de décroissance de la température, les critères d'arrêt ou la longueur des paliers de température) qui se choisissent souvent de façon heuristique.

b.ii/ Les tables de correspondance

Description de la méthode. Le principe des **LUT** est de créer une base de données de référence composée :

- d'un maximum de combinaisons possibles de caractéristiques biophysiques représentant une grande diversité de couverts végétaux,

– et de leur réflectance correspondante simulée ou mesurée, dans un certain nombre de bandes spectrales et de directions d'observation considérées.

La LUT peut être basée soit sur des réflectances simulées par un modèle de transfert radiatif, soit sur des réflectances mesurées. Cependant, ce dernier cas nécessiterait d'avoir un échantillonnage très complet des variables biophysiques du couvert, ce qui est très difficile à acquérir en pratique.

Pour résoudre le problème inverse, la LUT est triée en fonction d'un critère à minimiser, typiquement la RMSE [6] entre les réflectances (Combal [58] ; Weiss [246] ; Fig. 1.7). Cette méthode non paramétrique repère ainsi les cas les plus appropriés (ceux dont la RMSE est minimale à un certain seuil) dans la table et détermine les caractéristiques correspondantes du couvert associées à un certain intervalle de confiance. Il s'agit donc d'une méthode discrète puisqu'elle s'applique sur un ensemble discret de réflectances, et globale puisqu'elle explore toutes les valeurs possibles. Ceci est la principale différence avec les méthodes d'optimisation itérative décrites précédemment. Ainsi, elle consiste schématiquement à résoudre le problème (1.3) :

$$\text{trouver } \hat{\theta} = \text{Arg}\min_{\theta} [\rho_{mes} - \rho_{est}]^2 \tag{1.3}$$

où $\rho_{est} = MTR(\theta, \beta)$, avec β le vecteur de paramètres auxiliaires du modèle de transfert radiatif MTR.

Les LUT nécessitent, une fois la base générée, peu de coût de calcul relativement aux méthodes d'inversion. Elles sont devenues une des principales méthodes à laquelle on a recours lors de problèmes de grande taille, dans beaucoup d'autres disciplines (correction atmosphérique par exemple ; Liang [171]). Cependant, leurs performances restent fortement conditionnées par l'échantillonnage dans les espaces des variables biophysiques *et* des réflectances de par l'aspect discret de cette approche.

Quelques applications au couvert végétal. Les algorithmes utilisant les tables de correspondance pour la caractérisation des couverts végétaux ont été introduits par Gobron *et al.* [101] et Knyazikhin *et al.* [156] pour déterminer le LAI et le fAPAR pour les capteurs AVHRR, MODIS et MISR. Zhang *et al.* [252] les ont appliqués au radiomètre POLDER, puis Weiss *et al.* [247] les ont développés pour estimer le Cab et le fCover.

c. Minimisation dans l'espace des variables biophysiques

c.i/ Les réseaux de neurones

Description de la méthode. Les réseaux de neurones sont une méthode de minimisation de distance entre les variables biophysiques observées et simulées. Lorsque l'on ne peut inverser le modèle de transfert radiatif, il peut être particulièrement adapté d'utiliser les réseaux de neurones pour remplacer le modèle inverse. On peut alors exprimer les variables observables comme fonction des données de télédétection :

$$\theta = RN(\rho) \tag{1.4}$$

Les réseaux de neurones se caractérisent dans un premier temps par la génération d'une base d'apprentissage, du même type que les LUT. Une fois la base générée, l'entraînement du réseau consiste à estimer de manière itérative les coefficients (poids synaptiques et biais, voire Fig. 1.8) du réseau de telle sorte que les sorties soient les plus proches possibles des variables biophysiques qui ont servi à la simulation des réflectances de la base d'apprentissage (Weiss [243] ; Bacour [5]).

Lorsque la phase d'apprentissage a été effectuée, l'utilisation opérationnelle du réseau de neurones est très rapide, même sur un jeu de données important. De même que dans le cas des tables de correspondance, le choix de l'échantillonnage pour créer la base d'apprentissage conditionne totalement les performance du réseau. Si l'échantillonnage n'est pas optimal, les réseaux de neurones peuvent souffrir de sur-entraînement et mal représenter le comportement général.

[6] RMSE (Root Mean Square Error) : voir définition (2.69) § 2.6.2.

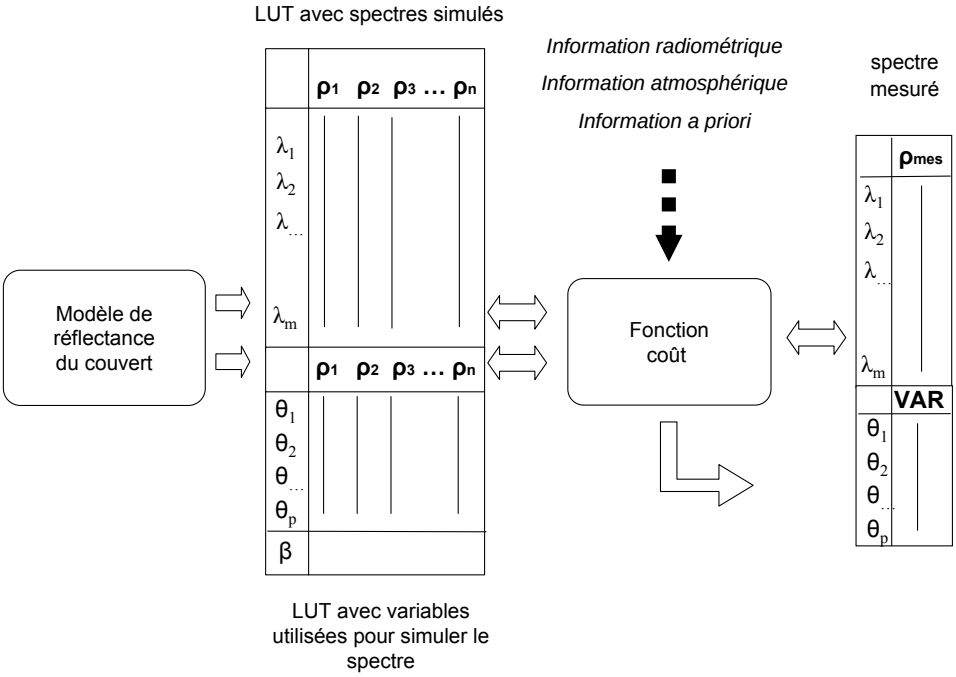

Fig. 1.7 – *Exemple de LUT permettant d'estimer les variables d'entrée* $(\theta_i)_{i=1,\ldots,p}$ *d'un modèle de réflectance du couvert végétal en comparant des spectres mesurés* ρ_{mes} *et simulés* $(\rho_i)_{i=1,\ldots,n}$ *selon plusieurs longueurs d'ondes* $(\lambda_i)_{i=1,\ldots,m}$ *;* β *est le vecteur de paramètres auxiliaires du modèle de réflectance (inspiré d'une communication personnelle de W. Dorigo).*

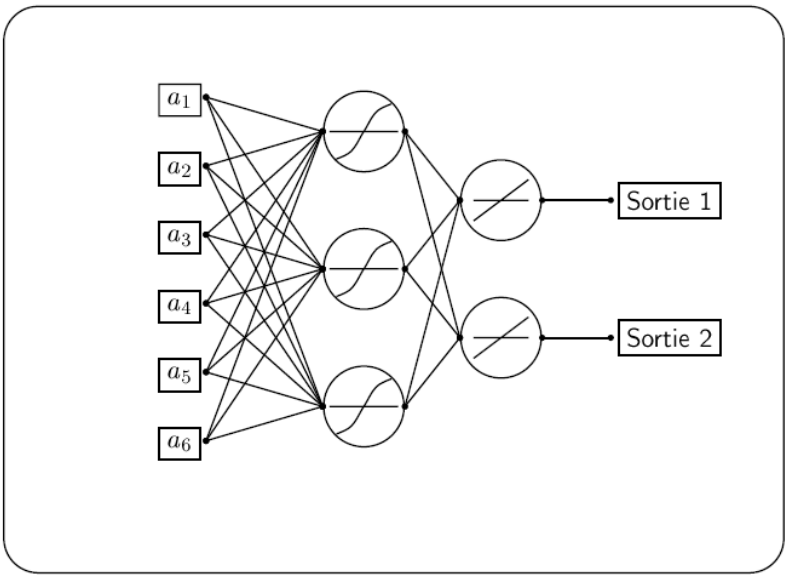

Fig. 1.8 – *Représentation schématique d'un réseau de neurones composé de 6 entrées, une couche cachée à fonctions de transfert sigmoïde, une couche de sortie à fonctions de transfert linéaire, et 2 sorties (Weiss [243])*

Quelques applications au couvert végétal. Les applications des réseaux de neurones pour caractériser les variables biophysiques du couvert végétal ont déjà fait leurs preuves dans les années 1990 : Chuah [52] les a développés pour calculer la teneur en eau et la taille des feuilles. Baret, Clevers *et al.* [10] montrent l'apport des réseaux par rapport aux indices de végétation, et en particulier lorsque le réseau est entraîné sur des réflectances *simulées*. Fourty et Baret [86] identifient la teneur en eau, le LAI et la matière sèche du couvert, et montrent une amélioration de cette méthode par rapport à une régression multiple. Kimes *et al.* [154] les appliquent à la forêt pour déterminer la biomasse et le nombre d'arbres sur des données radar simulées. Weiss [246] a pu valider cette technique sur différents couverts en estimant le LAI et le fCover sur des données POLDER, après avoir déterminé le Cab et le fAPAR (Weiss et Baret [244]) sur des données provenant du capteur VEGETATION/SPOT4. Enfin, mais c'est une liste non exhaustive de ces applications, Fang et Liang [79] estiment le LAI par des données Landsat-7 en comparant les réseaux utilisant, d'une part, la réflectance à la surface, et d'autre part, la radiance TOA[7], qui ne nécessite pas de correction atmosphérique. Ils obtiennent dans les deux cas des résultats prometteurs.

c.ii/ Approche semi-empirique : les indices de végétation (IV)

Les méthodes utilisant les indices de végétation sont les plus fréquemment utilisées du fait de leur grande simplicité. Elles consistent à exprimer les variables observables de la façon suivante :

$$\theta = g \circ f(\rho) \tag{1.5}$$

où $f(\rho) = IV$ est l'indice de végétation et g est une fonction exprimant la relation entre cet indice et la ou les variable(s) biophysique(s) que l'on veut estimer.

L'indice de végétation idéal se doit d'être à la fois sensible aux caractéristiques que l'on cherche à estimer, et insensible aux facteurs exogènes affectant sa réflectance (diffusion atmosphérique, réflectance du sol, conditions d'illumination).

Définition des IV. Partant du principe d'une forte corrélation entre les propriétés optiques des végétaux et leur teneur en chlorophylle dans le visible, les IV exploitent la différence des réponses spectrales du sol et de la végétation entre différents domaines de longueur d'onde. Ils permettent ainsi de déterminer certaines variables caractéristiques du couvert : le LAI, le fAPAR, le contenu en eau, les déficiences minérales, les attaques parasitaires par exemple.

La plupart des indices de végétation utilisent simplement des combinaisons de bandes deux à deux, en général les bandes rouge (R) et proche infrarouge (PIR). Ce choix provient du fort contraste entre les réflectances spectrales de la végétation verte et du sol entre ces deux bandes spectrales : la chlorophylle absorbe fortement le rayonnement lumineux dans le rouge alors qu'elle n'absorbe plus dans le proche infrarouge. Typiquement, la réflectance d'un couvert végétal est d'autant plus faible dans le visible que son activité photosynthétique est grande, alors qu'elle croît dans le PIR avec l'augmentation du LAI.

On peut réunir les indices de végétation en deux groupes principaux (Malet [179], Guérif *et al.* [118]), les indices de type "rapport" et les indices de type "distance". Ceux-ci sont décrits en annexe A.2.1. Parmi les indices de type "rapport", Le plus classiquement utilisé est le NDVI (Normalised Difference Vegetation Index, Tucker [233]) :

$$\text{NDVI} = \frac{PIR - R}{PIR + R} \tag{1.6}$$

Limites des IV. Les nombreux travaux au sujet des IV ont mis en évidence leur aspect limité par la difficulté d'exprimer la contribution de certains aspects sur le signal radiométrique (voir annexe A.2.1). Les études se sont attachées en particulier à décrire, et à améliorer par l'apparition de nouveaux IV, la prise en compte des effets :

[7] TOA : Top of the Atmosphere

– du sol : Baret and Guyot [12] ; Verstraete and Pinty [239] ;
– de l'atmosphère : Qi *et al.* [213] ; Kaufman et Tanré [153] ; Karnieli *et al.* [151],
– de la saturation du signal radiométrique pour de forts LAI : Myneni et Williams [191] ;
– de la configuration de mesure : Govaerts *et al.* [105] ; Leroy et Hautecoeur [169] ; Bégué [20].

Passage des IV à des variables observables. Les indices de végétation permettent de déterminer les variables observables telles que le LAI et le fAPAR (Asrar *et al.* [4], Myneni *et al.* [190]) par des relations semi-empiriques (fonction g de l'équation (1.5)). Les IV subissent une saturation pour un LAI trop élevé, comme l'ont démontré Baret et Olioso [16] pour le NDVI, Clevers [54] pour le PVI, et Baret *et al.* pour le TSAVI [14]. De fait, on peut identifier les IV à une fonction exponentielle basée sur la loi de Beer dépendante du LAI. Ces relations semi-empiriques ont permis de comparer les différents indices de végétation (Baret et Guyot [12]) et de prouver que ceux prenant en compte les effets du sol (PVI, SAVI, TSAVI) réduisent très nettement le bruit pour des couverts de LAI faible, inférieur à 2 ou 3, mais que ces mêmes indices saturent plus vite que le NDVI pour de très forts LAI. De même, le fAPAR étant une fonction du LAI, Baret et Guyot proposent de relier le fAPAR aux IV directement. En ce sens, plusieurs travaux utilisant des simulations de modèles ont montré que les relations fAPAR-IV peuvent s'assimiler à des fonctions quasi-linéaires (Roujean et Bréon [222]).

c.iii/ Approche empirique : la régression linéaire multiple pas à pas

Description de la méthode. La régression multi-linéaire effectuée dans l'espace des variables biophysiques est souvent la première mise en place lorsque l'on souhaite utiliser directement les mesures auxquelles on a accès sans utiliser de modèle de transfert radiatif. En effet, elle possède l'avantage de ne nécessiter aucune connaissance *a priori* sur les processus physiques intrinsèques au couvert, en terme d'absorption du rayonnement par ses composés biochimiques. Les variables observables s'expriment simplement de la façon suivante :

$$\theta = \hat{f}(\rho) \tag{1.7}$$

où $\hat{f}$ est générée par une base d'apprentissage.

Pour développer cette méthode, il s'agit donc de déterminer une fonction basée sur des relations statistiques entre les réflectances et les caractéristiques biophysiques du couvert végétal. Ceci se décompose en 2 étapes :

1. **Ajustement des coefficients de régression.** Dans un premier temps, un échantillon représentatif va permettre d'étalonner le modèle : à chaque jeu de mesures radiométriques (à différentes longueurs d'onde, par exemple imposées par le capteur) correspond une variable d'intérêt (Cab, teneur en azote, ou LAI par exemple), par une fonction multi-linéaire. Les données exploitées dans cette première étape peuvent provenir de mesures effectuées au sol et des valeurs de réflectance correspondantes mesurées par un capteur, ou être synthétiques, par exemple simulées par un modèle de transfert radiatif.

   On calcule ainsi des coefficients de régression caractérisant une fonction de transfert reliant les réflectances pour chaque longueur d'onde (indépendantes) aux caractéristiques du couvert (dépendantes). Par exemple si $\theta = LAI$, cela consiste à calculer :

   $$Coef_{reg} = regression(LAI_{mes}, \rho_{mes1})$$

   de telle sorte que les coefficients $Coef_{reg}$ vérifient :

   $$LAI_{mes} = \sum_{i=1}^{N} Coef_{reg}(i) \cdot \rho_{mes1}(i) + \epsilon$$

   où N est le nombre de bandes spectrales utilisées. ϵ peut définir l'erreur résiduelle du modèle, c'est-à-dire l'erreur affectée au MTR si les données de LAI et de réflectance sont synthétiques, ou l'erreur de mesure évaluée.

2. **Évaluation de la régression sur des données indépendantes.** On applique alors ces coefficients à un nouveau jeu de données de réflectance indépendant (ρ_{mes2}), ce qui permet d'obtenir les valeurs du LAI correspondant :

$$LAI_{est} = \sum_{i=1}^{N} Coef_{reg}(i) \cdot \rho_{mes2}(i)$$

On valide alors le modèle par le calcul de critères, tels que la RMSE, ou le coefficient de détermination (R^2), sur les échantillons de calibration et de validation. Les expressions de ces diagnostics de validation sont développées § 2.6.2.

Quelques applications au couvert végétal. On trouve un état de l'art très complet dans Fourty [85] en 1996 sur l'utilisation de cette méthode pour estimer les caractéristiques du couvert par données de télédétection. Fourty précise notamment qu'un pré-traitement des données radiométriques peut nettement améliorer la précision des estimations issues de ces modèles linéaires. Ceci peut se faire par la transformation de transmittance en équivalent absorptance, ou par la méthode de dérivation des spectres.

Jacquemoud *et al.* [147] estiment les concentrations en azote, protéines et cellulose d'échantillons d'espèces végétales très variées, de même que Grossman *et al.* [111]. Toutefois, Fourty *et al.* [87] démontrent que la régression ne permet pas une estimation robuste des teneurs biochimiques de la feuille.

Ces travaux montrent souvent que la sélection des longueurs d'onde par régression ne correspond pas forcément à ce que l'on connaît en terme de sensibilité spectrale des composants biochimiques (Curran [64]), puisqu'elle varie en fonction de facteurs autres que les caractéristiques chimiques d'absorption de la feuille fraîche : anatomie interne de la feuille (Peterson et Hubbard [205]) par exemple. De fait, l'utilisation de bandes spectrales sélectionnées lors d'autres travaux ne correspond pas systématiquement aux meilleurs choix pour des conditions différentes (Grossman *et al.* [111]) et il faudrait dans l'idéal créer un nouveau modèle par jeu de longueurs d'ondes.

Ce type de régression correspond donc souvent à une première étape pour la spécification de combinaisons spectrales pertinentes et optimales pour caractériser le couvert par des relations empiriques (Gastellu-Etchegorry et Bruniquel-Pinel [91]). D'autres types de régression utilisant les *modèles de mélange linéaire spectraux* exploitent des combinaisons de spectres de référence, typiques de feuilles, de minéraux... , qui semblent donner de meilleurs résultats au niveau de la feuille (Hlavka *et al.* [127]) qu'au niveau du couvert.

En effet, le couvert est caractérisé par une architecture spatiale dont les mélanges linéaires spectraux n'expriment pas suffisamment la complexité (Aber *et al.* [1]). Fourty et Baret [86] proposent l'utilisation conjointe d'une régression multi-linéaire et de réseaux de neurones. Cette approche a permis d'améliorer significativement les estimations des teneurs en eau et en matière sèche sur des données synthétiques.

Ainsi, au niveau du couvert végétal, la régression linéaire ne peut pas tenir compte des effets non intrinsèques au couvert mais influant sur sa réflectance : l'architecture du feuillage, les propriétés optiques du sol sous-jacent, et la diffusion atmosphérique, puisqu'ils représentent une composition non linéaire en réflectance (Myneni *et al.* [190]). Ce procédé statistique reste donc très limité opérationnellement, mais il permet une première approche d'estimation des caractéristiques biochimiques de la feuille ou du couvert sans modèle de transfert radiatif, déterminant une sélection de longueurs d'onde préférentielles et de l'information *a priori*, pour être éventuellement complété par la suite par une autre méthode.

d. Conclusion

Nous avons décrit les différentes méthodes d'estimation des variables observables par télédétection : méthode empirique, semi-empirique, inversion, hybrides, appliquées dans l'espace des variables biophysiques ou dans l'espace des données radiométriques.

- Les tables de correspondance, permettant de développer beaucoup de scénarios différents selon les conditions d'illumination et de visée, les types de couvert, les bandes spectrales. Elles sont très fréquemment utilisées du fait de leur simplicité de mise en œuvre, mais elles nécessitent cependant un échantillonnage optimal.
- Les méthodes d'inversion par optimisation itérative proposent une alternative pour identifier les paramètres d'entrée d'un modèle de transfert radiatif. Elles peuvent cependant parfois nécessiter un coût important d'itérations et surtout converger vers un minimum local. Leur robustesse dépend donc énormément de l'information *a priori* sur les caractéristiques du couvert que l'on ajoutera à la fonction coût, information qui n'est pas toujours évidente à déterminer.
- Les réseaux de neurones, une fois la phase d'apprentissage effectuée, présentent une vitesse de calcul très rapide. Les limitations se situent donc dans l'entraînement qui doit être de même nature que les mesures en terme de directions de visée, d'éclairement et de bandes spectrales, mais aussi de distribution des caractéristiques de la végétation.
- Les indices de végétation permettent de déterminer directement, à partir des réflectances dans plusieurs bandes spectrales, des caractéristiques structurelles du couvert. Mais ils restent limités par l'influence des conditions d'illumination, des effets optiques du sol et de la diffusion atmosphérique, qu'ils essaient de prendre en compte tout en gardant une expression simple.
- La régression multi-linéaire pas à pas est très discutable en terme d'application opérationnelle : elle donne de bons résultats au niveau de la feuille mais ne permet pas de considérer explicitement les effets non linéaires influents au niveau du couvert végétal. Elle reste généralement une étape d'approche vers une autre méthode d'inversion.

De nouvelles approches peuvent encore voir le jour pour exploiter les mesures de réflectance et en déduire les propriétés du couvert, comme par exemple les algorithmes génétiques, méthode encore peu utilisée dans ce domaine, qui utilise astucieusement les propriétés de sélection naturelle et a donné de premiers résultats prometteurs (Lewis [170]).

1.3 Des variables observables par télédétection aux variables agronomiques pour le suivi des cultures

1.3.1 Classification générale

La section 1.2.2 a défini les principales variables biophysiques observables par télédétection caractérisant le couvert végétal, et la partie 1.2.4 a décrit comment les estimer.

Toutefois, ces variables ne peuvent pas servir directement à caractériser le fonctionnement du couvert dans la plupart des cas (Baret *et al.* [9]). En effet, l'intérêt du point de vue des agronomes est surtout de caractériser les *variables agronomiques* du couvert étudié par télédétection : biomasse ou production primaire, nombre de grains par unité de surface ou rendement final... Le monde des télédétecteurs et celui des agronomes se distinguent d'ailleurs particulièrement à travers cette constatation : les premiers utilisent plutôt l'indice foliaire pour caractériser le couvert végétal, tandis que les seconds s'intéressent plutôt à la biomasse. Le lien entre le LAI et la biomasse étant très fort, plusieurs travaux y ont été consacrés au cours des 20 dernières années. On peut les ranger en trois grands groupes principaux :

1. l'approche purement **empirique**, déterminée par des relations instantanées entre variables observables et variables agronomiques.

2. les approches utilisant des modèles de fonctionnement du couvert, parmi lesquelles on distingue dans ce travail :

  2.1. les techniques semi-empiriques, où l'on mettra en commun l'utilisation de modèles simples et les méthodes de **forçage** des observations satellitaires dans des modèles mécanistes.

Le forçage consiste à réactualiser la variable d'état simulée en la remplaçant par la valeur déduite des données radiométriques.

2.2. l'**assimilation** de données de télédétection dans des modèles de fonctionnement du couvert, qui re-calibre les paramètres ou les conditions initiales du modèle afin de faire correspondre les variables d'état simulées par le modèle aux observations dérivées des données satellitaires.

La première partie propose quelques applications empiriques pour caractériser le fonctionnement du couvert végétal. Elle est suivie par une brève description des modèles de processus de surface, ainsi qu'une précision terminologique des termes employés, afin de se placer dans le cadre de l'utilisation combinée de modèles et d'observations satellitaires. Enfin, une synthèse bibliographique des méthodes de forçage dans les modèles de culture (§ 1.3.4) et d'assimilation (§ 1.3.5) est proposée. La synthèse des méthodes d'assimilation s'attachera à leur origine et aux différentes approches utilisées dans tous les domaines, pour ensuite proposer une classification de celles employées en agronomie.

1.3.2 Approche empirique : relations instantanées entre variables observables et variables agronomiques

La première approche, la plus simple, consiste à déterminer des relations empiriques entre variables observables et agronomiques, en apportant une information instantanée sur le couvert. Il apparaît que les informations radiométriques peuvent être reliées ainsi à diverses variables d'état du couvert.

a. LAI et biomasse

Le LAI, variable observable *in situ* et que l'on peut déduire des données de télédétection, est très fortement corrélé avec la biomasse, variable strictement agronomique. Des mesures de LAI et biomasse effectuées lors d'expérimentations différentes sont regroupées dans le travail de Baret *et al.* [13]. Les mesures permettent de déduire des relations instantanées selon la variété aux différents stades phénologiques. Les auteurs constatent qu'il existe cependant autant de relations empiriques que de conditions expérimentales différentes. Cette variabilité, ajoutée à la saturation de la réponse radiométrique pour un LAI trop élevé, c'est-à-dire dans une partie assez importante du cycle de croissance, réduit fortement l'exploitation de ces relations comme un outil de prévision.

De multiples relations empiriques entre les données radiométriques et le LAI ou la biomasse ont vu le jour. Un exemple général utilisant les indices de végétation (estimateur de LAI) est donné par Ikeda *et al.* [138] :

$$\mathrm{IV} = \frac{\log Y - a}{b}$$

où Y représente la biomasse accumulée par les végétaux et IV un indice de végétation tel que le NDVI. Les paramètres a et b du modèle sont considérés comme constants dans le temps et sont estimés par des régressions multilinéaires sur un ensemble d'observations de NDVI et de biomasse. Cependant, on ne peut pas interpoler ou extrapoler les données établies par ce modèle sans intégrer la *dynamique temporelle* des variables d'état. En ce sens, Ikeda *et al.* proposent un autre modèle empirique pour décrire le développement de Y au temps t donné par Y_t :

$$Y_t = Y_0 e^{rt}$$

où r est un taux de croissance constant et Y_0 la biomasse initiale au temps 0. De la même façon, le paramètre r doit être fixé à une valeur adaptée à la culture et à la situation.

b. Indices de végétation et production primaire

La partie (§1.2.4 c.ii/) a décrit comment déduire empiriquement les caractéristiques du couvert à partir d'indices de végétation. Beaucoup de travaux se sont également employés à estimer la **production saisonnière** par le cumul d'indices de végétation : Tucker *et al.* [234] relient le rendement

à du NDVI intégré pendant des périodes spécifiques de la saison de croissance. De même, Quarmby *et al.* [214][215] intègrent des valeurs de NDVI sur la saison, pour déterminer le rendement final du couvert :

$$Yield_{(t)} = A_{1986} + B_{1986} \sum \mathrm{NDVI}_{(t)}$$

où $Yield_{(t)}$ est le rendement d'un champ particulier d'une année spécifiée t, et les coefficients de régression A_{1986} et B_{1986} sont déterminés à partir des données statistiques officielles collectées en 1986. Maselli *et al.* [182] estiment le rendement de cultures à partir du NDVI observé à un stade critique en terme de précision phénologique.

A travers ces deux exemples, il apparaît clairement que les coefficients reliant le NDVI au rendement ne peuvent pas s'appliquer à toutes les conditions. Ils dépendent en effet de l'année, de l'environnement, des technologies appliquées. Des études plus récentes (Unganai et Kogan [235] ; Dabrowska-Zielinska *et al.* [65] ; Liu et Kogan [173]) ont démontré que la combinaison d'indices de végétation tels que le VCI[8] et le TCI[9] (indices créés en particulier pour estimer la sécheresse) permettent de mieux prédire le rendement que le NDVI. Enfin, Manjunath *et al.* [180], incorporent les données météorologiques dans la régression (les pluies mensuelles) et améliorent significativement les prédictions de rendement avec le NDVI : les observations de pluie, en particulier avant la date de semis ont une forte influence sur le rendement final, du fait qu'elles déterminent le développement des racines durant la croissance. Mais ces approches restent encore très empiriques, et n'assurent pas une prise en compte de tous les facteurs influençant la production.

c. LAI, nombre de grains par unité de surface et production

Le rendement d'une céréale s'exprime comme le produit du nombre de grains par unité de surface par le poids moyen d'un grain. L'évaluation du nombre de grains, défini en général juste après le stade de la floraison (Gate [202]), permet donc tout autant un diagnostic de l'état de la culture qu'un pronostic du rendement lui-même. Le nombre de grains par unité de surface est en général assez bien corrélé à la biomasse produite à la floraison, et également au LAI.

On peut également considérer, comme c'est le cas dans le modèle STICS [37] par exemple, que le nombre de grains est fonction de la vitesse de croissance. La vitesse de croissance V étant elle-même fonction du LAI par une expression simple du type :

$$V = \mathsf{RUE}(1 - e^{-k \cdot LAI})$$

avec k un coefficient d'extinction et RUE[10] l'efficacité d'utilisation du rayonnement. Ces deux paramètres peuvent être moyennés sur certaines situations et permettent ainsi d'obtenir une approximation du nombre de grains.

d. Conclusion

Ces travaux, s'ils offrent des améliorations significatives de la prévision, ont en même temps démontré les limites de l'utilisation de relations linéaires empiriques entre la biomasse et les indices de végétation, ou entre la biomasse et le nombre de grains, par leur validité uniquement locale. En effet, ces relations dépendent de l'année considérée, de la culture, de la saison de croissance ou de la région, et ne s'appliquent donc que dans le cadre d'une étude particulière.

Moulin *et al.* [189] montrent que les approches précédentes ne sont valables que si la conversion de l'énergie photosynthétiquement active en biomasse est constante. Ils font observer que divers facteurs de stress peuvent limiter l'efficience de la conversion du rayonnement photosynthétiquement actif en biomasse, et ainsi perturber les relations empiriques directes entre indice de végétation et biomasse. L'utilisation combinée de la télédétection et de modèles de fonctionnement plus complets devrait donc permettre de caractériser explicitement les stress subis par la culture et ainsi aboutir à une meilleure estimation de la production.

[8] VCI : Vegetation Condition Index
[9] TCI : Temperature Condition Index
[10] RUE : radiation use efficiency

1.3.3 Utilisation de modèles de fonctionnement

a. Variables, paramètres et erreurs associées

Ce travail repose en grande partie sur la combinaison d'observations satellitaires avec des modèles dynamiques de fonctionnement de la végétation. Chaque discipline possédant son propre vocabulaire, on adoptera par la suite la distinction suivante :

◇ **variable d'état** : variable que l'on a en général la capacité de mesurer, parmi lesquelles on distingue :
- les variables d'entrée, composées de deux groupes :
  ⇒ les variables de forçage : variables imposées au modèle (*e.g.* données climatiques) ;
  ⇒ les autres variables d'entrée, que l'on peut par exemple vouloir estimer par inversion.
- les variables de sortie, dont l'évolution dans le temps est simulée par le modèle, à partir d'une valeur initiale (*e.g.* la biomasse) ;

◇ **paramètre** : constante nécessaire au modèle pour simuler les variables d'état (*e.g.* le LAI maximal ou la date de semis). Un paramètre ne peut en général pas être mesuré, et ne prend son sens qu'au sein d'un modèle particulier.

Les paramètres et les variables d'entrée, s'ils ne sont pas connus ou mesurables, peuvent alors s'estimer au travers d'un modèle et des observations.

b. Les modèles de fonctionnement de la surface

b.i/ Modèles de processus de surface

Les modèles TSVA[11] (Transferts Sol - Végétation - Atmosphère) consistent à simuler les principaux transferts de masse et d'énergie entre le sol, la végétation et l'atmosphère (transferts radiatifs, hydriques...). Ils sont parfois couplés avec un module d'assimilation du CO_2 atmosphérique par les plantes, permettant d'introduire une végétation interactive (typiquement ISBA-Ags, Calvet *et al.* [43]).

Les DGVM (Dynamics General Vegetation Model) appartiennent à une nouvelle génération de modèles, qui proposent de coupler les processus physiques et biogéochimiques avec la dynamique de la végétation. Ces modèles incluant la végétation interactive permettent une description des échanges biosphériques de CO_2 entre l'atmosphère et la végétation en prenant en compte la biomasse du couvert végétal.

Ainsi, les TSVA gardent pour objectif premier la modélisation des flux et les DGVM permettent une représentation dynamique de la végétation, en général à l'échelle du globe.

b.ii/ Modèles de fonctionnement du couvert

Les modèles de fonctionnement du couvert végétal décrivent à l'aide de variables d'entrée (climatiques par exemple) et de paramètres relatifs aux différents processus, l'évolution temporelle des variables agronomiques ou caractéristiques du couvert : masse nette des différents composants du couvert, surface foliaire... , à chaque pas de temps, ainsi que les processus qui le caractérisent : flux d'énergie, de carbone, et d'eau par la photosynthèse, l'évapotranspiration... Ils reposent, contrairement aux modèles semi-empiriques décrits précédemment, sur la description de mécanismes réels, et prennent en compte de façon dynamique l'action des différents opérateurs et leur interaction, permettant une simulation en continu des variables de sortie (Gate [202]).

On attribue leur origine aux travaux de De Wit (1965) [66], qui part du principe que *la photosynthèse de la plante est la somme des photosynthèses de chaque feuille.* La modélisation, d'abord basée sur le seul calcul de la biomasse, s'est ensuite précisée par la prise en compte de nouveaux compartiments dans la plante, puis des contraintes non intrinsèques au couvert (contraintes hydrique, minérale, phytosanitaire).

[11] en anglais, modèle SVAT : Soil-Vegetation-Atmosphere-Transfer

Les modèles de fonctionnement des cultures possèdent la même base modulatoire (Gate [202] ; Bonhomme *et al.* [31]) :

- un **module de développement**, qui décrit chronologiquement l'apparition des différents stades phénologiques, dans la plupart des modèles : levée, début du tallage, épi à 1cm, LAI maximum, floraison, et maturité. Ce module fixe également les règles de répartition de la biomasse entre les différents organes de la culture. Les passages d'un stade phénologique au suivant peuvent se déduire d'expressions utilisant les sommes de *degrés·jours*[12], ce qui rend ce module principalement relié à la température.
- un **module de production et de répartition de biomasse**, qui prend en compte les processus d'interception du rayonnement par des données de PAR (captation d'énergie), la photosynthèse (assimilation du CO_2) et la respiration (passage des bilans de CO_2 à la production de biomasse). La biomasse ainsi élaborée est ensuite répartie dans les différents organes (tiges, feuilles, racines...) en fonction de certaines priorités de croissance variables dans le temps selon le calendrier phénologique. On peut simplifier ce module en 4 étapes de transformation, chacune dépendant de paramètres spécifiques :

  Ray. Glob. → PAR → PAR intercepté → Biomasse → Rendement en grains

  A chaque pas de temps, les variables d'état du modèle sont réactualisées : masse nette des différents organes, LAI...
- un **module de contraintes** permettant d'introduire divers stress dans le fonctionnement potentiel. Il requiert la description du cycle de l'eau et de l'azote dans le sol et la plante. La contrainte hydrique peut se caractériser par le comportement d'une variable d'état du modèle (ce qui demande un pas de temps très court), ou plus fréquemment par une fonction de stress basée sur le rapport entre la transpiration potentielle (demande en eau imposée à la plante par les conditions climatiques) et la transpiration effective (offre permise par les conditions hydriques du sol et les propriétés racinaires). Le stress hydrique a un effet assez limité sur la phénologie mais influe fortement sur la production de biomasse et prend donc toute son importance pour l'évaluation du rendement.

Les modèles de fonctionnement ainsi développés nécessitent un **forçage climatique** (température, PAR, pluie, vent...), et le renseignement des conditions initiales et de paramètres (Guérif *et al.* [113]). Ceux-ci peuvent être classés en trois groupes principaux :

- les paramètres caractérisant le **sol** pour les teneurs et cycle d'eau et d'azote ;
- les paramètres spécifiques et **variétaux** pour la croissance et le développement ;
- les paramètres décrivant les **pratiques culturales** : date et densité de semis, fertilisation, irrigation, niveaux d'intrants...

La spécification de tous ces paramètres et conditions initiales devient vite délicate pour des études à grande échelle ou sur des régions difficilement accessibles. Les données de télédétection, qui décrivent certaines caractéristiques biophysiques du couvert végétal de façon régulière et répétitive, permettent alors d'évaluer certaines entrées indisponibles du modèle par des méthodes d'assimilation de données de télédétection.

1.3.4 Approche par forçage

a. Description générale

Le modèle de fonctionnement nécessite des estimations de certaines variables d'état telles que le LAI pour simuler les processus de photosynthèse et d'évapotranspiration. Le forçage, méthode intuitive, consistera dans notre cas à fournir au modèle les valeurs de ces variables d'entrée à partir des données de télédétection. Cependant, il est difficile d'acquérir suffisamment d'images à la fréquence temporelle requise par le modèle, généralement journalière. La pratique la plus courante

[12] *degrés·jours* : valeurs représentant un écart de température d'une journée par rapport à un seuil donné.

(Liang [171]) consiste alors à interpoler les observations acquises au pas de temps nécessaire, par exemple en utilisant un modèle simple de description du LAI tel que BONSAÏ (§ 3.2.1).

On proposera dans un premier temps l'intégration de données satellitaires dans des modèles simples d'efficience, puis quelques applications de forçage dans des modèles mécanistes, qui permettent de décrire de façon dynamique et selon les lois physiologiques les réactions de la culture.

b. Applications à des modèles d'efficience

Une approche semi-empirique revient à intégrer l'information biophysique obtenue par télédétection (typiquement le LAI ou le fAPAR), dans des modèles agronomiques simples. Par exemple, le modèle de Varlet-Grancher *et al.* [236] utilise le LAI pour calculer la biomasse du couvert. Le fAPAR est également souvent utilisé dans les modèles de fonctionnement de la végétation pour calculer la production de biomasse et le rendement. Le premier instigateur de ce type d'approche semi-analytique est Monteith, qui affirme que la culture peut être considérée comme *un capteur et un transformateur d'énergie solaire*. Son premier modèle en ce sens, le modèle de Monteith ([186] [187]), qui exprime la croissance du couvert comme résultante de l'accumulation du rayonnement photosynthétiquement actif absorbé (fAPAR), a été adapté à l'utilisation de données de télédétection par Kumar et Monteith [157]. La production primaire nette P_n $(g \cdot m^{-2})$ s'obtient alors par l'intégration du produit du rayonnement global incident et de trois efficiences :

$$P_n = \epsilon_c \int_{\text{levée}}^{\text{récolte}} \epsilon_b \cdot fAPAR_t \cdot Rg(t)\ dt$$

où :

- $fAPAR_t$ est la fraction du PAR incident absorbé par le couvert à l'instant t, ou *efficience d'interception* ;
- $Rg(t)$ $(MJ \cdot m^{-2})$ est le rayonnement global incident à l'instant t (entre 300 et 3000 nm) ;
- ϵ_c est l'*efficience climatique*, c'est-à-dire la proportion de PAR dans le rayonnement global Rg ;
- ϵ_b $(g \cdot MJ^{-1})$ est l'*efficience biologique* de conversion du rayonnement absorbé en matière sèche.

L'efficience d'interception dépend des propriétés optiques du couvert et peut donc être dérivée par les données radiométriques (Baret et Olioso [16]). Monteith [186] a montré que le rapport d'efficience climatique ϵ_c est relativement constante (généralement comprise entre 0.4 et 0.5) pour certaines espèces telles que le blé le long de la saison de croissance. Quant à ϵ_b, qui est déterminée par tous les processus reliés à l'assimilation du CO_2, ses valeurs sont relativement constantes pour une espèce donnée quand elle est calculée sur l'ensemble de la saison de végétation (Gosse *et al.* [104]). Toutefois, différents stress peuvent modifier l'efficience de conversion et ϵ_b doit souvent être calibré pour ces conditions particulières.

Ce modèle de Monteith associé aux mesures de télédétection par le biais de l'efficience d'interception a permis d'estimer la production de diverses cultures : Bégué [19] estime la production primaire en zone Sahélienne ; Guérif *et al.* [112] l'appliquent sur du blé dur, puis Leblon *et al.* [168] sur le riz, avec des données SPOT dans le visible et le PIR, et estiment ainsi la matière sèche très correctement, puis en déduisent le rendement. Ce dernier est nettement moins bien estimé que la biomasse puisqu'un terme de conversion supplémentaire doit être introduit : le coefficient de récolte (rendement/biomasse) qui n'est pas toujours constant ni connu. Clevers [55] a également montré que le rendement final d'un champ de betterave est linéairement relié au PAR absorbé :

$$Yield = \alpha + \beta \int_{\text{levée}}^{\text{récolte}} fAPAR_t \cdot PAR_t\ dt$$

où α et β sont des coefficients. En pratique, il est difficile d'obtenir le PAR absorbé tout au long de la saison de croissance (Liang [171]). Cependant il a été montré que le PAR absorbé fin Juin et début Juillet est très fortement corrélé au rendement final de la betterave.

La paramétrisation de l'efficience de conversion ϵ_b suivant les conditions hydriques présente également un grand intérêt puisqu'elle permettrait de développer cette approche simple dans des zones à conditions non optimales pour la culture. Ainsi, Guérif *et al.* [114] déterminent la production céréalière en zone semi-aride en combinant les courtes longueurs d'onde et l'infrarouge thermique. En effet, ce domaine spectral permet la mesure de température de surface, elle-même indicatrice du stress hydrique (Lagouarde *et al.* [159] ; Seguin *et al.* [226]). Ce stress hydrique expliquerait les variations d'ϵ_b d'après les travaux de Steinmetz [230] sur du blé dur.

Ainsi, le modèle de Monteith et ses variantes permettent de bonnes estimations de la production primaire du couvert, mais présentent cependant quelques inconvénients : un problème majeur réside dans la difficulté de donner une valeur à l'**efficience de conversion** ϵ_b, qui quantifie la production de biomasse, d'autant qu'elle est sensible aux conditions d'environnement et aux stades phénologiques (Green [106] sur le blé ; Leblon *et al.* [168] ; Hanan et Bégué [122] ; Leroux *et al.* [167]). Une alternative appliquée par Leblon *et al.* [168] consiste à ré-estimer les valeurs de ϵ_b aux principaux stades phénologiques après avoir obtenu l'efficience d'interception par télédétection, puis à valider la méthode avec ces valeurs sur un plus grand nombre de parcelles.

Bien que ces modèles semi-empiriques permettent d'envisager une prévision simple et très rapide, la nécessité du fAPAR à chaque date implique une interpolation éventuelle générant un bruit. De plus, ces modèles restent très limités dans leur représentation des mécanismes physiologiques et biologiques. Pour une description plus complète des processus, des modèles mécanistes permettent de prendre en compte une quantité nettement supérieure de conditions.

c. Applications à des modèles mécanistes

Le forçage appliqué à des modèles mécanistes par des valeurs de LAI ou d'efficience incidente provenant de la télédétection effectué à chaque pas de temps permettrait de déduire, à l'aide d'une paramétrisation adaptée, une estimation des variables agronomiques désirées, telle que la production de biomasse et le rendement. Cela nécessite en général une adaptation de ces modèles mécanistes de fonctionnement de la végétation, en court-circuitant la mise à jour de la structure (Délecolle et Guérif [69]).

Faivre *et al.* [78] utilisent la méthode de forçage de données issues du capteur Végétation/SPOT désagrégées sous forme de LAI dans le modèle mécaniste STICS (Brisson *et al.* [37]), dans le but de déterminer des cartes de rendement sur la région de Chartres. Les comparaisons entre les statistiques officielles de production de la région ont permis de constater une prédiction des productions communales encourageante, que ce soit dans les zones à faible production (secteur urbain typiquement) ou dans les zones à forte production. Cependant, une meilleure description des propriétés du sol et des pratiques culturales sur cette région permettrait d'améliorer les estimations de production du modèle STICS.

Clevers *et al.* [56] dérivent du LAI à partir de données SPOT, tout en l'interpolant au pas de temps souhaité à l'aide d'un modèle semi-empirique, qui détermine une relation entre le WDVI[13] et le LAI. Ce LAI est ensuite forcé dans un modèle de croissance mécaniste [14]. Cette étude s'applique à l'expérimentation Alpilles ReSeDa [15], sur laquelle les forçages ont essentiellement été effectués par des mesures au sol et de télédétection optique aéroportée, et apporte donc une information supplémentaire par les données SPOT. De plus, les paramètres du modèle semi-empirique CLAIR ont été au préalable calculés pour des céréales aux Pays-Bas et ont été appliqués avec succès sur les données Alpilles, que ce soit sur les données aéroportées ou sur les données SPOT. Ceci exprime que les paramètres ne sont pas spécifiques et laisse espérer une possibilité d'application dans un vaste domaine.

Carbone *et al.* [45], de manière plus simple, combinent des données de télédétection et de systèmes SIG [16] pour du forçage dans un modèle de fonctionnement du soja, dans le but d'examiner

[13] WDVI : voir définition en annexe (A.5)
[14] ROTASK : Jongschaap, 1996 et 2002
[15] ReSeDa : Remote Sensing Data Assimilation
[16] SIG : Système d'Information Géographique

la variabilité spatiale des cultures. Les données radiométriques permettent d'établir une classification des couverts végétaux, et les SIG déterminent l'organisation spatiale des données du sol et climatiques dans le modèle de culture.

Enfin, de même que les modèles de culture, les modèles TSVA peuvent être combinés avec des données de télédétection par forçage pour décrire les principaux transferts de masse et d'énergie aux niveaux du sol et du couvert (Olioso *et al.* [197]).

d. Conclusion

La méthode de forçage comporte quelques avantages indéniables : simplicité théorique et pratique, résultats de prédiction de rendement plutôt satisfaisants. Cependant, ces modèles nécessitent des données radiométriques nombreuses à un pas de temps régulier pour bien décrire l'évolution temporelle des variables d'entrée (Maas [174] ; Moulin *et al.* [189] ; Guérif *et al.* [113]). Cette contrainte est difficile à satisfaire, voire même impossible, typiquement pour des capteurs à basse résolution temporelle. L'interpolation représente une alternative intéressante, mais elle n'assure aucune certitude sur la validité physique des pseudo-observations alors obtenues, puisqu'elle lisse les baisses temporelles liées à un stress par exemple.

Enfin, comme on l'a remarqué dans les applications, les modèles mécanistes nécessitent d'être renseignés par les propriétés du sol, les caractéristiques de la végétation (espèce, variété...), et les pratiques culturales, qui sont difficilement accessibles à grande échelle (échelle régionale dans le cas de Faivre *et al.*). Les méthodes d'assimilation des données de télédétection permettraient alors d'estimer ces paramètres.

1.3.5 Assimilation de données

Cette partie, qui se veut assez générale dans un premier temps, consiste en un état de l'art non exhaustif des méthodes d'assimilation existantes dans les principales disciplines d'application, avec une attention particulière au domaine agronomique. L'assimilation de données de télédétection, si elle commence à intéresser de très près les agronomes et autres analystes du fonctionnement du couvert végétal, revient cependant à l'origine à la météorologie et à l'océanographie. On proposera donc quelques références dans ces disciplines. Enfin, une revue des principales applications de l'assimilation de données de télédétection dans les modèles TSVA et de culture est présentée.

a. Définition générale de l'assimilation

On désigne sous l'appellation générique **assimilation de données** *l'ensemble des méthodes permettant de combiner de façon optimale les différents types d'informations auxquels on a accès : information mathématique sur les processus décrits par le modèle et information physique des observations* (Le Dimet et Blum [163]).

Dans le domaine agronomique, on combine l'information sur les processus physiologiques décrits par le modèle de fonctionnement, l'information bio-physique sur le climat, le sol, la variété..., et des observations biophysiques du couvert. L'apport d'information par télédétection joue un rôle essentiel dans ce domaine où les conditions ne permettent souvent pas d'effectuer des mesures régulières et nombreuses sur le cycle de la culture étudiée.

La partie suivante propose une classification des différentes méthodes d'assimilation. En particulier, l'assimilation de données de télédétection exploite *a priori* les données radiométriques mesurées par un capteur, mais on insistera cependant sur la distinction importante existant entre les observations et les *pseudo*-observations (§ c.).

b. Classification globale des méthodes d'assimilation

A l'origine, l'objectif de l'assimilation de données était de déterminer une condition initiale pour intégrer les équations aux dérivées partielles décrivant les flux. La météorologie, l'océanographie et surtout l'hydrologie ont ensuite associé à cette estimation celle des paramètres du modèle pour

résoudre des problèmes inverses. Afin de corriger la trajectoire d'un modèle à partir d'observations, on distingue deux objectifs principaux (Castaings *et al.*[47] ; Bertino [23]) :

- le **lissage** (*e.g.* le 4D-Var) : l'assimilation permet d'estimer l'évolution du système sur un temps passé en utilisant des mesures sur toute une fenêtre temporelle. Il permet d'établir une analyse historique du comportement du système et de faire de la prévision ;
- le **filtrage** (*e.g.* le Filtre de Kalman) : l'assimilation permet de caractériser l'état optimal du système *présent* (ou futur) à partir d'informations passées récentes. On parle d'état optimal dans le sens du plus vraisemblable par rapport aux observations et au modèle, dans une proportion à définir. Il s'agit de corriger la trajectoire du modèle à partir d'informations passées et présentes à chaque fois qu'une observation est disponible, pour déterminer les conditions initiales ou aux limites et établir une prédiction à la période suivante. Si la prévision n'est pas au sens strict du terme de l'assimilation de données, elle appartient au prolongement du filtrage, faisant maintenant partie de cet ensemble de méthodes (Vidard [240]).

Du fait de la distinction que l'on peut faire des processus - i/ processus dont on suppose que certaines des variables d'entrées sont des variables aléatoires, ou processus dont on ne connaît que les statistiques, et ii/ processus qui peuvent être représentés par des équations - on définit de manière générale deux principales classes de méthodes d'assimilation de données (Talagrand [232]) : les **méthodes stochastiques**[17] et les **méthodes déterministes**.

- Dans un cadre stochastique, l'évolution du modèle est considérée comme un processus aléatoire du fait d'une dynamique chaotique. L'objectif est en général de minimiser l'écart-type, représentant la dispersion de l'estimation. Ces méthodes sont particulièrement adaptées au filtrage, tel que le filtre de Kalman que l'on décrira plus en détail.
- Dans un cadre déterministe, on considère que les champs vérifient les équations du modèle (généralement des équations aux dérivées partielles). Le modèle est donc considéré comme étant exact. Les abus de langage en météorologie et océanographie ont convergé vers un syncrétisme des méthodes déterministes et des méthodes dites variationnelles, dont la spécificité est de minimiser un écart quadratique. En effet, on compte dans la classe des méthodes déterministes des approches telles que le 3D-Var et le contrôle optimal 4D-Var, qui sont effectivement variationnelles. Cependant, on citera comme contre-exemple la méthode BLUE[18], qui est une méthode à la fois stochastique et variationnelle.

Dans un premier temps, les principales méthodes seront décrites dans chacun de ces deux cadres, avec des applications dans les domaines "originels" de l'assimilation de données : océanographie, météorologie, hydrologie. Nous proposerons dans un second temps une classification plus naturelle à l'étude du fonctionnement de la végétation et du suivi des cultures.

b.i/ Dans un cadre stochastique

Description générale. L'approche stochastique est basée sur la théorie de l'estimation optimale. La technique la plus répandue est le Filtre de Kalman [150], qui généralise l'estimation optimale à un processus discret dans le temps. Cette méthode consiste à corriger la trajectoire des variables d'état du modèle lorsque l'on dispose d'observations pour les faire coïncider au mieux, en minimisant la variance de l'erreur de l'état analysé (représentée par l'écart entre l'état vrai et l'état analysé). L'ajustement du modèle se fait en deux étapes :

- *à l'instant* ***t-1*** : on possède un ensemble de mesures M_{t-1}, prises *à ou jusqu'à* l'instant ***t-1***. On intègre alors le modèle à partir de l'état d'analyse à l'instant ***t-1***, afin de prédire l'état à l'instant ***t*** et calculer la matrice de covariance d'erreur de prévision ;
- *à l'instant* ***t*** : on corrige l'état prédit par le modèle et les observations à l'instant ***t-1*** en minimisant la variance d'erreur d'analyse.

[17] L'adjectif stochastique est utilisé comme synonyme de aléatoire. On parle de variable et de vecteur aléatoires mais de processus stochastique.

[18] Best Linear Unbiased Estimator

L'intégration du modèle recommence à partir de l'état mis à jour à l'instant $\boldsymbol{t}$, et le processus est répété jusqu'à ce que toutes les observations aient été utilisées.

Ce filtre présente l'intérêt de déterminer une matrice de covariance de l'erreur d'analyse en tenant compte de sa propagation liée à la dynamique du modèle. Cependant, il est uniquement optimal pour des modèles dont l'équation d'observation est linéaire. En terme de coût de calcul, la propagation des erreurs dans un modèle dont le vecteur de contrôle est de taille N nécessite $2N$ intégrations du modèle. Ceci engendrera des difficultés liées au stockage de matrices de covariance de taille N^2, en particulier en météorologie ou en océanographie, où N vaut entre 10^6 et 10^8... De plus, l'application de cette méthode nécessite la spécification de l'incertitude sur l'état prévu par le modèle et des erreurs de mesure par leurs matrices de covariances, qui sont difficiles à exprimer et jouent un rôle déterminant dans l'analyse (Quesney [216]).

Ces problèmes concrets ont nécessité le recours à des simplifications (Interpolation optimale), ou conduit à la naissance de variantes intéressantes, utilisant par exemple un développement de Taylor au premier ordre pour linéariser le modèle (Extended Kalman Filter, Ghil et Manalotte-Rizzoli [95]), une méthode de Monte Carlo (Ensemble Kalman Filter, Evensen [77]), ou des rappels Newtoniens aux observations (Nudging, SCM[19], ACS[20] ; Vidard [240]).

Quelques applications. Les premières applications des méthodes d'assimilation stochastique reviennent à la météorologie, dont une synthèse bibliographique très complète est proposée en 1993 par Courtier *et al.* [60]. Elles ont été introduites par Jones et Peterson dans les années 1960 [149], puis suivies par maintes études, *e.g.* Ghil [94], qui popularise le filtre de Kalman en météorologie sur des modèles linéaires de type Shallow-Water[21], ou la thèse de Cohn [57] qui développe différentes méthodes d'assimilation séquentielle dans un modèle numérique de prévision du temps.

L'océanographie a également dû développer les méthodes de prévision suite aux besoins de diverses applications (navigation, météorologie, pêche, défense). Toutefois, les fortes non-linéarités dans ce domaine ne permettent pas de garantir l'optimalité de ces méthodes ainsi que l'obtention de modèles linéaires tangents. En effet, même le filtre de Kalman étendu peut conduire à des instabilités ou divergences (projet IDOPT [137]). De plus, les océanographes rencontrent la difficulté de la très grande taille du vecteur de contrôle, des matrices de covariance à garder en mémoire, ainsi que des difficultés à spécifier des statistiques des erreurs. Typiquement, Bertino [23] peut appliquer l'assimilation séquentielle dans le cas d'une lagune. Ce type de domaine présente l'avantage d'être plus facilement contrôlable du fait qu'elle possède peu de frontières ouvertes, donc moins de conditions aux limites. Enfin, pour pallier les problèmes de taille, Pham *et al.* [206] proposent un nouveau filtre de Kalman étendu dans lequel la matrice de covariance des erreurs est approchée par une matrice singulière de rang faible (SEEK[22]).

On peut également constater une extension vers d'autres disciplines telles que l'hydrologie (*e.g.* Ottlé et Vidal-Madjar [201] ; François *et al.* [89] ; Boegh *et al.* [30]), typiquement pour l'assimilation de données d'humidité de surface estimées par télédétection dans des modèles de surface du sol et hydrologiques, mais également vers des domaines dont les processus ne sont pas décrits par des équations aux dérivées partielles telles que l'agronomie (§ c.).

b.ii/ Dans un cadre déterministe

Description générale. Dans ce cadre, les méthodes les plus courantes sont les méthodes variationnelles. Elles reposent sur la théorie du contrôle optimal et consistent de façon générale à minimiser une fonction représentant l'écart entre les observations et les simulations du modèle. C'est ce type de méthode considérant que le modèle est exact qui a été développé dans le cadre de ce travail.

[19] SCM : Successive Corrections Methods
[20] ACS : Analysis Correction Scheme
[21] Shallow-Water : eaux peu profondes
[22] SEEK : Singular Evolutive Extended Kalman

L'assimilation variationnelle a été introduite par Sasaki en 1958 [225] sous la forme du 3D-Var[23], et repose sur l'estimation de certains paramètres du modèle ou de ses conditions initiales pour obtenir une bonne cohérence entre les observations et les variables du modèle. Elle consiste globalement à ajuster les simulations du modèle à un ensemble d'observations par la minimisation d'une fonction coût représentant l'écart quadratique entre ceux-ci. Les états ajustés dépendent ainsi de toutes les observations, et le modèle est considéré comme une contrainte. L'extension théorique aux méthodes de contrôle optimal (Lions [172]) revient à Le Dimet [162], Le Dimet et Talagrand [166], Courtier et Talagrand [61].

Le 3D-Var consiste à obtenir l'état optimal *à un instant donné t* par minimisation d'une fonction coût en fonction de toutes les observations que l'on possède sur la fenêtre à laquelle appartient l'instant t (Fig. 1.9, cas non séquentiel et intermittent). Ce terme inclut également les méthodes s'appliquant à des domaines à une et 2 dimensions, afin d'éviter tout quiproquo lorsque l'on ajoute la quatrième dimension, le temps.

Le 4D-Var, proposé par Le Dimet [162], consiste alors à ajouter la *dimension temporelle* (quel que soit le nombre de dimensions spatiales), en calculant la trajectoire optimale du modèle sur la fenêtre de temps donnée en fonction de l'ensemble des observations qu'elle contient (Fig. 1.9, cas non séquentiel et continu). Elle possède l'avantage d'ajouter la connaissance de l'évolution dynamique du système représentée par le modèle comme information supplémentaire pour l'assimilation des observations.

Pour minimiser la fonction coût, on peut envisager plusieurs méthodes, en tenant compte des non-linéarités du modèle et donc des minima locaux de la fonction coût associée. En optimisation, on utilise très souvent le calcul du gradient qui permet de déterminer les minima et maxima d'une fonction. Cependant, sans le calcul du gradient, on peut appliquer des méthodes très variées telles que :

- le simplexe de Nelder-Mead (exploration géométrique) ;
- le recuit simulé ;
- les algorithmes génétiques ;
- les différences finies ;
- les représenteurs de Benett.

On a déjà décrit certaines de ces méthodes d'optimisation dans la section 1.2.4 pour l'estimation des caractéristiques biophysiques du couvert végétal à partir de données radiométriques, mais la dimension temporelle n'y était pas intégrée. En effet, on peut considérer que l'inversion s'effectue sur des modèles statiques (*e.g.* modèles de transfert radiatif), tandis que l'assimilation de données opère sur des modèles dynamiques (*e.g.* modèles de culture), dans le but commun d'estimer les variables d'entrée du modèle. Les méthodes d'inversion et d'assimilation peuvent donc être éventuellement semblables. Les différences finies, qui représentent un moyen d'approcher la valeur du gradient, seront quant à elles décrites dans le cadre de la différentiation automatique (§ 2.3.1). Enfin, les représenteurs de Benett [22] nécessitent que l'on considère la formulation *duale* d'un problème linéaire. Ils sont alors les opérateurs élémentaires auxquels les noyaux de la combinaison linéaire d'une solution sont associés. Calculer explicitement ces représenteurs demande de minimiser uniquement dans l'espace dual des observations et permet donc une forte diminution de la taille du vecteur de contrôle.

Enfin, parmi les algorithmes d'optimisation non linéaire, les méthodes à direction de descente, de type gradient conjugué ou Quasi-Newton, qui seront décrites dans la section 2.4.1, consistent à explorer l'espace de l'ensemble des paramètres estimés simultanément selon la direction du gradient de la fonction coût, mais nécessitent l'évaluation de ce gradient.

Courtier *et al.* [63] montrent que l'implémentation directe du 4D-Var en météorologie engendre un coût de calcul dépassant la capacité des machines les plus puissantes. Ils proposent alors l'utilisation des équations adjointes, qui décrivent l'évolution de la sensibilité (aux conditions initiales, aux limites et paramètres du modèle) dans le sens rétrograde et diminuent donc considérablement la taille du vecteur d'entrée du modèle considéré. Le gradient de la fonction coût peut alors être

[23] 3D-Var : 3 Dimensional VARiational assimilation

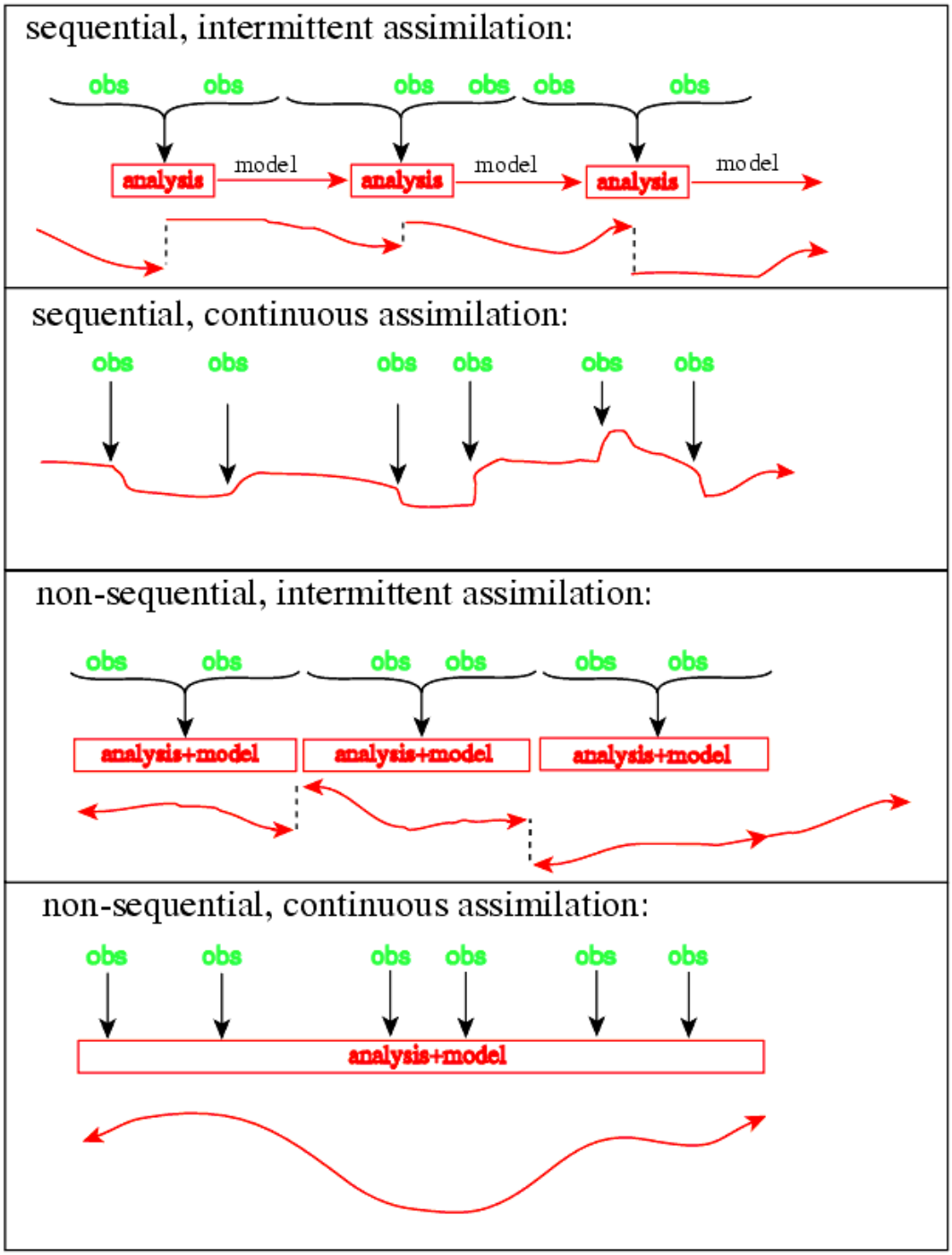

FIG. 1.9 – *Représentation de 4 stratégies de base pour l'assimilation de données, en fonction du temps. La façon dont la distribution dans le temps des observations est exploitée pour produire une suite d'états assimilés (courbe en bas de chaque type) peut être séquentielle, non séquentielle, continue, non continue. (Bouttier et Courtier) [34]*

calculé par intégration du modèle adjoint pour un coût de calcul raisonnable (Le Dimet [162]). Il permet ainsi de résoudre des problèmes de façon plus efficace que dans le passé, dans les domaines d'assimilation variationnelle, estimation de paramètres et études de sensibilité. Puisque l'utilisation du modèle adjoint a été choisie dans ce travail, le chapitre 2 lui est entièrement consacré.

Quelques applications. La méthode du 3D-Var est devenue opérationnelle dans les centres météorologiques européen (ECMWF[24] en 1996 : Courtier *et al.*[59] ; Anderson *et al.*[2] ; Rabier *et al.* [217]), et français (Météo-France en 1997). Après le ECMWF en 1997 (dont de nombreux travaux sont répertoriés dans [249]), la méthode du 4D-Var a remplacé celle du 3D-Var à Météo-France en 2000 (Gauthier and Thépaut [93]), qui produisait 4 fois par jour un état initial : analyse à $t = 00$, 06, 12 et 18 UTC. Courtier et Talagrand [62] proposent un développement utilisant les équations directes et adjointes de Shallow-Water pour assimiler des données météorologiques. Une description de l'implémentation opérationnelle du 4D-Var en météorologie est en particulier donnée par Gauthier [92].

En océanographie, on citera par exemple les thèses de Vidard [240], qui travaille sur la prise en compte des erreurs modèles en assimilation 4D-Var, ou Ngodock [194] qui applique la théorie des équations adjointes à la circulation océanique. Robert [219] compare une approche séquentielle de type filtre SEEK à l'approche variationnelle de type 4D-Var réduit, puis propose une méthode hybride combinant l'estimation d'erreur du filtrage de SEEK et le lissage du 4D-Var réduit. Pour pallier le problème lié à la grande dimension du vecteur de contrôle, Blayo *et al.* [29] proposent une analyse statistique de la trajectoire du modèle océanique pour réduire la taille de la dimension de l'espace de contrôle.

Enfin, le domaine hydrologique représente une forte demande en assimilation de données depuis quelques années, pour la prévision de crues ou de sédimentation, avec par exemple : Ngnepieba [193], Mazauric *et al.* [184] pour les modèles d'hydraulique fluviale, qui utilisent des méthodes de parallélisme associé au calcul de l'adjoint, Bélanger [21] sur des écoulements biphasiques en eaux peu profondes, et Castaings *et al.* [46] sur un modèle d'hydraulique fluviale complété par un modèle pluie-débit pour évaluer les conditions aux limites en amont.

b.iii/ Conclusion

Dans un cadre linéaire et d'erreur du modèle gaussienne, les méthodes séquentielles et variationnelles (en particulier respectivement le filtre de Kalman et le 4D-Var) donnent des résultats équivalents à la fin de la période d'assimilation (Bouttier et Courtier [34]). Ce n'est plus du tout le cas dans les applications réelles où les modèles comportent de fortes non-linéarités et où chaque méthode comporte ses qualités d'adaptation, ne permettant pas toujours une justification satisfaisante du choix des méthodes. L'assimilation variationnelle permet de prendre en compte plusieurs types d'incertitude, mais les méthodes d'optimisation directes génèrent un important coût de calcul, et les méthodes indirectes nécessitent le calcul du modèle adjoint, qui est délicat lors de fortes discontinuités. Cependant, une fois calculé, l'adjoint permet une optimisation avec un coût limité, et il représente également un outil très pratique pour les analyses de sensibilité. Le filtre de Kalman, quant à lui, permet l'évaluation et la propagation des covariances d'erreur d'analyse, mais il nécessite les matrices d'erreur du modèle et des mesures qui s'évaluent difficilement. Les méthodes hybrides peuvent offrir une bonne alternative exploitant les avantages de chaque type de technique. On citera pour conclure M. Ghil un jour de mai 1999 à propos de ces choix difficiles à faire : *God is in everything, but the Devil is in the details.*[25]

Si les méthodes d'assimilation s'appliquent donc à l'origine dans les disciplines de la météorologie, de l'océanographie, et de l'hydrologie, on constate également depuis une dizaine d'années une demande croissante pour l'assimilation de données de télédétection dans les modèles de fonctionnement de la végétation.

[24] ECMWF : European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
[25] Conférence de Québec, mai 1999 (d'après Bertino [23])

c. L'assimilation de données pour l'étude du fonctionnement de la végétation

Avant d'établir une classification des applications dans le domaine du fonctionnement de la végétation, une description des différents types d'observations potentiellement assimilables est proposée. En effet, les modèles de fonctionnement de la végétation et de surface ne prennent pas en compte la réflectance du couvert végétal et ne peuvent donc intégrer directement des données de télédétection.

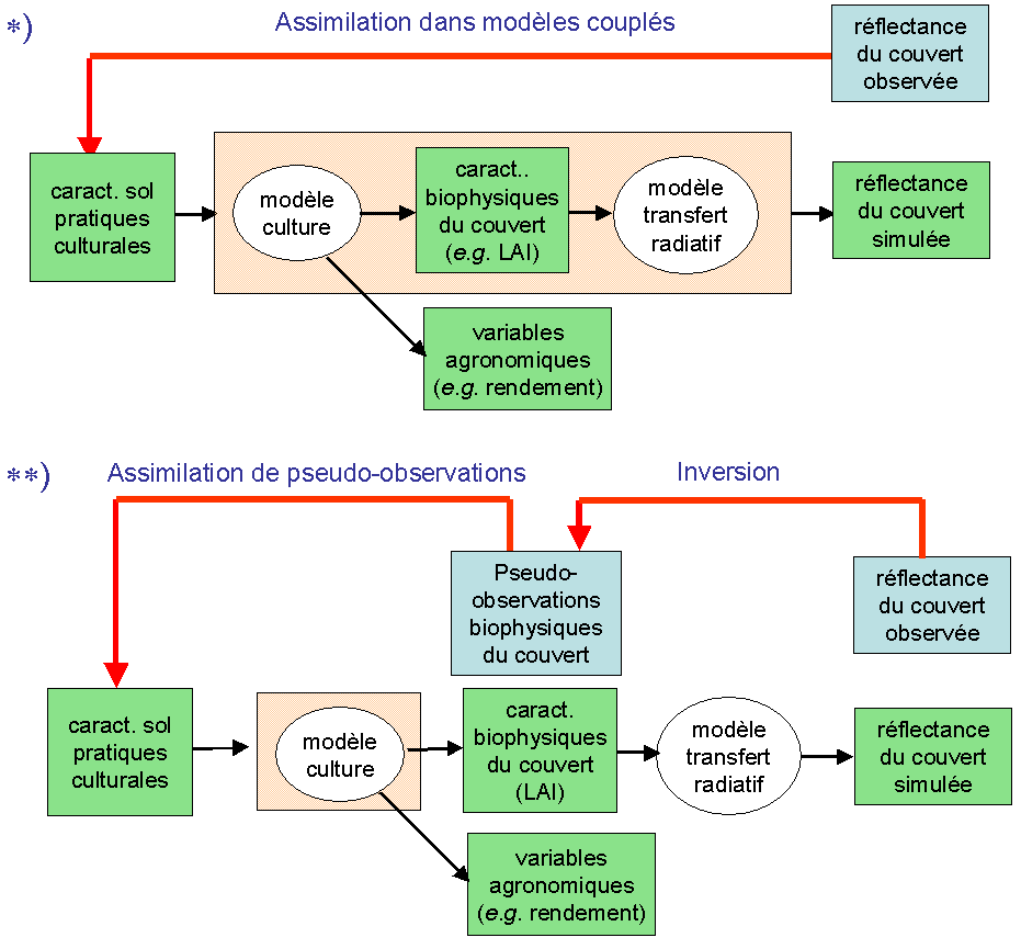

FIG. 1.10 – *Distinction des deux approches d'assimilation de données de télédétection dans les modèles de culture : ⋆) assimilation d'observations dans un modèle couplé avec un MTR ou ⋆⋆) assimilation de pseudo-observations provenant d'une inversion de MTR.*

⇝ à propos des observations assimilées

Lorsque l'on parle d'assimilation de données de télédétection dans les modèles de fonctionnement, il faut bien distinguer les deux types d'observations possibles (FIG. 1.10) :

- ⋆) les *observations directes de télédétection* : on assimile des données de réflectance dans un modèle de culture *couplé* à un modèle de transfert radiatif ; les données ont au préalable été corrigées de l'effet atmosphérique ;
- ⋆⋆) les *pseudo-observations* : on assimile des variables biophysiques du couvert (LAI, fAPAR, albedo...) estimées à partir de mesures de télédétection (par indices de végétation, régression, inversion... cf §1.2.4), dans le seul modèle de fonctionnement du couvert.

Delécolle *et al.* [70], puis Moulin *et al.* [189] classifient ces 2 types de méthodes en tant que *re-calibrage ou re-étalonnage* dans le cas de pseudo-observations -cas ⋆⋆)- et d'*assimilation* dans le cas du modèle couplé -cas ⋆)- tandis que l'on considère ici que ces deux situations consistent en de l'assimilation, avec simplement une distinction sur l'objet assimilé : pseudo-observations ou observations de télédétection. La distinction est très importante car l'erreur sur les observations est globalement donnée par l'incertitude de mesure du capteur et des corrections atmosphériques, tandis que l'erreur sur les pseudo-observations provient de l'erreur de modélisation du transfert radiatif et éventuellement de l'inversion de ce modèle, combinées à l'erreur des mesures radiométriques. Par la suite, on se permettra d'utiliser le terme *assimilation* à la fois dans le cas de pseudo-observations de télédétection (par exemple le LAI) et dans le cas d'observations directes de radiance.

L'assimilation directe de réflectances/radiances nécessite le couplage des modèles de fonctionnement de culture et des modèles de surface à un modèle de transfert radiatif. Cette technique est devenue une tendance récente dans la communauté scientifique européenne, mais sans utiliser le modèle adjoint, dont le calcul risque de nécessiter un coût de calcul important. La combinaison des deux méthodes minimisant à la fois les différences entre les réflectances et les variables estimées telles que le LAI pourrait correspondre à la solution optimale pour ce type de problème (Liang [171]).

c.i/ Assimilation dans les modèles de processus de surface

L'assimilation dans les TSVA a surtout vu le jour à travers le développement de méthodes stochastiques, et on trouve très peu d'utilisation de modèle adjoint dans ces domaines. De manière générale, les méthodes variationnelles sont rarement appliquées, ou sur des modèles simples, comme Calvet *et al.* [43] qui utilisent des données de température et d'humidité du sol mesurées à 2 mètres du sol pour estimer le profil d'humidité au niveau de la zone racinaire.

Viovy *et al.* [242] proposent d'assimiler des données de NDVI dans le modèle ORCHIDEE[26], modèle global de biosphère qui simule les échanges verticaux d'eau et d'énergie à l'interface sol-végétation-atmosphère, la dynamique du carbone dans la végétation et les sols. Ils améliorent ainsi la prédiction du LAI et à plus long terme, les prédictions de flux de carbone, en utilisant du Filtre de Kalman Ensemble ou Étendu.

Olioso *et al.* [197] assimilent du NDVI dans le modèle TSVA ISBA-Ags pour retrouver l'humidité initiale du sol en connaissant les autres caractéristiques de la végétation (forçage de données de LAI par les réflectances acquises dans le visible et de l'humidité du sol obtenues par les émissions dans le micro-ondes), puis inversement. L'assimilation des données de télédétection permet donc d'obtenir une cartographie de l'évapotranspiration et de l'irrigation sur la zone Alpilles.

Demarty *et al.* [75] ont récemment proposé une nouvelle approche d'assimilation (MCIP[27]) dérivée de méthodes automatiques d'étalonnage fortement utilisées par la communauté des hydrologues. Cette méthode repose sur un concept stochastique et multicritère, lui permettant de procéder conjointement à une analyse intrinsèque de la sensibilité du modèle et d'optimiser simultanément un nombre conséquent de paramètres. MCIP a été appliquée sur des modèles TSVA de complexités différentes, et ce en considérant différents types de variables de télédétection, par exemple celles acquises en infrarouge thermique et dans les micro-ondes passives (Demarty et al. [73]).

Pellenq et Boulet [204] ont introduit l'approche OSSE[28] dans le domaine éco-hydrologique. Cette approche a été développée par les météorologues et océanographes (Arnold and Dey [3]) pour évaluer l'intérêt d'assimiler certaines observations sur le comportement d'un modèle, avant le lancement d'une mission ou d'un capteur. Elle s'effectue en deux étapes :

1. génération d'un jeu de données synthétiques ;
2. assimilation de ces observations simulées dans le modèle.

[26] ORCHIDEE : Organizing Carbon and Hydrology In Dynamic Ecosystems Environment
[27] MCIP : Mulitiobjective Calibration Iterative Procedure
[28] Observing System Simulation Experiment

Pellenq et Boulet ont développé l'OSSE pour tester l'intérêt de l'assimilation de températures directionnelles dans l'infrarouge thermique dans la modélisation des profils d'humidité et de température dans le sol, en utilisant la méthode d'assimilation du filtre de Kalman Ensemble. Si la température du sol est relativement bien contrainte par l'assimilation, ils constatent que l'assimilation séquentielle de la teneur en eau de surface et de la teneur en eau profonde, qui sont temporellement très variables, ne permettent pas de contraindre suffisamment l'évolution du contenu en eau du sol. Ils proposent alors pour ce type de variable l'introduction d'un lisseur de Kalman, qui prend en compte une fenêtre temporelle de plusieurs pas de temps et améliorerait sans doute les résultats.

Ainsi, la plupart des travaux d'assimilation dans les modèles TSVA a pour objectif de recalibrer en exploitant les données spatiales et de favoriser leur couplage avec des modèles hydrologiques ou météorologiques. Cette approche leur permet de retrouver l'humidité du sol, dont le rôle est considérable dans les processus continentaux influant sur le climat, les crues et la sécheresse. Le couplage des TSVA avec des modèles de végétation permet également le suivi de l'état hydrique du couvert végétal. On constate actuellement, dans ce domaine, un fort attrait pour les méthodes stochastiques et très peu d'applications variationnelles. Cependant, les problèmes restent de manière générale complexes puisque les modèles TSVA nécessitent la prescription d'un nombre très important de paramètres.

c.ii/ Assimilation dans les modèles de culture

Dans le domaine de l'agronomie, on souhaite coupler les observations de télédétection avec un modèle de culture, dans un souci de diagnostic de la culture ou de prévision du rendement.

De nombreux travaux d'assimilation des données de télédétection dans des modèles de fonctionnement du couvert ont vu le jour depuis les années 80. Delécolle *et al.* [70], Fischer *et al.* [83] et Moulin *et al.* [189] proposent une synthèse bibliographique des applications des années 90, ainsi que plus récemment François *et al.* [88] et Liang [171]. François *et al.* proposent par ailleurs la terminologie d'assimilation *multiple*, dans le sens où toutes les observations de la fenêtre temporelle sont assimilées en même temps, par opposition à l'assimilation *séquentielle*, où le modèle est remis à jour à chaque instant où une observation est disponible.

Les méthodes d'assimilation ont été proposées à l'origine par les océanographes et les météorologues avec leurs propres notations, et ont généré diverses tentatives de classification unique (Ide *et al.* [136]). On comprend donc qu'adapter une classification à un nouveau domaine d'étude tel que l'agronomie n'est pas évident. Parmi les deux classes très générales des méthodes stochastiques et déterministes, nous proposons donc de suivre une distinction plus restreinte, souvent retrouvée dans la littérature et *a priori* plus adaptée au domaine agronomique.

⇝ Classification proposée dans le domaine agronomique

Compte tenu des deux objectifs définis précédemment (lissage/filtrage), et quel que soit le cadre dans lequel on se place (stochastique/déterministe), on distinguera dans le cadre de ce travail les méthodes séquentielles des méthodes non séquentielles (Fig. 1.9 ; Bouttier et Courtier) [34]).

- Les méthodes séquentielles, ou **méthodes de correction**, utilisent les observations passées et présentes à l'instant de l'analyse pour corriger la trajectoire de la variable d'état (mise à jour des états du système à l'instant t). Elles sont adaptées au filtrage et sont appliquées généralement dans un cadre stochastique avec un objectif de prédiction dynamique.
- Les méthodes non séquentielles, ou **méthode de re-calibrage**, peuvent exploiter les observations futures pour corriger un état situé à l'intérieur d'une fenêtre temporelle par exemple (mise à jour des états du système sur une plage $[t0; T]$). Elles sont adaptées au lissage et sont appliquées le plus souvent dans un cadre déterministe. Elles sont souvent "assimilées" aux méthodes variationnelles, qui, comme on l'a précisé précédemment, consistent à minimiser un écart quadratique.

La classification étant choisie pour notre domaine, nous pouvons maintenant établir un état de l'art non exhaustif des méthodes d'assimilation développées dans les modèles de suivi des cultures.

Utilisation de méthodes de correction. Olioso *et al.* [199] assimilent des données radiométriques micro-ondes dans le modèle de culture STICS couplé au modèle TSVA ISBA, permettant de déterminer dans le même temps le développement de la végétation et les valeurs initiales d'humidité du sol. Cayrol [48] développe également une méthode séquentielle d'assimilation de séries temporelles de NDVI issues de AVHRR/NOAA et VEGETATION/SPOT4 dans un modèle de végétation, pour le suivi des variations saisonnières et interannuelles dans les zones semi-arides. Elle montre l'intérêt de ce type d'assimilation pour ajuster la trajectoire du modèle en temps réel. En effet, le mode séquentiel permet de corriger les biais systématiques du modèle, même si le développement s'est restreint à un cadre simple en terme de détermination des erreurs de modèle et de mesure. Ses travaux montrent également qu'un étalonnage préliminaire est nécessaire à la performance de l'assimilation séquentielle pour de bonnes simulations de LAI et du bilan hydrique, en particulier dans un but prédictif à long terme.

François *et al.* [88] proposent une illustration simple du filtre de Kalman appliqué à des données de NDVI. Ils minimisent une fonction coût par rapport au LAI en utilisant des observations de NVDI et un modèle simple non linéaire transformant le LAI en NDVI, ainsi que de l'information *a priori* sur le LAI provenant d'un modèle de végétation. L'attention est portée sur l'inclusion dans la fonction coût des erreurs du bruit sur les valeurs de NDVI calculées à partir des observations de réflectance, du modèle simple qui relie le LAI au NDVI, et sur l'incertitude du LAI *a priori*.

Utilisation de méthodes de re-calibrage. Le premier travail d'assimilation de données variationnelle dans un modèle agronomique revient à Maas, qui utilise des mesures radiométriques pour contraindre les simulations du modèle GRAMI. Il améliore ainsi les estimations du profil temporel de biomasse et du rendement sur des cultures de maïs [174], détermine les conditions initiales d'un modèle de sorgho [175], et les principaux paramètres du modèle sur du blé d'hiver [176].

Moulin [188] simule les profils temporels de données de télédétection aux échelles de la région (NOAA AVHRR) et de la parcelle (SPOT HRV). Elle assimile alors ces profils dans le modèle de fonctionnement AFRCWHEAT2 (Porter [207]) couplé au modèle de réflectance SAIL [238] par la méthode du simplexe de Nelder-Mead afin d'estimer la date de semis.

Clevers [55] assimile du fAPAR dérivé de l'indice de végétation WDVI dans le modèle mécaniste de croissance de la betterave SUCROS[29], pour améliorer la prédiction du rendement. Il estime ainsi la date de semis, le taux de croissance, le LAI maximal, et démontre que le fAPAR autour de fin juin est linéairement relié au rendement final.

Guérif et Duke [116] choisissent de coupler le modèle SUCROS au modèle de transfert radiatif SAIL dans le même but. Ils minimisent l'écart entre des mesures de réflectances terrain et les simulations du modèle couplé en ajustant les paramètres d'émergence et de croissance précoce, tels que le LAI au stade émergence, le nombre final de plantes émergées, et la température nécessaire à l'émergence de 80% des plantes.

Launay [160] couple également le MTR SAIL au modèle mécaniste de croissance de la betterave SUCROS, mais en assimilant par une approche de recherche géométrique (algorithme de Price [210]) des données d'un indice de végétation (le TSAVI (A.4)), corrigées au préalable des effets atmosphériques. En effet, Guérif et Duke [117] ont montré que l'assimilation de cet indice de végétation, qui minimise les effets du sol, donne de meilleures performances que l'assimilation de réflectances pures pour l'estimation de la date de semis et des paramètres d'émergence. La méthode de Guérif et Duke, dérivée du simplexe de Nelder-Mead, leur a permis d'estimer le rendement de la betterave avec des erreurs relatives entre 0.6 et 2.6% sur un ensemble de situations très différentes, caractérisées par des dates de semis et de conditions d'émergence extrêmes. Par ces méthodes, Launay voulait établir d'une part un diagnostic de la culture et d'autre part une prévision du rendement, à l'échelle parcellaire sur des bassins sucriers. Les résultats d'identification de variable d'entrée et d'estimation de rendement effectués pour chaque unité de fonctionnement ont ensuite été agrégés au niveau parcellaire et confrontés aux mesures. Launay a montré que l'apport de la télédétection

[29]SUCROS : Simple and Universal Crop Growth Simulator, Spitters *et al.* *e.g.* [229]

pour le diagnostic se révèle plutôt décevant, en particulier la date de semis dans les conditions de son année d'expérimentation. Les estimations de rendement s'avèrent plus satisfaisantes et peuvent être déterminées dès le mois de juin avec un écart-type de $8t/ha$ par parcelle, contre $13t/ha$ sans assimilation. Cependant, dans les deux cas, le fonctionnement hydrique étant mal reproduit par le module concerné du modèle, de forts stress hydriques dégradent énormément les estimations. Ces résultats d'assimilation pourraient donc être grandement améliorés avec une correction du module de stress hydrique, mais également par l'acquisition d'un plus grand nombre d'images durant la phase d'installation du couvert.

L'étude de Weiss *et al.* [248] combine les modèles de fonctionnement du couvert (MFC) STICS et de transfert radiatif (MTR) SAIL pour l'estimation de plusieurs variables telles que le LAI, la Cab, la matière sèche organique et le contenu relatif en eau. Leur couplage a pu être accompli par la définition de relations entre les sorties du MFC et les entrées du MTR basées sur des données provenant de cultures de blé sous diverses conditions climatiques et de stress. Les résultats d'assimilation de données provenant de la campagne Alpilles-ReSeDa montrent une bonne estimation des réflectances par rapport aux observations données par SPOT, avec une erreur de moins de 0.05 pour toutes les longueurs d'onde. Cependant, ils constatent une forte sensibilité à l'incertitude sur les observations et un manque de stabilité de la technique développée (simplexe de Nelder-Mead, sans contraintes fortes), l'algorithme ne convergeant pas lorsque ses valeurs initiales sont trop éloignées de la solution.

Chauki [51] développe une méthode d'assimilation de données RADAR permettant l'estimation de paramètres d'entrée du modèle de fonctionnement du couvert STICS (Brisson *et al.*[37]). De même, Prévot *et al.* [209] assimilent des données optiques et RADAR pour déterminer la date de semis, le LAI maximal ou l'humidité à la capacité au champ, par l'algorithme de minimisation du simplexe de Nelder-Mead, sans prendre en compte d'information *a priori*.

Nouvellon [195] assimile des données radiométriques courtes longueurs d'onde dans un modèle couplé de fonctionnement de prairies semi-arides et de réflectance. Il choisit d'estimer en priorité les paramètres auxquels le modèle est sensible, ceux variables spatialement, et difficilement accessibles aux échelles d'application du modèle. La condition initiale de biomasse racinaire et le paramètre d'efficience de conversion maximale sont donc estimés par minimisation d'une fonction coût basée sur le NDVI. Ces estimations obtenues avec une méthode du simplexe de Nelder-Mead sont validées sur la biomasse. Les résultats deviennent satisfaisants lorsqu'il utilise plusieurs années (plus précisément "monsoon season"), car cela permet d'écarter les couples de paramètres aberrants obtenus par l'algorithme.

Houlès [129] adapte la méthode MCIP (proposée par Demarty sur les modèles TSVA [72]) au modèle STICS, dans le cadre de l'agriculture de précision, afin de raisonner les pratiques culturales à l'échelle intra-parcellaire, en particulier la fertilisation azotée.
Il compare MCIP sur des données simulées à la méthode à recherche géométrique du simplexe de Nelder-Mead, ainsi qu'à une autre méthode stochastique et bayésienne, GLUE [30], en intégrant de l'information *a priori* dans les trois cas. La méthode GLUE consiste à déterminer une approximation de la distribution *a posteriori* des paramètres que l'on veut identifier. Cette méthode possède l'avantage de considérer les non-linéarités du modèle, ainsi que les erreurs sur les observations et les erreurs du modèle, si elle est parfaitement implémentée.
Les variables d'état du modèle servant à l'estimation des paramètres par assimilation sont la quantité d'azote absorbé (Q_N) et le LAI. Q_N est déterminé par le biais de relations empiriques à partir de la quantité de chlorophylle présente dans le couvert (Q_{Cab}) obtenue, tout comme le LAI, grâce à des mesures de télédétection par inversion de modèles de transfert radiatif.
Les résultats permettent d'écarter la méthode du simplexe, dont les performances plutôt décevantes pourraient s'expliquer par le critère à minimiser qui donnerait trop de poids à l'information *a priori* lorsqu'elle est éloignée de la solution, ainsi que par le trop grand nombre de paramètres estimés. Le choix se porte ensuite sur la méthode GLUE de préférence à MCIP, malgré des résultats comparables en terme d'identification des paramètres, pour sa simplicité et sa plus grande efficacité en terme de temps de calcul sur un grand nombre de pixels (nombre de simulations indépendant

[30] GLUE : Generalized Likelihood Uncertainty Estimation, Beven and Binley [24].

du nombre de pixels pour une même information *a priori*). Cependant, si les simulations de LAI et de Q_N après assimilation sont satisfaisantes, l'estimation du rendement dépend de paramètres externes et non estimés donnés par des valeurs *a priori*. Pour estimer ces paramètres, il faudrait donc également utiliser le rendement dans le processus d'assimilation, ce qui impliquerait une sorte d'apprentissage pluriannuel. Une autre suggestion de ce travail consiste à proposer d'utiliser des modèles basés sur des variables d'état plus directement observables par télédétection comme Q_{Cab} ou l'efficience d'interception. La plupart des modèles de culture sont en effet basés sur le LAI qui sert ensuite à calculer l'efficience d'interception. Or, les problèmes de compensation d'effet font qu'il est difficile d'estimer le LAI par télédétection. Par ailleurs, l'efficacité de la photosynthèse est plus liée à la quantité de chlorophylle présente qu'au LAI seul.

$\rightsquigarrow$ **pour parachever...** Cet état de l'art non exhaustif s'est proposé de décrire un échantillon des travaux d'assimilation de données de *télédétection* dans les modèles de végétation. Cependant, l'assimilation peut s'appliquer sur des données ne provenant pas de la télédétection : dans le cas de bases de données consistantes, des mesures de biomasse avant la fin du cycle permettront peut-être d'estimer le rendement final. Ce type d'observations est nettement moins aisé à obtenir en terme d'accessibilité au terrain, ou de régularité des mesures, mais elles sont en fait très souvent présentes dans les bases de données aux côtés des données de télédétection, afin par exemple de calibrer des relations empiriques entre variables observables et réflectances, ou de valider les résultats d'assimilation. Nous proposons ici deux applications d'assimilation de données non radiométriques, une stochastique et une variationnelle, en particulier parce que les méthodes concernées l'ont rarement été dans le cadre d'une combinaison de la télédétection et de modèles de culture.
Makowski [177] applique le filtre de Kalman sous sa forme bayésienne, en estimant une distribution *a posteriori* à partir d'une distribution *a priori* de la variable d'état à l'instant présent. L'intérêt particulier de cette forme réside dans la fonction de densité *a posteriori* qui exprime une caractérisation complète des paramètres, variables d'état et incertitudes du modèle. Il assimile des mesures de biomasse sur du blé en Camargue dans le modèle d'efficience de Varlet-Grancher *et al.* [236], pour déterminer le rendement final. Il constate que l'assimilation de 10 mesures de biomasse réparties le long du cycle (jusqu'à 40 jours avant la récolte) permet d'améliorer la prévision à la date de récolte, si l'on intègre une erreur journalière du modèle suffisamment importante. L'évaluation de l'erreur du modèle influe très fortement sur la prévision et doit donc être effectuée avec précaution, en principe en utilisant une base de données d'entraînement.
Wu [250] propose pour la première fois des travaux préliminaires en assimilation de données dans un modèle de plante individuelle, Greenlab (*e.g.* Yan *et al.* [251]), sur un plant de tournesol. Du fait de la difficulté de dériver les modèles de culture liée à de très fortes non-linéarités, il propose de résoudre le système de contrôle optimal en calculant manuellement l'adjoint de l'un de ses modules, celui concernant la biomasse (*MiniGreenlab*). Ses résultats sur des observations simulées ont permis d'obtenir une meilleure estimation du ravitaillement en eau nécessaire à un rendement du fruit optimal, par l'estimation de conditions initiales. Il ouvre ainsi la porte à de nouveaux développements dans ce domaine, en particulier le calcul de l'adjoint du "modèle entier" après adaptation, l'assimilation de données mesurées, ainsi que l'utilisation de l'adjoint pour des analyses de sensibilité.

d. Conclusion

Le forçage, les relations empiriques et les méthodes semi-empiriques sont relativement efficaces pour décrire la biomasse ou le rendement final, dans les situations adaptées. Pour autant, les travaux combinant les modèles de culture et les observations de télédétection déjà effectués concluent de façon générale (*e.g.* Moulin *et al.* [189]) que l'approche par assimilation permet de meilleures estimations du profil temporel de ces variables agronomiques.

$\rightsquigarrow$ **choix des méthodes.** On constate que la plupart des travaux d'assimilation résultent du couplage d'un modèle de fonctionnement du couvert (MFC) et d'un modèle de transfert radiatif (MTR). De plus, à l'instar des TSVA, l'assimilation séquentielle de type Filtre de Kalman n'a

pas encore été beaucoup développée dans le domaine agronomique. Les travaux sont essentiellement basés sur des méthodes variationnelles de recherche directe (sans calcul du gradient), en grande majorité avec la méthode du simplexe de Nelder-Mead, permettant une mise en œuvre assez rapide. Ce constat génère une classification assez inégale selon le type de méthodes appliquées. Ceci s'explique notamment par le fait que les modèles agronomiques n'ont pas pour vocation de prédire à court terme mais plutôt d'évoluer sur une fenêtre temporelle très large pour représenter le cycle d'une culture avec un climat annuel. De fait, les méthodes non séquentielles sont plus appropriées à ce domaine que les méthodes de correction.

⇝ **difficultés d'application.** On peut envisager de nombreuses explications à la non-mise en œuvre de méthodes d'assimilation dans les modèles de culture :
- l'inexactitude du modèle ;
- le fait que beaucoup de paramètres sur des processus sont mal connus ;
- le domaine de définition du modèle au niveau de la parcelle tandis que les images offrent de l'information au niveau du pixel ;
- l'enjeu économique et social peu important au niveau de la parcelle, et plus évident à l'échelle globale pour laquelle il existe d'autres modèles.

De plus, les travaux se basant sur des méthodes d'assimilation séquentielles ont rencontré des difficultés liées à la définition des erreurs du modèle et des observations nécessaires à l'implémentation de la méthode. Certains travaux appliquant des méthodes variationnelles (*e.g.* Weiss *et al.* [248] ; Houlès [129] ; Nouvellon [195]) ont permis de démontrer que cette technique n'est pas stable, en particulier pour une quantité faible d'observations disponibles, ou pour un nombre trop important de paramètres à estimer.

1.4 Objectifs du travail

Avec ce chapitre introductif, nous avons pu comprendre les enjeux de la télédétection pour le suivi de la végétation cultivée. D'une part, il existe des capteurs qui permettent de récolter des données de réflectance sur l'ensemble des zones à étudier, et ce, de façon globale, répétitive, et dans une gamme spectrale pertinente pour la végétation. D'autre part, les agronomes souhaitent établir un diagnostic de l'état de la culture (*e.g.* pour estimer les besoins en intrants), ou de pronostic (*e.g.* rendement final), que les modèles de fonctionnement des cultures fournissent. Ces deux types d'information peuvent se combiner par des méthodes d'assimilation de données qui permettront d'estimer les paramètres et variables d'entrée de modèles de fonctionnement afin d'assurer une cohérence optimale de leurs simulations avec les observations satellitaires.

Dans le domaine agronomique, nous avons constaté à travers la synthèse bibliographique une certaine diversité des méthodes d'assimilation. Cependant, la plupart de ces travaux ont fait ressurgir le besoin de développer une méthode d'assimilation plus robuste face à une grande quantité de paramètres à estimer souvent associée à une faible quantité d'observations disponibles.

Cette thèse se propose donc de démontrer la faisabilité d'une nouvelle méthode d'assimilation de données de télédétection dans un modèle de fonctionnement de la végétation. Cette volonté a soulevé beaucoup d'interrogations, en particulier sur les aspects suivants :

⇝ *Quelle méthode d'assimilation développer ?* Parmi les méthodes de correction ou de recalibrage, quelle est la plus robuste dans notre contexte ?

⇝ *Quelles variables d'état assimiler ?* En particulier, faut-il assimiler des pseudo-observations de type LAI, ou directement des données radiométriques dans le modèle couplé MFC-MTR ?

⇝ *Quels paramètres estimer ?* Une quantité trop importante de paramètres à estimer peut générer la divergence de certains algorithmes ou la convergence vers un minimum local. Comment déterminer et sélectionner les paramètres les plus pertinents à estimer ?

⇝ *Comment prendre en compte l'aspect spatial ?* Comment assurer les continuités spatiales, *ie* la cohérence des caractéristiques du couvert végétal et du sol entre pixels voisins, d'une même parcelle, ou d'une même image ?

⇝ *Comment définir l'information a priori sur les paramètres ?* Elle permet de rendre le problème mieux posé en ajoutant de la convexité à la fonction coût à minimiser et d'éviter les résultats aberrants. Cependant, elle risque de donner trop d'influence sur l'estimation des paramètres et de pousser l'algorithme à converger plus près de celle-ci que de l'optimum global. Comment définir l'information *a priori* , et quel poids lui accorder dans la fonction coût ?

Jusqu'à présent dans le domaine agronomique, le choix a essentiellement porté sur des méthodes d'assimilation séquentielle ou variationnelle de recherche directe. Il apparaît probable que les méthodes calculant le gradient de la fonction coût soient plus efficaces. La méthode d'assimilation variationnelle utilisant le modèle adjoint n'a jamais été développée dans ce domaine, mais elle a prouvé dans d'autres disciplines une totale robustesse face aux problèmes de très grande dimension. Par ailleurs, le modèle adjoint permet d'effectuer des analyses de sensibilité locales qui constituent un atout supplémentaire.

Nous développerons donc dans le *chapitre 2* les **aspects mathématiques** pour comprendre l'intérêt de l'utilisation du modèle adjoint. La méthode d'assimilation exploitant cet outil appartient à la théorie du contrôle que nous décrirons dans un premier temps sur des équations aux dérivées partielles, puis dans un cas d'équations discrètes.

L'**analyse de sensibilité** détermine quels paramètres sont les plus influents sur les variables d'état du modèle. Cette méthode peut donc éventuellement nous aider à sélectionner les paramètres et les variables d'entrée du modèle à estimer en priorité. Parmi les principales méthodes existantes, nous verrons de façon théorique que le modèle adjoint est un outil particulièrement adapté. Nous aborderons également la sensibilité des résultats d'assimilation par rapport aux observations dans le cadre d'équations au second ordre.

Après ce volet purement mathématique, une seconde partie de ce chapitre s'attachera aux aspects pratiques rencontrés au cours des étapes intermédiaires de l'assimilation variationnelle. La **mise en œuvre** d'une telle méthode nécessite en particulier la compréhension du calcul du modèle adjoint et des **algorithmes de minimisation** pour améliorer leur efficacité. Nous présenterons donc le logiciel de **différentiation automatique** exploité TAPENADE ainsi que le code de minimisation opérationnel N1QN3. Enfin, nous détaillerons les différents **diagnostics** qui seront établis sur les résultats de l'assimilation.

Suite à ce chapitre essentiellement concentré sur l'assimilation, nous passerons dans le *3ième chapitre* à la compréhension des modèles utilisés et la description des données exploitées.

Afin de contrôler au mieux les erreurs intermédiaires, mais également de simplifier le problème de différentiation du modèle, nous ferons le choix d'assimiler des pseudo-observations de LAI dans le modèle de fonctionnement du couvert. Ce choix nécessite l'utilisation d'un **modèle de transfert radiatif** (PROSAIL) que nous décrirons dans une première partie.

Nous considérerons ensuite deux classes de modèles pour travailler au niveau de la végétation : nous proposerons d'une part un nouveau **modèle semi-mécaniste** de simulation du LAI (BONSAÏ). La simplicité de ce modèle facilite l'analyse et l'appropriation de la théorie de l'assimilation variationnelle. Son couplage à un modèle de biomasse (BONSAÏ-BIO) permettra de se placer dans le problème agronomique concret où les variables d'intérêt ne sont pas celles assimilées. Nous jugerons donc de l'intérêt d'assimiler du LAI pour prédire la biomasse finale. Nous présenterons d'autre part un **modèle mécaniste de fonctionnement** complet et complexe (STICS), dans lequel l'assimilation de données de télédétection représente un objectif important pour la communauté agronomique.

Enfin, nous dédierons une partie de ce manuscrit à l'**expérimentation ADAM**, dont les différents types de données seront exploités dans les chapitres suivants.

Le *chapitre 4* présentera les **résultats d'assimilation** obtenus principalement à partir des modèles semi-mécanistes. Il faudra dans un premier temps estimer les variables biophysiques qui seront assimilées dans BONSAÏ. Nous adapterons donc **trois méthodes d'estimation de LAI à partir des réflectances** du couvert végétal. Ces pseudo-observations permettront de corriger la trajectoire du modèle par assimilation dans BONSAÏ à travers de nombreux scénarios. Nous établirons un

diagnostic de la méthode sur sa capacité à **identifier les paramètres** et à reproduire la variable assimilée, ainsi que sur son **coût de calcul** selon les situations. En particulier, nous étudierons **l'importance de l'information *a priori*** , et comment diminuer la quantité d'observations nécessaires. Nous évaluerons également l'intérêt de l'assimilation de données de LAI dans le modèle BONSAÏ-BIO pour la **prévision de biomasse**.

Le *chapitre 5* développera une nouvelle façon de prendre en compte l'aspect spatial lors de l'assimilation de données de télédétection. Cette prise en compte s'exprimera au travers de contraintes spatiales imposées aux paramètres de BONSAÏ en fonction de leurs caractéristiques typiquement variétales (paramètres de phénologie), inter-parcellaires (techniques culturales), ou intra-parcellaires (propriétés du sol). Cette méthode nécessitera le calcul d'un modèle adjoint intégrant ces contraintes sur l'ensemble de l'image. Nous analyserons le gain potentiel associé à l'**utilisation explicite des contraintes spatiales** au niveau de la définition de la fréquence d'observation nécessaire, pour de futures missions spatiales dédiées à l'agriculture.

L'application de notre méthode variationnelle à un modèle mécaniste complexe passe par le calcul de son adjoint. Les modèles de culture comme STICS présentent des difficultés face à la différentiation liées à leurs discontinuités et à leur manque de déterminisme. Cette thèse s'attachera donc dans un *6ième chapitre* à démontrer la **faisabilité de l'application de la méthode variationnelle** en calculant le modèle adjoint de STICS, et en exploitant cet outil à travers une **analyse de sensibilité**.

2

La méthode variationnelle d'assimilation de données

Sommaire du chapitre

2.1 Assimilation de données variationnelle 49
2.1.1 Principe de la théorie dans un modèle généralisé 49
a. La fonction coût 49
b. Le problème de contrôle optimal 50
c. Le rôle de l'adjoint 50
2.1.2 Description de la méthode sur les équations discrètes 51
2.2 Analyse de sensibilité 54
2.2.1 Définition générale 54
a. Pourquoi l'analyse de sensibilité ? 54
b. Définition 54
2.2.2 Description des différentes méthodes 55
a. Méthodes déterministes ou statistiques d'approximation du gradient . . 55
a.i/ Les principales approches 55
a.ii/ Exemples d'applications au couvert végétal 56
b. Méthodes utilisant le modèle adjoint : calcul exact du gradient 57
b.i/ Le contexte de l'assimilation variationnelle 57
b.ii/ Exemples d'applications 57
c. Conclusion 58
2.2.3 Analyse de sensibilité utilisant l'adjoint au premier ordre 58
2.2.4 Analyse de sensibilité prenant en compte les observations 59
a. Sensibilité par rapport aux observations 60
b. Algorithme de la sensibilité 60
c. Le produit Hessien $\times$ Vecteur 61
d. Détermination de v : l'astuce 62
2.2.5 Analyse de sensibilité du vecteur de contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations 63
a. Hypothèses sur le Hessien 64
b. Calcul pratique de la sensibilité du vecteur de contrôle optimal par rapport aux observations 64
2.3 Différentiation et modèle adjoint 66
2.3.1 Les différentes méthodes de différentiation 66
2.3.2 Les opérateurs adjoints 67
2.3.3 Différentiation automatique 69
a. Les modes tangent et inverse 70
b. État de l'art succin 70
c. Les différentes méthodes en différentiation automatique (DA) 71
d. Le différentiateur automatique TAPENADE 71
d.i/ Présentation 71
d.ii/ Étapes importantes pour l'utilisateur 72

d.iii/ Quelques avantages de TAPENADE 73
e. Exemple de détermination pratique d'un code adjoint 73
f. Validation d'un code dérivé 74
f.i/ Le test du gradient ou test de Taylor 75
Théorie. 75
Algorithme du test du gradient. 75
f.ii/ Le test du produit scalaire 75
Théorie. 75
Algorithme du test du produit scalaire. 76
f.iii/ Une validation supplémentaire 76
2.3.4 Conclusion 77
2.4 Les algorithmes de minimisation 77
2.4.1 Introduction à l'optimisation sans contrainte 77
a. Définition du problème d'optimisation et des conditions d'optimalité . . 77
b. Résolution de (P_X) 78
b.i/ Calcul de la direction de descente d_k 78
b.ii/ Détermination du pas α_k 79
2.4.2 Le module d'optimisation M1QN3/N1QN3 79
a. Méthode de Quasi-Newton 79
b. Algorithme de la méthode à direction de descente de BFGS à mémoire limitée 80
c. Critère d'arrêt de l'algorithme 81
d. Signes précurseurs et solutions lors d'une non-convergence de N1QN3 . 81
e. Conclusion 83
2.5 Conditionnement et préconditionnement 84
2.5.1 Importance du Hessien 84
2.5.2 Conditionnement du Hessien 84
2.5.3 Préconditionnement et adimensionnalisation 85
a. Préconditionnement par changement de variables 86
b. Préconditionnement par changement de produit scalaire 87
2.5.4 Conclusion 88
2.6 Évaluation des résultats d'assimilation 88
2.6.1 Diagnostics sur le comportement de l'algorithme de minimisation 88
2.6.2 Diagnostic sur les résultats d'assimilation 89
a. Prise en compte des erreurs 89
b. Expériences jumelles : simulation d'observations 89
c. Comparaison avec des données différentes de celles assimilées 90
d. Diagnostics d'erreur 90
2.6.3 Conclusion 91

Comme les éléments bibliographiques ont permis de l'énoncer (§ 1.3.5), les méthodes d'assimilation variationnelle utilisent la théorie du contrôle optimal et reposent de façon générale sur la minimisation d'une fonction coût, représentant l'écart entre les observations et les simulations du modèle. Le minimum de la fonction coût est déterminé par l'utilisation du *modèle adjoint*, qui permet de calculer le gradient de la fonction coût.

Ce chapitre propose dans un premier temps de décrire la théorie justifiant l'utilisation d'un modèle adjoint, le système d'optimalité à résoudre et les principales équations pour déterminer le minimum de la fonction coût. On s'attachera également à l'analyse de sensibilité sous différentes formes, en commençant par une description des méthodes existantes et de quelques applications au couvert végétal. Nous développerons de façon théorique pourquoi le modèle adjoint est un outil particulièrement adapté à certains objectifs de l'analyse de sensibilité.

La deuxième grande partie du chapitre, quant à elle, décrira les outils algorithmiques intermédiaires, les aspects pratiques rencontrés ainsi que les difficultés associées que nous avons jugé utile de développer :

- ⇝ pour le calcul du modèle adjoint par la différentiation automatique (§ 2.3) ;
- ⇝ pour l'exploitation du gradient de la fonction coût par des algorithmes de minimisation (§ 2.4 - 2.5) ;
- ⇝ pour établir un diagnostic des résultats d'assimilation (§ 2.6).

1e PARTIE : ASPECT THÉORIQUE DE L'ASSIMILATION VARIATIONNELLE

2.1 Assimilation de données variationnelle

2.1.1 Principe de la théorie dans un modèle généralisé

Considérons le modèle décrit de manière générale par le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{dX}{dt} &= F(X,K) \\ X(0) &= u \end{cases} \tag{2.1}$$

où : X est la variable d'état appartenant à un espace de Hilbert $\mathcal{X}$ ($\mathcal{X} \equiv \mathbb{R}^n$ par exemple) évoluant dans le temps de t=0 à t=T, avec t le temps ; K est un vecteur de paramètres appartenant à $\mathcal{K}$ espace de Hilbert ; F est un opérateur différentiel, $F : K \to X$ que l'on supposera différentiable ; $u \in \mathcal{X}$ représente les conditions initiales. Si la variable de contrôle peut être la condition initiale u, ou les conditions aux limites comme dans beaucoup d'études [183]), celle choisie dans ce travail est K, représentant les paramètres du modèle.

a. La fonction coût

Considérant que nous avons des observations X_{obs} de la variable d'état X, elles appartiennent à un espace de Hilbert de dimension finie que l'on appellera $\mathcal{X}_{obs}$. On définit donc C l'opérateur de projection de l'espace de la variable d'état dans l'espace des observations $\mathcal{X}_{obs}$: $C : \mathcal{X} \to \mathcal{X}_{obs}$. L'objectif de la méthode consiste à estimer les variables de contrôle (ici K) minimisant l'écart entre les variables simulées par le modèle et les observations. Cet écart est représenté par la fonction coût J (2.2) qui prend également en compte l'information *a priori* K_0 que l'on détient sur les paramètres K :

$$J(K) = \frac{1}{2}\|C.X(K) - X_{obs}\|^2_{\mathcal{X}_{obs}} + \frac{1}{2}\|K - K_0\|^2_{\mathcal{K}} \tag{2.2}$$

avec $\|\cdot\|_{\mathcal{X}_{obs}}$ et $\|\cdot\|_{\mathcal{K}}$ les normes respectives des espaces de définition de X_{obs} et K. Ces normes peuvent par exemple considérer la matrice de covariance de l'erreur.

Remarque 1.
Le second terme $\|K - K_0\|^2_{\mathcal{K}}$ représentant l'information a priori (IAP) sur la variable de contrôle joue un rôle très important dans l'optimisation. Il permet en effet de réduire le nombre de minima locaux en ajoutant de la convexité à la fonction coût. Au cours de ce travail, on a pu constater à quel point ce terme est indispensable et difficile à déterminer. En effet, dans les exercices d'assimilation ayant pour objectif la prévision de l'état de l'environnement tel qu'en météorologie, on utilise souvent comme IAP l'état présent, et l'on cherche à estimer l'état futur. On lui associe également souvent un poids $\lambda\|K - K_0\|^2_{\mathcal{K}}$, ainsi qu'au premier terme, et on peut étudier l'effet de la variation de ces poids sur les résultats d'assimilation. Dans le cas d'un modèle de fonctionnement de la végétation, on considère souvent que chaque composante du vecteur des N paramètres $K(i)$ suit une loi gaussienne de moyenne le milieu de son intervalle de définition $K_0(i)$ et sa variance associée $\sigma^2(i)$:

$$\|K - K_0\|^2_{\mathcal{K}} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(K(i) - K_0(i))^2}{\sigma^2(i)}, \ i \in \mathbb{N}^*$$

(voir [178]). Cependant, cette considération nécessite de connaître l'intervalle de définition des paramètres. Ainsi, l'IAP est-elle un éternel souci et manque parfois de rigueur dans sa détermination. Ce vaste sujet est plus amplement discuté dans le chapitre de résultats 4.

b. Le problème de contrôle optimal

Cherchant à minimiser la fonction coût (2.2), on obtient le problème de contrôle optimal suivant : **déterminer K^* tel que**

$$J(K^*) = \min_{K \in \mathcal{K}} J(K) \tag{2.3}$$

K^* vérifie alors la condition d'Euler-Lagrange :

$$\nabla_K J(K^*) = 0 \tag{2.4}$$

où $\nabla_K J(.)$ est le gradient de J par rapport à K. L'objectif est ainsi de calculer le gradient de la fonction coût pour avoir la condition d'optimalité et utiliser les algorithmes de minimisation. Pour le calculer nous allons introduire le modèle adjoint qui sera explicitement défini plus tard. En appliquant une perturbation δK de K, on obtient la Gateaux-dérivée du modèle (2.1) (voir définition B.3 en annexe) suivante :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{d\widehat{X}}{dt} + \left[\dfrac{\partial F(X,K)}{\partial X}\right] \cdot \widehat{X} + \left[\dfrac{\partial F(X,K)}{\partial K}\right] \cdot \widehat{K} & = & 0 \\ \widehat{X}(0) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.5}$$

où : $\widehat{X}$ et $\widehat{K}$ sont les dérivées directionnelles respectivement de X suivant la direction δX et de K suivant la direction $k = \delta K$.
La Gateaux-dérivée de la fonction coût (2.2) dans la direction k est donnée par :

$$\widehat{J}(K,k) = \left(C \cdot X - X_{obs}, C\widehat{X}\right) + (K - K_0) \tag{2.6}$$

La dépendance linéaire de $\nabla_K J$ par rapport à k permettra d'exprimer le gradient de J tel que :

$$\widehat{J}(K,k) = \nabla_K J \cdot k$$

c. Le rôle de l'adjoint

Dans le but de montrer et d'exprimer la dépendance linéaire de $\nabla_K J$ par rapport à k, nous allons introduire la variable adjointe P de X. Cette variable est de même dimension que X et est la solution du modèle adjoint (2.7). Notons qu'elle évolue dans le temps dans le sens rétrograde, de t=T à t=0.

On multiplie scalairement le modèle (2.1) par P, puis on effectue une intégration par parties entre 0 et T. Les étapes des calculs sont fournies dans divers ouvrages (*e.g.* [194] [193]) et elles sont également détaillées dans le cas discret § 2.1.2. Il vient que si P est solution du modèle adjoint suivant :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dP}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^T P & = & C^t(CX - X_{obs}) \\ P(T) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.7}$$

alors on peut calculer le gradient de J avec l'expression suivante :

$$\nabla J_K = -\left[\frac{\partial F}{\partial K}\right]^t P + K - K_0 \tag{2.8}$$

Ainsi, la résolution du système d'optimalité (S.O.) (2.9) est le point-clé de la minimisation de la fonction coût J :

$$(\text{S.O.}) \left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dX}{dt} & = & F(X,K) \\ X(0) & = & u \\ \dfrac{dP}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^T P & = & C^t(CX - X_{obs}) \\ P(T) & = & 0 \\ \nabla_K J & = & -\left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t P + K - K_0 \end{array} \right. \tag{2.9}$$

Nous avons donc quatre étapes fondamentales dans le développement de la méthode d'assimilation par l'adjoint :

1. résoudre le modèle direct (2.1),

2. résoudre le modèle adjoint (2.7) et obtenir P,

3. en déduire le gradient de la fonction coût J en fonction de ce que l'on veut estimer par (2.8),

4. donner ce gradient à un algorithme de minimisation et obtenir les variables de contrôle optimales.

Remarque 2.
*L'étape **2.** n'est viable que si le modèle adjoint a été correctement calculé. Ceci est fait dans ce travail avec l'aide du différentiateur automatique TAPENADE (INRIA [123]) présenté § 2.3.3.*

Remarque 3.
*L'étape **4.** dans ce travail a été réalisée avec l'algorithme de minimisation N1QN3 (INRIA [98]) dont la théorie est décrite plus précisément § 2.4.2.*

2.1.2 Description de la méthode sur les équations discrètes

Dans cette partie, nous proposons de décrire la manière dont est obtenue l'équation discrète du modèle adjoint pour ceux qui sont plus familiarisés avec les équations discrètes. En effet, l'évolution du couvert végétal n'est pas exprimée par des équations aux dérivées partielles comme c'est le cas pour l'écoulement des fluides géophysiques modélisés en océanographie, hydrologie, ou météorologie par exemple. La théorie de l'assimilation de données variationnelle a été largement développée dans divers ouvrages, *e.g.* Le Dimet et Blum [163], et les thèses de Ngnepieba [193] et de Mazauric [183]. Ainsi nous proposons ici un développement théorique dans le cas où la variable d'état ne peut être exprimée par des équations continues mais l'est en fonction de l'instant précédent.

Considérons que le modèle se définit de manière discrète, c'est-à-dire que la variable d'état au temps t est fonction de la variable d'état au temps $t-1$. On peut l'écrire de manière générale par

le système suivant entre 0 et N :

$$\left\{\begin{array}{rcl} X_0 & = & X_0 \\ X_1 & = & X_0 + \Delta t \cdot F(X_0, K) \\ \vdots & & \vdots \\ X_j & = & X_{j-1} + \Delta t \cdot F(X_{j-1}, K) \\ \vdots & & \vdots \\ X_N & = & X_{N-1} + \Delta t \cdot F(X_{N-1}, K) \end{array}\right. \tag{2.10}$$

On cherche à calculer le gradient de la fonction coût suivante :

$$J(K) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} \omega_i (X_i - {X_i}^{obs})^2 + \frac{\alpha}{2}\|K - K_0\|^2 \tag{2.11}$$

avec K_0 l'IAP sur les paramètres ; $(\omega_i)_{i=1,N}$ les poids associés à l'écart aux observations ($\omega_i = 0$ quand il n'y a pas d'observation au temps i) ; α le poids associé à l'IAP ; ${X_i}^{obs}$ les observations au temps i de la variable d'état X. Pour simplifier les calculs, nous poserons $\Delta t = 1$ et nous développerons sans le terme de l'IAP K_0 sur les paramètres.

En posant $H = (K, X_0)$ et en notant $\bar{H} = (\bar{K}, \bar{X}_0)$ une perturbation sur H alors nous pouvons calculer les dérivées directionnelles dans la direction $\bar{H}$, on obtient le modèle linéaire tangent :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \bar{X}_0 & = & \bar{X}_0 \\ \bar{X}_1 & = & \bar{X}_0 + \dfrac{\partial F}{\partial X}\bar{X}_0 + \dfrac{\partial F}{\partial K}(X_0) \cdot \bar{K} \\ \vdots & & \vdots \\ \bar{X}_j & = & \bar{X}_{j-1} + \dfrac{\partial F}{\partial X}\bar{X}_{j-1} + \dfrac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1}) \cdot \bar{K} \\ \vdots & & \vdots \\ \bar{X}_N & = & \bar{X}_{N-1} + \dfrac{\partial F}{\partial X} \cdot \bar{X}_{N-1} + \dfrac{\partial F}{\partial K}(X_{N-1}) \cdot \bar{K} \end{array}\right. \tag{2.12}$$

et l'on peut exprimer la dérivée directionnelle de la fonction coût J dans la direction H ainsi :

$$\bar{J}(H, \bar{H}) = \sum_{i=1}^{N} \omega_i (X_i - {X_i}^{obs}) \cdot \bar{X}_i + \alpha < K - K_0, \bar{K} > \tag{2.13}$$

Par définition du gradient, on peut écrire :

$$\bar{J}(H, \bar{H}) =< \nabla J_H, \bar{H} >=< \nabla J_K, \bar{K} > + < \nabla J_{X_0}, \bar{X}_0 > \tag{2.14}$$

Ainsi, si l'on arrive à exprimer la linéarité de $\bar{J}(H, \bar{H})$ par rapport à $\bar{H}$ on pourra déterminer le gradient. C'est bien notre objectif puisque l'on souhaite minimiser la fonction coût.

Multiplions scalairement chaque équation du système (2.12) par la variable adjointe P_j de X_j et sommons de 0 à N, il reste :

$$\begin{array}{rcl} \displaystyle\sum_{j=1}^{N} < \bar{X}_j, P_j > & = & \displaystyle\sum_{j=1}^{N} < \bar{X}_{j-1}, P_j > + \sum_{j=1}^{N} < F'_X(j-1) \cdot \bar{X}_{j-1}, P_j > \\ & & \displaystyle\qquad + \sum_{j=1}^{N} < F'_K(j-1) \cdot \bar{K}, P_j > \\ & = & \displaystyle\sum_{j=1}^{N} < \bar{X}_{j-1}, P_j > + \sum_{j=1}^{N} < F'_X(j-1) \cdot \bar{X}_{j-1}, P_j > \\ & & \displaystyle\qquad + \sum_{j=1}^{N} < {F'}^t_K(j-1) \cdot P_j, \bar{K} > \end{array} \tag{2.15}$$

avec les notations $F'_X(j) = \dfrac{\partial F}{\partial X}(X_j)$ et $F'_K(j) = \dfrac{\partial F}{\partial K}(X_j)$ pour j entier compris entre 0 et N.
Il reste donc :

$$\begin{aligned}
< \bar{X}_N, P_N > - < \bar{X}_0, P_1 > \quad &+ \quad \sum_{j=1}^{N-1} < \bar{X}_j, P_j - P_{j+1} > \\
&= \quad \sum_{j=1}^{N} < [F'_K(j-1)]^t P_j, \bar{K} > + \sum_{j=0}^{N-1} < \bar{X}_j, [F'_X(j)]^t P_{j+1} > \\
< \bar{X}_N, P_N > - < \bar{X}_0, P_1 > \quad &+ \quad \sum_{j=1}^{N-1} < \bar{X}_j, P_j - P_{j+1} - [F'_X(j)]^t P_{j+1} > \\
&= \quad \sum_{j=1}^{N} < [F'_K(j-1)]^t P_j, \bar{K} > + < \bar{X}_0, [F'_X(0)]^t P_1 >
\end{aligned} \tag{2.16}$$

ce qui donne finalement :

$$\begin{aligned}
< \bar{X}_N, P_N > \quad - \quad &< \bar{X}_0, \left[\frac{\partial F}{\partial X_0}(X_0)\right]^t P_1 + P_1 > \\
+ \quad &\sum_{j=1}^{N-1} < \bar{X}_j, P_j - P_{j+1} - \left[\frac{\partial F}{\partial X_j}(X_j)\right]^t P_{j+1} > \\
&= \sum_{j=1}^{N} < \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1})\right]^t P_j, \bar{K} >
\end{aligned} \tag{2.17}$$

Si l'on définit l'adjoint P_j de X_j tel que :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} P_j - P_{j+1} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X_j}(X_j)\right]^t P_{j+1} & = & \omega_j(X_j - X_j{}^{obs}) \\ P_N & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.18}$$

il reste de l'équation (2.17) :

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{N-1} < \bar{X}_j, \omega_j(X_j - X_j{}^{obs}) > \quad = \quad &\sum_{j=1}^{N} < \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1})\right]^t P_j, \bar{K} > \\
&+ < \left[\frac{\partial F}{\partial X_0}(X_0)\right]^t P_1 + P_1, \bar{X}_0 >
\end{aligned} \tag{2.19}$$

et alors la dérivée directionnelle de la fonction coût peut se mettre sous la forme :

$$\begin{aligned}
\bar{J}(H, \bar{H}) \quad &= \quad < \nabla J_H, \bar{H} > \\
&= \quad \alpha < K - K_0, \bar{K} > + \sum_{j=1}^{N} < \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1})\right]^t P_j, \bar{K} > \\
&\qquad + < \left[\frac{\partial F}{\partial X_0}(X_0)\right]^t P_1 + P_1, \bar{X}_0 >
\end{aligned} \tag{2.20}$$

Ainsi, les composantes du gradient de J par rapport à H sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \nabla J_K & = & \displaystyle\sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1})\right]^t P_j + \alpha(K - K_0) \\ \nabla J_{X_0} & = & \left[\dfrac{\partial F}{\partial X_0}(X_0)\right]^t P_1 + P_1 \end{array} \right. \tag{2.21}$$

Les principales étapes dans cette démarche se résument donc ainsi :

– résoudre le modèle direct (2.10),
– résoudre de manière rétrograde le système adjoint (2.18),
– déduire avec la formule (2.21) le gradient de la fonction coût que l'on enverra à l'algorithme d'optimisation.

Ces étapes s'effectuent par la résolution du système d'optimalité (2.22), et les solutions (K^*, X_0^*) vérifient :

$$\left\{\begin{array}{rcl} X_0 & = & X_0^* \\ X_j & = & X_{j-1} + \Delta t \cdot F(X_{j-1}, K^*) \\ P_j - P_{j+1} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X_j}(X_j)\right]^t P_{j+1} & = & \omega_j (X_j - X_j^{obs}) \\ P_N & = & 0 \\ \nabla J_K & = & \displaystyle\sum_{j=1}^{N} \left[\frac{\partial F}{\partial K}(X_{j-1})\right]^t P_j + \alpha(K - K_0) \\ \nabla J_{X_0} & = & \left[\dfrac{\partial F}{\partial X_0}(X_0)\right]^t P_1 + P_1 \end{array}\right. \tag{2.22}$$

Remarque 4.
Le schéma discrétisé choisi ici étant le schéma d'Euler, un autre choix, tel que le Leap-Frog par exemple, aurait donné une solution exprimée différemment.

Les similitudes avec le système d'optimalité (2.9) de la première partie nous permettent d'annoncer que dorénavant les équations seront exprimées telles que dans la partie 2.1 pour alléger les écritures.

2.2 Analyse de sensibilité

2.2.1 Définition générale

a. Pourquoi l'analyse de sensibilité ?

Un modèle est une représentation simplifiée ou biaisée, plus ou moins réaliste de la variable d'état qu'il simule. C'est particulièrement le cas pour les modèles agronomiques, puisqu'on ne connaît pas (encore) d'équations exactes régissant les lois de leurs variables d'état. De fait, connaître l'incertitude sur les sorties du modèle est indispensable. Lorsqu'on utilise un nouveau modèle, il est difficile de deviner quels paramètres auront le plus de poids dans le modèle, sur lesquels porter plus d'attention en terme de précision, sur lesquels une perturbation engendrerait une différence conséquente en sortie. Dans un modèle agronomique, on peut se demander quels paramètres doivent être estimés en priorité, ou comment les observations d'une variable d'état du couvert végétal améliorent les résultats de l'assimilation. Et même, pour des raisons économiques ou pratiques, on peut souhaiter étudier l'impact de la fréquence de ces observations sur les résultats de l'estimation des paramètres du modèle. Ainsi, les besoins et les souhaits d'applications se résument en :

1. l'amélioration de la qualité de la réponse du modèle ;
2. la simplification du modèle.

Ces objectifs trouvent une réponse avec l'analyse de sensibilité, méthode qui permet, par définition, d'*étudier l'impact d'une perturbation des paramètres de contrôle sur la sortie du modèle.*

b. Définition

Une analyse de sensibilité se définit par :

- un **modèle** :

$$\mathcal{F}(\mathcal{X}, \mathcal{K}) = 0 \tag{2.23}$$

où $\mathcal{X}$ est la variable d'état ; $\mathcal{K}$ sont les variables de contrôle du modèle ; $\mathcal{F}$ est un opérateur différentiel *a priori* non linéaire, de dimension finie. On suppose que pour $\mathcal{K}$ donné, le système (2.23) a une unique solution.

- une **fonction réponse** $\mathcal{G}$, qui exprime (d'une certaine façon adaptée à la situation) une ou plusieurs sorties du modèle dont on cherche à évaluer la sensibilité, fonction de $(\mathcal{X}, \mathcal{K})$ à valeur scalaire.

On cherche alors à déterminer la **sensibilité de $\mathcal{G}$ par rapport à $\mathcal{K}$**. On peut choisir $\mathcal{K} = K$ (les paramètres), ou $\mathcal{K} = u$ (la condition initiale), ou $\mathcal{K} = X_{obs}$ (les observations), ou encore des combinaisons de ces possibilités. Dans ce travail, $\mathcal{K} = (K, X_{obs})$ constitue un choix intéressant.

Intuitivement, la sensibilité des sorties du modèle $\mathcal{F}$ (exprimées par $\mathcal{G}$) par rapport à $\mathcal{K}$ est en fait l'effet d'une perturbation de $\mathcal{K}$ sur les valeurs de $\mathcal{G}$. De façon mathématique, la sensibilité $\mathcal{S}$ de $\mathcal{G}$ par rapport à $\mathcal{K}$ est par définition *le gradient de $\mathcal{G}$ par rapport à $\mathcal{K}$* :

$$\mathcal{S} = \nabla_{\mathcal{K}} \mathcal{G} \tag{2.24}$$

Si l'on choisit de définir $\mathcal{G}$ comme une expression de X l'une des variables d'état du modèle, on obtient la sensibilité de cette variable d'état X par rapport aux paramètres $\mathcal{K}$.

2.2.2 Description des différentes méthodes

L'analyse de sensibilité regroupe deux grands types d'objectifs justifiant son besoin :

- mieux comprendre le modèle et les liens entre entrées et sorties ;
- considérer toutes les questions précises liées à ces relations :
  - études d'erreur de modèle dues à un contrôle de qualité non rigoureux sur les variables d'entrées ("analyse d'incertitude" des variables *d'entrée*),
  - optimisation du modèle en considérant constants certains paramètres auxquels le modèle n'est pas sensible,
  - identification des variables auxquelles le modèle réagit le plus, etc...

L'analyse de sensibilité consiste grossièrement à perturber les paramètres d'entrée et étudier les conséquences en sortie du modèle, *la variation des variables de sortie du modèle lorsque les paramètres ou les variables explicatives varient* (Molinari *et al.* [185] ; Saltelli *et al.* [224]). Cette sensibilité d'un modèle par rapport à une perturbation peut donc se calculer par des méthodes déterministes ou statistiques. Cependant, le calcul *exact* du gradient (équation (2.24)) ne s'obtient que par certaines méthodes déterministes et dans un cadre *local* (au voisinage d'un point de l'espace de contrôle), tandis que les méthodes statistiques en donnent toutes une approximation (Ionescu and Cacuci, 2004 [139]), mais permettent de déterminer une sensibilité *globale* en explorant tout l'espace de contrôle. On proposera donc une première partie composée des différentes méthodes d'approximation du gradient, par des techniques déterministes puis statistiques, et une seconde partie consacrée à l'approche permettant le calcul exact du gradient, utilisant le modèle adjoint.

a. Méthodes déterministes ou statistiques d'approximation du gradient

a.i/ Les principales approches

- **Par différences finies.** Cette méthode, qui représente l'approche la plus intuitive et simple des dérivées partielles, est décrite dans le cadre de la différentiation automatique (§ 2.3.1). Elle est très facile à mettre en place, cependant le choix des paramètres de perturbation des entrées (direction et pas de descente) est très délicat et peut engendrer des erreurs de précision, garantissant difficilement un résultat optimal. Tout le problème se pose dans le choix de la perturbation que l'on fait subir aux paramètres d'entrée, car elle a lieu dans l'espace des paramètres qui, en particulier s'il est grand, ne peut pas être entièrement parcouru.

- **Par dérivation du modèle.** On peut également calculer formellement les dérivées directionnelles du modèle par rapport aux variables d'entrée, en utilisant le **modèle linéaire tangent** calculé en général avec un différentiateur automatique. Celui-ci a l'avantage d'avoir linéarisé le modèle, car pour les modèles non linéaires il est pratiquement impossible de calculer les dérivées partielles. Il offre une alternative moins primitive par rapport aux différences finies, mais dépend également de la direction dans laquelle les dérivées directionnelles sont calculées. Il faut donc calculer ces dérivées dans toutes les directions de l'espace de contrôle, ce qui peut représenter un coût de calcul important, et dépend totalement de la façon dont on choisit de parcourir l'espace.
- Les **techniques d'échantillonnage** proposent une méthode efficace pour parcourir l'espace de contrôle et modéliser les relations entre entrées et sorties, en proposant au modèle des combinaisons aléatoires perturbées des paramètres d'entrée. On distingue :
  - les méthodes de type **Monte Carlo** : analyse de régression, analyse de variance (qui prend également en compte les variations de l'environnement et les relations entre ces variations, celles des paramètres d'entrée et les sorties du modèle),...
  - les **plans d'expériences numériques**, qui n'utilisent qu'un échantillonnage restreint déterministe contenant cependant un maximum d'information pertinente.

  Ces méthodes posent pour la plupart le problème de choix des fonctions de distribution qui leur sont associées, et ont surtout l'inconvénient de demander un coût numérique vite important dû au grand nombre de simulations déterminé par l'échantillonnage.
- **Méthodes hybrides** combinant par exemple les techniques d'échantillonnage pour décrire les directions possibles suivies du calcul des dérivées directionnelles par un modèle linéaire tangent peuvent être une alternative intéressante. Cependant, elles comportent les mêmes inconvénients de coût numérique et du bon choix des fonctions de distribution.

a.ii/ Exemples d'applications au couvert végétal

- Le type de méthode utilisant les **plans d'expériences numériques** est depuis peu appliqué en télédétection dans les modèles de réflectance du couvert végétal (Dechambre et le Gac [67] ; Bacour [6] en 2001), alors qu'il l'a été en agronomie depuis 1925 par Fisher (on ne parlait pas encore de *numérique*).
- Parmi les analyses de sensibilité de type **Monte Carlo** dans des modèles de fonctionnement du couvert, dont Hamby [121] fait une synthèse de toutes les méthodes existant en 1994, on peut citer les travaux de Ruget *et al.* [223]. Leur particularité est de ne garder que les coefficients jugés importants après une première étude indépendamment des conditions de simulation, pour faire ensuite sur ces coefficients seulement une analyse de régression globale. Grosbuis [110] compare trois méthodes d'analyse de sensibilité, directe, empirique ou à base stochastique.
- Citons également l'algorithme MOGSA (Bastidas *et al.* [18]) développé dans un contexte hydrologique. Il a été développé afin de réduire la dimension du problème d'optimisation ultérieure et repose principalement sur un concept stochastique et multicritère. Cet algorithme est inclus dans la méthode d'assimilation MCIP (Demarty *et al.* [74] ; cf. § 1.3.5 c.), qui a été appliquée par Houlès [129] pour faire une analyse de sensibilité du modèle de végétation STICS.
- Le **modèle tangent** pour déterminer la sensibilité a été utilisé en agronomie par Grosbuis [110], mais il est surtout connu dans d'autres domaines, comme en hydrologie (Bélanger [21]), ou en océanographie avec par exemple la linéarisation d'un modèle couplé océan-biogéochimie par Faugeras [80].

b. Méthodes utilisant le modèle adjoint : calcul exact du gradient

b.i/ Le contexte de l'assimilation variationnelle

La méthode d'analyse de sensibilité utilisant les équations adjointes est la seule permettant de calculer formellement le gradient de la fonction réponse, c'est-à-dire ses dérivées partielles *dans toutes les directions* de l'espace des paramètres d'entrée. On a ainsi une interprétation exacte du gradient par rapport à toutes les variables de contrôle souhaitées, en une seule résolution du modèle adjoint. Mais là encore on peut distinguer deux ordres :

- **adjoint au premier ordre.** Au premier ordre, on obtient la valeur exacte du gradient de la fonction réponse, et donc de sa sensibilité par rapport aux paramètres du modèle dans toutes les directions. Cette théorie simple et efficace est développée dans la section 2.2.3. Son inconvénient majeur, outre le calcul de l'adjoint, est de donner une sensibilité locale, au voisinage des conditions de calcul des dérivées.
- **adjoint au second ordre.** Dans un contexte d'assimilation tel que celui-ci, la difficulté supplémentaire est apportée par la dépendance à une nouvelle famille de paramètres, les *observations*. Cette subtile dépendance n'a pas toujours été évidente dans le domaine de l'assimilation. Un exemple simple donné par Ngodock [194] remet en cause certaines publications et met en évidence le besoin de tenir compte de cette dépendance aux observations. Dans le contexte de l'assimilation comme l'est celui de ce travail, ces méthodes donnent une information pertinente et intéressante pour le développement de l'assimilation et ont naturellement été choisies pour calculer la sensibilité des modèles de fonctionnement du couvert. Si l'on désire prendre en compte les observations et donc le système d'optimalité comme on l'a défini au préalable, on devra utiliser un adjoint au second ordre (§ 2.2.4). La théorie de la sensibilité au second ordre est développée dans les articles de Le Dimet [164] [165], où il introduit en particulier la définition du système d'optimalité au second ordre.

Ainsi, malgré la première intuition que l'on peut avoir, identifier les paramètres de cette façon ne permet pas de déterminer ceux sur lesquels il faudra porter l'attention pour l'assimilation d'*observations*. En effet, une analyse de sensibilité directe, si l'on veut inclure les observations, ne traduit pas les conséquences de perturbations des variables de contrôle sur les résultats d'assimilation de données, ou les conséquences d'un bruit sur les observations sur la qualité d'estimation des paramètres optimaux par exemple. Ceci ne peut être traduit que par une analyse de sensibilité utilisant l'adjoint au second ordre.

On pourrait donc obtenir avec la sensibilité directe qu'une variable d'état du modèle est très sensible à certains paramètres, et avec la sensibilité adjointe, que ces mêmes paramètres compensent leurs effets entre eux, et que les estimer moins bien n'a aucune conséquence sur les résultats de l'assimilation de données.

b.ii/ Exemples d'applications

- L'approche utilisant les équations adjointes au premier ordre a été utilisée dans divers domaines tels que l'économie, l'économétrie, la physique des réacteurs, dont le spécialiste Cacuci [41] le premier développa un cadre rigoureux et mathématique en 1981. Dans le domaine environnemental, la météorologie est l'applicateur le plus fidèle avec Zou *et al.* [253] qui l'utilise dans le contexte de l'assimilation.
- L'information apportée par le second ordre s'exploite dans de plus en plus de disciplines, en sismologie, en océanographie, en météorologie, encourageant la recherche en différentiation automatique. Cependant, en terme d'*analyse de sensibilité* utilisant les équations au second ordre, on remarquera particulièrement les thèses de Ngodock [194] en application à la circulation de l'océan, et Mazauric [183] pour les modèles d'hydraulique fluviale.

c. Conclusion

La méthode la plus efficace pour une sensibilité locale est sans conteste celle utilisant l'adjoint et donnant une valeur exacte du gradient (Ionescu and Cacuci [139]). Pour des problèmes à grande échelle, elle présente l'avantage de ne pas rencontrer de problèmes face aux méthodes d'échantillonnage et aux différences finies, qui restent limitées par l'exploration plus ou moins optimale et précise de l'espace de contrôle, et de fait par les coûts de calcul. Cependant, le calcul de l'adjoint n'est pas toujours évident selon le modèle, et la critique majeure revient au fait que l'on obtient une sensibilité locale, ce qui justifie sans doute son absence dans le domaine des modèles de fonctionnement de la végétation. Jusqu'ici, parmi toutes les méthodes déterministes, seule la méthode GASAP (Global Adjoint Sensitivity Analysis Procedure) développée par Cacuci [42] permet de généraliser la sensibilité calculée avec le modèle adjoint sur la globalité du domaine, c'est-à-dire sans dépendre du point dans le voisinage duquel est effectuée l'analyse, et des conditions extérieures forcées (données climatiques par exemple). La méthode GASAP n'a cependant pas encore été testée sur des modèles présentant de fortes discontinuités, mais est promise à être combinée avec des méthodes de sensibilité globale statistiques prochainement.

Le choix dans ce travail s'est donc logiquement porté sur l'exploitation du modèle adjoint comme outil d'analyse de sensibilité. La section qui suit consiste en une description de la méthode de l'analyse de sensibilité (locale) par les équations adjointes dans les 2 cas de figures (premier et second ordre).

2.2.3 Analyse de sensibilité utilisant l'adjoint au premier ordre

On note dans tout ce travail $\mathcal{K}_{ad}$ l'ensemble des valeurs admissibles du vecteur de paramètres K.

L'équation (2.24) définit la sensibilité d'une fonction réponse $\mathcal{G}$ directement par le calcul de son gradient. Le principe va donc consister à exhiber la dépendance linéaire de $\hat{\mathcal{G}}$ la dérivée directionnelle de la fonction réponse par rapport à la perturbation k des variables de contrôle $\mathcal{K}$, de la même façon que dans la théorie de l'assimilation utilisant les équations adjointes.

Dans cette partie nous considérons que le modèle est exprimé par l'équation (2.23). Formellement, une perturbation k de $\mathcal{K}$ sur le modèle généralisé (2.23) donne :

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}} \cdot \hat{\mathcal{X}} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}} \cdot k = 0 \tag{2.25}$$

avec $\hat{\mathcal{X}}$ la dérivée de $\mathcal{X}$ dans la direction k. De même, la dérivée directionnelle de la fonction réponse $\mathcal{G}$ s'écrit

$$\hat{\mathcal{G}} = \left\langle \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{X}}, \hat{\mathcal{X}} \right\rangle = \langle \nabla \mathcal{G}, k \rangle \tag{2.26}$$

Dans le but d'exhiber la dépendance linéaire de $\hat{\mathcal{G}}$ par rapport à k, on s'aidera encore une fois de la variable adjointe $\mathcal{P}$ de $\hat{\mathcal{X}}$ que l'on multiplie scalairement par l'équation (2.25), ce qui donne :

$$\left\langle \hat{\mathcal{X}}, \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}}\right]^t \cdot \mathcal{P} \right\rangle + \left\langle k, \left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}}\right]^t \cdot \mathcal{P} \right\rangle = 0 \tag{2.27}$$

Si l'on définit $\mathcal{P}$ tel que :

$$\left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{X}}\right]^t \cdot \mathcal{P} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathcal{X}} \tag{2.28}$$

alors on a bien le gradient de la fonction réponse par l'expression :

$$\nabla \mathcal{G} = -\left[\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{K}}\right]^t \cdot \mathcal{P} \tag{2.29}$$

Nous avons ainsi très simplement, avec une seule résolution du modèle adjoint, la sensibilité de la fonction réponse par rapport à une perturbation sur les variables de contrôle. Pour résumer nous devrons :

1. résoudre le modèle direct (2.23) dans le voisinage où l'on souhaite connaître la sensibilité ;

2. résoudre le modèle adjoint (2.28) ;

3. en déduire la sensibilité de $\mathcal{G}$ avec l'équation (2.29).

2.2.4 Analyse de sensibilité prenant en compte les observations

Comme nous souhaitons regarder la sensibilité par rapport aux paramètres, mais également aux observations, ou tout simplement si l'on veut prendre en compte les observations dans l'analyse de sensibilité, il semble indispensable de considérer non pas le système simple mais bien le système d'optimalité. Il va s'agir ici de résoudre successivement plusieurs systèmes dans le but d'établir le gradient de la fonction réponse dans le S.O (système d'optimalité) au second ordre. On considère maintenant le modèle comme étant le S.O. et contenant ainsi de l'information sur les observations :

$$\begin{aligned} \mathcal{X} &= \begin{pmatrix} X \\ P \end{pmatrix} \\ \mathcal{F}(\mathcal{X},\mathcal{K}) &= \begin{pmatrix} \dfrac{dX}{dt} - F(X,K) \\ \dfrac{dP}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^T P - (C^t(CX - X_{obs}) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.30}$$

Une perturbation k des variables de contrôle $\mathcal{K}$ donne alors :

$$\begin{cases} \dfrac{d\hat{X}}{dt} &= \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]\hat{X} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]k \\ \hat{X}(0) &= \hat{u} \\ \dfrac{d\hat{P}}{dt} &= \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2}\hat{X}\right]^t \cdot P + \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K}k\right]^t \cdot P + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^t \cdot \hat{P} = C^T C\hat{X} \\ \hat{P}(T) &= 0 \\ \hat{P}(0) &= 0 \end{cases} \tag{2.31}$$

Introduisons la variable adjointe $\mathcal{P} = (Q,R)$ de $\mathcal{X} = (X,P)$, avec $(Q,R) \in \mathbb{R}^{2m}$ les variables adjointes au second ordre de (X,P). Après avoir multiplié scalairement la première équation de (2.31) par Q, la troisième équation par R, et réalisé une intégration par parties entre 0 et T (elle est décrite dans [193]), on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^T < \hat{X} \quad & , -\frac{dQ}{dt} - \left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^t \cdot Q + \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X^2}R\right]^t \cdot P - C^T CR > dt \\ + \quad & \int_0^T < \hat{P}, -\frac{dR}{dt} + \left[\frac{\partial F}{\partial X}R\right] > + < \left[\frac{\partial F}{\partial K}\right]k, Q > dt \\ + \quad & \int_0^T < \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K}k\right]^t \cdot P, k > dt \\ + \quad & < \hat{X}(T), Q(T) > + < \hat{X}(0), Q(0) > \\ + \quad & < \hat{P}(T), Q(T) > + < \hat{P}(0), Q(0) >= 0 \end{aligned} \tag{2.32}$$

Ainsi, il vient que si (Q,R) est solution du système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{dQ}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t \cdot P + C^t CR &= \left[\dfrac{\partial G}{\partial X}\right] \\ \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot R &= 0 \\ Q(T) &= 0 \\ Q(0) &= 0 \end{cases} \tag{2.33}$$

le gradient de la fonction réponse est :

$$\nabla\mathcal{G} = \int_0^T \left(\left[\frac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t \cdot P \right) dt \tag{2.34}$$

Ce gradient exprime en fait la sensibilité de la fonction réponse à une perturbation sur les paramètres *dans le contexte d'assimilation.*

a. Sensibilité par rapport aux observations

Plutôt que les conséquences d'une perturbation sur K les paramètres d'entrée du modèle, on peut vouloir connaître la sensibilité de la fonction réponse par rapport à un bruit sur les observations X_{obs}. En développant les opérations avec $\mathcal{K} = X_{obs}$, on obtient alors que la sensibilité de la fonction réponse par rapport aux observations est :

$$\nabla\mathcal{G} = \int_0^T C \cdot R(t) dt \tag{2.35}$$

b. Algorithme de la sensibilité

Pour déterminer la sensibilité de $\mathcal{G}$, nous devrons donc procéder en trois étapes principales :

1. Résoudre le système d'optimalité (2.30) pour obtenir X et P.

2. Résoudre le modèle tangent en R :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot R & = & 0 \\ R(0) & = & v \end{array} \right. \tag{2.36}$$

avec v une condition initiale à déterminer, *cohérente* avec le S.O. au second ordre (2.33).

3. Intégrer de façon rétrograde le système adjoint au second ordre :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dQ}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t \cdot P + C^t C R & = & \left[\dfrac{\partial G}{\partial X}\right] \\ Q(T) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.37}$$

puis déduire la sensibilité de la fonction réponse avec les équations (2.34) ou (2.35).

Remarque 5.
Le principal problème est que l'équation en R du S.O. (2.33) ne possède pas de condition initiale. Il faut déterminer v, la condition initiale de R exprimée dans (2.36) en cohérence avec les autres équations du S.O. : il faut que v soit tel que $Q(0) = 0$. Heureusement, nous pouvons contourner cette difficulté, par un moyen décrit un peu plus tard.

Remarque 6.
On voit clairement dans l'équation (2.37) qu'il va falloir résoudre le système adjoint en Q pour le deuxième terme, et pour le troisième terme, l'adjoint au second ordre, c'est-à-dire ***l'adjoint en*** *P* ***du tangent en*** *R du modèle.*

Avant de proposer l'approche pour calculer la condition initiale de R, nous allons parler du Hessien (voir définition B.6 en annexe) de la fonction coût, et plus précisément du produit Hessien $\times$ Vecteur. Ce produit va nous permettre, comme nous le verrons, d'effectuer des calculs de façon relativement économique et de résoudre le système d'optimalité au second ordre. En fait, connaître explicitement la matrice hessienne par ses N^2 termes n'apporte pas énormément d'intérêt et nécessite une mémoire très importante, tandis que le produit Hessien $\times$ Vecteur permet d'accéder à toute l'information nécessaire.

c. Le produit Hessien × Vecteur

Soit le vecteur de contrôle optimal $U^* = (K^*, u^*)$ caractérisés par la condition nécessaire :

$$\nabla J(U^*) = 0$$

Dans cette partie, on considérera également la condition initiale comme variable de contrôle dans le souci d'être le plus complet possible. Il sera ensuite aisé d'adapter la solution à ce qui nous intéresse en particulier. Le système d'optimalité correspondant est le suivant :

$$\text{(S.O.)} \left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dX}{dt} & = & F(X,K) \\ X(0) & = & u \\ \dfrac{dP}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^T P & = & C^t(CX - X_{obs}) \\ P(T) & = & 0 \\ \nabla_K J & = & -\left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t P + \mu_1(K^* - K_0) = 0 \\ \nabla_u J & = & \mu_2(u^* - u^0) - P(0) = 0 \end{array} \right. \tag{2.38}$$

où μ_1 et μ_2 sont des paramètres de poids associés aux termes de régularisation (ou d'IAP) dans la fonction coût.

Une perturbation (h_k, h_u) des variables de contrôle $U = (K, u)$ donne alors :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{d\hat{X}}{dt} & = & \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]\hat{X} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right] h_k \\ \hat{X}(0) & = & h_u \\ \dfrac{d\hat{P}}{dt} & + & \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2}\hat{X} + \dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} k\right]^t \cdot P + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^t \cdot \hat{P} = C^T C \hat{X} \\ \hat{P}(T) & = & 0 \\ \widehat{\nabla_u} J & = & \mu_2 h_u - \hat{P}(0) = 0 \\ \widehat{\nabla_K} J & = & \mu_1 h_k - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial K^2} \cdot h_k + \dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot \hat{X}\right]^t \cdot P - \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \hat{P} = 0 \end{array} \right. \tag{2.39}$$

où $\hat{X}$ et $\hat{P}$ sont respectivement les perturbations sur X et P.

Les termes $\widehat{\nabla_K} J(h_k)$(perturbation de $\nabla J(K)$ induite par h_k), et $\widehat{\nabla_u} J(h_u)$ peuvent s'exprimer par définition à l'aide de la matrice hessienne de la fonction coût :

$$\begin{array}{rcl} \widehat{\nabla_K} J(h_k) & = & \widehat{\nabla} J(K, h_k) \quad = \quad H(K) \cdot h_k \\ \widehat{\nabla_u} J(h_u) & = & \widehat{\nabla} J(u, h_u) \quad = \quad H(u) \cdot h_u \end{array}$$

Ainsi, il s'agit encore une fois d'exhiber la dépendance linéaire de $\widehat{\nabla_K} J$ et $\widehat{\nabla_u} J$ par rapport à respectivement k et u pour exprimer le Hessien H de J.

Introduisons les variables au second ordre (Q, R) de (X, P). On multiple scalairement la première équation de (2.39) par Q et la troisième par R, on somme les deux équations, on intègre entre 0 et T par parties et on obtient (les calculs sont détaillés dans Mazauric [183]) :

$$\begin{array}{rcl} < \hat{X}(T), Q(T) > - < \hat{X}(0), Q(0) > & + & < \hat{P}(T), R(T) > - < \hat{P}(0), R(0) > \\ = \displaystyle\int_0^T < \hat{X}, \dfrac{dQ}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]^t \cdot Q & - & \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2} R\right]^t \cdot P + C^T C R > dt \\ + \displaystyle\int_0^T < \hat{P}, \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X} \cdot R\right] > & + & < h_k, \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t P > dt \end{array} \tag{2.40}$$

Ainsi, si on choisit (Q, R) tels que :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dQ}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot R\right]^t \cdot P & = & -C^t C R \\ \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot R & = & 0 \\ Q(T) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.41}$$

il reste de (2.40) que :

$$< h_u, Q(0) > + < \hat{P}(0), R(0) > + \int_0^T < h_k, \left[\frac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\frac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t P > dt = 0 \tag{2.42}$$

Considérant $\widehat{\nabla} J(U, v)$ la perturbation induite sur $\nabla J(U)$ par v, le produit Hessien(J) $\times$ Vecteur v est par définition :

$$H(U) \cdot v = \widehat{\nabla} J(U, v)$$

Donc si l'on pose la condition initiale $R(0) = v$, il reste que le produit Hessien $\times$ Vecteur vaut, comme $\widehat{\nabla} J(U, v) = \mu_1 v - \hat{P}(0)$:

$$H(U) \cdot v = \mu_2 v + Q(0) \tag{2.43}$$

Ainsi, l'algorithme pour déterminer le produit du Hessien par un vecteur v se résume en trois étapes :

1. Résoudre le système en R avec pour condition initiale ce vecteur v :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot R & = & 0 \\ R(0) & = & v \end{array}\right. \tag{2.44}$$

2. Intégrer de manière rétrograde le système :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dQ}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2} \cdot R\right]^t \cdot P & = & -C^t C R \\ Q(T) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.45}$$

3. Déduire le produit Hessien $\times$ Vecteur par :

$$H(U) \cdot v = \mu_2 v + Q(0) \tag{2.46}$$

Le produit Hessien $\times$ Vecteur est très pratique pour résoudre maints problèmes et sera utilisé dans la section suivante. Ce produit est d'autant plus intéressant qu'il permet de ne pas calculer le Hessien directement, tâche difficile qui demande beaucoup de mémoire de stockage.

Remarque 7.
On pourra notamment simplifier (2.46) si l'on n'a pas besoin de terme de régularisation en u la condition initiale dans la fonction coût. Dans ce cas, $\mu_2 = 0$ et :

$$H(U) \cdot v = Q(0) \tag{2.47}$$

d. Détermination de v : l'astuce

Pour résoudre le modèle (2.33) qui nous permettra d'exprimer le gradient de la fonction réponse, donc la sensibilité par rapport aux paramètres (2.34), ou par rapport aux observations (2.35), on a besoin d'une condition initiale sur R. Cette condition nommée v impose à Q d'en dépendre implicitement. En effet, il faut :

$$\left\{\begin{array}{rcl} R(0) & = & v \\ Q(0) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.48}$$

Il s'agit donc de voir $Q(0)$ comme fonction de v : $Q(0) = Q(0, v)$. L'idée proposée par Le Dimet *et al.* [165] consiste à décomposer la variable Q en $Q = Q_1 + Q_2$.
On pose (Q_1, R) solution de :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dQ_1}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q_1 - \left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X \partial K} \cdot R\right]^t \cdot P & = & -C^t C R \\ \dfrac{dR}{dt} - \left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right] \cdot R & = & 0 \\ Q_1(T) & = & 0 \\ R(0) & = & v \end{array} \right. \tag{2.49}$$

et (Q_2, R) solution de :

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \dfrac{dQ_2}{dt} + \left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t \cdot Q_2 & = & \left[\dfrac{\partial G}{\partial X}\right] \\ Q_2(T) & = & 0 \end{array} \right. \tag{2.50}$$

On reconnaît alors dans le système (2.49) l'adjoint au second ordre exprimé dans le système couplé (2.44)-(2.45), et dont la solution est le produit Hessien $\times$ Vecteur (2.47) :

$$Q_1(0) = H \cdot v \tag{2.51}$$

où H est le Hessien de la fonction coût par rapport aux paramètres de contrôle. On a donc, comme $Q(0) = Q_1(0) + Q_2(0)$:

$$Q(0) = H \cdot v + Q_2(0) \tag{2.52}$$

Comme H est symétrique définie positive, il existe un unique v^* tel que $Q(0, v^*) = 0$. v^* sera déterminé par la minimisation de la fonction :

$$f(x) = \frac{1}{2} < Hx, x > + < Q_2(0), x) > \tag{2.53}$$

Remarque 8.
La minimisation de la fonction f sera réalisée avec l'aide de l'algorithme Quasi-Newton à mémoire limitée N1QN3 ([98], détaillé dans la partie 2.4.2).

2.2.5 Analyse de sensibilité du vecteur de contrôle optimal par rapport à un bruit sur les observations

La sensibilité développée dans les parties précédentes était celle d'une fonction-critère par rapport à une perturbation sur les paramètres ou sur les observations. On peut également vouloir connaître la sensibilité du vecteur de paramètres optimal K^* par rapport à un bruit sur les observations. En effet, ce vecteur optimal a été déterminé en fonction d'observations précises, on peut donc le considérer comme fonction de ces observations. Plus formellement, on exprime la fonction $M : Z \mapsto K^*$ qui à l'observation Z associe K^*, le paramètre optimal déterminé par minimisation de la fonction coût J_Z :

$$J_Z(K) = \frac{1}{2} \| f(K) - Z \|^2$$

où f est la fonction qui à K associe la variable d'état projetée dans l'espace des observations (c'est une composée du modèle F proprement dit et de la matrice C définis précédemment pour l'assimilation).

Cette sensibilité ne pourra être exprimée que sous certaines hypothèses sur le Hessien de la fonction coût J que nous allons maintenant définir.

a. Hypothèses sur le Hessien

Pour un vecteur d'observations fixé X_{obs}, on considère :

Hypothèse 1 : Il existe $\mathcal{Z}$ un voisinage de X_{obs} tel que pour tout Z de $\mathcal{Z}$, le problème de minimisation :

$$J_Z(K_Z^*) = \min_{K \in \mathcal{K}_{ad}} J_Z(K) \tag{2.54}$$

admette une unique solution K_Z^*.

Hypothèse 2 : Le Hessien $H = Hess\ J_{X_{obs}}(K_{obs}^*)$ de la fonction coût au point optimal K_{obs}^* possède les propriétés suivantes :

– il est continu	: il existe	A tel que	$\|H \cdot X\|$	$\leq A\|X\|$	$\forall X \in \mathcal{K}_{ad}$
– il est coercif	: il existe	$\alpha > 0$ tel que	$< H \cdot X, X >$	$\geq \alpha\|X\|^2$	$\forall X \in \mathcal{K}_{ad}$

Alors le théorème démontré par Ngnepieba [193] est le suivant :

Théorème (1)

Sous les hypothèses **1** et **2**, l'application :

$$\begin{aligned} M : \mathcal{Z} &\mapsto \mathcal{K}_{ad} \\ Z &\mapsto K_Z^* \end{aligned}$$

où K_Z^* est solution du problème de minimisation (2.54), est Gateaux-différentiable au point X_{obs} et sa dérivée est :

$$\frac{\partial M}{\partial Z}(X_{obs}) \cdot \delta Z = H^{-1} \cdot \left[f'\right]^t \cdot \delta Z \ \forall\ \delta Z \tag{2.55}$$

où δZ est une perturbation de Z l'observation, $[f']^t$ l'opérateur adjoint du linéarisé de f autour du point $K_{X_{obs}}^* = M(X_{obs})$.

Remarque 9.
Si le modèle est linéaire, on peut écrire que

$$H = f^t \cdot f$$

Dans les directions propres correspondant aux plus petites valeurs propres du Hessien, l'estimation des paramètres optimaux est très affectée par une erreur sur les observations. En revanche, dans les directions propres correspondant aux plus grandes valeurs propres du Hessien, les bruits sur les observations génèrent peu de perturbation sur l'identification.

b. Calcul pratique de la sensibilité du vecteur de contrôle optimal par rapport aux observations

Pour le calcul pratique, retroussons-nous les manches et perturbons le vecteur d'observations X_{obs} dans la direction h_{obs}. On a déterminé les paramètres optimaux K_{obs}^* en fonction de X_{obs} : $K_{obs}^* = M(X_{obs})$. Intuitivement, la sensibilité du vecteur de paramètres optimaux pas rapport à un bruit sur les observations est bien l'écart entre le vecteur optimal obtenu avec X_{obs} et le vecteur optimal obtenu après perturbation des observations :

$$\widetilde{K^*} = M(X_{obs}) - M(X_{obs} + h_{obs}) \tag{2.56}$$

On souhaite exprimer cette sensibilité en fonction de h_{obs}. Comme X_{obs} et $X_{obs}+h_{obs}$ sont solutions du S.O. (2.38), on montre que $\widetilde{K^*}$ est solution de :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dQ}{dt}+\left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t\cdot Q-\left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2}\cdot R\right]^t\cdot P & = & -C^t(CR-h_{obs}) \\ \dfrac{dR}{dt}-\left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]\cdot R & = & 0 \\ R(0) & = & \widetilde{K^*} \\ Q(T) & = & 0 \\ Q(0) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.57}$$

Si l'on décompose $Q=Q_1+Q_2$, en posant (Q_1,R) solution de :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dQ_1}{dt}+\left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t\cdot Q_1-\left[\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^2}\cdot R\right]^t\cdot P & = & -C^tCR \\ \dfrac{dR}{dt}-\left[\dfrac{\partial F}{\partial X}\right]\cdot R & = & 0 \\ R(0) & = & \widetilde{K^*} \\ Q_1(T) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.58}$$

et (Q_2,R) solution de :

$$\left\{\begin{array}{rcl} \dfrac{dQ_2}{dt}+\left[\dfrac{\partial F}{\partial K}\right]^t\cdot Q_2 & = & C^t h_{obs} \\ Q_2(T) & = & 0 \end{array}\right. \tag{2.59}$$

on reconnaît bien en (2.58) le produit Hessien $\times$ Vecteur qui donne :

$$Q_1(0)=H\cdot\widetilde{K^*} \tag{2.60}$$

Puisque $\widetilde{K^*}$ est caractérisé par la condition $Q(0)=0$, il reste :

$$H\cdot\widetilde{K^*}+Q_2(0)=0 \tag{2.61}$$

où $Q_2(0)$ est la perturbation du gradient de la fonction coût par la perturbation h_{obs} sur les observations. Par ailleurs, comme le Hessien est symétrique défini positif (Ngnepieba [193]), il existe une unique solution $\widetilde{K^*}$ du système (2.57). Cette solution est définie par l'expression :

$$\widetilde{K^*}=-H^{-1}\cdot Q_2(0) \tag{2.62}$$

et sera obtenue par minimisation de la fonction :

$$f(x)=\frac{1}{2}<Hx,x>+<Q_2(0),x)> \tag{2.63}$$

2nde partie : les outils algorithmiques nécessaires à l'application de la méthode variationnelle

La théorie de l'assimilation variationnelle de données étant maintenant présentée, nous pouvons envisager de la mettre en pratique. Les techniques d'assimilation de données fondées sur le contrôle optimal utilisent le *gradient* de l'écart quadratique entre les solutions du modèle et les observations en le calculant à l'aide du *modèle adjoint*. Ce gradient est introduit dans des *algorithmes d'optimisation* afin de déterminer le minimum de la fonction, permettant ainsi l'estimation de l'état optimal par rapport aux observations (tout en tenant compte de multiples contraintes). De même, pour une analyse de sensibilité, le gradient de la fonction réponse et le Hessien sont les clés du problème. Ainsi, le gradient de manière générale joue un rôle principal dans notre étude et la façon dont on l'obtient également.

- $\rightsquigarrow$ Il serait donc bon dans un premier temps de comprendre la méthode de l'état adjoint avec laquelle on calcule le gradient de la fonction coût. Ceci est expliqué dans la partie suivante, qui décrit l'aspect "gradient & adjoint", et en particulier quelques détails techniques de l'outil de différentiation automatique.
- $\rightsquigarrow$ Nous développerons ensuite l'aspect "utilisation du gradient" dans les méthodes d'optimisation à direction de descente. Le minimiseur particulièrement utilisé dans notre cas étant N1QN3, une description plus détaillée s'impose, de la théorie de son algorithme à quelques remarques pratiques.
- $\rightsquigarrow$ Pour procéder à l'optimisation avec N1QN3, quelques obstacles se sont particulièrement opposés à ce travail que nous avons jugé utile d'expliciter : le conditionnement sera abordé dans la partie suivante. Il représente un moyen intéressant de juger de l'optimalité des résultats d'assimilation. D'autres moyens classiques d'évaluer une méthode d'assimilation seront enfin proposés dans une dernière partie.

2.3 Différentiation et modèle adjoint

2.3.1 Les différentes méthodes de différentiation

Nous allons commencer par expliquer les diverses méthodes classiquement utilisées pour obtenir le gradient d'une fonction puisqu'il est fréquemment le personnage principal des problèmes de cette étude.

Pour une fonction quelconque F qui à $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n$ associe $F(x) \in \mathbb{R}^m$, on cherche à obtenir le gradient ∇F, c'est-à-dire toutes ses dérivées partielles premières (voir annexe B.1) :

$$\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}(x)\right)_{i=1,\ldots,n}$$

Afin de comprendre l'intérêt de choisir la différentiation automatique, il convient de bien distinguer les trois principaux types de méthodes de différentiation qui permettront de calculer ces précieuses dérivées partielles :

- **la différentiation symbolique :** proposée par les logiciels MAPLE, MACSYMA ou REDUCE, elle impose comme conditions à la fonction F que l'on veut dériver d'être symboliquement représentée par des formules mathématiques. Ceci exclut toute instruction conditionnelle (IF, THEN), boucle (GOTO), appel à des subroutines (CALL)... C'est une automatisation de la dérivation que l'on peut faire "à la main". Ainsi, pour un très grand nombre de variables, l'expression symbolique du gradient ou du Hessien devient particulièrement fastidieuse. Un exemple de cette dérivation est développé en annexe B.2 sur une équation de calcul de la biomasse avec le modèle BONSAÏ-BIO.
- **la différentiation par différence finies :** les dérivées partielles de la fonction F sont *approchées* à la suite de variations successives dans l'une des directions de la base canonique, les

autres étant fixées :

$$\frac{\partial F}{\partial e_i}(x) \approx \frac{F(x+\alpha_i e_i) - F(x)}{\alpha_i}, \ i = 1, \ldots, n$$

On utilise également une meilleure approximation mais encore plus coûteuse qui est donnée par les différences finies centrées :

$$\frac{\partial F}{\partial e_i}(x) \approx \frac{F(x+\alpha_i e_i) - F(x-\alpha_i e_i)}{2\alpha_i}, i = 1, \ldots, n$$

où e_i est le i-ème vecteur de la base canonique de $\mathbb{R}^n$, et $\alpha_i > 0$ est proche de zéro. Son principal inconvénient est de nécessiter autant de calculs que la dimension du vecteur de départ, pour donner de plus une approximation moyennement précise. Elle doit être effectuée pour un α très proche de zéro, ce qui, du point de vue informatique, peut générer des erreurs de troncature et donc de mauvaises dérivées. Le choix de α est donc généralement délicat et plusieurs valeurs doivent être testées. Cependant, cette méthode classique reste très souvent utilisée car elle ne demande pas de réécriture du code, et se justifie particulièrement lorsque les termes du second ordre du développement de Taylor sont négligeables, et si le coût du calcul n'est pas trop important.

- la différentiation automatique : La différentiation automatique ne donne pas une approximation des dérivées de la fonction représentée par le code, mais elle écrit un nouveau programme, qui génèrera les dérivées analytiques de la fonction. Elle ne demande pas à la fonction F d'être représentée exclusivement par des formules mathématiques, mais impose cependant qu'elle soit exprimable à travers un code informatique. Ceci permet la présence des instructions symboliques interdites par la différentiation "manuelle", et offre un gain de temps considérable, mais impose une simplification de la structuration de la fonction qui peut avoir des conséquences néfastes dans certaines études (cf Gilbert [100]). Enfin, elle propose deux types de calcul des dérivées : on dit que le différentiateur automatique est en *mode direct* pour calculer le code tangent et en *mode inverse* pour calculer le code adjoint, qui est particulièrement intéressant pour les problèmes à forte dimension d'entrée relativement au nombre de sorties.

Chacune de ces trois méthodes possède ses avantages et inconvénients, et il convient d'en préférer une selon la situation dans laquelle on se trouve : il est parfois plus intéressant de dériver symboliquement certaines parties puis les écrire sous forme de programme avec un générateur automatique de code. D'un autre coté, certains programmes ne sont pas exprimables symboliquement, en particulier lorsque les chemins d'appels deviennent complexes. On peut également exploiter la complémentarité des méthodes, selon les particularités des parties du programme : approcher la dérivée avec les différences finies lorsque le différentiateur automatique ne permet pas de la calculer, et utiliser la différentiation automatique dans d'autres parties du code. Cependant, il faudra rester très prudent dans ces cas d'associations, particulièrement en ce qui concerne la sauvegarde des trajectoires des variables dont on parlera plus tard. Enfin, on pourra, pour valider le gradient obtenu par différentiation automatique, confirmer les valeurs dans quelques directions de perturbations avec les différences finies.

Beaucoup de travaux privilégient encore les différences finies qui sont très simples à implémenter, mais la différentiation automatique prend définitivement l'avantage dans le cas d'un grand nombre de variables par rapport auxquelles on souhaite dériver le modèle. Passons donc maintenant à une description plus précise de cette méthode, après avoir compris ce que représente l'état adjoint qui sera calculé par le différentiateur automatique.

2.3.2 Les opérateurs adjoints

Pour une fonction scalaire définie sur $\mathbb{R}^n$, on souhaite calculer n valeurs de dérivées pour obtenir un gradient. Selon la taille n du vecteur de contrôle, on devient très vite limité en temps de calcul numérique : en météorologie, la taille du vecteur de contrôle peut aller jusqu'à plusieurs milliers ! Ceci signifie qu'on ne serait capable de résoudre que des problèmes de taille limitée, moyenne. Dans

les problèmes de minimisation, on utilise alors l'état adjoint, qui présente l'intérêt, parmi d'autres, de réduire le coût numérique.

Définition 2.1. Adjoint

Soit A un opérateur linéaire, $A : \mathcal{E} \to \mathcal{F}$. Alors l'adjoint de A est l'opérateur linéaire A^* tel que :

$$< Ax, y >_{\mathcal{F}} = < x, A^* y >_{\mathcal{E}}$$

pour tout $(x, y) \in (\mathcal{E} \times \mathcal{F})$ où $< \cdot, \cdot >_{\mathcal{G}}$ est le produit scalaire associé à l'espace $\mathcal{G}$.
En dimension finie, $\mathcal{E}$ et $\mathcal{F}$ sont des espaces de Hilbert, et le théorème de Riesz [1] donne l'existence et l'unicité de l'adjoint A^*.

Définition 2.2. Adjoint d'une suite d'opérateurs

Soient $P = P_1 P_2 \dots P_N$ une suite de N opérateurs linéaires de $\mathcal{E}$ dans $\mathcal{F}$, et E et F les matrices définissant les produits scalaires dans les espaces $\mathcal{E}$ et $\mathcal{F}$, c'est-à-dire :

$$< Ax, y >_{\mathcal{F}} = x^T A^T F y \text{ et } < x, y >_{\mathcal{E}} = x^T E y$$

Alors l'adjoint de P est défini comme suit :

$$P^* = (P_1 P_2 \dots P_{N-1} P_N)^* = E^{-1} P_N^T P_{N-1}^T \dots P_2^T P_1^T F$$

c'est-à-dire le produit des adjoints des opérateurs dans le sens inverse.

Dans toute la suite du travail on considérera le produit scalaire comme le produit euclidien, ce qui implique que l'opérateur adjoint est le transposé : $A^* = A^T$.

On peut ainsi envisager le sens *rétrograde* qui consiste à partir du vecteur de paramètres de dimension grande et arriver à la valeur de la fonction, *i.e.* à une dimension. Un résultat essentiel démontré par Griewank [107] annonce en 1988 que le mode inverse de différentiation automatique permet d'obtenir le gradient de n'importe quelle fonction en un temps inférieur à 5 fois le coût nécessité par l'évaluation directe de la fonction. En 2002, Gilbert [97] prouve que par le mode inverse, on peut toujours calculer le gradient d'une fonction pour un coût équivalent au run de la fonction en mode direct, et ceci indépendamment du nombre de variables en fonction desquelles on dérive.

L'objectif est donc de définir un modèle adjoint :

- $\rightsquigarrow$ Algébriquement, cela consiste à remplacer un ensemble d'opérateurs par leur adjoints (voir Vidard [240]). Pour l'opérateur qui à x associe la sortie y, l'opérateur A', son tangent, va associer la perturbation sur y à la perturbation sur x, et l'opérateur adjoint A^* va associer à la perturbation sur y la perturbation générée sur x :

$$\begin{array}{rcll} A \cdot x & \longrightarrow & y & \text{équation directe} \\ A' \cdot \delta x & \longrightarrow & \delta y & \text{équation tangente} \\ x^* & \longleftarrow & A^*(\delta y) & \text{équations cotangentes (adjointes)} \end{array}$$

- $\rightsquigarrow$ Numériquement, il va falloir coder le modèle par ses équations adjointes. Il s'agit de considérer le code comme une suite d'équations et de calculer l'équation adjointe de chacune d'elles.

Un exemple formel simple permet de comprendre le processus pour obtenir l'adjointe d'une équation. Supposons que le code soit composé d'équations du type :

$$u = ax + byz$$

alors l'équation tangente linéaire s'exprime par :

$$u' = ax' + by'z + byz'$$

En termes matriciels cela donne :

$$\begin{pmatrix} u' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & a & bz & by \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}$$

on transpose alors la matrice :

$$\begin{pmatrix} u^* \\ x^* \\ y^* \\ z^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ bz & 0 & 1 & 0 \\ by & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u^* \\ x^* \\ y^* \\ z^* \end{pmatrix}$$

On lit alors les équations obtenues dans le sens rétrograde :

$$\begin{aligned} z^* &= by \cdot u^* + z^* \\ y^* &= bz \cdot u^* + y^* \\ x^* &= a \cdot u^* + x^* \\ u^* &= 0 \end{aligned}$$

On obtient ainsi les équations adjointes, où les variables indexées par une astérisque sont les variables adjointes.

Cette approche permet de travailler localement dans certains morceaux du code, et l'adjoint d'un morceau de code est composé des transposées des équations adjointes lues dans le sens rétrograde.

Cependant, calculer les équations adjointes d'un code un peu compliqué ou ne serait-ce qu'un peu long nécessite beaucoup d'investissement en temps de calcul. On a donc souvent recours à des différentiateurs automatiques de code pour faciliter le travail, ce que la partie suivante propose de décrire brièvement.

2.3.3 Différentiation automatique

La différentiation automatique (DA) est un ensemble de techniques permettant d'obtenir les dérivées exactes (aux erreurs d'arrondis près) d'une fonction représentée par un programme informatique, en Fortran, C, C++, ou même depuis peu Matlab. Considérons un programme prenant comme argument d'entrée un vecteur $X \in \mathbb{R}^n$ et calculant un vecteur $Y \in \mathbb{R}^m$ par l'intermédiaire d'une fonction $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $Y = F(X)$. Le différentiateur automatique génère alors un programme qui calcule les dérivées de F en fonction de X (Hascoët et Pascual [126]). Pour cela, on considère que le programme est constitué d'une suite d'instructions, et que la fonction F est donc une composition de différentes fonctions supposées différentiables :

$$F = f_p \circ f_{p-1} \circ \cdots \circ f_1$$

Alors, si l'on note $X_k = f_k(X_{k-1})$ et $X_0 = X$, le jacobien de F est donné par :

$$F'(X) = f'_p(X_{p-1}) \times f'_p(X_{p-2}) \times \ldots f'_p(X_0)$$

ce qui peut s'exprimer par une suite d'instructions dans un code informatique.

a. Les modes tangent et inverse

La DA propose différents modes dont on distingue les deux principaux :

- le mode direct (*forward mode*), qui apparaît dans les années 65-70 avec Wengert et permet de calculer le **modèle tangent**. Il consiste à calculer la fonction et son gradient simultanément. Lorsqu'une variable intermédiaire est modifiée par une fonction quelconque, le gradient est modifié par la loi de composition des fonctions. En pratique, calculer le jacobien de la fonction est très lourd en terme de coût de calcul et de mémoire. On n'a souvent besoin que des dérivées directionnelles, qui sont la projection du jacobien $F'(X)$ sur un vecteur direction de l'espace de départ de F. Le modèle tangent permet de les calculer. Elles correspondent au produit $F'(X) \times \dot{X}$ où $\dot{X}$ est une direction de l'espace de départ :

$$F'(X) \times \dot{X} = f'_p(X_{p-1}) \times f'_{p-1}(X_{p-2}) \times \dots f'_1(X_0) \times \dot{X}$$

- le mode inverse (*backward mode*) a été introduit par Speelpenning en 1980. Le but premier de la thèse de Speelpenning était en fait d'optimiser le code tangent généré par le mode direct. Il s'est alors aperçu du nul besoin d'optimiser le modèle tangent, puisqu'on obtient un gradient de manière optimale par le mode inverse. Le mode inverse permet d'obtenir le **modèle adjoint**, qui calcule le gradient de la fonction F, et s'apparente ainsi à la méthode de l'état adjoint proposée plus haut. En pratique, on a besoin de définir une combinaison linéaire scalaire $Y^T \times P$. Le vecteur P est une entrée du programme dérivé. Le gradient de $Y^T \times P$ est $F'^T(X) \times P$, avec F'^T le jacobien transposé de F. On obtient alors :

$$F'^T(X) \times P = f'^T_1(X_0) \times f'^T_2(X_1) \dots f'^T_{p-1}(X_{p-2}) \times f'^T_p(X_{p-1}) \times P$$

  Ce mode est plus efficace en sens inverse (de droite à gauche), car il est nettement moins coûteux de calculer des produits de vecteur par matrice que de matrice par matrice.

Dans la théorie du contrôle, comme explicité § 2 (équation (2.8)), le gradient de la fonction coût est déterminé par la modélisation du terme :

$$\left[\frac{\partial F}{\partial X}\right]^t \cdot P$$

où P est la variable adjointe de la variable d'état X, et F est la fonction représentant le code. Ce terme est donc bien décrit par le modèle adjoint.

b. État de l'art succin

Les années 90 furent particulièrement prolifiques en différentiateurs automatiques, dans tous les langages : pour le C et le C++, citons ADIC (Bischof *et al.* [28]), qui utilise la transformation de source, et ADOLC (Griewank [109]). En Fortran 77, 90 ou 95, on a nottament ADIFOR (Bischof *et al.* [27]), TAMC (Giering), ODYSSÉE [81] et son successeur TAPENADE [123] du Projet "Tropics" (INRIA Sophia-Antipolis), et enfin en Matlab, ADiMat [26]. Parmi tous les travaux effectués avec la différentiation automatique, on peut citer par exemple l'obtention de l'adjoint de Meso-NH avec Odyssée (Charpentier [49]).

Les travaux d'évaluation et de comparaison des différents méthodes sont également très nombreux puisque c'est un domaine en progrès constant. Mais on peut par exemple se référer aux synthèses de Griewank dans [108] ou [107], qui démontre notamment le coût numériquement faible de la DA, ou aux études de Gilbert [100] et [96], qui comparait en 1991 toutes les méthodes existantes ; Charpentier [50] propose également une optimisation du différentiateur Odyssée, notamment en termes de sauvegarde des trajectoires. Pour les modèles agronomiques, l'utilisation de la différentiation automatique se retrouve dans très peu de travaux : pour faire une comparaison de méthodes d'analyses de sensibilité, Grosbuis [110] a calculé les dérivées partielles d'un morceau du code de STICS ; Wu Lin [250], en contrôle optimal, a appliqué manuellement la théorie des différentiateurs

pour écrire le code adjoint de Greenlab [251], un modèle décrivant l'architecture et la croissance des plantes écrit en Matlab. En effet, les différentiateurs automatiques existant en Matlab restent limités soit aux matrices à trois dimensions (Admat), soit à une approche transformation de source (voir la partie suivante) concentrée sur un mode direct, *i.e.* donnant essentiellement le code tangent (Adimat).

c. Les différentes méthodes en différentiation automatique (DA)

Chacun des différentiateurs automatiques qui viennent d'être cités offre des opportunités particulières avec une méthode différente. Les deux méthodes principales que ces outils utilisent sont la *transformation de source* par précompilation, et la *surcharge des opérateurs*(voir [100]) :

- La méthode par transformation de source consiste en une adaptation de la fonction, une précompilation de cette fonction générant un code qui est alors modifié pour ajouter des instructions dont le dérivateur aura besoin pour exprimer les différentielles, pour finalement procéder à une compilation du tout. La principale difficulté de cette technique est située au niveau de la mémorisation des informations lors du calcul de la fonction. Ceci se résout de deux manières possibles (et donc selon le différentiateur) : la méthode du *graphe de calcul*, mémorise séquentiellement toutes les données et parcourt le graphe qu'elle a créé de la fonction en sens inverse ; *la méthode de l'adjoint* construit le code adjoint par dualisation des instructions du code direct, par une analyse ligne par ligne, dans le sens inverse de leur ordre d'execution.
- La surcharge des opérateurs s'applique surtout en langage orienté objet (typiquement C++). Son idée est d'éviter les deux compilations successives opérées dans la première technique pour obtenir autant d'informations en une fois. Pour ce faire, on surcharge les opérateurs, c'est-à-dire que chaque réel est remplacé par une paire de réels : sa valeur et sa différentielle ; et chaque opérateur, selon ses opérandes, peut représenter d'autres opérations. Cela demande un codage parfaitement propre pour que le compilateur reconnaisse bien, en fonction des opérandes, quelle opération il doit appliquer. Cette méthode compile de façon très lente à cause des constructions-destructions des paires de réels. Elle permet essentiellement d'évoluer en mode direct, très difficilement en mode inverse. Par contre, un avantage important se retrouve dans le fait qu'elle ne modifie pas le code puisque toutes les surcharges sont effectuées lors de la compilation. Ainsi, c'est une méthode très jolie mais qui n'est pas adaptable à tous les langages.

TAPENADE, le logiciel utilisé durant ce travail, applique la théorie de la transformation de source et permet d'obtenir le mode direct linéaire tangent et le mode adjoint.

d. Le différentiateur automatique TAPENADE

d.i/ Présentation

TAPENADE [2], est un logiciel de différentiation automatique de codes Fortran, développé à l'INRIA de Sophia-Antipolis par l'équipe TROPICS[3], et successeur d'Odyssée lui-même créé par l'équipe SAFIR. Cette méthode consiste à considérer un programme informatique comme une suite d'instructions élémentaires :

- affectations ;
- opérations élémentaires (addition, multiplication...) ;
- fonctions élémentaires (exp, log, cos...).

Conceptuellement, elle diffère bien de la différentiation symbolique, qui n'envisage que les formules mathématiques et exclut toute autre commande (if, then, goto...) ou de la différentiation

[2]La TAPENADE est avant tout un condiment méditerranéen composé de câpres, anchois, olives noires et huile d'olives, et aromatisé (généralement aux herbes de Provence comme le thym, la sarriette, le laurier, le fenouil, le romarin). *TAPENADE* provient de l'appellation provençale des câpres : *tapeno*.

[3]TAPENADE est disponible en ligne à l'adresse : http ://TAPENADE.inria.fr :8080/TAPENADE/index.jsp

par différence finies, qui nécessite autant de calculs que la dimension du vecteur de départ, et donne de plus une approximation moyennement précise.

d.ii/ Étapes importantes pour l'utilisateur

Cette partie propose une description des étapes importantes à la compréhension de l'utilisateur, du prétraitement qu'il doit effectuer, aux calculs et modifications effectués sur son code qu'il peut observer pendant le travail de TAPENADE. Elle exprime donc une vision largement simplifiée du différentiateur, les autres étapes intrinsèques à TAPENADE étant décrites précisément dans Hascoët et Pascual [126].

1. **Prétraitement :** En première phase, le différentiateur automatique construit un *arbre du code* afin de déterminer toutes les dépendances de subroutines à subroutines, de subroutines à variables, de variables de sortie à paramètres internes, etc... Pour cela, il faut lui faire reconnaître la structure du code. Les fichiers de lecture des paramètres d'entrées et de sortie doivent être mis de côté, et la structure de calcul du code doit être bien mise en évidence par un appel d'une routine principale, qui appellera toutes les subroutines (en passant par des intermédiaires si nécessaire), et dont les entrées et les sorties sont clairement repérables.

   L'utilisateur exécute ensuite TAPENADE, en déterminant :
   - quelle routine principale doit être considérée comme le sommet de l'arbre (TAPENADE ne parcourra alors que les routines appelées par celle-ci) ;
   - les variables d'entrée *indépendantes* par rapport auxquelles on souhaite obtenir les dérivées (ce sont les directions de dérivation) ;
   - les variables de sortie *dépendantes* [4] dont on désire les dérivées ;
   - le mode de différentiation souhaité : direct ou inverse.

2. **Analyse de dépendance :** Le différentiateur, après avoir construit l'arbre du code, va déterminer les variables indépendantes, dépendantes, afin de connaître les *trajectoires* que ces dernières vont effectuer. Une variable est alors dite active si elle dépend d'une variable indépendante et si d'autres variables dépendent d'elle. Les variables non répertoriées dans cette sauvegarde sont considérées comme *passives* et ne seront pas dérivées. On peut voir l'ensemble des variables d'un code comme une chaîne commençant par les variables d'entrée, de 1 à n, les variables intermédiaires, et donc passives, de $n+1$ à m, et les variables de sortie, qui sont dépendantes, de $m+1$ à p :

$$\underbrace{x_1, \ldots, x_n}_{\text{entrées}} \; , \underbrace{x_{n+1}, \ldots, x_m}_{\text{intermédiaires}} \; , \underbrace{x_{m+1}, \ldots, x_p}_{\text{sorties}} \quad (n, m, p) \in \mathbb{N}^3;\ 1 < n < m < p$$

   TAPENADE possède maintenant l'ensemble des relations d'appel existant lors de la compilation.

3. **Analyse de dépendance intra-procédure :** Du fait que l'on dérive une routine par rapport à ses entrées, toute l'information interne à la routine ne varie pas. Par contre, elle n'utilise pas toujours les mêmes arguments comme actifs selon la situation. Le différentiateur crée alors une matrice de dépendance d'interaction ne prenant pas en compte les variables intermédiaires, qui teste la dépendance d'une variable en *valeur* (v peut dépendre de w en contrôle, et ne pas dépendre de w en valeur, c'est-à-dire qu'une variation de w ne changera pas la valeur de v.). Pour l'ensemble des variables d'une routine dont on n'a pas pu être sûr que les dérivées sont nulles, ces matrices donnent la confirmation qu'elles sont actives (1 dans la matrice) ou non (un point à la place de l'indice correspondant), en entrée et en sortie. Avec TAPENADE, cette procédure est *généralisée*, en opposition avec une procédure *spécialisée*. Ceci signifie qu'elle est construite pour le cas le plus général, en considérant l'ensemble des variables susceptibles d'être actives selon la situation où la routine est appelée.

[4] On dit qu'une variable v est dépendante d'une autre u si la dérivée de v par rapport à u est non trivialement nulle.

Le différentiateur est maintenant capable de déterminer lorsqu'il parcourt le code quelle variable est active, en contrôle puis en valeur. C'est ce qu'on appelle la *propagation des variables actives*.

4. **Adaptation du code :** TAPENADE procède à la dissection du code : il découpe les expressions en étapes de calculs plus simples afin de soulager la procédure de différentiation.
5. **Écriture du code dérivé :** Enfin, le logiciel procède à la dérivation même de chaque instruction (selon les règles décrites plus bas) : chaque sortie dépendante est dérivée par rapport aux entrées actives que l'on a choisies.

Un point très important est la *sauvegarde de trajectoires* que doit effectuer le différentiateur, qu'il soit automatique ou humain. En effet, l'intégration de l'adjoint dans le sens rétrograde nécessite justement les valeurs obtenues dans le sens direct. Il faut donc sauvegarder les trajectoires (dite trajectoires de référence) en effectuant un run du modèle direct, puis lancer le run du modèle adjoint. Ces sauvegardes sont stockées en général dans un compromis entre l'espace de rangement (ou disque I/O) et le temps CPU ([34]).

d.iii/ Quelques avantages de TAPENADE

Notons à propos de TAPENADE un progrès important en terme de mémoire, puisqu'il utilise une analyse spéciale du code appelée *To Be Restored* (TBR), qui permet de ne stocker et récupérer que les sauvegardes des variables dont il a besoin pour la différentiation, tandis que d'autres accumulaient beaucoup de variables non réutilisées par la suite et demandaient un nettoyage manuel précis du code. Il possède également un mécanisme effaçant le code "mort", c'est-à-dire des instructions qui affectent une valeur à une variable de façon inutile, puisqu'elle subit une autre modification plus tard qui reste la seule utilisée.

D'autres détails sur le logiciel TAPENADE, ses évolutions et ses intérêts par rapport à d'autres différentiateurs peuvent se trouver dans Hascoët *et al.* [125].

e. Exemple de détermination pratique d'un code adjoint

Un code adjoint est composé de deux parties bien distinctes : la première est simplement le code direct, pour effectuer la sauvegarde des trajectoires, puis suit le code adjoint, qui récupère et utilise les trajectoires. Bien sûr, ceci implique un temps de calcul strictement supérieur au temps du code direct. On peut cependant remarquer que dans le but de ne pas trop alourdir les codes, la simplification des équations par décomposition, ajoutant des variables temporaires, n'est effectuée par TAPENADE que dans la phase inverse du code adjoint.

Par exemple, si le code BONJOUR Tab. 2.1 est dérivé, le code adjoint sera composé d'une partie directe, où les trajectoires sont sauvées ("save (trajectoire)"), et d'une partie dérivée (Tab. 2.2).

Comme on peut le constater sur l'exemple Tab. 2.2, le programme principal (routine tête) appelant toutes les subroutines devient un programme appelant ces mêmes subroutines suivies des subroutines adjointes appelées dans le sens inverse. L'adjoint est ensuite construit en suivant un certain nombre de règles simples dont voici une sélection non exhaustive :

- les équations sont décomposées afin de n'obtenir plus qu'une suite d'opérations et de fonctions élémentaires ;
- l'adjoint d'une suite d'opérations est la suite inverse des adjointes de chaque équation (voir remarque 10 et définition 2.2) ;
- les *opérations élémentaires* (addition, multiplication...) sont dérivées de la même manière qu'en différentiation symbolique, puis transposées ;
- les *fonctions élémentaires* (exp, log, cos...) sont dérivées de la même manière qu'en différentiation symbolique, puis transposées ;
- une *boucle* (DO) de 0 à T devient une boucle de T à 0 ;
- les affectations (GOTO) sont transformées par les équations auxquelles elles font référence. En effet, l'affection GOTO est typiquement problématique dans le sens inverse, et ajoute au différentiateur des risques d'erreur ;

```
program BONJOUR
call (MONCODE1)
do I=1,T
      call (MONCODE2)
enddo
end
```

Tab. 2.1 – *programme direct BONJOUR*

```
program BONJOUR-ADJOINT
save (trajectoire1)
call (MONCODE1)
do I=1,T
      save (trajectoire2)
      call (MONCODE2)
enddo
* *        partie dérivée        * *
do I=T,1,-1
      call (trajectoire2)
      call (MONCODE2-ADJOINT)
enddo
call (trajectoire1)
call (MONCODE1-ADJOINT)
end
```

Tab. 2.2 – *programme adjoint BONJOUR-ADJOINT*

– l'entrée d'un code direct devient la sortie d'un code adjoint et réciproquement.

Remarque 10.
Au lieu de considérer le code comme une suite d'opérations, on peut également considérer le code comme un opérateur à lui tout seul et calculer la transposée de la jacobienne de cet opérateur. Ceci n'est bien sûr possible que pour des codes simples puisque les coûts en mémoire deviennent vite déraisonnables.

Même si les différentiateurs automatiques évoluent très vite et sont de plus en plus performants, on ne peut pas avoir la garantie de l'exactitude des codes dérivés donnés par le logiciel. Si le code a été écrit selon les règles de base d'une programmation claire, et avec en perspective le calcul du modèle adjoint, le risque d'erreur sur l'adjoint est limité. Cependant, ces deux conditions sont rarement réunies. Une dernière étape indispensable est donc la vérification des codes tangent et adjoint calculés par TAPENADE.

f. Validation d'un code dérivé

Pour vérifier que les modèles tangent et adjoint sont corrects du point de vue mathématique, on considère de manière classique deux tests principaux de validation :

1. le *test du gradient* permet de vérifier l'exactitude des relations entre code direct et code dérivé (tangent) par comparaison de dérivées directionnelles ;

2. le *test du produit scalaire* permet de valider l'adéquation entre le code tangent et le code adjoint.

Comme cela est développé dans Charpentier *et al.* [50], nous allons donner les points de vue mathématiques puis informatiques de cette validation. Pour cela, considérons P un programme informatique défini ainsi :

$$\begin{array}{rccl} P: & \mathbb{R}^n & \rightarrow & \mathbb{R}^m \\ & u & \mapsto & P(u) = v \end{array}$$

Lors de la validation, on doit choisir une fonctionnelle N représentative au plus près de ce que l'on souhaite dans le modèle, comme par exemple la fonction réponse utilisée pour l'analyse de sensibilité, ou la norme d'une variable d'état simulée par le programme (sortie du modèle) :

$$\begin{array}{rccl} N: & \mathbb{R}^m & \rightarrow & \mathbb{R} \\ & v & \mapsto & N(v) \end{array}$$

f.i/ Le test du gradient ou test de Taylor

Théorie. Le développement de Taylor d'ordre 1 permet de manière fiable de valider expérimentalement l'exactitude du gradient. En effet, pour une perturbation $h \in \mathbb{R}^m$ dans la direction δv, $\|\delta v\| = 1$, on a le développement de Taylor au premier ordre de N au point v :

$$N(v+h) = N(v) + < \nabla N(v), h > + o(\|h\|)$$

Alors, si pour toute direction $\delta v \in \mathbb{R}^m$, on a

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{N(v + \alpha \delta v) - N(v)}{\alpha < \nabla N(v), \delta v >} = 1$$

le test du gradient est vérifié, la linéarisation du code direct est correcte.

Algorithme du test du gradient. Notons toujours P le code direct, P_{tan} le code tangent linéarisé de P. Soient U un vecteur d'entrée de P et $V = P(U)$ un vecteur sortie. U et V sont composés de variables scalaires et de tableaux de variables scalaires diverses et variées. Soit M un entier (il sera de l'ordre de 15).

Du point de vue algorithmique, la validation peut se faire ainsi :

1. exécuter le code direct $V_0 = P(U)$;
2. calculer $N_0 = N(V_0)$;
3. calculer le gradient de la fonctionnelle ∇N_0 avec l'exécution de P_{tan} ;
4. pour $i = 1, M$
   - poser $\alpha = \dfrac{1}{2^i}$;
   - calculer $V_\alpha = P(U + \alpha \cdot \delta U)$ par l'exécution du code direct P ;
   - calculer $N_\alpha = N(V_\alpha)$;
   - évaluer le terme suivant :

$$Val_i = \frac{N_\alpha - N_0}{\alpha < \nabla N_0, \delta V >}$$

Le test du gradient est satisfait dans la direction δv si la limite de Val_i tend vers 1 lorsque i devient grand. En pratique, après une convergence croissante vers 1, on observe une perturbation autour de 1. Il s'agit donc en général de s'arrêter à la limite de la convergence croissante.

f.ii/ Le test du produit scalaire

Théorie. Ce test valide le code adjoint en utilisant le code tangent et des perturbations de l'état direct. Il permet de plus de valider les sauvegardes de trajectoires effectuées lors du calcul de l'adjoint. Il est très coûteux et n'est donc effectué que sur un nombre de directions limité, choisies comme significatives du modèle et représentatives de ce qui est important pour l'étude.

On considère toujours le code informatique P défini ainsi :

$$\begin{array}{rccc} P: & \mathbb{R}^n & \to & \mathbb{R}^m \\ & u & \mapsto & P(u) = v \end{array}$$

On note P_{tan} le code tangent et P_{adj} le code adjoint. Pour une direction δu de u, on a la perturbation en sortie avec le code tangent par :

$$\delta v = P_{tan}(\delta u)$$

Calculons avec P_{adj} la perturbation obtenue en sortie du code adjoint :

$$\delta u^* = P_{adj}(\delta v)$$

Si l'égalité suivante est vraie pour toute direction δu de u :

$$< \delta v, P_{tan}(\delta u) > = < P_{adj}(\delta v), \delta u >$$

c'est-à-dire

$$|\delta v|^2 =< \delta u^*, \delta u >$$

alors P_{adj} (i.e. le code linéaire cotangent) est bien l'adjoint de P_{tan} au sens de la définition 2.1 et il est donc correct relativement au code tangent.

Algorithme du test du produit scalaire. Notons toujours P le code direct, P_{tan} le code tangent linéarisé de P, P_{adj} le code cotangent linéarisé de P. Soient U un vecteur d'entrée de P et $V = P(U)$ un vecteur sortie. On identifiera une variable *tangente* par le préfixe $_d$ (pour *dot* ou *direct*) et une variable *adjointe* par le préfixe $_b$ (pour *bar* ou *backward*), comme cela est symbolisé dans TAPENADE.

Du point de vue algorithmique, la validation peut se faire ainsi :

1. choisir une perturbation U_d ;
2. calculer $V_d = P_{tan}(U_d)$ avec le modèle tangent ;
3. poser $V_b = V_d$;
4. calculer $U_b = P_{adj}(V_b)$;
5. si $< V_b, V_d >=< U_b, U_d >$ est satisfaite, alors le test est validé.

Le code de validation proposé Tab. 2.3 et effectué sur un certain nombre de perturbations permettra donc de valider le modèle adjoint. Il faudra choisir chaque fois une perturbation U_d et faire jouer le programme $TEST_{adjoint}$, avec pour objectif que les deux produits scalaires calculés donnent la même valeur :

program $TEST_{adjoint}$
call $P_{tan}(U, U_d) \rightarrow V, V_d$
$V_b := V_d$
call $P_{adj}(V_b) \rightarrow U_b$
call $prod.scal(V_b, V_d)$
call $prod.scal(U_b, U_d)$
return
end

Tab. 2.3 – *Programme du test du produit scalaire : si les deux résultats des produits scalaires donnent le même résultat, le test est validé.*

Remarque 11.
En théorie, il faudrait faire ces calculs de produits scalaires dans toutes les directions possibles de U. En pratique, cela est trop coûteux et l'on choisit donc un nombre limité de directions de manière déterministe (par exemple aux frontières des domaines de calcul) ou bien de manière aléatoire.

Remarque 12.
La validation des deux tests - validation (1) du code tangent à partir du code direct et (2) du code adjoint à partir du code tangent - consécutivement est bien indispensable puisqu'aucun test ne permet de valider directement le code adjoint à partir du code direct.

f.iii/ Une validation supplémentaire

Une troisième validation consiste à utiliser la formule des différences finies centrées

$$DD = \frac{P(U + \epsilon \cdot U_d) - P(U - \epsilon \cdot U_d)}{2\epsilon} \text{ pour } \epsilon \text{ proche de zéro,}$$

et de comparer le carré scalaire $< DD, DD >$ avec le carré scalaire $< V_d, V_d >$, et avec le produit scalaire $< U_d, U_b >$. Les trois scalaires doivent être égaux.

Nous proposons en annexe B.2 le calcul des équations adjointes de biomasse du modèle BONSAÏ-BIO par différentiation manuelle et automatique. Nous pouvons constater à travers cet exemple que les règles de la différentiation automatique s'appliquent facilement pour un code relativement simple, ou du moins écrit dans les règles de la différentiation.

2.3.4 Conclusion

En pratique, la différentiation automatique est moins adaptée aux modèles agronomiques qu'aux modèles météorologiques ou océaniques. En effet, ils représentent l'état du couvert végétal de façon relativement empirique et utilisant de nombreuses non-linéarités, par rapport aux fluides qui sont décrits par des équations aux dérivées partielles. Par contre, la taille du vecteur de contrôle est nettement inférieure pour les modèles de culture. Nous développerons dans le chapitre 6 les principaux problèmes posés par le modèle STICS lors de sa "confrontation" avec TAPENADE.

Lorsque le modèle adjoint est calculé, une résolution de celui-ci permet d'obtenir le gradient de la fonction coût dans toutes les directions. Ce gradient peut alors être exploité par un algorithme de minimisation dont nous détaillons dans la partie suivante les aspects théorique et pratique, après avoir placé la méthode choisie dans le contexte général de l'optimisation.

2.4 Les algorithmes de minimisation

2.4.1 Introduction à l'optimisation sans contrainte : les méthodes à direction de descente

Dans cette partie, nous nous proposons d'aborder les différentes méthodes d'optimisation qui consistent en la deuxième et dernière phase principale de l'assimilation après la résolution du système d'optimalité. Le choix de la méthode, de l'algorithme et du minimiseur qui nous facilitera la tâche est donc primordial.

a. Définition du problème d'optimisation et des conditions d'optimalité

Soit f une fonction définie sur l'ensemble X à valeurs réelles. On cherche à résoudre le problème suivant :
Trouver $x^*\epsilon X$ tel que pour tout $x\epsilon X$: $f(x^*) \leq f(x)$, ce qui se notera dans ce manuscrit :

$$(P_X) \begin{cases} \min_X f \\ x^*\epsilon X \end{cases}$$

Alors les *conditions d'optimalité* pour résoudre un système tel que (P_X) sont du premier et du second ordre, nécessaires (CN) ou suffisantes (CS) :

CN1 : Si f définie sur R^n à valeurs dans R, dérivable en x^*, a un minimum local en x^*, alors $\nabla f(x*) = 0$. C'est donc une condition nécessaire d'optimalité.

CS1 : Si f est convexe, alors la condition $\nabla f(x*) = 0$ est suffisante pour que x^* soit un minimum global de f sur R^n.

CN2 : Soit une fonction f C^1 dans un voisinage de x^* et deux fois dérivable en x^*. Si x^* est un minimum local de f sur R^n, alors :

$$\nabla f(x*) = 0 \text{ et } \nabla^2 f(x^*) \text{ est semi-définie positive.}$$

CS2 : Si la fonction f est C^1 dans un voisinage de x^* et deux fois dérivable en x^* et si :
$\nabla f(x*) = 0$ et $\nabla^2 f(x^*)$ est définie positive,
alors x^* est un minimum local de f sur R^n.

b. Résolution de (P_X)

Pour résoudre le problème (P_X), on introduit ce que l'on appelle une direction de descente :

Définition 2.3. Direction de descente

d est une direction de descente de f en $x \epsilon X$ si :

$$\nabla f(x) \cdot d < 0$$

Si d est une direction de descente, alors la fonction f est décroissante autour de x dans la direction d. En effet :

$$\lim_{\substack{\alpha \to 0 \\ \alpha > 0}} \frac{f(x+\alpha d) - f(x)}{\alpha} = \nabla f(x) \cdot d < 0 \Rightarrow f(x+\alpha d) < f(x)$$

Ainsi, la méthode itérative

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k \tag{2.64}$$

va converger au minimum de f. Toutes les méthodes de descente reposent sur ce principe : résoudre la suite définie par (2.64). Elles diffèrent simplement par les réponses aux deux questions suivantes :

a. Comment calculer d_k ?

b. Comment déterminer α_k ?

On estime le nombre de simulations, c'est-à-dire le nombre de calculs de la valeur de la fonction coût et de son gradient, comme proportionnel au coût de notre problème d'assimilation de données. Une *itération* correspond à une réactualisation du vecteur de contrôle. Il peut y avoir plusieurs simulations avant une nouvelle itération, et l'on verra dans la partie 2.5 que cela peut traduire un mauvais conditionnement du problème de minimisation.

Remarque 13.
Dans le minimiseur N1QN3, on peut choisir le nombre maximal de simulations et le nombre maximal d'itérations, ce qui correspond à un moyen d'utiliser la qualité du conditionnement comme critère d'arrêt.

b.i/ Calcul de la direction de descente d_k

La direction de descente d_k va être obtenue par la résolution de divers algorithmes de descente possibles, que nous décrivons ici de manière succincte et non exhaustive. Plus de détails sur les descriptions de chaque méthode sont disponibles par exemple dans Gilbert [97].

- **Algorithme du gradient :**

  $$d_k = -\nabla f(x_k)$$

  séduisant par sa simplicité, mais numériquement détestable : il peut donner un nombre infini d'itérations de part le fait qu'il ne prend pas en compte la courbure de la fonction, exprimée à travers son Hessien.
- **Algorithme du gradient conjugué :**

  $$d_k = \begin{cases} -\nabla f(x_1) & \text{si } k = 1 \\ -\nabla f(x_k) + \beta_k d_{k-1} & \text{si } k \geq 2 \end{cases}$$

  où le scalaire β_k peut être choisi à des fins différentes.

– **Algorithme de Newton :**

$$d_k = -[\nabla^2 f(x_k)]^{-1} \cdot \nabla f(x_k)$$

qui n'a un sens que si le Hessien de f en x_k $\nabla^2 f(x_k)$ est inversible et n'est envisageable que si la fonction est deux fois dérivable. Ceci demande parfois un coût de calcul et une place mémoire (pour stocker la matrice) qui en dissuadent plus d'un.

– **Algorithme de Quasi-Newton :**

$$d_k = -M_k^{-1} \cdot \nabla f(x_k)$$

avec en général la matrice M_k auto-adjointe choisie définie positive, ce qui impose à d_k son statut de direction de descente. Si $M_k = \nabla^2 f(x_k)$ on reconnaît l'algorithme de Newton. La génération de M_k à chaque itération est bien sûr primordiale. Elle dépend de formules dites *de mise à jour*, dont celles choisies dans ce travail, les formules de BFGS et BFGS inverse, sont décrites dans la partie 2.4.2 a.

b.ii/ Détermination du pas α_k

Il s'agit ensuite de déterminer le pas $\alpha_k > 0$ le long de la direction de descente d_k. Ceci se résume en deux souhaits : *faire décroître f suffisamment et intelligemment*, en bornant $f(x_k + \alpha_k d_k)$ par la somme de $f(x_k)$ et un terme négatif γ_k, et *empêcher le pas α_k d'être trop proche de 0*, ce qui entraînerait une convergence vers un point non stationnaire. On choisit alors de suivre certaines règles de décision (règle de Curry, règle de Cauchy (recherches linéaires exactes) ou règles d'Armijo, Goldstein, ou encore Wolfe) pour la détermination du terme négatif γ_k et du pas α_k, mais qui ne seront pas détaillées ici puisqu'elles le sont amplement dans Gilbert [97]. Tout ceci consiste à faire ce que l'on appelle de la *recherche linéaire*.

2.4.2 Le module d'optimisation M1QN3/N1QN3

Le module d'optimisation utilisé au cours de cette thèse pour déterminer le minimum de la fonction coût est le module M1QN3 (en simple precision) ou N1QN3 (en double précision), développé par Jean-Charles Gilbert et Claude Lemaréchal [98]. La méthode utilisée par ce programme, une méthode Quasi-Newton à mémoire limitée, va donc être logiquement détaillée, avant une description de quelques caractéristiques de (non-)convergence de l'algorithme.

a. Méthode de Quasi-Newton

Comme dit précédemment, on cherche ici à résoudre le problème

$$(P_X) \begin{cases} \min_X f \\ x^* \epsilon X \end{cases}$$

en résolvant la suite définie par $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$. Dans l'algorithme de Quasi-Newton,

$$d_k = -M_k^{-1} \cdot \nabla f(x_k)$$

et la matrice M_k n'est pas égale au Hessien de f en x_k ($\nabla^2 f(x_k)$), mais on cherche à s'en rapprocher. Les matrices M_k sont générées par des formules de *mises à jour*, qui ont l'avantage de n'utiliser que les dérivées premières de f. L'information sur le Hessien leur est tout simplement donnée par la variation du gradient de f d'une itération à l'autre.
L'idée générale est de partir de M_k et de chercher M_{k+1} la plus proche de $\nabla^2 f(x_{k+1})$. L'équation de Quasi-Newton (2.65) :

$$\nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k+1}) = M_{k+1} \cdot (x_{k+1} - x_k) \tag{2.65}$$

permet bien de rapprocher M_{k+1} du Hessien, par le développement de Taylor avec reste intégral. On impose également à M_{k+1} d'être symétrique.
Mais cela ne suffit pas, on n'a en effet que n équations à $\frac{n(n+1)}{2}$ inconnues. On cherche ainsi à résoudre le système suivant :

$$\text{Trouver M tel que : } \begin{cases} \min \text{ écart}(M, M_k) \\ \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k+1}) = M \cdot (x_{k+1} - x_k) \\ M = M^T \end{cases} \tag{2.66}$$

Avec les formules de BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno, années 1970 [39]-[84]-[103]-[227]) et BFGS inverse, M_{k+1} va être obtenue par approche variationnelle. Leur objectif est de faire en sorte que M_{k+1} soit définie positive sans toutefois lui l'imposer dans la résolution du système (2.66) puisque cela risque d'empêcher l'existence d'une solution.
Ces formules ont l'avantage de n'utiliser que les valeurs du vecteur gradient, elles évaluent de l'information sur le Hessien à partir des variations sur le gradient de la fonctionnelle coût f entre deux itérés successifs. Le logiciel N1QN3 utilisé pour la minimisation tout au long de ce travail fait partie de la famille de type "Quasi-Newton à mémoire limitée" (QNML) dont voici l'algorithme :

b. Algorithme de la méthode à direction de descente de BFGS à mémoire limitée

A chaque itération, on a la valeur du point $x_k \in \mathbb{R}^m$ et l'on procède aux étapes suivantes :

1. *Test d'arrêt* : Calcul du gradient $\nabla f(x_k)$. Si le critère d'arrêt est vérifié, arrêt de l'algorithme.

2. Calcul de la direction de descente d_k :

$$d_k = -M_k^{-1} \cdot \nabla f(x_k)$$

3. Calcul du pas de descente α_k tel que :

$$f(x_k + \alpha_k d_k) = \inf_{\alpha \in \mathbb{R}} f(x_k + \alpha d_k)$$

4. Déduction de x_{k+1} par l'expression :

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

avec la mise à jour de M_k par les formules BFGS ou BFGS inverse.
Soit $B_k = M_k^{-1}$, alors les formules BFGS et BFGS inverse sont les suivantes :
– BFGS :

$$[B_{k+1}] = [B_k] + \frac{y_k \otimes y_k}{< y_k, s_k >} - \frac{[B_k \cdot s_k] \otimes [B_k \cdot s_k]}{< s_k, B \cdot s_k >}$$

– BFGS inverse :

$$[M_{k+1}] = [M_k] + \frac{(s_k - M_k y_k) \otimes s_k + s_k \otimes (s_k - M_k y_k)}{< y_k, s_k >} - \frac{< s_k - M_k \cdot y_k, y_k >}{< y_k, s_k^2 >}[s_k \otimes s_k]$$

où :

$s_k = x_{k+1} - x_k$

$y_k = \nabla f(x_k) - \nabla f(x_{k+1})$

$< \cdot, \cdot >$ est le produit scalaire choisi dans $\mathbb{R}^m$

$[\cdot \otimes \cdot]$ est le produit tensoriel associé à ce produit scalaire :

$$\begin{array}{rcccc} \otimes & : & \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^m & \longrightarrow & \mathcal{L}(\mathbb{R}^m) \\ & & (u, v) & \mapsto & [u \otimes v] \\ \text{avec pour tout } w \in \mathbb{R}^m & , & [u \otimes v] \cdot w & = & < v, w > u \end{array}$$

5. Accroître k de 1 et aller en **1.**

Lorsque la taille du problème est grand, il devient difficile, voire impossible de stocker tous les coefficients des matrices B_k et M_k. La méthode QNML a l'avantage de n'utiliser que les vecteurs $(y_k, s_k)_{1\leq k\leq m}$ les plus récents, ce qui permet de ne garder en mémoire qu'un nombre limité de vecteurs. Elle représente ainsi une méthode très efficace associée à une capacité de mémoire raisonnable.

Remarque 14.
Il existe d'autres formules de mise à jour permettant d'obtenir la matrice M_{k+1} à partir de la matrice M_k, telles que par exemple les formules de mise à jour PSB (Powell-Symétrique-Boyden).

c. Critère d'arrêt de l'algorithme

L'algorithme M1QN3/N1QN3 s'arrête lorsque le gradient atteint un certain seuil *relativement* à la norme du gradient à la première itération :

$$\frac{\|\nabla f(x_k)\|}{\|\nabla f(x_0)\|} \leq \beta$$

où β est un seuil fixé lors du lancement de N1QN3 de l'ordre de 10^{-6}.

Remarque 15.
En pratique il arrive que si le seuil β est fixé trop faible, l'algorithme s'arrête après un nombre trop important de simulations. En effet il se peut que le gradient garde une valeur importante relativement à celle en x_0 même en son minimum pour diverses raisons : une information a priori trop grande, des observations qui ne correspondent à aucune solution du modèle, où encore dans le cas où l'on a démarré l'initialisation trop près de la solution optimale (le paradoxe est là : si l'on initialise trop loin de la solution, on a beaucoup de chances de converger vers un minimum local, et si on initialise trop près, la quantité $\|\nabla f(x_0)\|$ sera trop petite et l'algorithme ne parviendra pas à s'arrêter...). Dans ce cas il peut être judicieux d'utiliser un autre critère d'arrêt tel qu'un seuil pour la norme du gradient elle-même, ou le nombre maximal d'itérations, ou encore le nombre maximal de simulations.

Remarque 16.
Lorsque les variables de contrôle initiales sont proches d'une solution, l'algorithme de Quasi-Newton converge moins rapidement que celui de Newton, mais demande moins de calcul puisqu'il n'utilise que les dérivées premières.

d. Signes précurseurs et solutions lors d'une non-convergence de N1QN3

Les difficultés rencontrées avec N1QN3 au cours de ce travail sont toujours soutenues lors d'une mauvaise adaptation du problème à l'optimiseur. Cette partie propose de dresser une liste non exhaustive de quelques effets et causes probables. Elle n'a pour vocation que de mieux comprendre la façon de fonctionner de N1QN3 et de déterminer les valeurs de ses paramètres d'entrée, afin de cerner quelques sources d'erreur :

- **nombre important de simulations par itération :** Si l'algorithme M1QN3/N1QN3 génère beaucoup de simulations par rapport au nombre d'itérations (environ plus de 10%), une erreur sur le gradient peut être suspectée, en particulier une erreur de précision. Il est donc très fortement conseillé de déclarer toutes les variables en DOUBLE PRECISION, et d'utiliser ainsi N1QN3. Cependant, si cela arrive en fin d'optimisation, cela peut simplement signifier que l'on est trop exigent en terme de critère d'arrêt : on a demandé ϵ_g (critère d'arrêt)[5] et *dxmin* (résolution minimale entre deux points) très petits. Si cela arrive à la première itération, cela provient en général d'un mauvais choix du paramètre *df*1, qui donne une estimation de la diminution de f à la première itération.

[5] tous les paramètres de N1QN3 sont décrits dans [99]

n1qn3 : iter. 20, simul. 24, f= 0.40020758E+03, h'(0)=-0.10406D-01			
n1qn3 : line search			
mlis0 fpn=-0.104E-01 d2= 0.21E-05 tmin= 0.81E-05 tmax= 0.10E+21			
mlis0	0.100E+01	0.656E-02	-0.354E-04
mlis0	0.147E+00	0.305E-03	-0.888E-02
mlis0	0.146E+00	0.275E-03	-0.889E-02
mlis0	0.139E+00	0.397E-03	-0.897E-02
mlis0	0.104E+00	0.427E-03	-0.933E-02
...	...	...	...
mlis0	0.705E-03	0.305E-04	-0.104E-01
mlis0	0.493E-03	0.000E+00	-0.104E-01
mlis0	0.345E-03	-0.305E-04	-0.104E-01
mlis0	0.390E-03	0.000E+00	-0.104E-01
arrêt de la recherche linéaire en MODE 6 :			
stop on tmin	step	functions	derivatives
iter. 21	0.34527326E-03	0.40020755E+03	-0.104E-01
iter. 20	0.38966554E-03	0.40020758E+03	-0.104E-01

Tab. 2.4 – *Fichier de sortie de N1QN3 relatant une erreur de gradient : 1ère colonne = valeur du pas le long de la direction de descente ; 2ème colonne = écart entre la valeur de f à la simulation précédente et la simulation présente ; 3ème colonne = dérivée directionnelle. Les deux dernières lignes sont générées lors de l'arrêt en MODE 6 et donnent ces trois valeurs à la première simulation de l'itération 20 et de l'itération 21.*

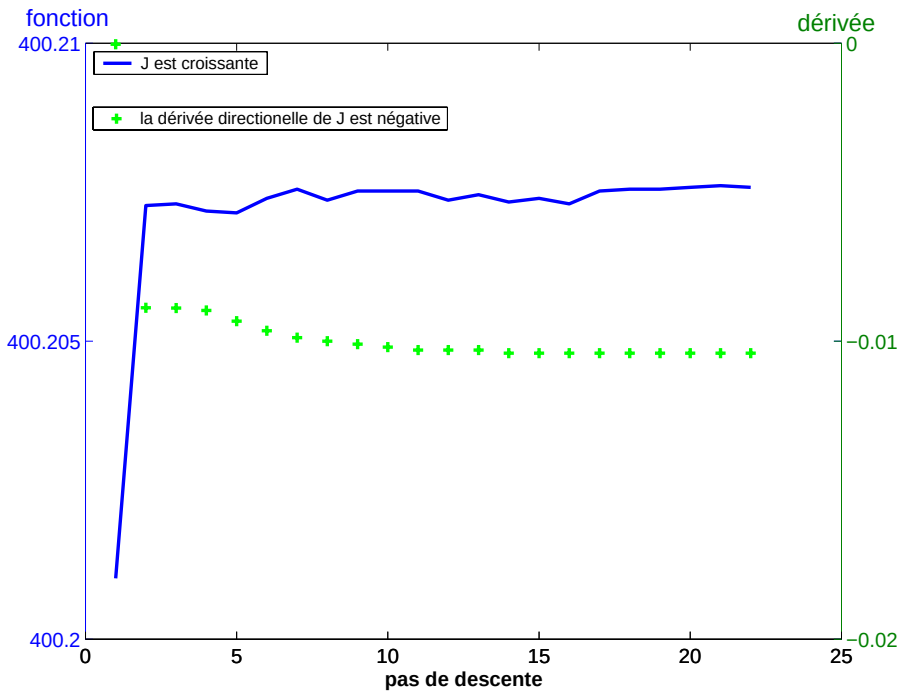

Fig. 2.1 – *Résultats de la recherche linéaire effectuée dans l'exemple de* Tab. *2.4 : axe de gauche : valeurs du critère J en fonction du pas de descente ; axe de droite : dérivée directionnelle de J en fonction du pas, en fonction du nombre de pas de descente de la recherche linéaire.*

- **angle(-g,d) proche de 90 degrés :** Parmi les données de N1QN3 pendant l'optimisation, on a accès à l'angle entre l'opposé du gradient et la direction de descente. Si cette valeur est proche de 90 degrés, cela traduit un mauvais conditionnement du problème, que l'on pourra résoudre par un préconditionnement comme décrit dans la partie 2.5.
- **arrêt de l'optimiseur en MODE $\neq 1$:** Quel que soit l'état dans lequel N1QN3 s'arrête, il donne un mode de sortie, dont la signification est détaillée dans [99] et qui permet de cerner les raisons de cet arrêt. Cependant, notons qu'un arrêt en MODE 1 signifie que le critère d'arrêt a été atteint et que le test du gradient est satisfait. Tout autre MODE d'arrêt révèle un problème, mais pas forcément que la solution obtenue est fausse. Notamment, un arrêt en MODE 6 peut signifier que le critère d'arrêt ϵ_g est trop petit et que le seuil ne peut être atteint, même s'il se trouve sur la solution. Si l'on constate que le critère n'a pas assez décru, cela peut venir du fait que $df1$ est trop petit ou que $dxmin$ est trop grand (deux valeurs assez éloignés sont alors considérées comme égales).
- **erreur de gradient :** On propose pour mettre en évidence une erreur sur le gradient deux méthodes :
  1. **Repérage par rapport à l'estimation par différences finies.** Lors de la recherche linéaire, si on a demandé l'option d'impression *impres=5*, on obtient les valeurs données dans trois colonnes, comme on le voit sur l'exemple d'une sortie de N1QN3 (Tab. 2.4) : la première colonne représente le pas le long de la direction de descente, la deuxième la valeur de l'écart de la fonction avec l'itération précédente, et la troisième la valeur de la dérivée directionnelle. On peut alors, si l'algorithme semble avoir rencontré un problème (comme dans cet exemple où l'on a beaucoup de simulations (lignes mlis0) lors de la recherche linéaire pour une seule itération), vérifier la valeur du gradient par différences finies. Ici, on observe avec les deux dernières lignes du fichier, qui représentent les valeurs obtenues après la recherche linéaire aux itérations 20 et 21, que l'estimation par différences finies vaut :
  $$\frac{0.40020758\text{E}{+}03 - 0.40020755\text{E}{+}03}{0.38966554\text{E}{-}03 - 0.34527326\text{E}{-}03} = 6.7579317802782\text{E}{-}01$$
  tandis que la valeur annoncée par N1QN3 est de $-1.04\text{E}{-}02$. Ceci traduit un problème concentré sur le gradient, probablement à cause d'une dérivation erronée du code.
  2. **Repérage par représentation graphique.** On observe Tab. 2.4 que quel que soit le pas le long de la direction de descente (première colonne), la fonction croît (la deuxième colonne, écart entre la valeur de f à l'itération précédente et l'itération présente, est positive) alors que sa dérivée directionnelle est annoncée negative (troisième colonne). La figure 2.1 représente la fonction (croissante) par rapport au pas de descente sur l'axe de gauche, et la dérivée directionnelle (négative) sur l'axe de droite, mettant ceci en évidence.

  Les erreurs sur le gradient perdent une grande chance d'exister si l'on se donne pour règle de toujours valider le gradient donné par TAPENADE avec les tests proposés précédemment. Cependant, il peut également parfois s'agir d'une erreur de précision de la machine, dans des cas où le solveur travaille à la limite de la précision possible et doit générer des valeurs arrondies.

e. Conclusion

Dans cette partie l'algorithme utilisé par le minimiseur N1QN3 a été décrit, ainsi que quelques erreurs à repérer et les solutions envisageables en cas de convergence non satisfaisante. L'algorithme de minimisation QNML-BFGS est utilisé dans beaucoup de travaux d'assimilation (*e.g.* Homescu and Navon [128]), et le minimiseur M1QN3/N1QN3 en particulier dans des dizaines de centres d'océanographie ou de météorologie : parmi ceux-ci, Météo-France avec le modèle ARPEGE, ainsi

que le centre européen de prévision à moyenne échéance ECMWF[6] [249], l'utilisent quotidiennement depuis de nombreuses années. Ainsi, les erreurs générées lors de l'utilisation de M1QN3/N1QN3 ne peuvent provenir que d'une mauvaise *adaptation* du problème. L'une des plus importantes techniques d'adaptation à un algorithme d'optimisation consiste alors à étudier le Hessien de la fonction à minimiser, et à préconditionner le problème afin de faciliter la tâche du minimiseur qui cherche à l'approcher. La section suivante est entièrement consacrée au conditionnement du Hessien, ainsi qu'à tous les enjeux qu'il représente pour une bonne minimisation, et enfin aux techniques permettant de l'améliorer.

2.5 Conditionnement et préconditionnement

2.5.1 Importance du Hessien

Dans les problèmes d'optimisation, et en particulier dans les algorithmes à direction de descente, toute information sur le Hessien est utile à chaque étape :

- les valeurs propres du Hessien permettent d'estimer la *vitesse de convergence* de l'algorithme ;
- le Hessien définit immédiatement la *sensibilité* d'une variable d'état aux paramètres, il donne également la sensibilité de l'estimation aux observations en terme de fréquence ou de qualité ;
- un bon conditionnement du Hessien garantit une *identification correcte* des paramètres pour les problèmes quadratiques : la matrice hessienne est une mesure de l'écart-type de la fonction de densité de la probabilité que l'état analysé obtenu par l'assimilation soit le bon (Vidard [240]).

En fait, la minimisation peut se traduire par une inversion du Hessien : par le développement de Taylor d'ordre 1 de ∇J, où H est la Hessienne de J par rapport à la perturbation δx, on a :

$$\delta x_{opt} \simeq -H^{-1}\nabla J(O)$$

De fait, si une valeur propre est trop proche de zéro, elle risque d'être considérée comme nulle et de signifier que le Hessien est singulier, rendant l'identification des paramètres à partir des données impossible. S'il est mal conditionné, il se rapproche de la singularité et permet une moins bonne estimation des paramètres : d'une part l'algorithme va exclure certaines combinaisons linéaires de paramètres, notamment dans les directions des vecteurs propres correspondant aux plus petites valeurs propres proches de zéro ; d'autre part, il diminue fortement la vitesse de convergence de l'algorithme.

La première partie propose donc une description plus détaillée du conditionnement du Hessien, tandis que la suivante proposera une amélioration de cette propriété dont le rôle est primordial dans l'identification des paramètres.

2.5.2 Conditionnement du Hessien

Définition 2.4. Conditionnement

Le conditionnement d'une matrice$H$ est donné par le rapport entre ses valeurs propres maximale $\lambda_{max}(H)$ et minimale $\lambda_{min}(H)$:

$$cond(H) = \frac{\lambda_{max}(H)}{\lambda_{min}(H)}$$

Les valeurs propres du Hessien sont toutes positives ou nulles puisque c'est une matrice symétrique définie positive.

[6] ECMWF : European Centre for Medium-Range Weather Forecasts

Géométriquement, le conditionnement de H est représenté par l'ellipticité des iso-surfaces de la fonction dont H est la matrice hessienne, de grand axe proportionnel à $\lambda_{max}(H)$ et de petit axe proportionnel à $\lambda_{min}(H)$:

- si le rapport vaut 1 (*i.e.* le Hessien est proportionnel à la matrice identité), le conditionnement est idéal : la fonction est dite sphérique, les iso-surfaces sont circulaires, et le gradient pointe directement sur la solution ;
- plus la valeur propre minimale s'approche de 0, plus le rapport est supérieur à 1, plus les iso-surfaces deviennent elliptiques et plus le problème est mal conditionné.

Un schéma simple permet de comprendre l'importance d'un bon conditionnement de la matrice hessienne pour un algorithme de minimisation par direction de descente. On suppose que la fonction coût est quadratique (ou presque) comme dans l'exemple illustré Fig. 2.2. Sur cette figure, la matrice hessienne est très bien conditionnée et l'algorithme convergera rapidement vers le minimum, les iso-surfaces étant circulaires. La représentation Fig. 2.3 propose quant à elle un exemple de problème mal conditionné : les iso-surfaces sont elliptiques, si bien que le gradient de la fonction coût est proche de 90 degrés par rapport à la direction de la solution Xmin. De fait, l'algorithme va osciller entre les iso-surfaces, nécessiter beaucoup d'itérations et converger lentement vers le minimum. Comme de plus N1QN3 est déterminé par un nombre maximal d'itérations, si ce seuil est atteint avant de se situer dans l'espace optimal, l'algorithme s'arrêtera probablement sur une solution fausse, généralement un minimum local. Ce phénomène de zigzag entre les iso-surfaces est appelé effet Narrow-Valley (vallée étroite) (voir Ciarlet, 1990 [53]).

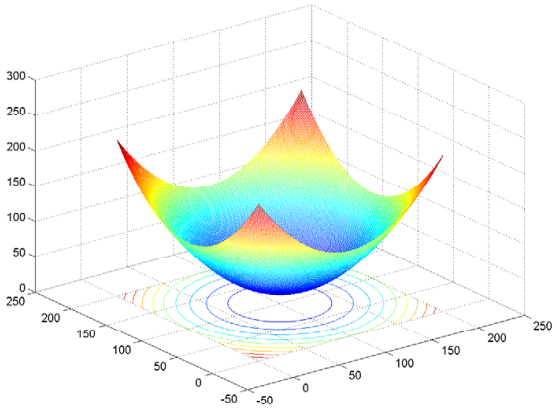

Fig. 2.2 – *Exemple de fonction quadratique convexe, d'un conditionnement idéal (iso-surfaces circulaires).*

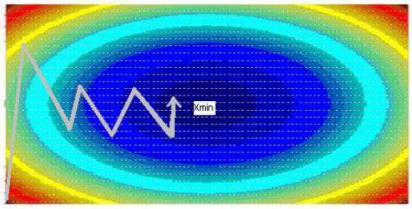

Fig. 2.3 – *Illustration de l'effet Narrow-Valley lors d'un mauvais conditionnement du Hessien (iso-surfaces elliptiques).*

Comme la vitesse de convergence de l'algorithme et la qualité de l'identification des paramètres dépendent directement du conditionnement du Hessien ([97]), on procède à ce que l'on appelle un *préconditionnement* du problème. Dans le rapport de Veersé et Auroux [237], il est prouvé que la formule BFGS directe avec mise à l'échelle proposée par Gilbert et Lemaréchal [98] est plus performante et robuste par rapport à d'autres formules de mise à jour et par rapport à d'autres préconditionnements. Développons maintenant les deux méthodes proposées par ceux-ci, puisqu'elles ont été appliquées dans ce travail et ont effectivement permis d'améliorer nettement la performance.

2.5.3 Préconditionnement et adimensionnalisation

Pour un nombre important de variables, les échelles peuvent être différentes d'un ordre très élevé. Par exemple, dans le cas du modèle BONSAÏ (§3.2.1), le paramètre E_b est de l'ordre de 10^{-3} et Ti est de l'ordre de 10^3. Si on les laisse à leurs unités respectives, les poids qu'ils joueront pendant la minimisation ne peuvent pas être comparables. Afin de prendre en compte ces problèmes d'unités, on procède à ce que l'on appelle une *mise à l'échelle*, c'est-à-dire une adimensionnalisation

de tous les paramètres dans l'espace de minimisation, permettant d'obtenir un vecteur de contrôle sans dimension. Cependant, il faut bien comprendre que **ce n'est pas la grandeur des variables qui importe mais l'effet de leur variation sur le critère à optimiser.**

On peut effectuer cet arrangement soit par un changement de variables, soit par un changement de produit scalaire :

- par le changement de variables, on transforme l'espace de départ où l'on applique ensuite l'algorithme ;
- par le changement de produit scalaire, on ne transforme pas l'espace de la fonction mais on remplace le produit euclidien par un autre.

Ces deux méthodes donneront le même préconditionnement sous certaines conditions données dans [97].

Dans les deux parties suivantes, la fonction étudiée (que l'on peut voir comme la fonction coût) est une fonction Gateaux-dérivable[7] notée f :

$$\begin{array}{rcl} f : \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ x & \longmapsto & f(x) \end{array}$$

a. Préconditionnement par changement de variables

Rappelons que si H le Hessien de f est symétrique définie positive, elle peut s'écrire : $H = D^T \cdot D$, où D peut être interprété comme l'opérateur qui associe au vecteur de contrôle la projection de la solution dans l'espace des observations. Considérons le changement de variable du vecteur de contrôle $x \in \mathbb{R}^n$:

$$\begin{array}{rcl} \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ x & \longmapsto & \tilde{x} = Lx \end{array}$$

A ce changement de variables est associée la fonction $\tilde{f} = f \circ L^{-1}$:

$$\begin{array}{rcl} \tilde{f} : \mathbb{R}^n & \longrightarrow & \mathbb{R}^n \\ \tilde{x} & \longmapsto & \tilde{f}(\tilde{x}) = f \circ L^{-1}(\tilde{x}) = f(x) \end{array}$$

Soient $x \in \mathbb{R}^n$ et $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ tel que $\tilde{x} = Lx$. Alors on a les deux relations essentielles suivantes sur le gradient et le Hessien de $\tilde{f}$:

$$\nabla \tilde{f}(\tilde{x}) = L^{-T} \cdot \nabla f(x) \tag{2.67}$$

$$Hess\ \tilde{f}(\tilde{x}) = \nabla^2 \tilde{f}(\tilde{x}) = L^{-T} \cdot Hess\ f(x) \cdot L^{-1} \tag{2.68}$$

Plus le Hessien est proche de la matrice identité, plus le problème est bien conditionné. Ainsi, il est particulièrement judicieux d'opérer à un changement de variable tel que le Hessien de la fonction dans le nouvel espace $\tilde{f}$ s'en approche : on veut $\nabla^2 \tilde{f}(\tilde{x}) \simeq Id$, c'est-à-dire $L^{-T} \nabla^2 f(x) L^{-1} \simeq Id$, donc le changement de variable idéal demande à la matrice L la propriété suivante :

$$L^T L \simeq \nabla^2 f(x)$$

Bien sûr, on ne connaît le Hessien de la fonction à minimiser que dans très peu de cas. En pratique on se contente souvent de prendre pour changement de variable une matrice diagonale $L = diag(L_i)_{i=1,N}$. Pour le choix des L_i on propose trois issues, tout en gardant la volonté d'approcher L_i par $\sqrt{H_{ii}}$ où H_{ii} est le i-ième terme de la forme diagonalisée du Hessien de f :

- Pour la première issue, l'idée est la suivante : avoir le Hessien de $\tilde{f}$ proche de l'identité, c'est demander qu'en une solution $\tilde{f}(\tilde{x^*}) = f(x^*) = 0$, $\tilde{f}$ varie de la même quantité lorsque les variables $\tilde{x_i}$ sont perturbées de manière infinitésimale de la même quantité. Si x_j fait varier f M fois plus que la variable x_i, on peut déterminer les termes de la diagonale au rang i et j par : $L_i = \sqrt{M} \cdot L_j$ (la racine carrée vient du fait que l'on travaille au second ordre avec le Hessien). Les L_i se déterminant les uns après les autres, il faut en fixer un au départ, par exemple 1.

[7] voir annexe, déf. B.3

– La deuxième possibilité consiste à faire vivre toutes les variables autour de 1 :

$$L_i = \frac{1}{x_i}$$

où x_i est la valeur moyenne d'un terme du vecteur de contrôle. Cette solution n'est pas idéale en théorie mais a l'avantage de donner des résultats visiblement efficaces et d'être implémentée très rapidement. En fait, elle se justifie par le fondement intuitif que la grandeur d'une variable permet souvent de déduire les L_i donnant la mise à l'échelle : la perturbation d'une toute petite variable perturbera vraisemblablement le critère f de la même manière qu'une grande perturbation -proportionnellement au rapport de ces deux variables- d'une grande variable.

– La deuxième proposition étant très pratique mais relativement intuitive, on pourra confirmer son efficacité ou non par celle-ci, pour laquelle il faut se placer à l'optimum obtenu : on regarde v_i variation de f quand x_i varie de dx_i :

$$v_i = f(x_i + dx_i) - f(x_i)$$

Le développement de Taylor nous donne que $v_i = H_{ii} \cdot \frac{dx_i^2}{2}$. Puisque l'on souhaite $L_i = \sqrt{H_{ii}}$, on pose :

$$L_i = \frac{\sqrt{2v_i}}{dx_i}$$

Ceci a pour rôle de conforter la mise à l'échelle simple donnée par le deuxième choix.

Une fois le changement de variable opéré, Le théorème de préconditionnement donné par Bouttier [34] permet d'obtenir la solution du nouveau problème de minimisation :

Théorème 1. *Préconditionnement d'une analyse variationnelle : Si L est un opérateur inversible, une réécriture équivalente du problème de minimisation d'une fonction J :*

$$\begin{cases} x^* & = & \min J \\ J : x & \mapsto & ((J(x), \nabla J(x)) \\ x_{ini} & = & x_0 \text{ le point initial} \end{cases}$$

est le problème préconditionné *:*

$$\begin{cases} \tilde{x}^* & = & \min \widetilde{J} \\ \widetilde{J} : \tilde{x} & \mapsto & \left(\widetilde{J}(\tilde{x}) = J(x), \nabla \widetilde{J}(\tilde{x}) = L^{-T} \cdot \nabla J(x)\right) \\ \tilde{x}_{ini} & = & L \cdot x_0 \text{ le point initial} \end{cases}$$

La solution est :

$$x^* = L^{-1} \cdot \tilde{x}^*$$

b. Préconditionnement par changement de produit scalaire

Cette méthode donne les mêmes résultats mais prend un peu plus de temps dans certains modes d'utilisation de N1QN3. En général, on choisit comme produit scalaire le produit euclidien $< \cdot, \cdot >_E$:

$$< u, v >_E = v^T u$$

L'idée est ici de transformer le produit scalaire dans le sens entendu dans la première partie et d'obtenir ainsi un changement de variable. On souhaite toujours approcher la matrice M_k à l'itération k du Hessien de f, mais cette fois-ci c'est au sens d'un nouveau produit scalaire $< \cdot, \cdot >_P$ défini ainsi : :

$$< u, v >_P = < Pu, v >_E = v^T P u$$

où P est une matrice symétrique définie positive de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^n$. Alors, si $P = L^T L$ avec L la même matrice que définie dans le changement de variable (*i.e.* s'approchant autant que possible de la racine carrée du Hessien), on a

$$< u, v >_P = < Lu, Lv >_E$$

et on obtient le même préconditionnement que dans la partie 2.5.3.

2.5.4 Conclusion

Les propriétés de la fonction coût déterminent toute la suite du problème en terme de vitesse et de qualité de la convergence. En particulier, l'étude du Hessien et un préconditionnement de celui-ci permettent généralement d'améliorer fortement les résultats de l'optimisation. Cependant, l'algorithme doit débuter à un vecteur de paramètres initiaux assez proche de la solution (*first guess*) lorsque cela est possible. Le problème des modèles agronomiques se situe aussi là : en prévision météorologique, le *first guess* représente l'état présent, on cherche à déterminer l'état futur, en prenant pour hypothèse que ces deux états suivent une certaine cohérence modélisable. Dans un cas d'étude agronomique, on cherche souvent à déterminer l'état du couvert sur l'ensemble du cycle de la végétation, c'est-à-dire plus de 8 mois : étant incapable de connaître les données climatiques à si long terme, le *first guess* est beaucoup plus difficile à évaluer, et on se fiera plutôt à l'information *a priori*. Une autre possibilité est d'effectuer une première calibration du modèle. De plus, il est important de prendre en compte les fortes non-linéarités du modèle, en envisageant d'autres méthodes si celle à direction de descente ne permet pas une identification satisfaisante, comme par exemple le recuit simulé. Enfin, un nombre suffisant d'observations est nécessaire pour que le conditionnement du Hessien soit raisonnable. Ceci pourra être déterminé plus précisément dans le cadre d'une analyse de sensibilité au second ordre (voir § 2.2.4).

2.6 Évaluation des résultats d'assimilation

Évaluer la qualité des résultats d'assimilation n'est pas évident. L'œil critique du spécialiste permettra certes d'écarter des solutions irréalistes ou de probabilité moindre, mais les anomalies sous-jacentes sont aussi beaucoup plus difficiles à analyser.

Pour comparer différentes méthodes ou applications dans des conditions similaires (mêmes paramètres à estimer, même modèle, mêmes observations), on peut choisir de privilégier :

- la robustesse d'une méthode, c'est-à-dire sa capacité à trouver le minimum global,
- son coût de calcul,
- sa capacité à reproduire la variable d'état assimilée sur la fenêtre temporelle ou instantanément,
- sa capacité à bien identifier les paramètres du modèle,

tout prenant en compte autant que possible les erreurs associées à toutes les variables. Selon ce que l'on privilégie, les diagnostics sont envisageables à plusieurs étapes du processus d'assimilation :

- au niveau de l'optimisation en terme de conditionnement ou de coût de calcul ;
- sur les résultats d'assimilation (paramètres estimés et variable d'état conséquente), notamment avec les expériences jumelles ;
- par des études statistiques (Vidard [240]).

Cette partie est une description des diagnostics effectués dans ce travail, au niveau de la minimisation, et sur les résultats d'assimilation, et des formules statistiques utilisées pour caractériser les évaluations.

2.6.1 Diagnostics sur le comportement de l'algorithme de minimisation

- **le conditionnement du problème** : lors de la minimisation effectuée avec N1QN3, on peut déjà s'attendre à une mauvaise estimation du minimum si le nombre de simulations à chaque itération est trop important. Cela provoquera une décroissance irrégulière de la fonction coût le long des itérations, et traduit un mauvais conditionnement du problème. Le minimiseur oscille dans beaucoup de directions inutiles (voir § 2.5), ce qui risque d'augmenter fortement le coût de calcul d'une part, et de déterminer un minimum local d'autre part.

  Les normes du gradient de J la fonction coût et du critère d'arrêt $\frac{\|\nabla J\|}{\|\nabla J_0\|}$ donnent également des informations pratiques sur l'efficience de l'optimisation.

  Enfin, des calculs sur la matrice hessienne, tels que l'algorithme de Lanczos, peuvent apporter beaucoup d'information sur le conditionnement du problème et sur le Hessien de la fonction

à minimiser (*e.g.* Ngnepieba [193]).

- **le coût de calcul** peut être rapidement évalué par le nombre d'itérations et de simulations effectuées par l'algorithme de minimisation. Cependant, une itération du minimiseur implique une exécution du modèle et de son adjoint. Compter le nombre d'itérations ne permet donc pas de considérer le coût de calcul engendré par le modèle. Dans le cas où l'on veut comparer le coût de la minimisation avec des *modèles différents* (chapitre 5), il faudrait multiplier le nombre d'itérations avec le coût du modèle. Pour cela, le temps CPU[8] nécessaire au programme utilisateur permet de déterminer le temps réel de calcul.

2.6.2 Diagnostic sur les résultats d'assimilation

Le diagnostic sur les résultats d'assimilation doit, lorsque cela est possible, passer par la prise en compte des erreurs, que nous décrivons ci-après. Les parties suivantes proposent différents types d'observations, dont le choix et la disponibilité sont primordiaux pour évaluer les paramètres et variables d'état estimés. Enfin, on décrira quelques formules statistiques permettant de caractériser l'erreur relative à la référence sur les résultats d'assimilation.

a. Prise en compte des erreurs

Le chapitre 1 a permis de mettre en évidence le fait qu'à chaque type de variable (variable d'état, variable de forçage, paramètre...) est associée une erreur. Bien souvent, l'incertitude sur les variables de forçage du modèle n'est pas prise en compte : on considère que les mesures climatiques sont parfaites. En contrepartie, on cherche à caractériser l'erreur du modèle. Dans le cas d'une combinaison du modèle avec des observations (*e.g.* assimilation d'observations de *variables d'état* permettant d'estimer les *paramètres* du modèle), l'incertitude associée aux observations doit également être considérée. Celle-ci se compose de l'incertitude de mesure (du capteur par exemple), ainsi que de l'erreur effectuée lors de la correction (atmosphérique) et la transformation en variables assimilables (transformation des réflectances en variables biophysiques par inversion de modèle de transfert radiatif typiquement). Pour caractériser l'erreur de simulation du modèle, il faut caractériser l'incertitude sur les paramètres, les variables initiales, les variables de forçage ou les formalismes (Boulet [33]).

b. Expériences jumelles : simulation d'observations

Dans le cadre d'*expériences jumelles*, on utilise pour observations des données simulées par le modèle, en général bruitées. Beaucoup de travaux ont recours à cette méthode lorsque les observations ne sont pas suffisantes, les conditions météorologiques ne permettant pas les prises d'images satellite par exemple, ou encore comme Mazauric [183] dont les observations de hauteur d'eau qu'il souhaite assimiler pendant les crues se révèlent impossibles à mesurer. Ainsi, les expériences jumelles présentent beaucoup d'avantages :

- elles permettent de contrôler et définir l'erreur sur les observations ;
- elles considèrent le modèle comme "parfait" et évitent donc le problème de l'erreur du modèle qui est généralement très difficile à évaluer ;
- les paramètres estimés après assimilation peuvent être comparés à la solution du problème, les paramètres optimaux, qui ont créé les "observations" de LAI ;
- la base de données créée peut correspondre à des situations très différentes, en particulier en terme de nombre d'observations disponibles, de fréquence, et de répartition temporelle et spatiale.

Cette méthode permet particulièrement bien d'évaluer la qualité de l'assimilation, puisque l'on connaît la solution, les paramètres à identifier : on comparera les paramètres estimés et les paramètres avec lesquels on avait créé les "observations", avec par exemple une RMSE (voir partie § d.). Cependant, si l'objectif est seulement d'assurer à la variable d'état d'être proche des observations, le

[8] CPU : Central Processing Unit

diagnostic peut aussi se baser sur la comparaison entre les données obtenues après assimilation avec les données créées. En effet, on peut obtenir une reproduction parfaite des observations avec une combinaison des paramètres très éloignée de la "vraie" solution, voire pas réaliste du tout. Ce cas de solutions non réalistes peut être corrigé avec le terme d'information *a priori* dans la fonction coût. Les expériences jumelles permettent donc également de réaliser si la fonction possède beaucoup de minima locaux, si sa convexité ne suffit pas à trouver le minimum convenu, et s'il faut augmenter le poids du terme d'IAP.

c. Comparaison avec des données différentes de celles assimilées

- **Comparaison avec des mesures terrain.** Si la base de données permet d'accéder à des mesures effectuées au sol, on peut comparer l'écart entre la variable d'état observée et simulée après estimation des paramètres par assimilation des données de télédétection. Cette comparaison doit prendre en compte l'erreur de mesure pour être réaliste.
- **Comparaison avec des données indépendantes.** Pour valider les résultats d'assimilation dans le cas d'observations non simulées, une comparaison avec des données indépendantes de l'assimilation apporte un intérêt certain : une autre année, ou même une autre base de données, peuvent permettre de valider les valeurs estimées de certains paramètres.
- **Comparaison avec une autre variable d'état.** On peut également valider l'assimilation de LAI par une autre variable d'état. Par exemple, on peut comparer la prévision de matière sèche finale obtenue après estimation du LAI avec des mesures terrain de matière sèche (§ 4.4.3). Cependant, ceci implique de considérer la relation entre le LAI et la matière sèche comme parfaite. Or la partie du modèle décrivant la biomasse n'utilise pas seulement le LAI assimilé mais également, entre autres, des paramètres d'efficience, qu'il faut étalonner pour valider les résultats.

d. Diagnostics d'erreur

Pour évaluer les résultats d'assimilation de données réelles ou simulées, on utilise généralement plusieurs types de calculs sur les variables d'état ou sur les paramètres estimés. Les diagnostics utilisés dans ce travail consistent à quantifier l'écart entre un vecteur réel x estimé/simulé et y un vecteur réel de référence. Pour $(x, y) \in \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$, on dispose de :

– la RMSE (root mean square error) :

$$RMSE(x, y) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (x_i - y_i)^2} \tag{2.69}$$

– la RMSE relative :

$$RRMSE(x, y) = \frac{RMSE(x, y)}{\bar{y}} \tag{2.70}$$

– le coefficient de détermination R^2, qui s'interprète comme une mesure de la qualité d'une estimation (de type régression, inversion ...). Il représente la proportion de la variance expliquée par le modèle d'estimation sur la variance totale. Plus R^2 est proche de 1, plus les fluctuations de la série sont expliquées par le modèle.

$$R^2(x, y) = 1 - \frac{\sigma^2(x - y)}{\sigma^2(x)} \tag{2.71}$$

où $\bar{y}$ est la moyenne arithmétique du vecteur y :

$$\bar{y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} y_i$$

et σ est l'écart-type et σ^2 est la variance :

$$\sigma(x) = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \bar{x})^2}$$

2.6.3 Conclusion

Le coût de calcul et la robustesse en terme de minima locaux de la méthode d'assimilation seront caractérisés par le comportement de l'algorithme de minimisation. La RMSE, la RRMSE, et le coefficient de régression nous permettront d'évaluer par exemple :

- la capacité des méthodes de régression/NDVI/inversion du MTR à reproduire (instantanément) le LAI à partir des données de réflectance, en les comparant à des mesures terrain de LAI ;
- la qualité d'estimation des paramètres par assimilation, en comparant les paramètres estimés à ceux ayant servi à simuler les données, dans le cas d'expériences jumelles ;
- la capacité de la méthode d'assimilation à reproduire la dynamique du LAI sur le cycle de la culture, en la comparant au vecteur de pseudo-observations de télédétection ;
- la qualité de prévision de la matière sèche finale après assimilation du LAI en la comparant à des mesures terrain.

Enfin, la comparaison de valeurs de LAI devra tenir compte de la représentativité de la mesure terrain (généralement sur une placette) par rapport au LAI fourni par les modèles (généralement la parcelle) et aux informations satellites (dépendant de la résolution du capteur).

3

Modèles et données

Sommaire du chapitre

3.1 Le modèle de transfert radiatif PROSAIL 94
3.1.1 Le modèle de propriétés des feuilles PROSPECT 94
3.1.2 Le modèle de réflectance SAIL 95
3.2 Les modèles de fonctionnement de la végétation 96
3.2.1 Le modèle BONSAÏ-BIO 96
a. Le modèle BONSAÏ 96
b. Couplage de BONSAÏ avec un modèle de biomasse : BONSAÏ-BIO . . . 97
c. Intervalles de définition des paramètres de BONSAÏ 98
3.2.2 Le modèle STICS de fonctionnement de la végétation 98
a. Présentation générale 98
b. Entrées et sorties du modèle 98
c. Fonctionnement modulaire de STICS 100
c.i/ Phénologie 100
c.ii/ Croissance aérienne et rendement 100
d. Conclusion 101
3.3 La base de données ADAM 101
3.3.1 Présentation générale du projet ADAM 101
3.3.2 Description du site 102
3.3.3 Le climat de Funduléa 103
3.3.4 Les mesures au sol 104
a. Échantillonnage 104
b. Les caractéristiques du sol 104
c. Les mesures biologiques 104
3.3.5 Les données de télédétection 105
3.3.6 Les données de LAI utilisées 106

Par définition, l'assimilation de données consiste à exploiter de façon optimale les informations acquises par les modèles et les observations. Nous avons constaté que la mise en œuvre de la théorie développée § 2 nécessite de maîtriser un certain nombre d'outils et de techniques algorithmiques. Par ailleurs, une combinaison optimale des modèles et des observations passe également par une bonne description de ces deux types d'information.

Ce chapitre décrira les modèles utilisés (§ 3.1 - 3.2) :

- Le modèle de transfert radiatif couplé PROSPECT-SAIL (Jacquemoud et Baret [143] ; Verhoef [238]) : il simule la réflectance du couvert végétal à partir de ses caractéristiques structurales, de la configuration d'observation, du sol sous-jacent et des propriétés des feuilles qui le composent. Il permettra de passer des données de télédétection aux variables observables simulées par les modèles de fonctionnement du couvert.
- Les modèles de fonctionnement de la végétation : nous proposerons un nouveau modèle semi-mécaniste simple, BONSAÏ, qui pourra être couplé à un modèle de biomasse, et dont l'adjoint sera exploité pour le développement de méthodes d'assimilation de données. Le modèle mécaniste STICS (Brisson *et al.* [37]-[38]) sera ensuite présenté, en dégageant surtout les paramètres essentiels dans la description du fonctionnement pour le calcul du modèle adjoint et l'analyse de sensibilité.

Dans un second temps (§ 3.3), l'importante base de données de télédétection et agronomiques du projet ADAM, sur laquelle tout ce travail d'assimilation a été appliqué, sera présentée.

3.1 Le modèle de transfert radiatif PROSAIL

Le couplage de modèles de réflectance du couvert végétal avec un modèle de propriétés optiques de feuilles permet de simuler la réflectance du couvert végétal à partir des propriétés des feuilles, de la structure du couvert, de la configuration géométrique et des propriétés du sol. Le modèle PROSAIL consiste ainsi à coupler le modèle de feuilles PROSPECT et le modèle de réflectance SAIL, dont une courte description est proposée ici (Fig. 3.1).

3.1.1 Le modèle de propriétés des feuilles PROSPECT

Le modèle PROSPECT (PROpriétés SPECTrales ; Jacquemoud et Baret [143]) simule la réflectance et la transmittance diffuses d'une feuille verte sur tout le domaine solaire. A l'origine, il nécessitait trois entrées : un paramètre de structure, le contenu en chlorophylle a+b, et l'épaisseur équivalente en eau. Une nouvelle version (Jacquemoud *et al.* , 1996 [146]) a introduit deux nouvelles variables, les teneurs en protéines et en cellulose et lignine, qui permettent de simuler les propriétés optiques des feuilles.

En raison des difficultés rencontrées pour estimer la teneur en protéines, une alternative a été proposée par Baret et Fourty [11], réduisant la biochimie (teneurs en protéine, en cellulose + lignine) à la teneur en matière sèche. Cette version a été validée dans l'infra-rouge par Baret et Fourty, puis dans les autres longueurs d'ondes par Jacquemoud *et al.* [141]. Cette dernière version est celle que nous utiliserons dans ce travail.

PROSPECT détermine la réflectance ($refl$) et la transmittance ($tran$) d'une feuille dans une longueur d'onde donnée, caractérisées par les variables d'entrée suivantes :

- λ : longueur d'onde (qui peut être un vecteur, nm) ;
- N : indice de structure des feuilles ;
- Cab : concentration en chlorophylle $a + b$ ($\mu g/cm^2$) ;
- Cw : contenu en eau (g/cm^2) ;
- Cms : teneur en matière sèche (g/cm^2) ;
- Cpb : Contenu en pigments bruns (pas d'unité) ;
- Ang : angle déterminant la transmitivité de la surface de la feuille (degrés).

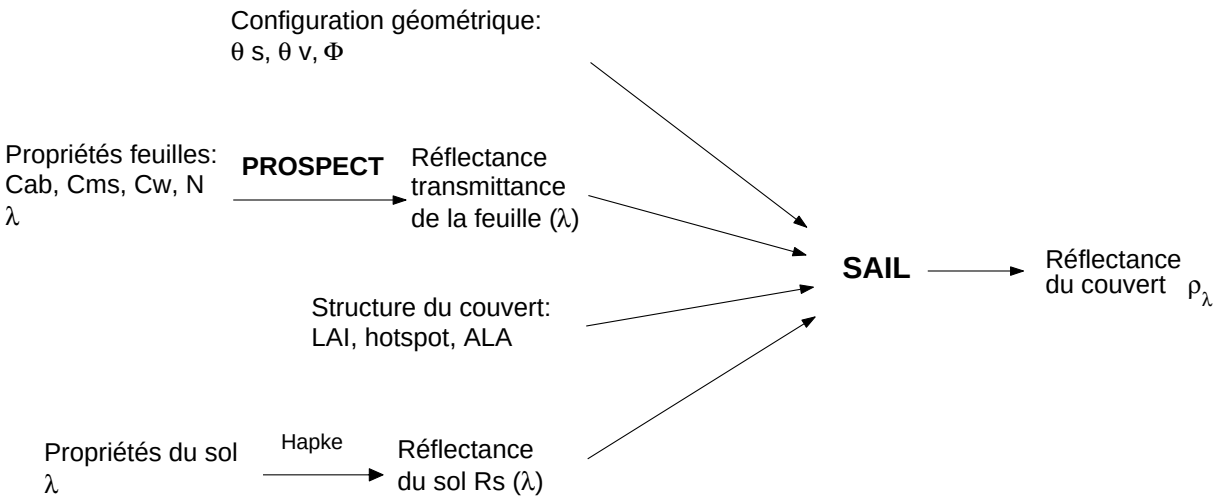

FIG. 3.1 – *Couplage de PROSPECT ET SAIL pour déterminer la réflectance du couvert végétal dans une longueur d'onde donnée. Le modèle de Hapke simule la réflectance du sol.*

3.1.2 Le modèle de réflectance SAIL

SAIL (light Scattering by Arbitrarily Inclined Leaves) proposé par Verhoef [238] dérive comme la plupart de ses confrères de l'équation de transfert radiatif et s'applique à des milieux homogènes absorbants et diffusants. Il a pour originalité de représenter la distribution des angles d'inclinaison foliaires en supposant la distribution elliptique. Il prend également en compte l'effet "hot spot"[1] depuis le début des années 90, particulièrement marqué dans la direction de rétrodiffusion.

Les variables d'entrée de SAIL sont regroupées en quatre types représentant :

- la structure du couvert :
  - LAI : indice foliaire ;
  - ALA : angle moyen d'inclinaison des feuilles ;
  - hot : ce paramètre de hot spot est le rapport entre le diamètre moyen des feuilles et la hauteur du couvert ;
- les propriétés optiques de feuilles :
  - $refl$: réflectance des feuilles ;
  - $tran$: transmittance des feuilles ;
- la géométrie d'éclairement et de visée :
  - to : angle zénithal d'observation ;
  - ts : angle zénithal solaire ;
  - ψ : angle azimutal entre observation et soleil ;
  - $skyl$: fraction diffuse du flux solaire incident (fraction diffuse sky irradiance).
- les propriétés du sol :
  - Bs : facteur de brillance du sol
  - $Rs1, Rs2, Rs3$: réflectances bidirectionnelle, hémisphérique-directionnelle et bihémisphérique ;

L'exécution de SAIL permet d'obtenir une simulation de la réflectance du couvert dans la direction du capteur.

[1] **Définition 1: Hot spot**
Le "hot spot" correspond au pic étroit de réflectance autour de la direction d'illumination. Il est lié au phénomène d'ombrage et dépend principalement de la taille des feuilles relative à la hauteur du couvert.

3.2 Les modèles de fonctionnement de la végétation

3.2.1 Le modèle BONSAÏ-BIO

Le modèle que nous proposons dans ce travail est un modèle semi-mécaniste simulant l'indice foliaire et la biomasse en fonction des températures cumulées et du rayonnement photosynthétiquement actif. BONSAÏ-BIO est le résultat du couplage de deux modèles :
- le premier modèle, BONSAÏ décrit l'indice foliaire en fonction de la somme de températures,
- le second modèle décrit la dynamique de la biomasse en fonction du LAI et du rayonnement PAR incident.

a. Le modèle BONSAÏ

Le modèle BONSAÏ est largement inspiré de MODLAI (Baret, 1986 [8]), qui simule l'indice foliaire en fonction des degrés-jours cumulés (sur une base de 0 °, en somme de températures). Une nouvelle version de l'équation du LAI est née suite au besoin de paramétrer le modèle par la *date de levée*, donnée parfois inconnue et intéressante à estimer. Afin d'ajouter de la souplesse au modèle, une logistique généralisée a été introduite par un paramètre C, puissance représentant la position du point d'inflexion de la courbe dans la phase de croissance (dans MODLAI, C=1). Le modèle BONSAÏ s'exprime donc ainsi :

$$LAI_t = L_{max} \cdot \left(\frac{1}{(1 + e^{-A(ST_t - t_0 - Ti)})^C} - e^{B(ST_t - t_0 - (\Delta Ts + Ti))} \right) \tag{3.1}$$

où :
- t représente les jours cumulés ;
- LAI_t est l'indice foliaire au jour t ;
- ST_t est la somme des températures cumulées depuis la date de levée jusqu'au jour t (°C) ;
- les paramètres du modèle :
  - T_i est le seuil de température de croissance maximale (°C) ;
  - ΔTs est la somme de température entre le point de croissance maximale et la sénescence (°C) ;
  - B représente la vitesse de sénescence ;
  - L_{max} est le LAI maximal ;
  - C représente le point d'inflexion dans la partie croissante ;
  - t_0 est la date de levée (°C).

A est calculé par la contrainte d'avoir une valeur de LAI nulle à la levée t_0 :

$$A = \frac{1}{Ti} \cdot \log \left(\left(e^{\frac{B}{C} \cdot (\Delta Ts + Ti)} \right) - 1 \right)$$

Remarque 17.
Afin de ne pas rencontrer de problèmes numériques avec le logarithme, une contrainte sur le terme

$$\left(\left(e^{\frac{B}{C} \cdot (\Delta Ts + Ti)} \right) - 1 \right)$$

a été imposée. Elle correspond à de très rares cas :

$$si \left(e^{\frac{B}{C} \cdot (\Delta Ts + Ti)} \right) < 1 \text{ , alors on fixe } \left(e^{\frac{B}{C} \cdot (\Delta Ts + Ti)} \right) == 2$$

Les paramètres du modèle n'étant pas tous significatifs d'un phénomène physique ou biologique clairement identifié, comme B et C, la figure 3.2 schématise leur influence sur la dynamique du LAI. Lorsque l'on fixe tous les autres paramètres, on constate (Fig. 3.3) que le paramètre C permet *a priori* de représenter toutes sortes de dynamiques par son aspect généralisateur. Il semblerait donc que le modèle BONSAÏ, par sa logistique, possède plus de souplesse pour reproduire la dynamique des observations de LAI que MODLAI, et soit donc **plus adapté à l'assimilation de données de LAI**.

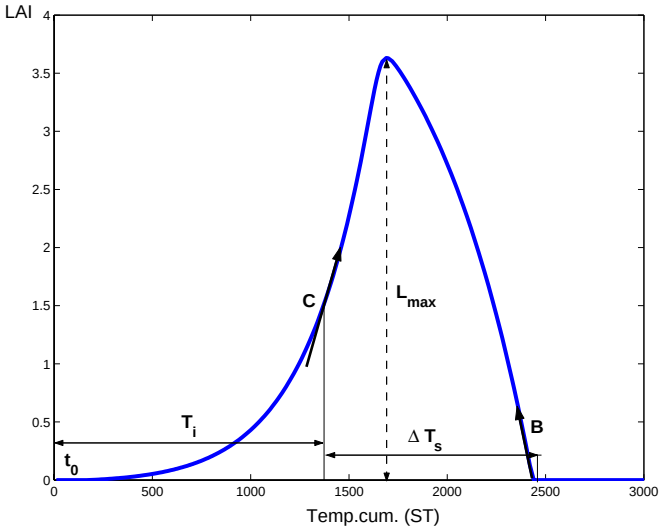

FIG. 3.2 – *Représentation schématique de l'équation du LAI de BONSAÏ.*

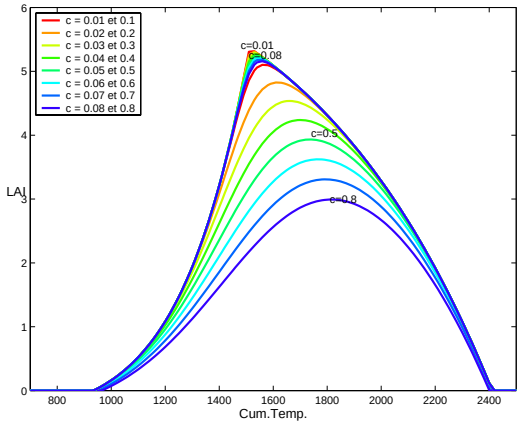

FIG. 3.3 – *Effet du paramètre C sur la courbe de LAI : de C=0.01 (pente la plus forte), à C=0.8 (pente la plus faible). $t_0 = 0$; $Ti = 1500$; $\Delta Ts = 900$; $B = 0.0014$; $L_{max} = 7.5$*

b. Couplage de BONSAÏ avec un modèle de biomasse : BONSAÏ-BIO

Dans le but de déterminer l'intérêt de l'assimilation de LAI pour prédire la biomasse finale, on propose de coupler BONSAÏ à un modèle de biomasse. Le choix s'est porté sur le modèle d'efficience simulant la biomasse en fonction de l'indice foliaire et du rayonnement photosynthétiquement actif incident (Varlet-Grancher *et al.* [236]) :

$$biom_{t+1} = biom_t + E_b \cdot Ei_{max} \left[1 - e^{-K \cdot LAI_t}\right] PAR_t \tag{3.2}$$

où :

- t représente les jours cumulés ;
- $biom_t$ est la matière sèche au jour t (g/m^2).
- LAI_t est le LAI calculé au temps t par BONSAÏ.
- PAR_t est le rayonnement utile à la photosynthèse [2] au jour t.
- les paramètres du modèle :
  - K est un coefficient d'extinction du rayonnement PAR incident. Il dépend principalement de la structure du couvert.
  - E_b (g/MJ) est l'efficience de la transformation du rayonnement absorbé en matière sèche, c'est-à-dire le rapport entre l'énergie accumulée dans la matière sèche et le PAR absorbé par la végétation.
  - Ei_{max} est le rendement maximal de l'interception du rayonnement, c'est-à-dire le rapport maximal du PAR absorbé par la végétation au PAR incident.

Le modèle couplé BONSAÏ-BIO dépend ainsi de 9 paramètres :

$$\left.\begin{array}{lll} \diamond\ t_0 & \diamond\ Ti & \diamond\ \Delta Ts \\ \diamond\ B & \diamond\ L_{max} & \diamond\ C \end{array}\right\} \text{LAI}$$

$$\left.\begin{array}{lll} \diamond\ E_b & \diamond\ Ei_{max} & \diamond\ K \end{array}\right\} \text{biomasse}$$

[2] PAR : Photosynthetically Active Radiation, 400-700nm

c. Intervalles de définition des paramètres de BONSAÏ

Dans un cadre très général, on propose Tab. 3.1 les minima et maxima suivants pour les paramètres adaptés de Baret [8]. On constate que les paramètres t_0 et Ti ont un très grand intervalle de définition afin de simuler des cultures d'hiver comme d'été. Ceci permet une large gamme d'estimation dans le cas où l'on ne sait pas du tout où placer la date de levée dans le fichier climatique et dans le cas où l'on ne connaît vraiment pas bien la culture. Cependant, dans la plupart des applications, la nature de la culture est connue, ainsi que la date de levée à un mois près. On peut donc considérer un intervalle de définition plus restreint pour t_0, pour Ti, ainsi que de fait pour ΔTs, comme cela est défini Tab. 3.2. Par la suite, c'est ce second ensemble de définition qui sera utilisé pour l'assimilation.

paramètre	min	;	max	moy
t_0	-1000	;	1000	0
Ti	500	;	2500	1500
ΔTs	400	;	1200	800
B	0.0011	;	0.003	0.00205
L_{max}	3	;	12	7.5
C	0.01	;	0.1	0.055
E_b	0.9	;	2.8	1.85
Ei_{max}	0.9	;	0.99	0.945
K	0.6	;	0.8	0.7

Tab. 3.1 – *Intervalles de définition des paramètres de BONSAÏ-BIO, dans un cadre très général.*

paramètre	min	;	max	moy
t_0	-300	;	300	0
Ti	1400	;	1600	1500
ΔTs	650	;	950	800
B	0.0011	;	0.003	0.00205
L_{max}	3	;	12	7.5
C	0.01	;	0.1	0.055
E_b	0.9	;	2.8	1.85
Ei_{max}	0.9	;	0.99	0.945
K	0.6	;	0.8	0.7

Tab. 3.2 – *Intervalles de définition des paramètres de BONSAÏ-BIO, dans un cadre plus précis, centré sur des cultures d'hiver.*

3.2.2 Le modèle STICS de fonctionnement de la végétation

a. Présentation générale

Le modèle STICS (Simulateur mulTIdisciplinaire pour les Cultures Standard) est un modèle de fonctionnement du couvert développé à l'INRA depuis 1996. On trouve dans Brisson *et al.* [37] une description des principes généraux de fonctionnement de la version 3 de STICS, complétée par une comparaison des résultats des versions 3 et 4 dans Brisson *et al.* [38]. Enfin, la version 5, apparue au cours de l'année 2002, est décrite par Brisson *et al.* [35]. Cette dernière version est celle utilisée dans ce travail.

Le modèle STICS prend en compte de manière mécaniste les principaux processus du couvert :
- photosynthèse,
- respiration,
- phénologie,
- bilans d'eau et azote,...

et simule le système sol-végétation par la croissance de la végétation, ainsi que les bilans d'eau et d'azote en fonction de données climatiques journalières.

b. Entrées et sorties du modèle

Les principales entrées qu'il nécessite sont :
- les variables climatiques : rayonnement, pluie, températures, évapotranspiration, vent...
- les propriétés permanentes et initiales du sol : réserve en eau, en azote minéral, en azote organique...
- les paramètres de la culture caractérisant le développement, la croissance et la sensibilité aux stress ;

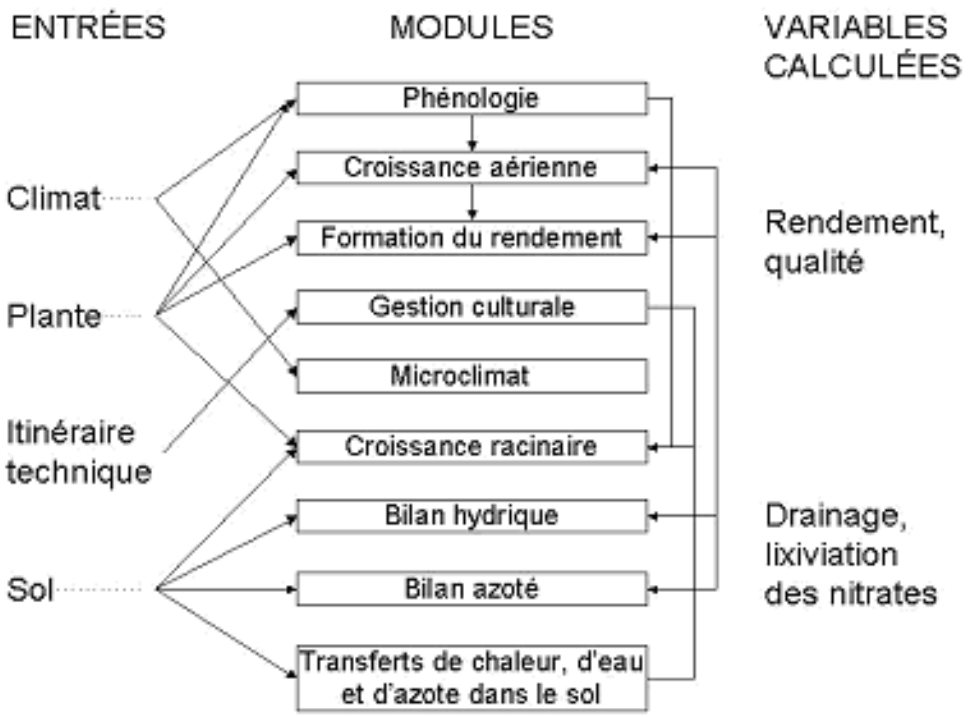

FIG. 3.4 – *Entrées et sorties des neufs modules de STICS. Les flèches traduisent les principales influences respectives. Les flèches liant les modules et situées au centre de la figure symbolisent la croissance potentielle ; les flèches positionnées à droite des modules représentent l'effet de stress sur la croissance potentielle. D'après Houlès [129].*

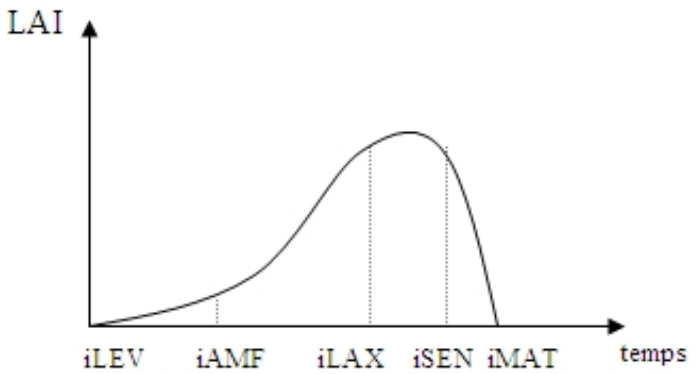

FIG. 3.5 – *Schéma simpliste des stades simulés par le modèle STICS sur la dynamique du LAI.*

– l'itinéraire cultural : date de semis, irrigation, fertilisation...

Ses sorties sont à la fois les variables environnementales (*e.g.* drainage de l'eau et lixiviation des nitrates) et les variables agronomiques (*e.g.* biomasse, rendement en grains et qualité déterminée par la teneur en azote des grains).

c. Fonctionnement modulaire de STICS

Le modèle STICS est composé de 9 modules qui interagissent fortement, et dont les principales entrées et sorties sont représentés Fig. 3.4. Le module de développement de STICS permet de faire en sorte que le LAI évolue en fonction des degrés-jours, et gère également la production et la répartition de biomasse.

Le modèle est basé sur trois types de fonctions (Ruget *et al.* [223])) :

1. Un calendrier phénologique permet de calculer les stades de développement d'après un indice vernalo-photothermique (prise en compte des températures et de la durée du jour).
2. Pour chaque stade végétatif défini par le calendrier, la croissance potentielle de la culture est déterminée par les variables climatiques et les caractéristiques de la végétation.
3. L'effet des stress hydriques et azotés sur la croissance potentielle sont simulés en fonction de la croissance racinaire.

Dans STICS, la culture est assimilée à une couche décrite par sa biomasse totale ($masec$), son indice de surface foliaire verte (LAI), sa quantité d'azote absorbée (QN) et sa biomasse récoltée (G) (Houlès [129]). Une description des variables et paramètres intervenant dans les modules de phénologie et de croissance aérienne s'avère utile pour l'interprétation des résultats de l'analyse de sensibilité qui sera effectuée chapitre 6. Les autres modules sont décrits dans les ouvrages référencés précédemment.

c.i/ Phénologie

Les stades végétatifs (Brisson *et al.* [36] ; Fig. 3.5) sont très importants pour la simulation du LAI. Pour le blé, les principaux stades phénologiques sont le stade "épi à 1 cm", le stade "épiaison", le stade "floraison", le stade "maturité" (indiqué par le contenu en eau des grains). Dans ce travail concentré sur la variable LAI, nous ne nous intéresserons qu'aux stades végétatifs (LEV, AMF, LAX, SEN), car nous ne simulerons pas le rendement en grains mais seulement la biomasse totale.

– Le stade LEV détermine la levée.
– Le stade AMF (accélération maximale de l'indice foliaire) correspond au début de l'élongation de stem, à la fin de la croissance juvénile, et est également appelé le stade "épi 1cm ".
– Le stade LAX (LAI maximal) représente la fin de la croissance foliaire. Il correspond à environ 100 degrés-jours avant l'épiaison, ou 250 avant la floraison.
– Le stade SEN (début de sénescence nette) est le seul stade n'équivalant à aucun stade classique dans les termes agronomiques. Ce stade est utilisé dans STICS pour une raison pratique : il a été observé que le nombre de degrés-jours entre le LAI maximal et le début de la sénescence nette est relativement constant (sauf dans le cas particulier d'une fertilisation excessivement élevée en Nitrate qui provoquera une sénescence plus tardive).

Le **module phénologie** calcule un indice de développement, $ULAI(t)$, à partir du climat et des durées de stades de développement caractéristiques de l'espèce et de la variété (Houlès [129]). Les paramètres de stades de développement sont $stlevamf$, qui représente la durée entre la levée et l'accélération maximale de l'accroissement de LAI et $stamflax$, durée entre le stade précédent et celui marquant la fin de la croissance foliaire.

c.ii/ Croissance aérienne et rendement

Le **module de croissance aérienne** calcule le LAI à partir d'un accroissement potentiel journalier, et en fonction de différents paramètres (voir Tab. 3.3) caractéristiques de l'espèce ($dlai_{max}$,

$pentlai_{max}$, $vlai_{max}$, tc_{min}) et de la variété ($durvieI$: durée de vie des feuilles juvéniles ; $durvieF$: durée de vie des feuilles adultes), et bien sûr de la température.

La deuxième étape de ce module concerne l'interception du rayonnement ($RAINT(t)$) par la culture considérée homogène, suivant une loi de Beer. Le coefficient d'extinction de la loi de Beer dépend de l'espèce. L'interception du rayonnement permet ensuite de calculer la vitesse de croissance potentielle en matière sèche ($\Delta MS(t)$) et de déterminer la biomasse aérienne du couvert cumulée ($masec$). On note que l'efficience maximale de conversion du rayonnement varie en fonction du stade de développement dans ce modèle ($efcroijuv$, $efcroiveg$, $efcroirepro$).

Enfin, le **module de Formation du rendement** établit les composantes du rendement. Il détermine en particulier le nombre de grains, qui dépend de la date de remplissage des grains ($cgrain, cgrainv0$) et du nombre de grains maximal ($nbgrmax$), et la matière sèche des grains en fonction de l'indice $vitircarbT$ et la quantité d'azote accumulée en fonction de l'indice $vitirazo$.

d. Conclusion

Le tableau Tab. 3.3 synthétise l'ensemble des paramètres les plus importants en fonction des modules.

Paramètre	**Module**	**Variable**
$stlevamf, stamflax, spltger$	Phénologie	$LAI(t)$
$dlai_{max}(brut), pentlai_{max}, vlai_{max}, tc_{min}$	Croissance aérienne	$LAI(t)$(croissance)
$durvieI, durvieF$	Croissance aérienne	$LAI(t)$ (sénescence)
$efcroijuv, efcroiveg, efcroirepro$	Croissance aérienne	$\Delta MS(t)$, $masec(t)$
$stlevdrp, cgrain, cgrainv0,$	Formation du rendement	$G(t)$
$nbgrmax, vitircarbT$		
$vitirazo$	Formation du rendement	$P(t)$
$croirac, contrda_{max}$	Croissance racinaire	$Zract$) (front racinaire)
$draclong, lvfront, stdebsenrac$	Croissance racinaire	$Lrach(t,h)$(dens. de racines)
$psisto, kmax$	Bilan hydrique	Stress hydriques
$inn_{min}, innturg_{min}, innsen.inn_{min}$	Bilan azoté	Stress azotés

Tab. 3.3 – *Paramètres les plus influents de STICS et module dans lequel ils sont impliqués. D'après Houlès [129].*

Comme nous l'avons développé au chapitre 1, le LAI influence l'évolution temporelle de l'ensemble de la réflectance, et d'autre part le fonctionnement du couvert. Cette variable d'état observable est utilisée pour calculer la réflectance mais aussi l'absorption du rayonnement PAR exploité par STICS. Pour l'analyse de sensibilité, l'adjoint du modèle STICS sera donc calculé en fonction de la plupart des paramètres et variables d'état concernant la phénologie et la croissance aérienne.

3.3 La base de données ADAM

3.3.1 Présentation générale du projet ADAM

Le projet ADAM (Assimilation des Données de télédétection dans les AgroModèles) associe divers instituts de recherche français et roumains : dirigé par le CNES, il réunit l'INRA d'Avignon (spécialiste des modèles agro-physiologiques), l'ESAP (spécialiste de l'agriculture de précision) en France[3], et en Roumanie, l'ICPA, l'ICCPT, et le CRUTA encadrés par l'Agence Spatiale Roumaine.[4]

[3]CNES : Centre National d'Etudes Spatiales ; INRA : Institut National de Recherche Agronomique ; ESAP : Ecole Supérieure d'Agriculture de Purpan

[4] ICPA : Institutul de Cercetari pentru Pedologie si Agrochimie ; ICCPT :Institutul de Cercetari pentru cereale si Plante Tehnice-Fundulea ; CRUTA : Centrul Roman pentru Utilizarea Teledetectiei in Agricultura ; ASR : Agentia Spatiala Romana

Il a pour vocation de contribuer à fournir les informations nécessaires à une conduite optimale des cultures et à l'estimation de rendement, en particulier par le développement de méthodes d'assimilation de données de télédétection.

Sa particularité se situe notamment au niveau de la *base de données* qui a été confectionnée de manière très complète, en terme de qualité et en quantité d'images satellites, ainsi qu'en mesures sur le terrain. L'ensemble de ces données (spatiales et terrain) est mis à disposition des scientifiques par l'intermédiaire d'un site ftp[5], contenant les données pré-traitées et validées, dans le but de rendre possibles des études futures sur l'apport de la haute répétitivité temporelle à d'autres équipes et thèmes de recherche.

Pour des publications relatives à ce projet, on peut se reporter à Vintila [241], Baret *et al.* [17] ou [15]. De plus, trois thèses sont menées dans le cadre ADAM : la thèse de Rochdi [220], qui modélise l'agrégation des feuilles pour améliorer la simulation du transfert radiatif, celle de Denux [76], qui combine les applications de la télédétection et les modèles de végétation pour fournir un outil d'aide à la décision, et celle que vous lisez actuellement, qui, de part son sujet, se situe au cœur de ce projet.

Cette section décrit tout d'abord le site, sur lequel l'expérimentation a eu lieu. La mise en place d'un tel travail de terrain doit permettre d'acquérir un maximum d'informations sur les cultures de blé pour renseigner au mieux les modèles de fonctionnement de cultures et de transfert radiatif qui seront utilisés. Le protocole des mesures concernant la végétation sera décrit § 3.3.4, ainsi que les données climatiques obtenues (§ 3.3.3), ayant personnellement participé au traitement de ces types de mesures. Les mesures de sol sont très amplement détaillées dans [17] et ses caractéristiques dans [44]. Cette base est complétée par les données de télédétection dont une description non exhaustive est proposée § 3.3.5. Enfin, les données de LAI essentielles dans ce travail seront décrites.

3.3.2 Description du site

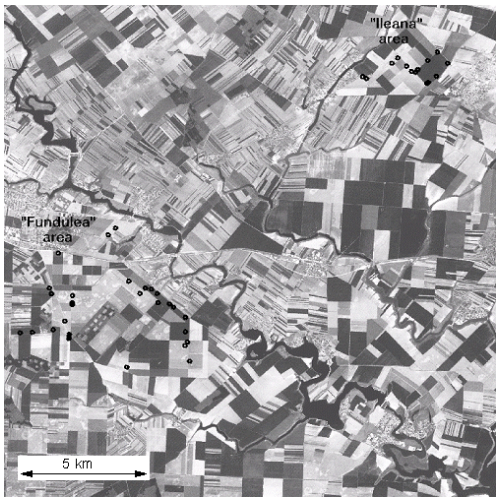

Fig. 3.6 – *Image SPOT du site ADAM (20 × 20km). Les unités d'échantillonnage de Fundulea et Ileana sont figurés par des cercles noirs.*

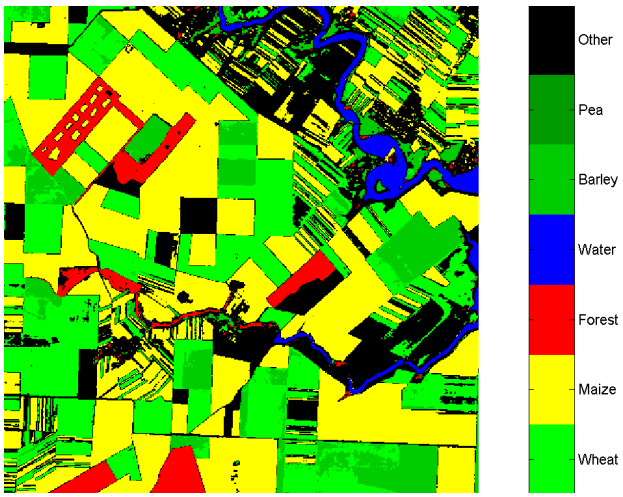

Fig. 3.7 – *Classification des types de cultures sur le site de Fundulea : pois, orge, (eau), forêt, maïs, blé, et autres (image extraite de 10 × 10km, communication personnelle de F. Oro).*

Le site ADAM (44°27'38.43"N ; 26°37'14.34"E) correspond à une région de 20 × 20 km^2 située à 30 km à l'est de Buccuresti, près de Fundulea dans la plaine du Danube. Ce site a été choisi pour diverses raisons :

– c'est une importante zone agricole en Roumanie avec très peu de relief ($dZ < 15m$) ;

[5]web : http ://medias.obs-mip.fr/adam/

– l'Institut des Céréales de Roumanie (ICCPT/ARDI) y exploite de grandes parcelles (50 à 150 ha) pour la production de semences. Cette collaboration locale permet l'utilisation des moyens humains et matériels avec :
  - des correspondants roumains motivés et hautement qualifiés ;
  - une très bonne connaissance du terrain ;
  - des mesures de terrain de qualité ;
  - des conditions agronomiques bien connues et maîtrisées ;
  - un haut niveau de technicité.
– C'est une zone géographique à faible intérêt commercial pour SPOT Image, donnant la possibilité d'utiliser l'ensemble de la constellation SPOT (1-2-4-5) pour réaliser un suivi intensif (quotidien) de la zone.

Ce site est essentiellement composé de parcelles agricoles, mais il subsiste également quelques forêts de feuillus. Les cultures sont variées : blé, maïs, tournesol, orge, pois, soja, pois chiche, avoine, sorgho, luzerne et lin. La répartition des principales cultures a été établie par une classification donnée Fig. 3.7 et décrite dans les travaux de Oro *et al.* [200]. L'ensemble des parcelles du Secteur de Production de l'ICCPT est composé de 1500 ha de blé d'hiver sur un total d'environ 4000 ha, soit environ 33%, mais toutes les parcelles de blé ne contiennent pas d'unités d'échantillonnage. En effet, ces unités ont été choisies pour décrire la variabilité des situations (supposées *a priori* , avant le semis) et pouvaient être mesurées sur des chemins optimaux. Enfin, le sol de Fundulea est très uniforme et riche grâce aux terres noires fertiles, les tchernozioms. Cependant, les techniques culturales employées ces 50 dernières années ont largement influé sur les caractéristiques physiques et chimiques du sol comme le démontre Canarache [44].

L'expérimentation utilisée dans ce travail s'est déroulée entre octobre 2000 et juillet 2001, et est concentrée sur deux zones visibles sur l'image 3.6 : Fundulea, principale zone de travail, et Ileana, au Nord-est du site.

3.3.3 Le climat de Funduléa

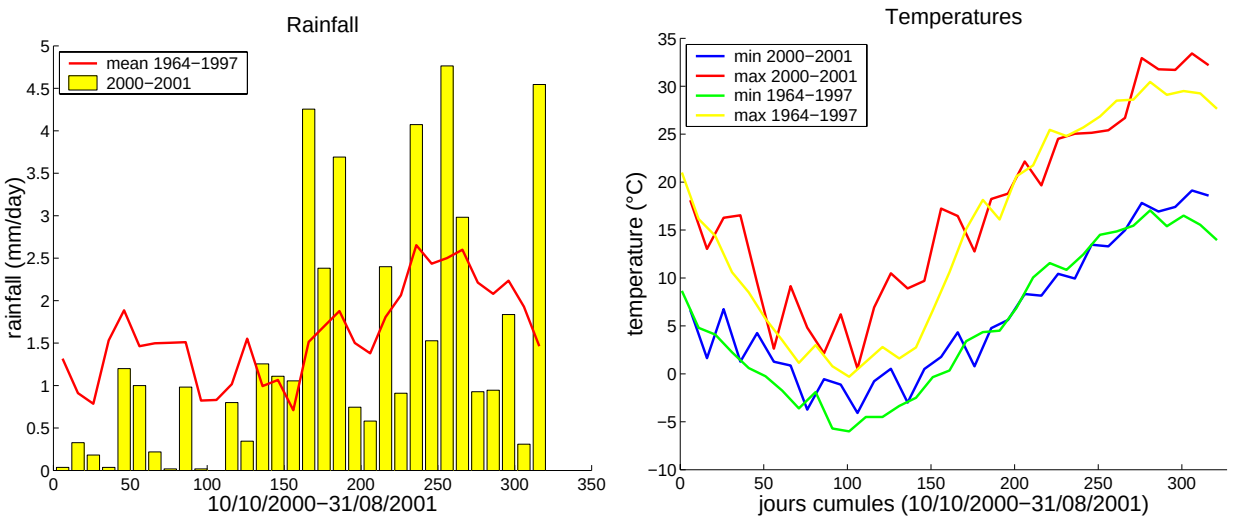

Fig. 3.8 – *Précipitations (à gauche) et température (à droite) décadaires pendant la campagne 2000-2001 comparées à la moyenne décadaire des valeurs observées durant les années 1964 à 1997. L'échelle temporelle exprimée en jours cumulés commence au 1er octobre 2000.*

Pendant toute l'expérimentation, les données météorologiques suivantes ont été mesurées toutes les 15 minutes à Fundulea (voir [181]) :
– précipitations,
– température de l'air,

- humidité relative,
- vitesse du vent et direction,
- rayonnement global,
- température du sol (à 2, 5, 10, 25, 50 et 100 cm de profondeur).

En complément, des mesures de PAR incident sont réalisées à la fréquence d'une minute. Si l'on compare avec les 30 années précédentes, on constate que la saison 2000-2001 est caractérisée par un automne particulièrement sec et un hiver plus chaud que la moyenne, sans beaucoup de neige. Le printemps est relativement humide, avec des températures équivalentes aux années précédentes (Fig. 3.8).

Ainsi, les conditions climatiques de 2000-2001 à Fundulea furent plutôt favorables à une bonne croissance du blé, ainsi qu'à l'acquisition des images satellites dans le domaine visible puisque peu de nuages ont empêché les acquisitions d'images.

3.3.4 Les mesures au sol

a. Échantillonnage

Afin de couvrir la variabilité spatiale et de pouvoir valider les produits de la télédétection obtenus à partir des données SPOT multi-temporelles à des fins agricoles, 40 unités d'échantillonnage géo-référencées ont été mises en place. Ces unités ont des tailles équivalentes à celle du pixel SPOT (30m de diamètre environ). Le choix des unités a été réalisé selon trois critères principaux, la variété, le type de sol, (incluant le microrelief) et l'historique de la parcelle. Sur les quarante unités, dix sont destinées à l'étalonnage des modèles de transfert radiatif et de fonctionnement de cultures et les trente restantes sont utilisées pour valider les résultats de l'assimilation des données de télédétection.

Tout au long du cycle de croissance des cultures de blé, diverses mesures ont été réalisées pour suivre l'évolution des caractéristiques du sol et de la végétation et leurs réponses aux facteurs climatiques. On peut décomposer les mesures en deux parties : les mesures caractéristiques du sol et celles relatives à la végétation.

b. Les caractéristiques du sol

Cette partie, consacrée au **sol** consistait à effectuer des mesures verticales (tous les 30 cm) sur :
- la profondeur du sol ;
- sa composition chimique et son contenu en matière organique ;
- sa texture ;
- ses propriétés hydriques : humidité à la capacité au champ et au point de flétrissement, et donc sa réserve utile.

L'ensemble des mesures ont été acquises par les équipes Roumaines de L'ICPA et du RICIC sous la responsabilité de l'INRA et de l'ESAP, d'octobre 2000 à juillet 2001 de manière intensive, puis en 2002 et 2003 de façon plus sporadique mais complémentaire.

c. Les mesures biologiques

Le second type de mesures porte sur la **végétation** et son **évolution** depuis le semis jusqu'à la récolte. Les caractéristiques du couvert auxquelles on s'intéresse sont :
- le stade phénologique qui décrit le développement des divers organes du blé ;
- l'état sanitaire (maladies et mauvaises herbes) ;
- l'indice de surface foliaire (LAI) défini par la somme des surfaces des feuilles vertes par mètre carré de sol ;
- la biomasse totale aérienne égale à la somme des poids de tous les organes (tiges, feuilles et épis) ;
- la hauteur du couvert ;
- la répartition de la biomasse dans les divers organes ;
- le contenu en azote de la plante ;

– le rendement.

Les mesures biologiques sur chacune des 40 unités ont été organisées de telle sorte que les besoins des modèles de fonctionnement de culture en paramètres et en variables d'entrées soient satisfaits. Le protocole expérimental était le suivant :

- **Pratiques culturales :** elles consistent à noter le travail du sol, le type de fertilisation, le traitement phytosanitaire et les méthodes d'irrigation.
- **Développement et phénologie :** on considère qu'un stade phénologique du blé (l'émergence, le début du tallage, le gonflement, l'épiaison, la floraison ou la maturité physiologique) est atteint lorsque 50% des plantes sont à ce stade. La mesure de la hauteur du couvert se fait en cinq lieux différents de l'unité et l'apparition de maladies ou de mauvaises herbes est notée dès qu'elle est observée.
- **Indice foliaire :** La mesure de l'indice de surface foliaire (LAI) se fait sur trois répétitions par unité à partir de **mesures directes destructrices :** il est déterminé en mesurant la longueur (L) et la largeur (l) des feuilles vertes et en appliquant la formule donnant la surface foliaire : $s = 0.73 \cdot l \cdot L$.
- **Biomasse aérienne totale :** elle permet de suivre la croissance des plantes et de leurs organes tout au long du cycle végétal. Sur 50cm on prélève trois répétitions de deux rangs adjacents dont on mesure le poids frais total et on compte le nombre de tiges correspondant. On extrait de chaque répétition 10 plantes au hasard qu'on sépare en quatre parties : tiges, feuilles vertes, feuilles sénescentes et épis. Après avoir pesé chaque partie séparément on met l'ensemble à sécher à 80°durant 24 heures. Enfin, on mesure le poids sec.
- **Structure de la plante :** sur les mêmes 10 plantes utilisées pour la biomasse aérienne, on note le nombre de talles par plantes et on effectue les mesures suivantes : longueur totale du brin, longueur au sommet épis sans barbe, longueur de la tige, l'insertion de la dernière feuille apparue (première feuille en comptant à partir du haut de la plante), la transition entre la partie verte et la sénescente et enfin la surface des feuilles vertes (à partir de la longueur et la largeur des feuilles). L'ensemble de ces informations permet de suivre l'évolution architecturale de la plante en fonction du temps.
- **Rendement :** pour estimer le rendement obtenu à la fin du cycle du blé, on prélève six fois 50cm sur deux rangs adjacents. On pèse le poids frais de chaque répétition, on n'en garde que 10 talles dont on pèse les épis séparément du reste. Après avoir laissé l'ensemble dans l'étuve durant 24 heures à une température de 80°, on pèse de nouveau les épis et le reste des talles. Enfin pour chaque répétition on pèse 50 grains qu'on envoie ensuite au laboratoire pour réaliser les analyses d'azote.

La fréquence de mesures décrites précédemment dépend du type d'unité considéré. Ainsi, les mesures sur les unités d'étalonnage se déroulent une fois par semaine sauf pour les analyses d'azote et les mesures de structure qui sont effectuées une fois chaque deux semaines. Quant aux unités de validation, les mesures sont réalisées une fois par mois.

3.3.5 Les données de télédétection

L'utilisation complémentaire d'images SPOT 1, 2 et 4 a permis l'acquisition de 39 images SPOT sans nuages pendant le cycle de croissance de la végétation, dans le visible et le proche-infra-rouge à une résolution de 20 mètres. La haute répétitivité temporelle donne à la base ADAM un caractère unique.

Le tableau 3.4 décrit les principales caractéristiques des capteurs du projet ADAM. Les images ont été pré-traitées et validées par le CNES, afin d'obtenir la réflectance TOC (Top of Canopy) ainsi que les facteurs de rétrodiffusion.[6] Une étude de la qualité des images est faite plus en détail dans Oro *et al.* [200].

[6] Rapport de la puissance du rayonnement électromagnétique tombant sur un obstacle diffusant à la puissance du rayonnement diffusé par l'obstacle dans la direction opposée à la direction incidente.

capteur	satellite	domaine spectral (nb bandes)	résolution spatiale	répétivité	largeur fauchée	angle zénital de visée	polar.
HRV-XS	SPOT1 SPOT2	VNIR(2)	20m	3jours	60km	±27° vert./lat.	non
HRVIR	SPOT4 SPOT5	VNIR(3) SWIR(1)	20m	3 jours	60km	±27° vert./lat.	non

Tab. 3.4 – *Caractéristiques principales des capteurs ayant fourni des données pour la base ADAM.*

3.3.6 Les données de LAI utilisées

Afin d'obtenir différentes bases de données de LAI, plusieurs manipulations des images et des mesures déjà acquises dans la base ADAM ont eu lieu. Selon l'étude, les objectifs de l'assimilation diffèrent, et les données correspondantes également, c'est pourquoi il faut bien distinguer dans quel but veut-on assimiler et comment a-t-on l'intention de valider les résultats. Les trois grands groupes de données utilisées au cours de ce travail sont donc présentés ici, ainsi que les objectifs justifiant leurs choix :

Mesures au sol :

Les mesures directes destructrices au sol de LAI et matière sèche effectuées comme décrit plus haut permettront d'une part de **valider les résultats d'inversion**, d'autre part d'évaluer l'intérêt de l'assimilation du LAI pour **améliorer l'estimation du rendement final** (§ 4.4.3). Enfin, on pourra éventuellement assimiler la matière sèche pour estimer les paramètres du modèle BONSAÏ-BIO.

Estimation de LAI sur les unités ADAM :

Dans l'objectif de **reproduire la dynamique du LAI** sur tout le cycle, nous avons estimé des valeurs de LAI des 40 unités ADAM à partir des images SPOT, qui permettent une observation régulière du couvert. Cette estimation a été effectuée par différentes méthodes qui sont analysées, comparées, et validées à partir des mesures terrain (§ 4.1).

"Grande base" de données LAI à partir de l'inversion d'images :

Dans un objectif d'**estimation des paramètres** du modèle BONSAÏ par assimilation du LAI (§ 4.4.2), il est plus intéressant d'utiliser une grande quantité de données de LAI. Ceci est possible par inversion des images de télédétection : en parcourant toutes les cultures de blé de l'image, on pourra extraire 250 unités de 25 pixels chacune et construire une base de 250 données de LAI pour chaque date d'acquisition d'une image SPOT.

Remarque 18.
Toutes ces données sont entachées d'erreurs, que ce soit des pseudo-observations issues d'une inversion de modèle de transfert radiatif, ou des mesures directes effectuées sur le terrain. Il faudra donc déterminer comment les prendre en compte de manière non négligeable dans le processus d'assimilation, notamment dans la définition des termes de la fonction coût.

4

Analyse de sensibilité de Bonsaï et assimilation de données

Sommaire du chapitre

4.1 Estimation du LAI à partir de données radiométriques 109
4.1.1 Les différentes méthodes d'estimation 109
4.1.2 Comparaison des trois méthodes sur les 40 unités d'expérimentation 110
a. Mise en correspondance des images SPOT et des mesures de LAI au sol 110
b. Régression 110
c. Utilisation d'un indice de végétation 110
c.i/ Choix et définition de l'indice 110
c.ii/ Résultats 112
d. Inversion du modèle de transfert radiatif PROSAIL 112
d.i/ Mise en place de la méthode 112
d.ii/ Précisions sur les variables de PROSAIL 115
d.iii/ Définition de l'IAP 115
d.iv/ Précision des estimations et information *a priori* 115
e. Conclusion : comparaison des trois méthodes. 116
4.1.3 Création de la "grande base" par extraction de pixels 118
4.2 Étapes préliminaires à l'assimilation dans BONSAÏ 118
4.2.1 Information *a priori* sur les paramètres de BONSAÏ 118
4.2.2 Préconditionnement du Hessien 119
4.2.3 Calcul de l'adjoint de BONSAÏ-BIO 119
4.3 Analyse de sensibilité aux paramètres 120
4.3.1 Analyse de sensibilité locale au voisinage des valeurs *a priori* des paramètres 120
a. Sensibilité du LAI 120
b. Sensibilité de la biomasse finale 121
c. Conclusion 121
4.3.2 Analyse de sensibilité multi-locale (sur 1000 voisinages) 124
a. Sensibilité du LAI 124
b. Sensibilité de la biomasse finale 126
c. Conclusion 126
4.3.3 Sensibilité du LAI et de la biomasse à chaque pas de temps 128
4.4 Assimilation de données utilisant l'adjoint 130
4.4.1 Estimation des paramètres avec les expériences jumelles 130
a. Plan d'expérience 130
b. Choix de 8 expériences particulières 132
c. Tendances générales des résultats des expériences jumelles 132
d. Importance de la bonne connaissance de l'IAP 134
e. Conclusion 136
4.4.2 Assimilation de pseudo-observations de télédétection de la base ADAM . . 136
a. Choix de la fonction coût, de l'IAP, et du préconditionnement 138
b. Assimilation de 23 observations de LAI 138

c. Assimilation de 4 observations 140
d. Conclusion 140
4.4.3 Amélioration de l'estimation de biomasse par assimilation du LAI 140
a. Les scénarios étudiés 142
b. Les données utilisées 142
c. L'information *a priori* 142
d. Rôle de l'IAP dans l'assimilation dans BONSAÏ 143
e. Estimation de la biomasse 143
4.4.4 Conclusion 143
4.5 Conclusion 146

Le bonsaï demande du dévouement, de la patience, de l'amour. Et ce n'est qu'avec persévérance que votre petit arbre finira par livrer son secret, celui d'une meilleure compréhension de la nature.
J.D.Nessman [1]

Comme nous l'avons justifié lors de la description des objectifs du travail (§ 1.4), le choix de cette étude s'est porté sur l'assimilation des pseudo-observations de LAI dans le modèle de fonctionnement du couvert, plutôt que l'assimilation de réflectances dans le modèle couplé avec un modèle de transfert radiatif (voir la distinction § 1.3.5 c.). On procédera donc en deux phases principales :

1. estimation de la variable biophysique LAI sur chaque pixel ;
2. assimilation de ces pseudo-observations de télédétection sur chaque pixel.

Le modèle BONSAÏ, par sa simplicité, va permettre d'étudier et de comprendre en détail les résultats et les difficultés liés à chacune des étapes de ces deux phases.

On exposera dans un premier temps quelques résultats d'estimation de l'indice foliaire, en proposant une inter-comparaison de trois méthodes sur la base de données ADAM.

Pour l'aspect méthodologique de la phase 2, ce travail a consisté à développer une méthode d'assimilation variationnelle utilisant le modèle adjoint. Cet outil, une fois validé, permettra d'effectuer diverses *analyses de sensibilité locale* de ses variables d'état.

Les principaux résultats d'*assimilation* obtenus avec le modèle BONSAÏ pourront alors également être exposés. Dans un premier temps, on procédera aux expériences jumelles pour l'identification des paramètres du modèle BONSAÏ. La méthode d'assimilation sera ensuite appliquée au cas réel de pseudo-observations de LAI provenant de la base de données ADAM. Enfin, l'intérêt de l'assimilation du LAI pour la prévision de la biomasse sera étudié.

4.1 Estimation du LAI à partir de données radiométriques

4.1.1 Les différentes méthodes d'estimation

Il existe deux principales approches pour estimer les caractéristiques du couvert (cf § 1.2.4) : la minimisation se situant dans l'espace des variables biophysiques, et celle se plaçant dans l'espace des données radiométriques. Afin de déterminer les pseudo-observations qui seront par la suite assimilées dans un modèle de fonctionnement des cultures, nous proposons dans un premier temps de comparer trois approches d'estimation du LAI : deux méthodes basées sur la minimisation dans l'espace des variables biophysiques (par le calcul du NDVI et par régression), et une méthode d'optimisation effectuée dans l'espace des variables radiométriques (inversion de modèle de transfert radiatif).

- L'**approche empirique** consiste à relier des mesures biophysiques (effectuées au sol par exemple, ou simulées par des modèles de transfert radiatif) avec les valeurs de réflectance par régression linéaire (équation (1.7)).
- Les **indices de végétation** sont une approche semi-empirique qui exploite des relations simples entre la réflectance et le couvert(équation (1.5)).
- L'**inversion de modèles de transfert radiatif** s'effectue par une minimisation de l'écart entre réflectances observées et simulées par le modèle afin de déterminer ses paramètres d'entrée caractéristiques du couvert(équation (1.1)).

Nous présenterons d'abord les résultats de comparaison de ces trois approches sur les 40 unités d'expérimentation ADAM de façon à sélectionner la méthode la plus performante. Ensuite, cette dernière sera appliquée à une plus grande base de données, permettant un échantillonnage plus large (§ 4.1.3).

[1] Extrait du livre *Réussir son Bonsaï, conseils pratiques*, J.D.Nessman, éd.SAEP

4.1.2 Comparaison des trois méthodes sur les 40 unités d'expérimentation

a. Mise en correspondance des images SPOT et des mesures de LAI au sol

Les données au sol (cf protocole ADAM § 3.3) n'ayant pas été systématiquement réalisées au moment du passage des capteurs SPOT, il nous a fallu réaliser des interpolations pour associer à une même date ces deux types d'information. Ceci a été fait de la manière suivante :

Pour la phase d'étalonnage de l'approche empirique par régression.

L'étalonnage a été réalisé sur les unités de calibration. Sur ces unités, on dispose de mesures au sol fréquentes. Nous avons donc interpolé (interpolation linéaire simple) aux dates SPOT les valeurs de LAI mesurées au sol.

Pour la phase d'évaluation des performances des trois méthodes.

Dans ce cas, les valeurs de LAI estimées aux dates SPOT ont été interpolées aux dates de mesure de LAI au sol. L'erreur d'interpolation est négligeable compte tenu du faible intervalle de temps entre deux images SPOT consécutives.

b. Régression

Dans un premier temps, une méthode de régression a été appliquée entre les données radiométriques SPOT et les mesures terrain de LAI. Cette méthode a pu être développée grâce à la disponibilité des mesures au sol de LAI effectuées sur les 40 parcelles ADAM, dont 10 ont été échantillonnées fréquemment (unités de calibration UC, une fois par semaine), et 30 autres moins fréquemment (unités de validation UV)[2]. Notons que dans ce travail utilisant des données SPOT, les réflectances mesurées sont des vecteurs à trois composantes : réflectance dans le vert, le rouge et le proche infra-rouge. La régression a tout d'abord été réalisée sur les unités de calibration entre les réflectances ρ_{mes}^{UC} et les mesures de LAI au sol LAI_{mes}^{sol} pour chacune des dates :

$$Coef_{reg} = regression(LAI_{mes}^{sol}, \rho_{mes}^{UC})$$

de telle sorte que les coefficients $Coef_{reg} = (\mu, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \in \mathbb{R}^4$ vérifient :

$$LAI_{mes}^{sol} = \mu + \alpha_1 \cdot \rho 1_{mes}^{UC} + \alpha_2 \cdot \rho 2_{mes}^{UC} + \alpha_3 \cdot \rho 3_{mes}^{UC}$$

où

- $\rho 1$ est la réflectance dans la première bande SPOT, le vert ;
- $\rho 2$ est la réflectance dans la deusième bande SPOT, le rouge ;
- $\rho 3$ est la réflectance dans la troisième bande SPOT, le proche infra-rouge ;

Les coefficients ont ensuite été appliqués aux unités de validation :

$$LAI_{est} = \mu + \alpha_1 \cdot \rho 1_{mes}^{UV} + \alpha_2 \cdot \rho 2_{mes}^{UV} + \alpha_3 \cdot \rho 3_{mes}^{UV}$$

Cette dernière étape constitue cependant une validation relative de la régression, puisque ces 30 unités correspondent à la même année et aux mêmes conditions.

La régression sur les unités de calibration aboutit à une RMSE entre LAI estimés et LAI mesurés au sol de 0.41 (Fig. 4.1). Appliquée ensuite aux parcelles de validation, elle permet d'obtenir une RMSE très correcte de 0.46. Lorsque l'on observe les résidus en fonction du temps exprimé en températures cumulées (Fig. 4.2), on constate que la régression sur-estime légèrement en début et en fin de cycle.

c. Utilisation d'un indice de végétation

c.i/ Choix et définition de l'indice

Parmi les indices de végétation décrits en annexe A.2.1, le NDVI (Normalised Differention Vegetation Index, Tucker [233]) se calcule en utilisant la réflectance dans les bandes rouge (R) et proche

[2] voir la description de la base de données ADAM : § 3.3

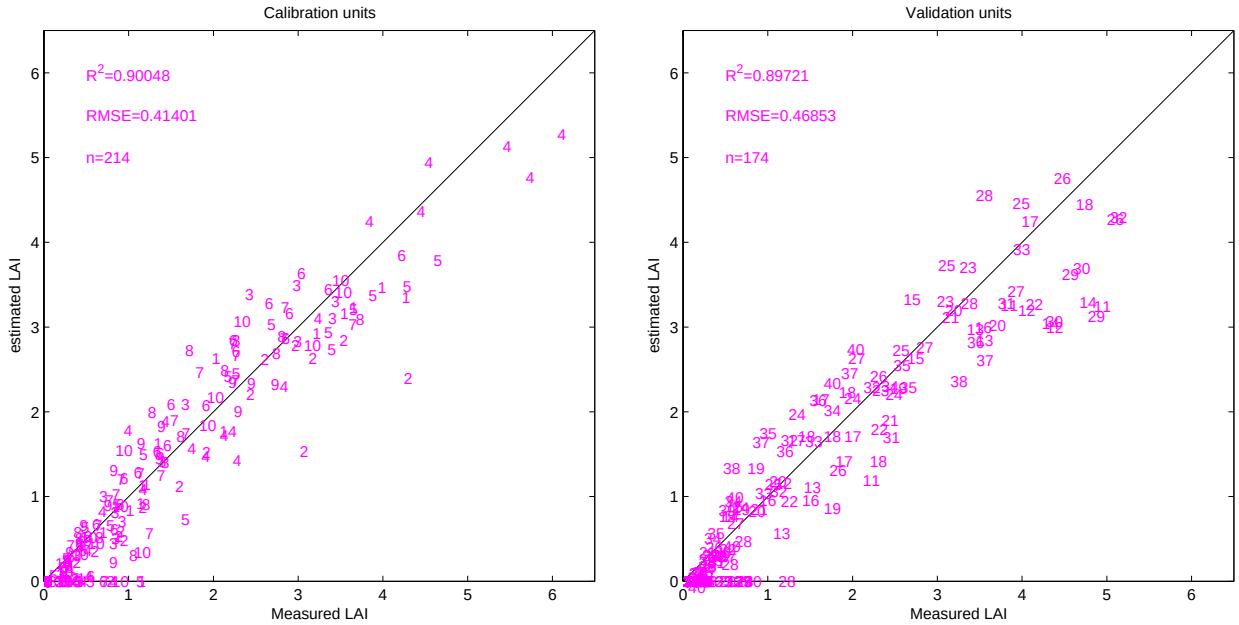

FIG. 4.1 – *Comparaison entre les LAI estimés par la régression et les LAI mesurés au sol sur les unités de calibration (à gauche) et sur les unités de validation (à droite). La valeur de chaque unité est représentée par le numéro de cette unité.*

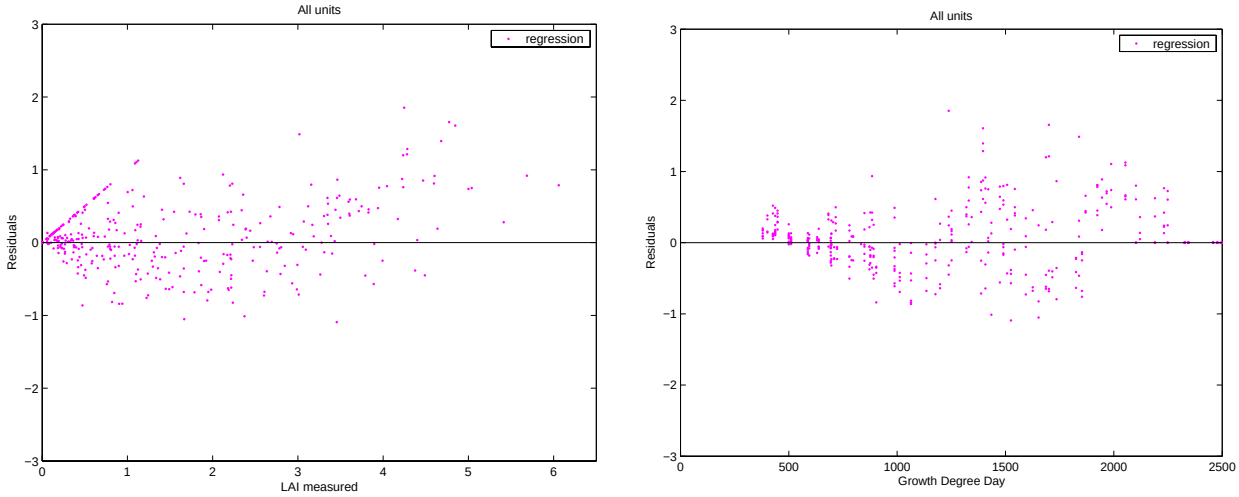

FIG. 4.2 – *Résidus de la méthode de régression par rapport aux LAI mesurés (à gauche), en fonction des températures cumulées (à droite) : résidus = LAI estimés - LAI mesurés.*

infra-rouge (PIR), par la formule suivante :

$$\text{NDVI} = \frac{PIR - R}{PIR + R} \tag{4.1}$$

Le LAI peut alors être estimé à partir d'une relation empirique (inversée) entre LAI et NDVI utilisant une loi de Beer modifiée (Baret et Guyot [12]) :

$$LAI_{\text{NDVI}} = -\frac{1}{K_{\text{NDVI}}} \cdot \log \frac{\text{NDVI} - \text{NDVI}_\infty}{\text{NDVI}_s - \text{NDVI}_\infty} \tag{4.2}$$

où NDVI_s est le NDVI d'un sol nu, NDVI_∞ est la valeur asymptotique du NDVI atteinte quand le LAI tend vers l'infini, et K_{NDVI} est le coefficient d'extinction contrôlant la pente de la relation. Le coefficient d'extinction à été fixé à $K_{\text{NDVI}} = 0.67$ d'après Weiss *et al.* [246]. Les valeurs de NDVI_s et NDVI_∞ et ont été approximées par :

$$\text{NDVI}_s \;=\; \min(\text{NDVI}_{SPOT}) - 0.005 \quad | \quad \text{NDVI}_\infty \;=\; \max(\text{NDVI}_{SPOT}) + 0.005$$

où NDVI_{SPOT} correspond à l'ensemble des valeurs de NDVI observées sur les 10 unités de calibration.

c.ii/ Résultats

L'application de cette méthode simple aboutit à des résultats assez satisfaisants, avec une RMSE entre LAI estimés et mesurés de 0.66 sur les unités de calibration et 0.62 sur les unités de validation (Fig. 4.3). Les résidus (mesurés-estimés) en fonction des sommes de température permettent de constater une tendance légère à la sur-estimation pour le premier tiers du cycle, suivi d'une importante sous-estimation jusqu'au maximum de LAI, puis, une sur-estimation assez importante en fin de cycle (Fig. 4.4).

d. Inversion du modèle de transfert radiatif PROSAIL

d.i/ Mise en place de la méthode

La troisième méthode d'estimation du LAI développée dans ce travail de comparaison procède à l'inversion du modèle de transfert radiatif PROSAIL, qui simule la réflectance ρ du couvert végétal dans une longueur d'onde donnée λ. Rappelons qu'une simulation de PROSAIL :

$$PROSAIL(\lambda, LAI, ALA, hot, N, Cab, Cms, Bs, to, ts, \psi)$$

consiste à appeler le modèle PROSPECT, qui simule les spectres de réflectance et transmittance de la feuille (R, T) :

$$(R, T) = PROSPECT(\lambda, N, Cab, Cw, Cms, Cpb, Ang)$$

puis le modèle SAIL qui simule la réflectance du couvert :

$$\rho = SAIL(LAI, ALA, hot, R, T, Rs1, Rs2, Rs3, to, ts, \psi, skyl)$$

Les variables d'état de PROSPECT sont décrites § 3.1.1, et celles de SAIL § 3.1.2.

L'inversion de PROSAIL a été effectuée par un algorithme de minimisation sans contrainte de type Quasi-Newton BFGS, avec une recherche linéaire mixée quadratique et cubique (voir § 2.4.1), avec la fonction *fminunc* du logiciel Matlab® (The MathWorks, Inc.). Un développement avec la méthode du Simplexe de Nelder-Mead (§ 1.2.4, Fig. 1.6) a permis d'obtenir les mêmes résultats et ne sera donc pas exposé ici. En pratique, la fonction coût minimisée représente l'écart entre les réflectances estimées par le modèle et les réflectances mesurées, additionné d'un terme d'information *a priori* sur les variables à estimer :

$$f(\theta) = \left\| \frac{\rho_{mes} - \rho_{est}}{\sigma^2_{\rho_{est}}} \right\|^2 + \left\| \frac{\theta - \theta_0}{\sigma_0^2} \right\|^2 \tag{4.3}$$

où :

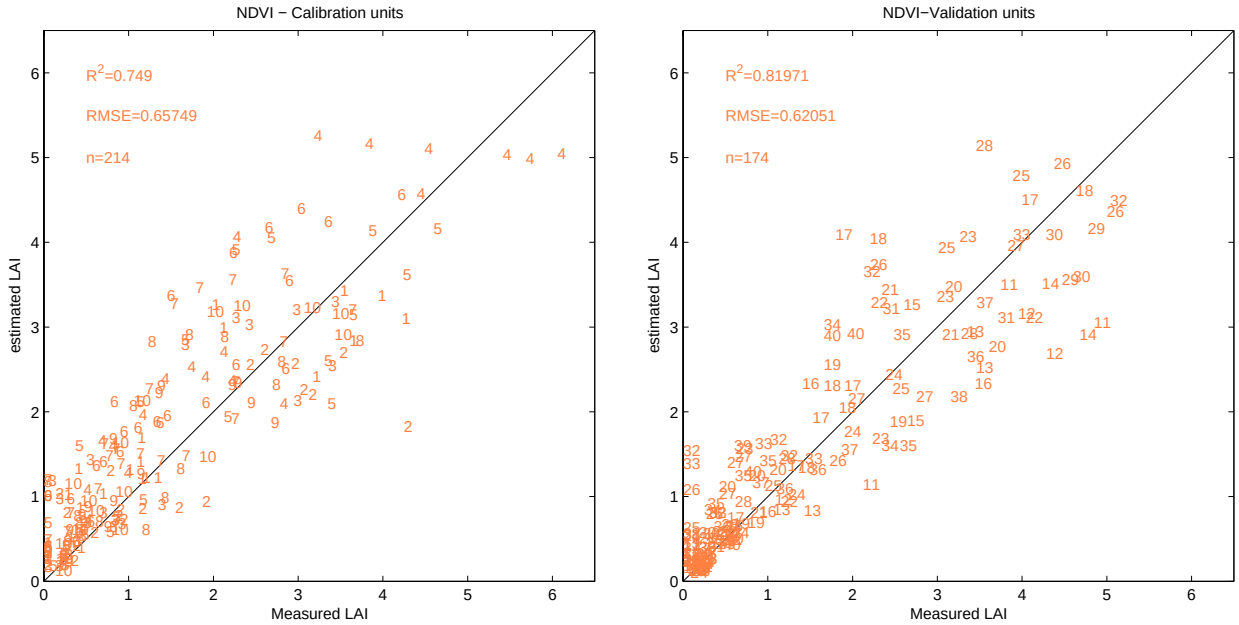

FIG. 4.3 – *Comparaison entre les LAI estimés par le NDVI et les LAI mesurés au sol sur les unités de calibration (à gauche) et sur les unités de validation (à droite). La valeur de chaque unité est représentée par le numéro de cette unité.*

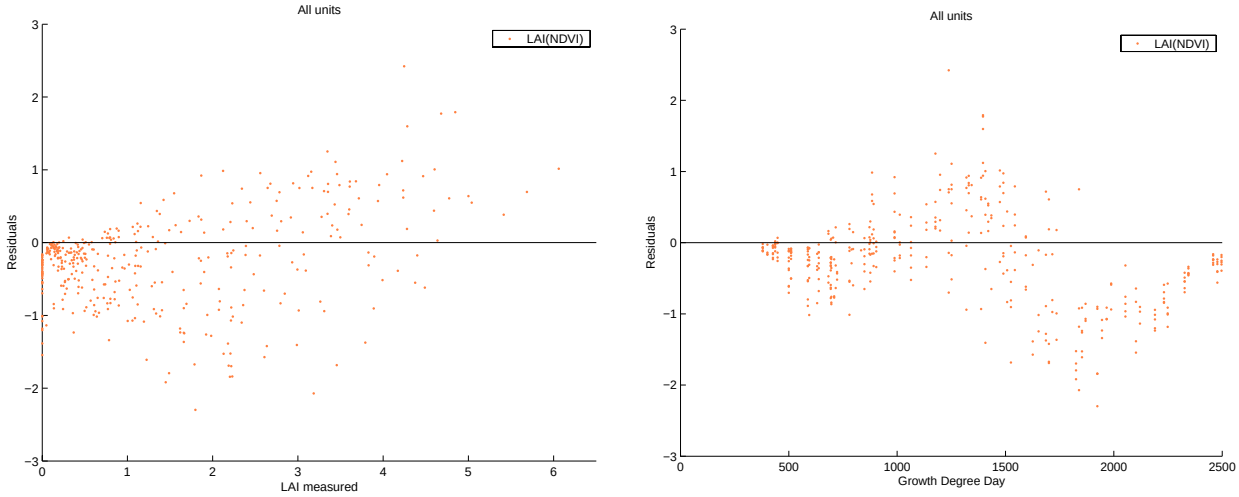

FIG. 4.4 – *Résidus des calculs directs d'après le NDVI par rapport aux LAI mesurés (à gauche), en fonction des températures cumulées (à droite) : résidus = LAI estimés - LAI mesurés.*

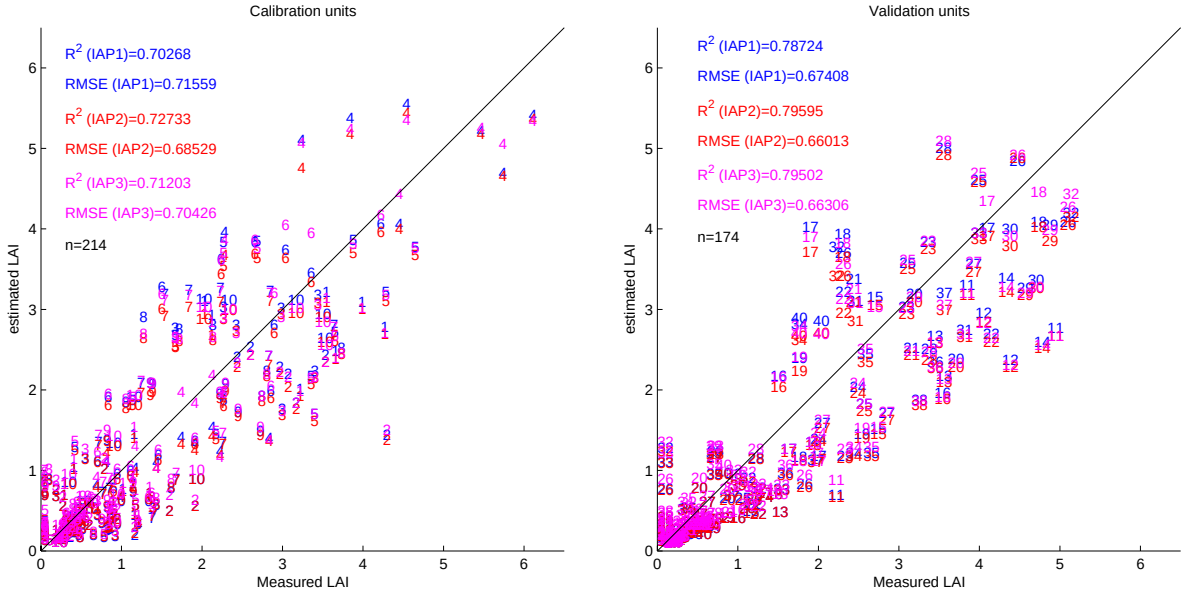

Fig. 4.5 – *Comparaison des RMSE avec les trois IAP différentes : IAP1 restreinte en bleu, IAP2 moyenne en rouge, IAP3 très large en magenta ; sur les unités de calibration (à gauche) et sur les unités de validation (à droite). La valeur de chaque unité est représentée par le numéro de cette unité.*

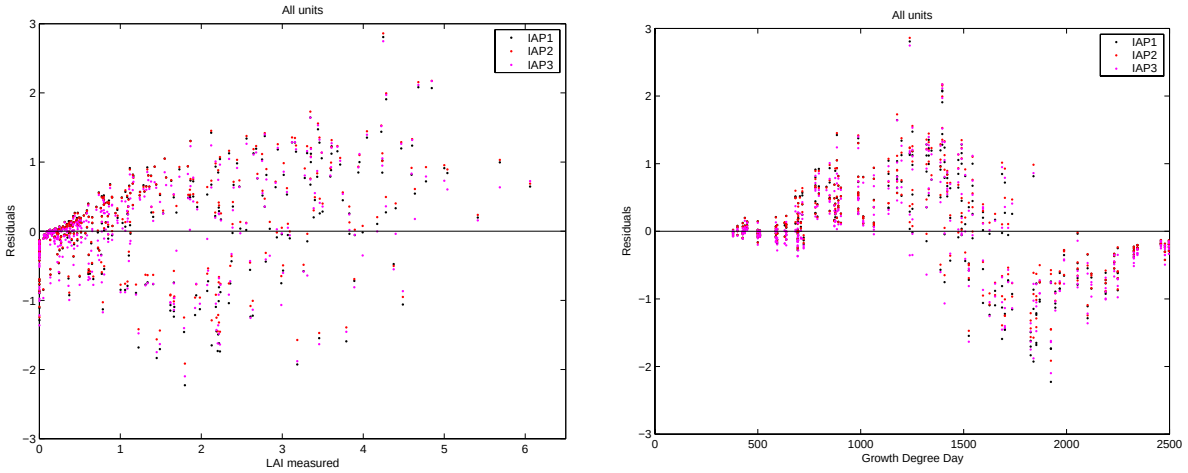

Fig. 4.6 – *Comparaison des résidus (LAI estimés - LAI mesurés) avec les trois IAP différentes : IAP1 restreinte, IAP2 moyenne, IAP3 très large ; sur les unités de calibration et de validation en fonction du LAI (à gauche) et en fonction des températures cumulées (à droite).*

- $\|\cdot\|^2$ est la somme des carrés des termes sur l'ensemble des dates de prise de vue SPOT D : pour A vecteur réel quelconque, $\|A\|^2 = \sum_{d \in D} \|A(d)\|^2$;
- $\theta = (LAI, ALA, hot, N, Cab, Cms)$ est le vecteur des variables d'entrée de PROSAIL que l'on souhaite estimer, avec comme valeur *a priori* θ_0, accompagnée d'un écart-type *a priori* σ_0 ;
- $\rho_{est} = PROSAIL(\theta, geo)$ sont les réflectances estimées par PROSAIL avec les variables géométriques *geo* fixées aux valeurs définies ci-après ;
- ρ_{mes} sont les réflectances mesurées, d'incertitude associée $\sigma^2_{\rho_{est}}$.

d.ii/ Précisions sur les variables de PROSAIL

- **Variables fixées.** Certaines variables seront considérées fixes car elles ont une influence très faible sur la réflectance ($Ang = 59°$, $Cpb = 0$), ou sont très fortement liées à d'autres variables ($Cw = 4 * Cms$, soit 80% d'eau relative). La réflectance du sol est calculée à partir d'un spectre de sol de référence et d'un facteur de brillance (Bs) que l'on cherchera à ajuster pour chaque pixel. Le spectre de référence a été extrait des images SPOT du début de cycle pour lequel beaucoup de parcelles étaient nues : $Rs = Bs * [0.072\ 0.087\ 0.158]$.
- **Variables connues.** Les conditions d'observations sont parfaitement connues :
  - bandes spectrales assimilées aux longueurs d'ondes centrales de SPOT : $\lambda = [545\ 645\ 840]\ nm$;
  - géométrie d'observation $[to, ts, \psi]$ connue pour chaque date d'observation.
  - pas de flux incident diffus considéré ($skyl = 0$), les réflectances calculées après correction atmosphérique correspondant à de la réflectance observée dans la direction de visée de SPOT pour la direction d'incidence du soleil.
- **Variables à estimer.** L'initialisation de l'algorithme de minimisation pour les variables à estimer (ALA, hot, N, Cab, Cms, Bs) a été fixée aux valeurs *a priori* , définies Tab. 4.1.

d.iii/ Définition de l'IAP

La méthode d'inversion a été testée avec trois types d'information *a priori* sur les propriétés du couvert végétal : une très contraignante (IAP1), une moyenne (IAP2) et une peu informative (IAP3). Les variances associées à chaque variable (Tab. 4.1) caractérisent ces trois types d'information *a priori* . Ces valeurs résultent de l'expérience accumulée au cours diverses expérimentations (Combal *et al.* [58]).

param.	valeur nom.	$\sigma^2(IAP1)$	$\sigma^2(IAP2)$	$\sigma^2(IAP3)$
ALA	60	10	10	20
hot	0.2	0.05	0.05	0.05
N	1.5	0.25	0.5	1
Cab	50	5	15	30
$Cms(IAP1)$	0.0038	0.0002	□	□
$Cms(IAP2, 3)$	0.005	□	0.001	0.001
Bs	1	0.3	0.3	0.6

Tab. 4.1 – *Valeurs des paramètres et de leur variance a priori pour l'inversion dans trois cas : IAP1 = contraintes fortes ; IAP2 = contraintes moyennes ; IAP3 = contraintes faibles.*

d.iv/ Précision des estimations et information *a priori*

Nous proposons de comparer les résultats obtenus avec les trois IAP considérées Tab. 4.1. On constate Fig. 4.5 que l'IAP moyenne donne les résultats les plus proches des mesures ($RMSE = 0.68$

sur les unités de calibration et $RMSE = 0.66$ sur les unités de validation). Toutefois, les différences ne sont pas significatives : $RMSE(IAP1) = 0.674$; $RMSE(IAP3) = 0.663$; $RMSE(IAP2) = 0.660$.

Les résidus (LAI estimés - LAI mesurés) tracés en fonction des sommes de température (Fig. 4.6), mettent en évidence, comme pour le NDVI, une sous-estimation en début de cycle (faible) et une sur-estimation en fin de cycle. Si ces tendances ont lieu de façon très similaire dans les trois cas d'information *a priori*, on peut remarquer que l'IAP2 sur-estime un peu plus que les deux autres en milieu de cycle, mais elle sous-estime beaucoup moins dans les phases de début et fin de cycle, réduisant son erreur sur la globalité des valeurs de LAI.

Ainsi, même si les différences entre les trois types d'IAP ne sont pas importantes, ce qui confirme la robustesse de l'inversion, on retiendra pour la suite de la comparaison l'information *a priori* moyenne, qui représente celle donnée le plus intuitivement d'une part, et qui fournit les RMSE les plus faibles sur l'ensemble des unités.

e. Conclusion : comparaison des trois méthodes.

Suite à la mise en œuvre de ces trois méthodes, il est possible de comparer les mesures au sol avec les résultats obtenus par la régression, par le NDVI, et par l'inversion utilisant l'IAP2. On propose cette comparaison en fonction des sommes de températures sur deux exemples typiques des 40 unités (Fig. 4.7). Les RMSE sur les unités de calibration, de validation, et sur l'ensemble des unites sont détaillées Tab. 4.2.

La comparaison des trois méthodes montre que la régression est la plus efficace, comme on l'attendait. On notera que la régression a été appliquée date à date, ce qui doit améliorer significativement ses performances globales. Cependant, la portée opérationnelle de cette méthode est limitée puisque les coefficients de régression ne peuvent être directement appliqués à d'autres dates ou conditions. Les approches basées sur le NDVI et l'inversion obtiennent des résultats inférieurs

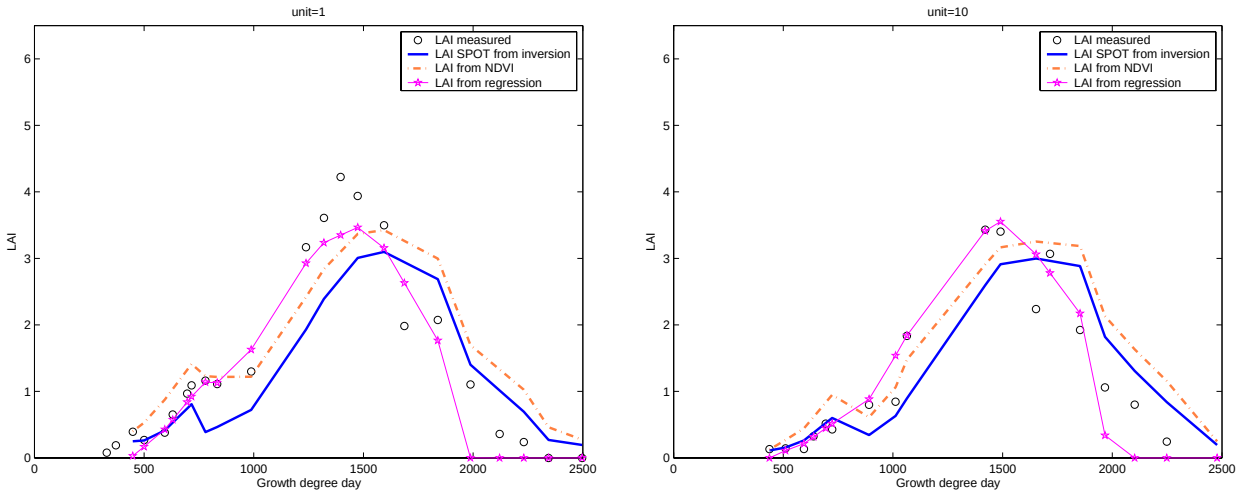

Fig. 4.7 – *Comparaison des 3 méthodes avec les mesures au sol sur deux unités de calibration, en fonction de la somme de températures.*

Méthode \ RMSE	Unités de calibration	Unités de validation	Toutes unités
Régression	0.41401	0.46853	0.43885
NDVI	0.65749	0.62051	0.64454
Inversion	0.68529	0.66013	0.67423

Tab. 4.2 – *RMSE entre LAI estimés et mesurés sur les trois méthodes et par type d'unité.*

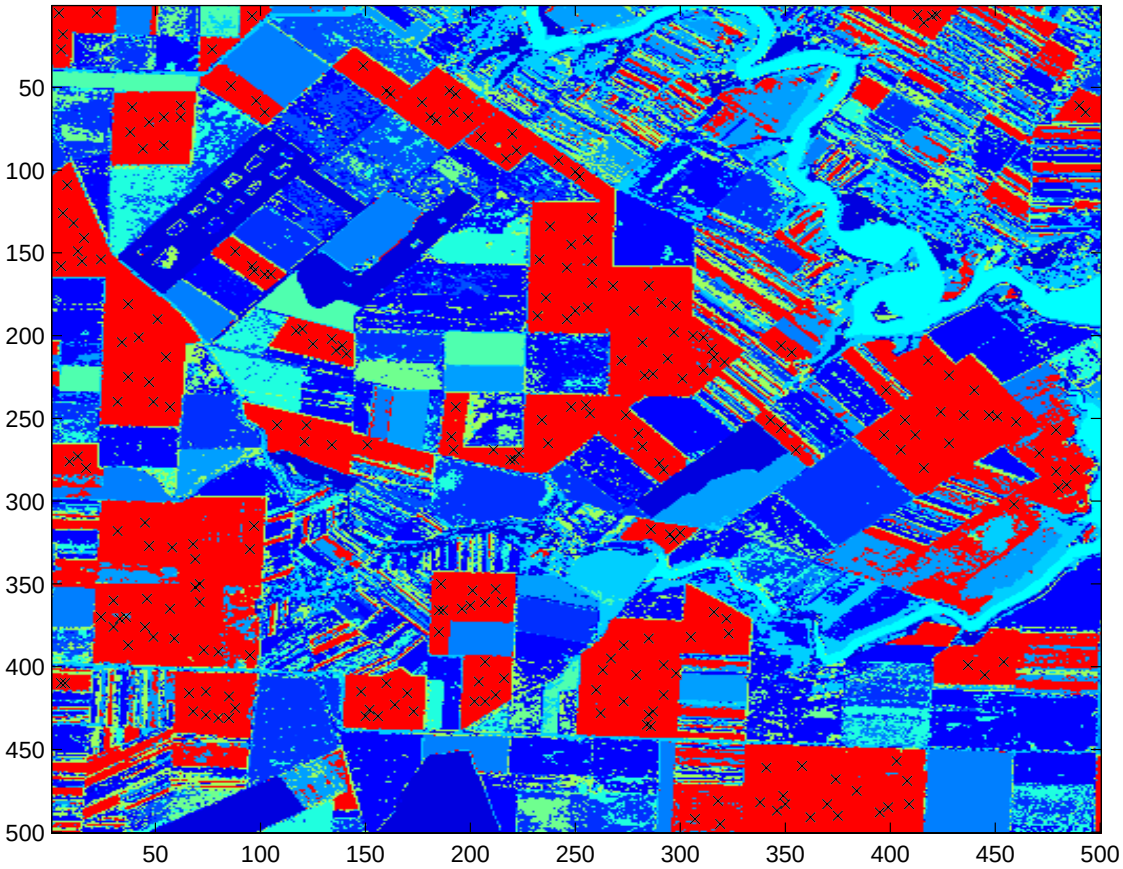

FIG. 4.8 – *Prélèvement de données sur une image SPOT du site ADAM : les croix vertes représentent les positions des points choisis au hasard sur les parcelles de blé. Les parcelles de blé sont reconnaissables ici par leur couleur rouge.*

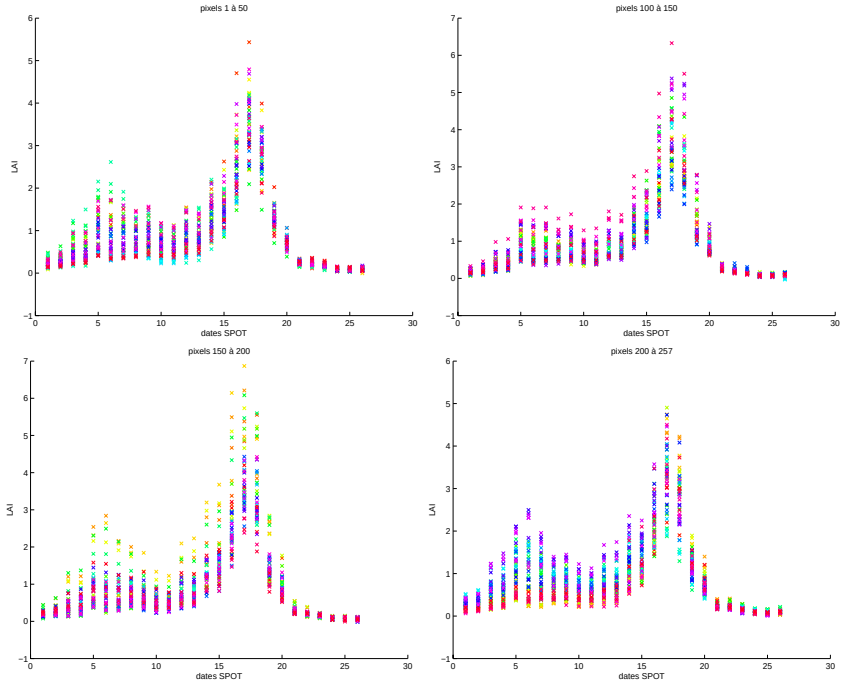

FIG. 4.9 – *Variabilité du LAI obtenu sur les 253 pixels, par groupes de 50.*

mais très similaires. Si l'estimation pour les 3 méthodes apparaît globalement non biaisée, l'observation de la dynamique des résidus montre que l'approche NDVI (Fig. 4.4) comme l'inversion (Fig. 4.6) sous-estiment en début de cycle et surestiment en fin de cycle.

Cependant, pour interpréter la distribution des estimations des paramètres après assimilation, la taille de l'échantillon de LAI (40) est contestable. C'est pourquoi une autre base a vu le jour, provenant également des données ADAM, mais de dimension nettement supérieure : 253 jeux de LAI ont été extraits sur les images ADAM et sont décrits dans la partie suivante.

4.1.3 Création de la "grande base" par extraction de pixels

Afin d'obtenir une base de données plus représentative de la variabilité observée sur les 40 unités d'expérimentation ADAM, 253 pixels répartis dans les zones de culture de blé ont été sélectionnés sur les images SPOT. Cet échantillon offre de plus l'avantage d'être plus important que le précédent, autorisant une meilleure exploitation statistique. Les zones de culture du blé sont repérables par la couleur rouge Fig. 4.8. Les croix déterminent les points où ont eu lieu les prélèvements radiométriques. De même que dans la partie précédente, ces données radiométriques ont servi à estimer le LAI par différentes méthodes : calcul du NDVI ou inversion avec trois informations *a priori* différentes, dont on ne détaillera pas les résultats puisqu'ils sont très similaires à ceux de l'expérience précédente. L'inversion avec une IAP moyenne a été choisie pour déterminer le LAI sur les 253 pixels pour les mêmes raisons.

On peut constater sur les 4 graphiques 4.9 représentant les LAI obtenus après inversion du modèle de transfert radiatif que l'on garde à la fois une bonne cohérence temporelle et une certaine variabilité du LAI, particulièrement en début de cycle et au maximum de LAI.

Remarque 19.
Les validations effectuées sur chaque méthode et sur les deux bases de données ont également permis d'estimer les résidus par rapport aux mesures terrain. Ces résidus seront seront pris en compte par la fonction coût pour l'assimilation de pseudo-observations de LAI.

4.2 Étapes préliminaires à l'assimilation dans BONSAÏ

Pour assimiler les pseudo-observations de LAI que nous avons estimées, la méthode variationnelle choisie nécessite le calcul du modèle adjoint de BONSAÏ. Avant de procéder aux tests de validation, nous proposons d'établir l'information *a priori* et le préconditionnement du Hessien pour faciliter la suite du travail.

4.2.1 Information *a priori* sur les paramètres de BONSAÏ

Nous avons pris le parti de déterminer l'IAP sur les paramètres du modèle BONSAÏ à partir d'intervalles de définition relativement larges. Les intervalles de définition correspondent à ceux de Tab. 3.2. En effet, le type de culture, du blé d'hiver, et la date de levée (supposée homogène sur une parcelle) sont connus : pour la date de levée, on reste très large avec un mois près, puisqu'en fait celle-ci est déterminée dans cette base de données à plus ou moins une semaine. La variance est calculée en observant une loi gaussienne avec une probabilité de 95 % de se situer dans l'intervalle de défintion. Cette variance pourra éventuellement être divisée par 100 (var *a priori* 2), ce qui donnera nettement plus d'importance à l'information *a priori* centrée sur le milieu de l'intervalle de définition.

L'information *a priori* utilisée dans le cadre de ce travail de comparaison est donc composée d'une valeur moyenne et de deux cas de variances *a priori* possibles (Tab. 4.3).

Param.	val. *a priori*	var. *a priori* 1	var. *a priori* 2
t_0	0	23428	234
Ti	1500	2603	26
ΔTs	800	5857	59
B	0.00205	2.35E-07	2.35E-9
L_{max}	7.5	5.27	0.0527
C	0.055	0.000527	5.27124E-06

TAB. 4.3 – *IAP (valeur et écart-type), telle que les bornes inférieure et supérieure représentent respectivement 2.5 % et 97.5 % de la distribution a priori des paramètres.*

4.2.2 Préconditionnement du Hessien

Comme le décrit la partie 2.5.3, l'algorithme de minimisation nécessite en particulier que le Hessien soit bien conditionné, c'est-à-dire que l'ensemble des variables aient des ordres de grandeur similaires. Le préconditionnement du problème (également appelé mise à l'échelle) a été assuré ici par un changement de variables, permettant de travailler avec un vecteur de contrôle sans dimension. Différents changements de variables ont été testés, celui choisi pour la suite étant défini par les valeurs moyennes *a priori* du tableau 4.3. Il a en effet permis d'améliorer très nettement la vitesse de convergence (moins d'effet *Narrow-Valley*), et surtout la convergence vers un *même* minimum en partant de conditions initiales très différentes.

4.2.3 Calcul de l'adjoint de BONSAÏ-BIO

α	limite	α	limite
$1/2$	1.00120274782465	$1/2^{11}$	1.00000117550380
$1/2^2$	1.00060163997454	$1/2^{12}$	1.00000058760616
$1/2^3$	1.00030088421403	$1/2^{13}$	1.00000029416699
$1/2^4$	1.00015045787330	$1/2^{14}$	1.00000014219649
$1/2^5$	1.00007523284618	$1/2^{15}$	1.00000006315139
$1/2^6$	1.00003761738681	$1/2^{16}$	1.00000002163142
$1/2^7$	1.00001880891659	$1/2^{17}$	1.00000003858733
$1/2^8$	1.00000940450459	$1/2^{18}$	1.00000001510572
$1/2^9$	1.00000470216474	$1/2^{19}$	0.999999901557095
$1/2^{10}$	1.00000235096139	$1/2^{20}$	0.999999938912505

TAB. 4.4 – *Validation du modèle tangent de BONSAÏ-BIO.*

prod. scal.	direction 1	direction 2	direction 3
$a =< V_d, V_b >$	879.26792042264	96.511627479139	107.53766976091
$b =< U_b, U_d >$	879.26792042263	96.511627479139	107.53766976091
$< DD, DD >$	879.26791162995	96.511626514022	107.53766868553
diff.=(b-a)	$8.9812601800077\text{E}^{-12}$	$2.7000623958884\text{E}^{-13}$	$4.2632564145606\text{E}^{-13}$
diff.rel.=(b-a)/b	$1.0214474986976\text{E}^{-14}$	$2.7976550250093\text{E}^{-15}$	$3.9644307190579\text{E}^{-15}$

TAB. 4.5 – *Résultats du test du produit scalaire sur le tangent et l'adjoint de BONSAÏ-BIO à partir de perturbations dans trois directions $\delta u = U_d$.*

L'adjoint de BONSAÏ-BIO (couplage du modèle de biomasse avec BONSAÏ, cf § 3.2.1) a été calculé au vu de deux objectifs :

– effectuer une analyse de sensibilité de la biomasse et du LAI simulés par BONSAÏ-BIO par rapport à ses paramètres,
– assimiler les données de LAI dans BONSAÏ.

La validité du modèle adjoint se démontre par les tests du tangent et de l'adjoint expliqués § 2.3.3. Le tableau 4.4 expose l'un des résultats obtenus pour le test de Taylor. Rappelons que l'on souhaite la convergence suivante :

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{N(v + \alpha \delta v) - N(v)}{\alpha < \nabla N(v), \delta v >} = 1$$

où v est une sortie du modèle, δv une perturbation sur v, et N est une fonction réponse scalaire dont le gradient est donné par le code tangent. Ici par exemple, N représente la norme du LAI. La limite est bien obtenue pour $\alpha = 1/2^{18}$. On remarque qu'au delà, α se trouve trop proche du zéro de la machine et le test commence à diverger. Le tableau 4.5 expose quant à lui quelques résultats de validation du modèle adjoint, dans trois directions de perturbations différentes. On constate bien que les deux produits scalaires sont égaux entre eux, ce qui exprime l'exactitude de l'adjoint *par rapport au tangent*, et le troisième carré scalaire ($< DD, DD >$) valide définitivement le test du produit scalaire avec les différences finies.

4.3 Analyse de sensibilité aux paramètres

4.3.1 Analyse de sensibilité locale au voisinage des valeurs *a priori* des paramètres

Le modèle adjoint peut être exploité pour les problèmes d'assimilation de données, mais également pour les analyses de sensibilité locales qu'il permet d'établir. La méthode développée de façon théorique dans la partie 2.2.3 est appliquée ici au modèle BONSAÏ-BIO. Nous avons choisi de calculer la sensibilité locale au voisinage des valeurs moyennes des paramètres (cf Tab. 3.2). Rappelons que la sensibilité $s(k)$ d'une fonction réponse G à un paramètre k est par définition la dérivée de G par rapport à k :

$$s(k) = \frac{\partial G}{\partial k}(k)$$

La sensibilité dépend évidement de l'échelle des paramètres incluant leur unité. Il serait donc pertinent de réaliser l'analyse de sensibilité sur les paramètres adimensionalisés. Toutefois, la mise à l'échelle étant relativement subjective (voir § 4.2.2), l'analyse de sensibilité risque d'en être influencée. Huiskes [133], propose de travailler sur les valeurs brutes des paramètres, et d'adimensionnaliser les sensibilités correspondantes, ce qui nous permettra de les comparer entre elles.

Huiskes définit la sensibilité mise à une échelle sans dimension, ou sensibilité *relative*, par :

$$S(k) = \frac{\partial G}{\partial k}(k) \cdot \frac{k}{G} \tag{4.4}$$

Il s'agit de la sensibilité "brute" multipliée par le rapport entre le paramètre et la valeur de la fonction-réponse. Pour récupérer les sensibilités adimensionnalisées, il suffit donc de :

1. calculer la sensibilité avec l'adjoint du modèle *sans la mise à l'échelle* ;

2. en déduire les paramètres adjoints $s(k) = k_b$;

3. obtenir les sensibilités relatives : $S(k) = k_b^* = k_b \cdot \frac{k}{G}$.

a. Sensibilité du LAI

La fonction réponse que nous avons choisie dans un premier temps est l'intégrale du LAI sur l'ensemble du cycle. Elle représente donc la réponse globale du LAI :

$$G(k) = \sum_{t=0}^{T} LAI_t(k)$$

La sensibilité de la fonction réponse G est représentée Fig. 4.10. On peut constater que l'adimensionnalisation des sensibilités est indispensable pour interpréter les hiérarchies des paramètres. Les trois graphiques du haut de gauche à droite représentent la sensibilité sans adimensionnalisation, calculée à partir des valeurs "brutes" des paramètres :

1. la sensibilité de la fonction réponse à chaque paramètre : "sensib" ;

2. le pourcentage de la valeur absolue de cette sensibilité : "% |sensib|" ;

3. le *log* de la valeur absolue de cette sensibilité : "log |sensib|".

Les trois graphiques du bas de gauche à droite représentent la sensibilité après adimensionnalisation (équation (4.4)), également calculée à partir des valeurs "brutes" des paramètres :

4. la sensibilité relative de la fonction réponse à chaque paramètre : "sensib relative" ;

5. le pourcentage de la valeur absolue de cette sensibilité "% |sensib relative|" ;

6. le *log* de la valeur absolue de cette sensibilité : "log |sensib relative|".

On peut tout d'abord remarquer que le LAI n'est pas du tout sensible aux trois derniers paramètres E_b, Ei_{max}, K, ce qui provient évidemment du fait qu'ils sont présents dans l'équation calculant la biomasse et non dans celle calculant le LAI. Les paramètres auxquels le LAI est le plus sensible sont L_{max} (37%) et ΔTs (33%), puis Ti (21%), et B (7%).

b. Sensibilité de la biomasse finale

Dans cette partie, la fonction réponse utilisée représente la biomasse finale (ou Matière sèche totale : MST), lorsque le LAI est nul en fin de cycle :

$$G(k) = biom_T(k)$$

De même que pour le LAI, on peut constater sur la représentation de la sensibilité de la fonction réponse "MST" (Fig. 4.11) l'importance de l'adimensionnalisation des sensibilités pour interpréter les hiérarchies des paramètres. Lorsque l'on observe les pourcentages de sensibilités des paramètres dans le cas sans adimensionnalisation, avec les graphiques du milieu de Fig. 4.11, (titres "% |sensib|" et "% |sensib sans dim|"), le paramètre B semble être le seul à avoir une influence certaine. Pourtant, lorsque l'on adimensionnalise les sensibilités, la hiérarchie des paramètres est complètement modifiée : les paramètres E_b et Ei_{max} ont la plus forte influence, suivis de ΔTs, L_{max} et K. On remarque que la sensibilité aux paramètres E_b et Ei_{max} est égale puisqu'ils jouent un rôle parfaitement symétrique dans l'équation de la biomasse. Il en est de même pour K et L_{max}.

c. Conclusion

Les paramètres les plus influents dans BONSAÏ-BIO pour les réponses du LAI et de la MST *au voisinage des valeurs a priori des paramètres* sont définis Tab. 4.8.

LAI	MST
1. L_{max}	1. Ei_{max} et E_b ex aequo
2. ΔTs	2. ΔTs
3. Ti	3. L_{max} et K ex aequo
4. B	4. Ti
	5. B

Tab. 4.8 – *Hiérarchie des sensibilités aux paramètres du LAI et de la MST* dans le voisinage des valeurs *a priori* des paramètres *(voir remarque 20).*

Pour le LAI comme pour la MST, les paramètres t_0 et C ont un effet négligeable sur le résultat. Ceci s'explique notamment par le fait que les quantités de MST les plus importantes sont produites en fin du cycle, tandis que C et t_0 n'influent le modèle qu'en début de cycle. On constate également

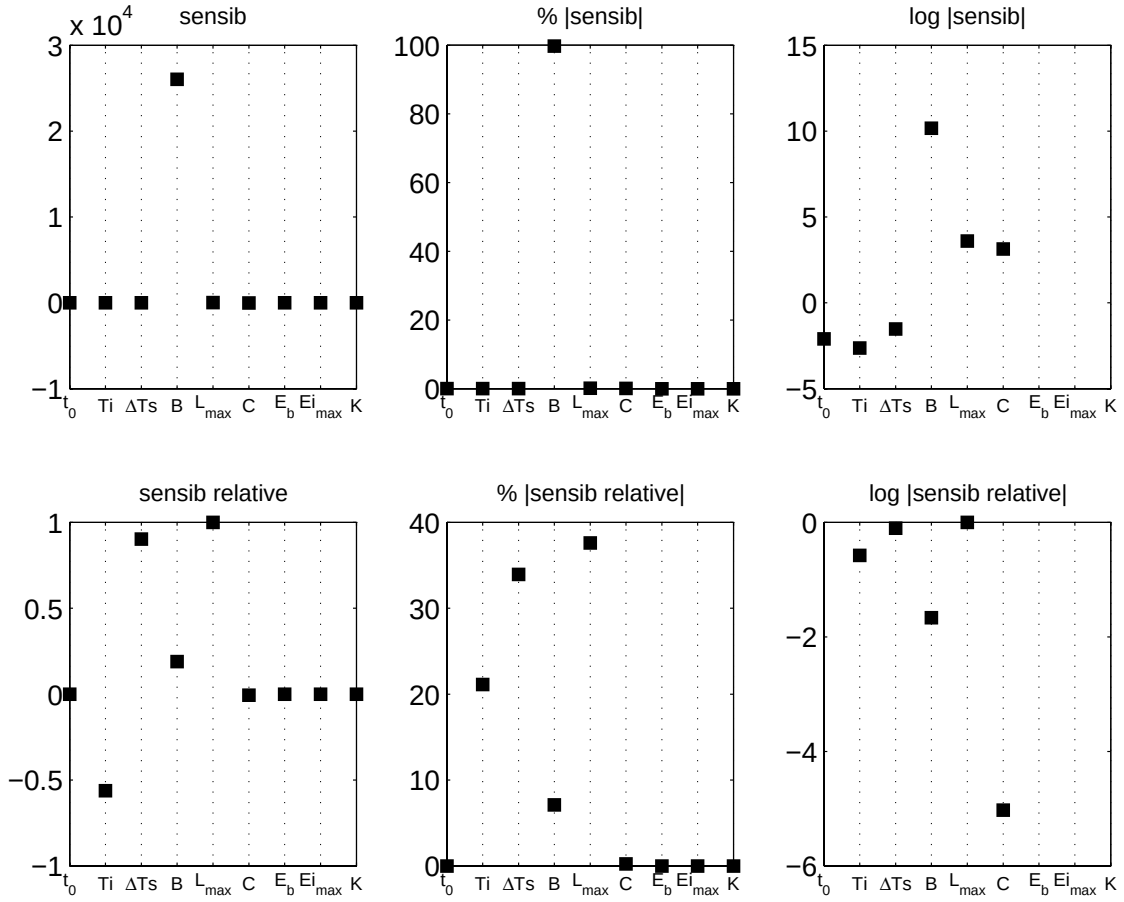

Fig. 4.10 – *Sensibilité du LAI sans adimensionnalisation (trois graphiques du haut) et après adimensionnalisation (trois graphiques du bas) en valeurs réelles, en pourcentage et en log.*

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% sensib. relative
t_0	-0.12211	0	0
Ti	-0.07221	-0.56178	21.122
$DeltaTs$	0.21747	0.90234	33.926
B	26035	0.18904	7.1075
L_{max}	36.379	1	37.598
C	-23.025	-0.00657	0.24694
E_b	0	0	0
Ei_{max}	0	0	0
K	0	0	0

Tab. 4.6 – *Sensibilité du LAI en fonction des paramètres au voisinage des valeurs a priori.*

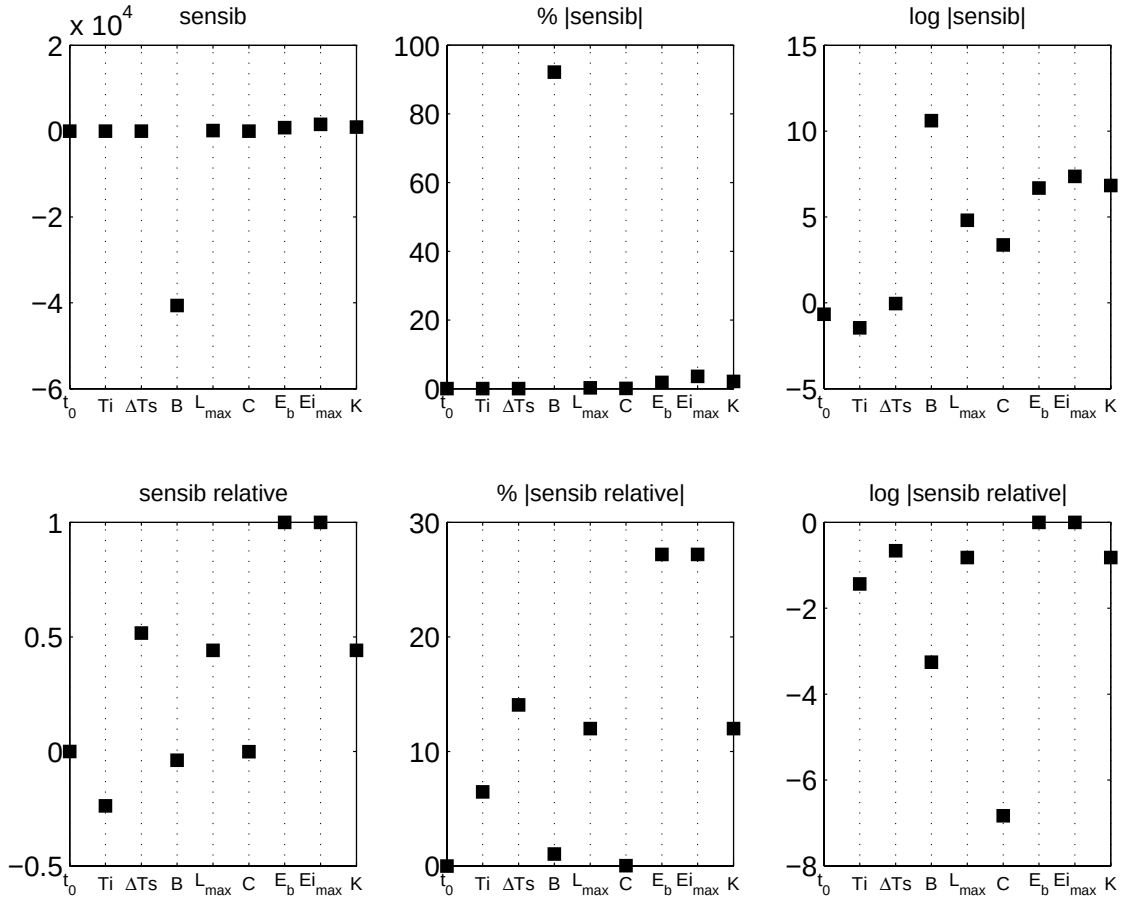

FIG. 4.11 – *Sensibilité de la MST sans adimensionnalisation (trois graphiques du haut) et après adimensionnalisation (trois graphiques du bas) en valeurs réelles, en pourcentage et en log.*

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% sensib. relative
t_0	-0.51386	0	0,000
Ti	-0.23436	-0.23787	6.4699
$DeltaTs$	0.95481	0.51685	14.058
B	-40609	-0.03847	1.0463
L_{max}	123.01	0.44114	11.999
C	-29.14	-0.00108	0.0295
E_b	798.86	1	27.199
Ei_{max}	1572.2	1	27.199
K	931.36	0.44114	11.999

TAB. 4.7 – *Sensibilité de la MST en fonction des paramètres au voisinage des valeurs a priori.*

que, si pour le LAI, le paramètre L_{max} influe plus que ΔTs, les rôles sont inversés pour le calcul de la biomasse. On note que le paramètre ΔTs correspond grossièrement à la durée de la saison de végétation (DVG) qui est reconnu comme étant une caractéristique essentielle des modèles DGVM (cf § 1.3.3).

Ainsi, si l'objectif est de déterminer la meilleure approximation de la MST, l'accent ne sera pas particulièrement posé sur L_{max} mais sur E_b et Ei_{max}, alors que si l'on souhaite bien simuler la courbe de LAI, ce paramètre sera fortement pris en compte.

Remarque 20.
Une remarque importante est que ces résultats de sensibilité ne sont vrais et interprétables que dans le voisinage des paramètres initiaux choisis, et dans des conditions précises. En effet, la sensibilité est la pente de la tangente au modèle. Si cette dérivée reste constante pour un modèle linéaire, elle évolue en fonction des valeurs nominales des paramètres pour un modèle non linéaire. Il est clair que dans un modèle non linéaire, on ne peut obtenir de réponse globale : chaque sensibilité est liée à un voisinage et rien n'est intrinsèque.

Cette analyse de sensibilité locale a été calculée au voisinage du milieu des intervalles de définition définis Tab. 3.2. Pourtant, ce choix est discutable : la sensibilité de t_0 est réduite après adimensionnalisation à environ 40, alors qu'elle était de l'ordre de 10^8, *i.e.* de même ordre que les sensibilités à Ti et ΔTs. Ceci est dû au fait que l'on a pris une valeur de t_0 très proche de 0. Or dans d'autres conditions, si l'on connaissait mal la date de levée par exemple, on pourrait choisir t_0 nettement différent de 0 et changer l'ordre de grandeur du paramètre t_0 adimensionnalisé. La section suivante propose donc de tester la sensibilité sur un échantillon de l'ensemble des valeurs possibles des paramètres.

4.3.2 Analyse de sensibilité multi-locale (sur 1000 voisinages)

Dans cette partie, 1000 combinaisons de valeurs de paramètres ont été générées aléatoirement suivant une distribution uniforme sur l'ensemble de leurs intervalles de définition. En calculant la sensibilité au voisinage de ces 1000 vecteurs de paramètres qui balaient tout l'espace de définition (défini Tab. 3.2), on obtient une sensibilité "multi-locale". On peut considérer cette analyse de *sensibilité globale de premier ordre* comme généralisée (dans la limite de l'échantillonnage) sur l'ensemble de définition des paramètres, en opposition à la sensibilité *locale* de la partie précédente (voir remarque 21).

a. Sensibilité du LAI

Les résultats sur les 1000 cas de sensibilité du LAI par rapport aux paramètres sont visibles Fig. 4.12, ainsi que les distributions des sensibilités sur les histogrammes Fig. 4.13 et Fig. 4.14, et les résultats numériques Tab. 4.9. On observe que le profil général des sensibilités relatives suit la même hiérarchie que la sensibilité établie au voisinage des valeurs *a priori*.

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% |sensib relative|
t_0	-0.16248	-0.00999	0.38082
Ti	-0.10776	-0.53649	21.685
ΔTs	0.29219	0.83764	33.816
B	19503	0.13205	5.1064
L_{max}	29.759	0.7294	37.68
C	-35.546	-0.009325	0.3655

Tab. 4.9 – *Médiane de la sensibilité du LAI en fonction des paramètres au voisinage de 1000 valeurs différentes.*

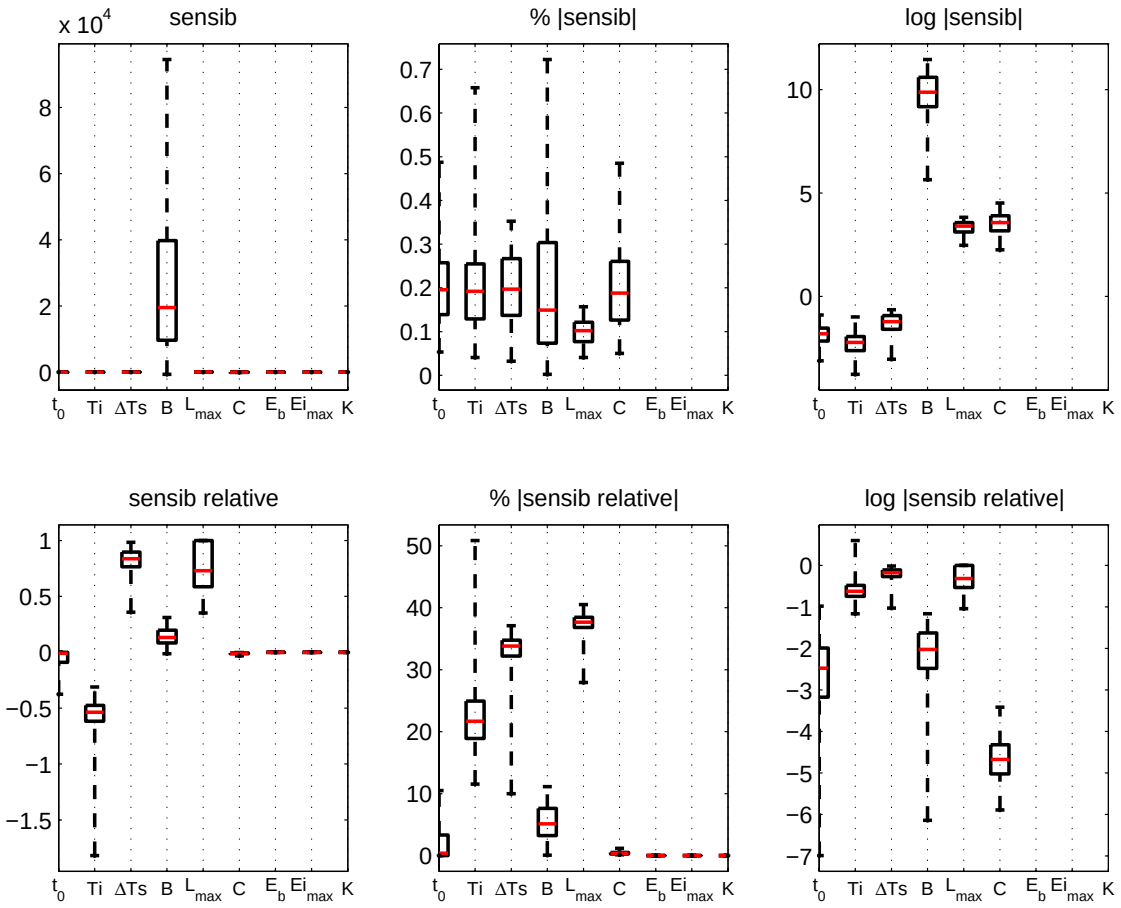

FIG. 4.12 – *Sensibilité du LAI sans adimensionnalisation (trois graphiques du haut)et après adimensionnalisation (trois graphiques du bas) en valeurs réelles, en pourcentage et en log au voisinage de 1000 vecteurs de paramètres différents. La boite borne les valeurs de sensibilité aux premier et troisième quartiles, avec la médiane (en rouge). Les "moustaches" (en pointillés) représentent le reste des valeurs.*

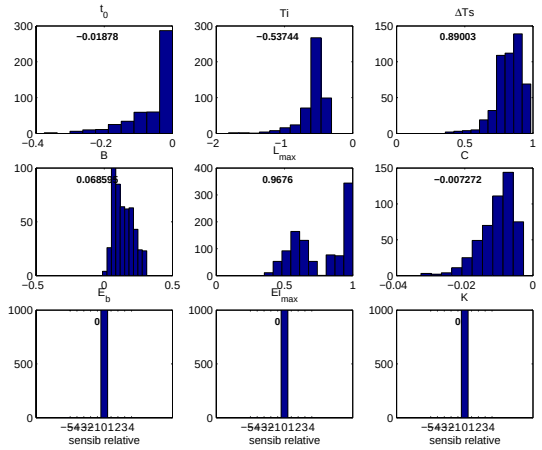

FIG. 4.13 – *Histogramme des valeurs des sensibilités relatives du LAI aux 9 paramètres pour 1000 voisinages différents.*

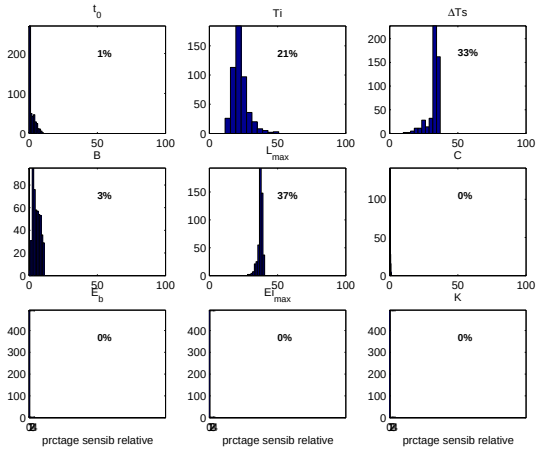

FIG. 4.14 – *Histogramme des pourcentages des sensibilités relatives du LAI aux 9 paramètres à 1000 voisinages.*

b. Sensibilité de la biomasse finale

De même que pour le LAI, on constate Fig. 4.15 qu'un profil se dessine sur les 1000 cas de sensibilité de la MST. Ce profil est d'autant plus visible lorsque l'on étudie les distributions des sensibilités sur ces 1000 cas, représentées Fig. 4.16 et Fig. 4.17. Le tableau 4.10 renseigne quant à lui sur les valeurs des médianes des sensibilités obtenues au voisinage de 1000 paramètres différents.

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% |sensib relative|
t_0	-0.50304	-0.00592	0.144
Ti	-0.233	-0.24489	6.9208
$DeltaTs$	0.79205	0.43678	13.088
B	-1.2807e+005	-0.16228	4.5732
L_{max}	37.664	0.2107	8.8991
C	-9.5032	-0.0005	0.01452
E_b	525.84	0.64533	27.712
Ei_{max}	1074.7	0.64533	27.712
K	392.56	0.2107	8.8991

Tab. 4.10 – *Médiane de la sensibilité de la MST en fonction des paramètres au voisinage de 1000 valeurs différentes.*

Remarque 21 (à propos de la sensibilité globale)**.**
Dans cette partie, la sensibilité a été calculée sur un échantillon de 1000 combinaisons de paramètres parcourant l'ensemble des intervalles de définition, et n'est donc plus considérée comme locale. Cependant, elle ne peut non plus être dénommée analyse de sensibilité ***globale****. En effet, les analyses de sensibilité globale sont obtenues avec des méthodes généralement basées sur des analyses de variances des variables du modèle [148], et prennent en compte les interactions entre paramètres en fonction de leur intervalle de définition. L'indice de sensibilité globale est alors une somme d'indices correspondant à l'effet principal et aux interactions. Ici, les intervalles de définition ont simplement été balayés sans cette prise en compte.*

c. Conclusion

Cette partie a proposé une sensibilité locale effectuée sur un échantillonnage de l'ensemble de définition des paramètres. On peut considérer que les paramètres auxquels le LAI et la MST sont sensibles suivent le même profil que celui déterminé au voisinage de l'IAP des paramètres, comme cela est résumé Tab. 4.11.

Ces résultats confortent les sensibilités quasi-nulles de t_0 et C quel que soit le voisinage dans lequel est effectuée la sensibilité. Ils mettent en évidence que les valeurs des paramètres du LAI n'influent pas énormément sur la MST, relativement aux deux paramètres E_b et Ei_{max}.

LAI		MST	
1. L_{max}	37%	1. E_b et Ei_{max}	28%
2. ΔTs	33%	2. ΔTs	16%
3. Ti	21%	3. L_{max} et K	9%
4. B	3%	4. B	3%
5. t_0	1%	5. Ti	1%
6. C	0%	6. t_0 et C	0%

Tab. 4.11 – *Hiérarchie et pourcentages des sensibilités (généralisées sur l'ensemble de définition) du LAI et de la MST aux paramètres.*

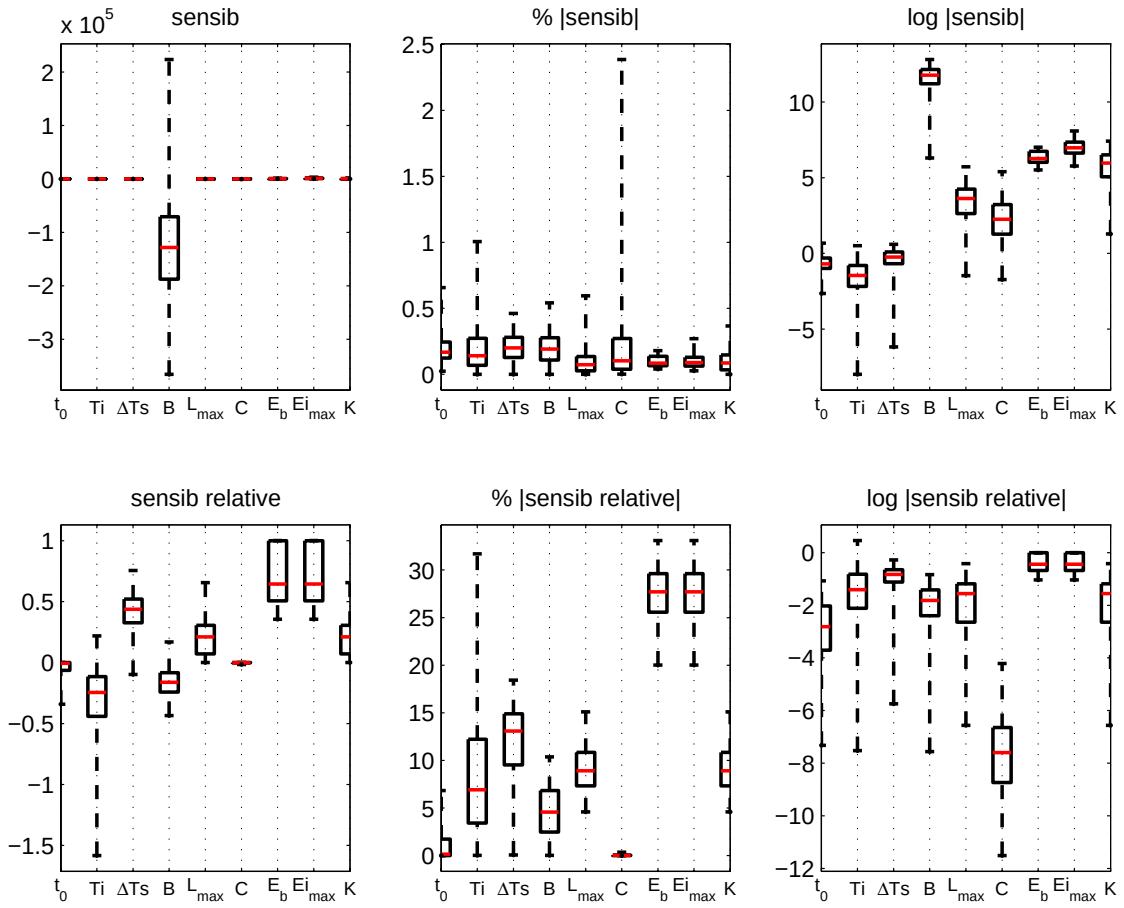

FIG. 4.15 – *Sensibilité de la MST sans adimensionnalisation (trois graphiques du haut)et après adimensionnalisation (trois graphiques du bas) en valeurs réelles, en pourcentage et en log au voisinage de 1000 vecteurs de paramètres différents. La boite borne les valeurs de sensibilité aux premier et troisième quartiles, avec la médiane (en rouge). Les "moustaches" (en pointillés) représentent le reste des valeurs.*

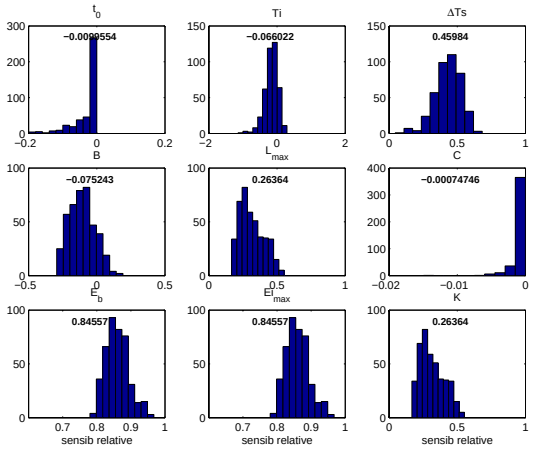

FIG. 4.16 – *Histogramme des valeurs des sensibilités relatives de la MST aux 9 paramètres pour 1000 voisinages différents.*

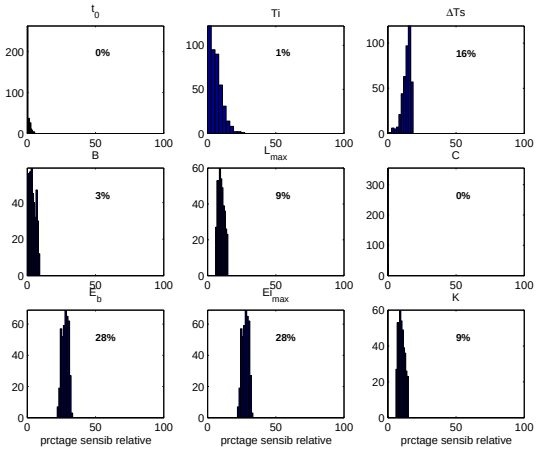

FIG. 4.17 – *Histogramme des pourcentages des sensibilités relatives de la MST aux 9 paramètres à 1000 voisinages.*

4.3.3 Sensibilité du LAI et de la biomasse à chaque pas de temps

Après avoir déterminé les paramètres les plus influents sur l'ensemble du cycle, il peut être utile de déterminer la sensibilité du LAI et de la biomasse à leurs paramètres à chaque pas de temps, ou du moins pour chaque étape essentielle du cycle de la culture. Par exemple, pour la prévision de rendement, il est très important de connaître les paramètres les plus influents avant la fin du cycle. En effet, certains paramètres doivent avoir une influence au moment de la croissance et très peu pendant la sénescence. Ceci permettrait éventuellement de n'assimiler que des observations concentrées sur une portion spécifique du cycle, pour estimer les paramètres qui sont les plus influents localement.

On note que les sensibilités représentées Fig. 4.18 ont été évaluées au voisinage des valeurs *a priori* des paramètres.

- **Le LAI.** On constate logiquement que la sensibilité du LAI aux paramètres K, E_b et Ei_{max} est nulle puisque ces paramètres ne sont pas dans l'équation de cette variable d'état. De plus, les sensibilités du LAI aux paramètres C et t_0 sont quasiment nulles tout au long du cycle, confirmant les résultats observés précédemment sur la sensibilité du LAI intégré (ainsi que de la biomasse finale).

  En terme de période de sensibilité du LAI, les paramètres L_{max} et ΔTs, auxquels le LAI est le plus sensible, jouent un rôle mineur en début de cycle, et prépondérant à partir du début du tallage (janvier-février). Le paramètre Ti a une influence positive dominante en tout début de cycle, puis quasiment nulle au début du tallage, et négative mais importante sur le reste du cycle. B est moins influent que les autres paramètres entrant dans le modèle de LAI. Si certains paramètres ont une signification particulière à un moment du cycle (Ti, B, C), il n'existe pas de période privilégiée permettant de mieux les identifier, à l'exception peut-être de Ti en début de cycle. Chaque paramètre (sauf C et t_0) agit donc sur toute la dynamique du LAI.

- **La biomasse.** Dans le cas de la biomasse, E_b et Ei_{max} jouent un rôle symétrique et ont donc la même influence relative. Il en est de même pour K et L_{max}. Ces couples de paramètres apparaissent dans le modèle associés toujours sous forme de produit, et ne sont donc pas identifiables individuellement.

  Les valeurs de sensibilité de la biomasse aux paramètres déterminant le LAI sont du même ordre de grandeur que ceux des sensibilités du LAI observées précédemment. Seul le paramètre Ti montre des différences, car dans le cas de la sensibilité de la biomasse, il reste toujours positif. Le produit des paramètres E_b et Ei_{max} apparaît comme étant le plus influent à partir du milieu du tallage.

  L'estimation de E_b et Ei_{max} et des paramètres du LAI jusqu'au tiers de la croissance de la biomasse devraient donc permettre une bonne évaluation de la matière sèche finale. Bien sûr, l'estimation en début de cycle de ces paramètres doit permettre une estimation précoce de la biomasse finale si les hypothèses de stabilité dans le temps des paramètres est vérifiée. Certains travaux montrent que ce n'est pas toujours le cas, en particulier pour E_b (Steinmetz [230]).

Dans un cadre opérationnel de prévision de rendement où il n'est pas envisagé d'assimiler des mesures de biomasse (§ 4.4.3), l'assimilation d'observations de LAI sur le cycle permettrait l'estimation des paramètres ΔTs, Ti, L_{max}. Il faudra donc compléter les observations de LAI par une évaluation indépendante du produit $E_b \cdot Ei_{max}$.

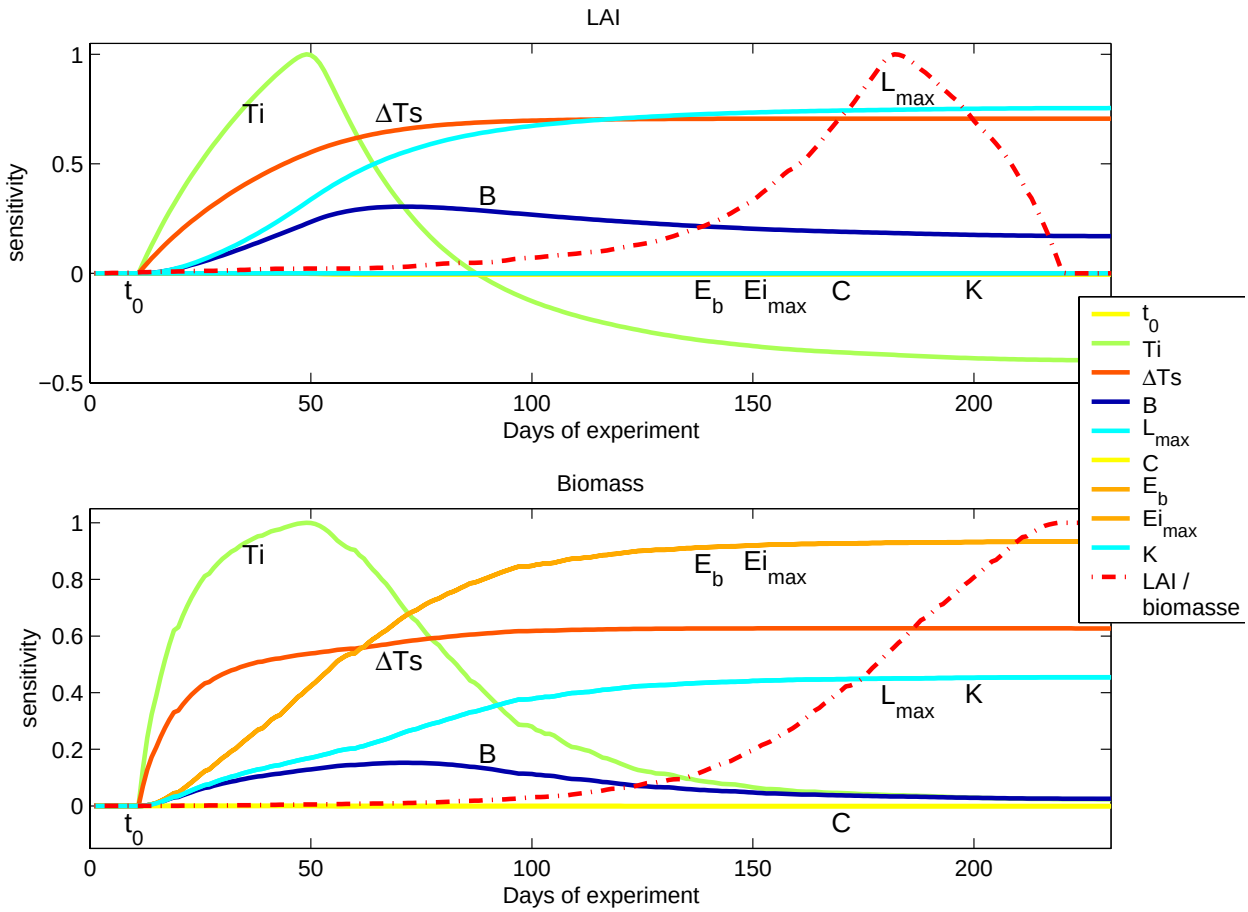

FIG. 4.18 – *Sensibilités relatives du LAI et de la biomasse aux 9 paramètres en fonction des jours du cycle. Le LAI et la biomasse normalisés sont représentés en pointillés rouges.*

4.4 Assimilation de données utilisant l'adjoint

4.4.1 Estimation des paramètres avec les expériences jumelles

Dans cette partie, on a procédé à ce que l'on appelle des expériences jumelles, ce qui consiste à créer des données par des simulations du modèle. Ces données peuvent être bruitées si l'on souhaite introduire une erreur de mesure, ou non bruitées si l'on considère les observations parfaites. Les expériences jumelles présentent beaucoup d'avantages, en particulier en terme de diagnostic, décrits § 2.6.2.

Dans ce travail, les données de LAI sont créées à partir d'un jeu de paramètres que l'on appellera θ_{obs}. L'estimation des paramètres après assimilation (θ_{est}) devrait converger dans l'idéal vers θ_{obs}. On distingue les θ_{init}, qui correspondent à différents points de départ du vecteur de contrôle, et les θ_{ap} qui sont les valeurs *a priori* des paramètres, et qui participent à la fonction coût.

a. Plan d'expérience

L'un des objectifs des expériences jumelles est de déterminer si les paramètres optimaux correspondent bien à ceux utilisés pour simuler les observations. On cherche donc à minimiser la fonction coût définie par la somme des écarts entre LAI simulé et "observé", et d'un terme d'information *a priori* . Dans ce cas, le terme d'IAP est représenté par l'écart entre les paramètres estimés θ_{est} et les valeurs *a priori* des paramètres θ_{ap}, pondéré par les variances *a priori* associées σ_{ap} :

$$J(\theta_{est}) = \sum_{i=1}^{N} |LAI(i) - LAI_{obs}(i)|^2 + \frac{\|\theta_{est} - \theta_{ap}\|^2}{{\sigma_{ap}}^2}$$

avec N le nombre d'observations assimilées ; LAI l'indice foliaire simulé par le modèle ; LAI_{obs} l'indice foliaire créé par une première simulation avec les θ_{obs} ; θ_{est} le vecteur des paramètres estimés par l'algorithme, de dimension 6.

A partir de cette fonction coût, le plan d'expérience a considéré une grande partie des configurations possibles afin d'en analyser les conséquences, c'est-à-dire :

- **10 jeux d'observations correspondant aux paramètres θ_{obs}, dont seulement les cas 1 et 2 seront considérés ici :**
  - cas 1 : $\theta_{obs} = \theta_{ap}$;
  - cas 2 : θ_{obs} choisis aléatoirement et répétés 9 fois pour simuler des observations différentes ;
- **100 valeurs aléatoires des θ_{init} ;**
- **3 types de variances *a priori* associées aux θ_{ap} pour l'IAP dans la fonction coût :**
  - pas d'IAP ;
  - IAP1, qui correspond aux valeurs de Tab. 4.3 ;
  - IAP2, qui est plus contraignante que l'IAP1, également définie Tab. 4.3.
- **4 valeurs du nombre d'observations N :** N=170 (un jour sur deux), N=23 (configuration similaire à ADAM), N=10 et N=5 ;
- **deux types d'observations :**
  - bruit=1 : les observations sont bruitées de 10% de façon aléatoire suivant une loi gaussienne centrée ;
  - bruit=0 : les observations son considérées comme parfaites et non bruitées ;

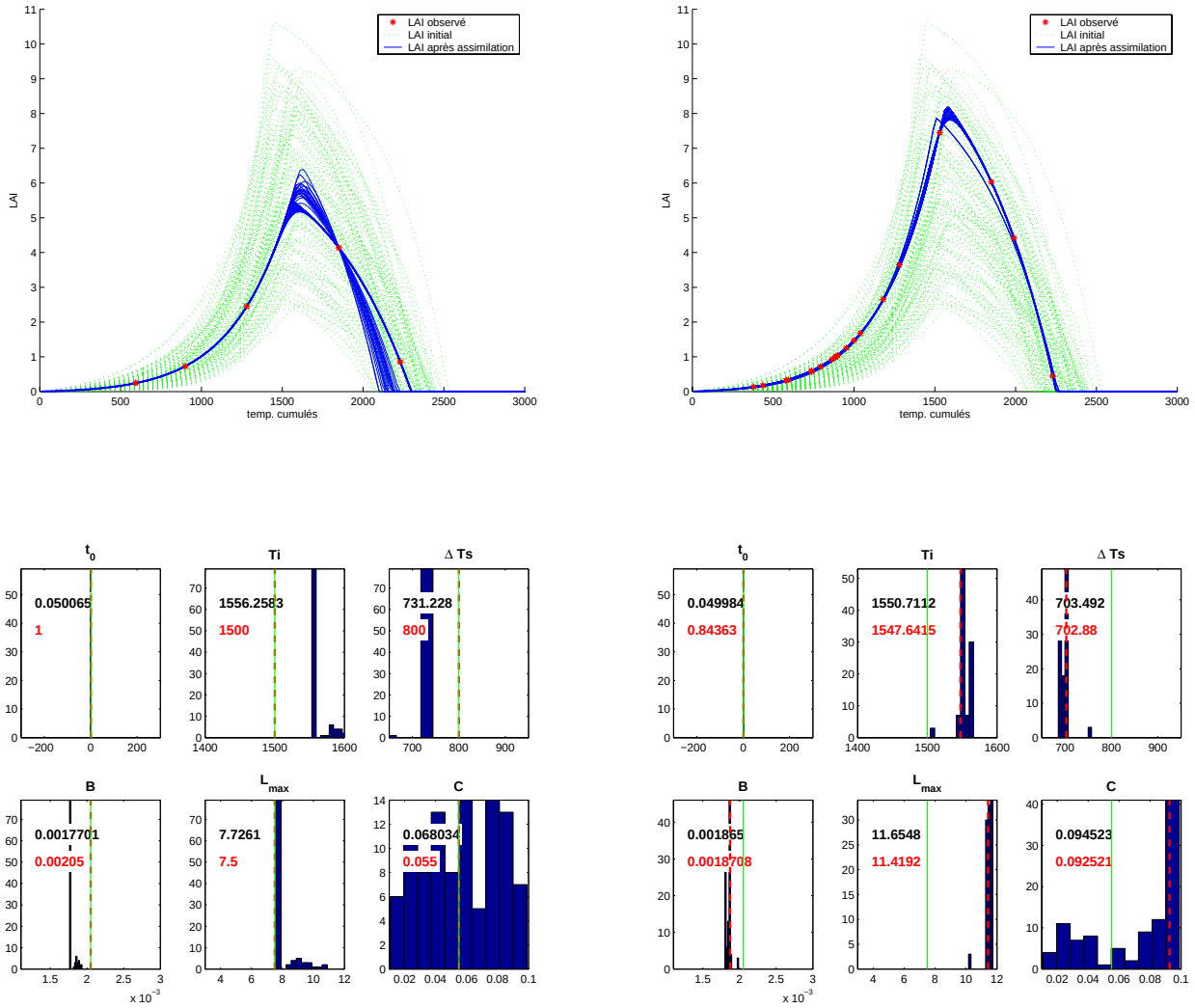

FIG. 4.19 – *Cas particuliers 4 (à gauche : sans IAP avec bruit, 5 obs.) et 5 (à droite : sans IAP, sans bruit, 23 obs.), où différentes initialisations convergent vers différents jeux de paramètres optimaux. En haut, les courbes en pointillés verts représentent les 100 initialisations différentes d'où commence l'algorithme de descente, les courbes pleines bleues les solutions après assimilation des observations (représentées par les étoiles rouges). En bas, ce sont les distributions des paramètres estimés (θ_{est}) ainsi que la valeur dominante de l'estimation en bleu. La droite verte centrée représente les valeurs a priori des paramètres (θ_{ap}) et celle en rouge θ_{obs}, c'est-à-dire la solution parfaite, écrite en rouge.*

	Info. *a priori*			nb obs					
	pas d'IAP	IAP1	IAP2	170	23	10	5	bruit	
exp.1			✓	✓				non	cas obs. 1
exp.2			✓		✓			non	
exp.3		✓				✓		oui	
exp.4	✓						✓	oui	
exp.5	✓				✓			non	cas obs. 2
exp.6		✓			✓			non	
exp.7	✓				✓			oui	
exp.8		✓			✓			oui	

Tab. 4.12 – *Caractéristiques des 8 expériences choisies pour la représentation graphique : l'IAP1 permet de prendre en compte la connaissance des intervalles de définition des paramètres. L'IAP2 est utile lorsque l'on aune très bonne connaissance a priori de la solution.*

b. Choix de 8 expériences particulières

Pour des raisons de gestion de l'espace, les résultats de seulement 8 de ces expériences seront présentées graphiquement. Leur choix est répertorié dans le tableau 4.12. Cependant, toutes les valeurs estimées des paramètres résultant de l'optimisation sont données en annexe, Tab. D.1 (sans IAP), D.2 (IAP 1), D.3 (IAP 2), pour le cas d'observation 1, et Tab. D.4 (sans IAP), D.5 (IAP 1), D.6 (IAP 2) pour le cas d'observation 2. On peut y lire également les RMSE des LAI simulés après estimation par rapport aux LAI observés.

Les expériences 1 à 3 ont été choisies afin d'étudier l'intérêt d'avoir une très bonne information *a priori* des paramètres optimaux, à des degrés différents de prise en compte, et dans différentes situations d'observations (quantité et qualité). L'expérience 4 permet d'observer le comportement de l'algorithme sans aucune information *a priori* et avec très peu d'observations. Les expériences 5 à 8 étudient l'impact de l'IAP lorsqu'elle est très différente des paramètres optimaux : on peut ne pas prendre en compte l'IAP ou l'utiliser avec un poids raisonnable dans la fonction coût afin de gérer les domaines de définition des paramètres. 23 observations sont toujours utilisées pour ces 4 dernières comparaisons, bruitées ou non bruitées.

Pour les 8 expériences cochées Tab. 4.12, les résultats suivants ont été représentés graphiquement :

- le LAI estimé après assimilation des observations (Fig. 4.20 à 4.27) ;
- le log du rapport de la fonction coût avec sa valeur initiale : $\|J\|/\|J_0\|$ et le log du rapport du gradient avec sa valeur initiale (critère d'arrêt de N1QN3) : $\|\nabla J\|/\|\nabla J_0\|$ (Fig. 4.28 à 4.35) ;
- les différentes valeurs de LAI obtenues après assimilation et distributions des paramètres estimés dans les expériences 4 et 5, où les convergences ne donnaient pas toutes la même solution selon l'initialisation des paramètres (Fig. 4.19).

c. Tendances générales des résultats des expériences jumelles

Plusieurs tendances générales se dégagent sur les aspects suivants :

- **Vitesse de convergence :** la convergence de l'algorithme représentée Fig. 4.28 à 4.35 est effectuée en moins de 16 itérations dans tous les cas où l'on a donné à la fonction coût un poids sur le terme de l'IAP. Sans aucune IAP, il faut à l'algorithme au moins 22 itérations pour obtenir le vecteur optimal (exp. 4, 5 et 7). Ce nombre d'itérations nécessaire dépend également du nombre d'observations mais dans une moindre mesure par rapport au poids de l'IAP. En effet ce terme d'IAP ajoute à la fonction coût de la convexité par rapport à ses paramètres et facilite le trajet de l'algorithme de descente. Une erreur ajoutée sur

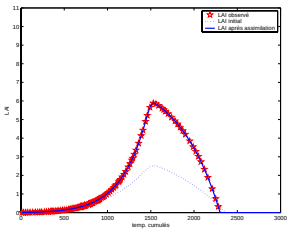

FIG. 4.20 – *exp.1.*

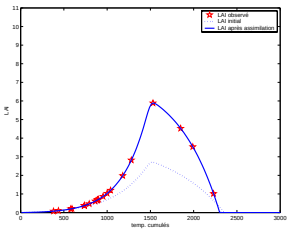

FIG. 4.21 – *exp.2.*

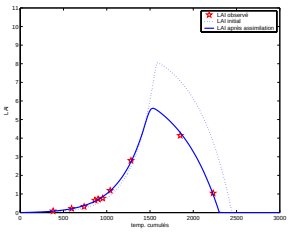

FIG. 4.22 – *exp.3.*

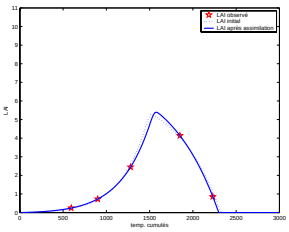

FIG. 4.23 – *exp.4.*

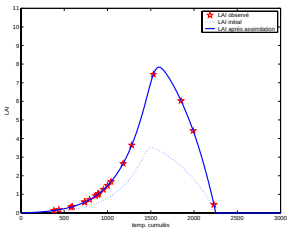

FIG. 4.24 – *exp.5.*

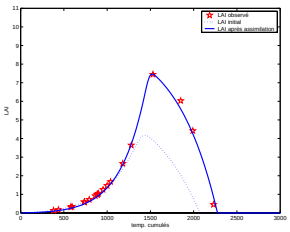

FIG. 4.25 – *exp.6.*

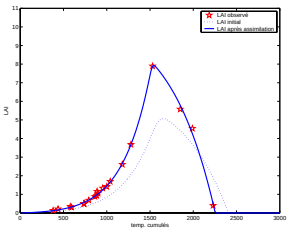

FIG. 4.26 – *exp.7.*

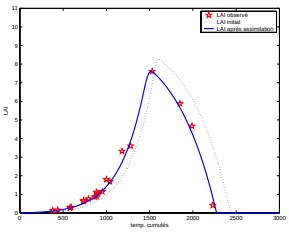

FIG. 4.27 – *exp.8.*

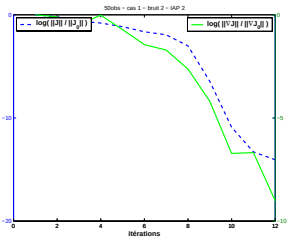

FIG. 4.28 – *exp.1.*

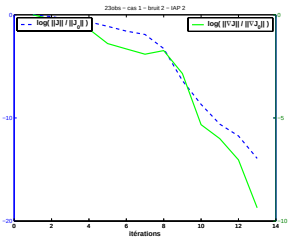

FIG. 4.29 – *exp.2.*

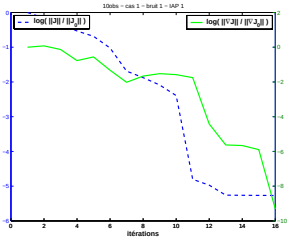

FIG. 4.30 – *exp.3.*

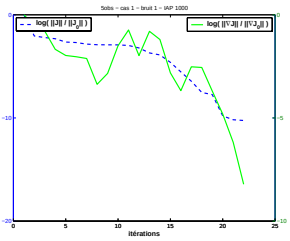

FIG. 4.31 – *exp.4.*

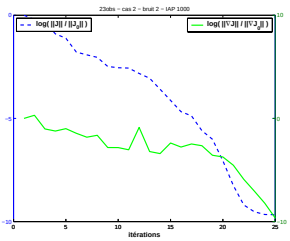

FIG. 4.32 – *exp.5.*

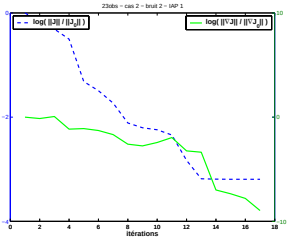

FIG. 4.33 – *exp.6.*

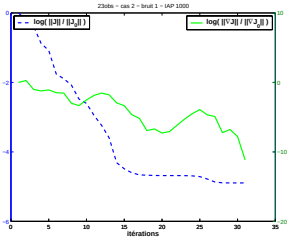

FIG. 4.34 – *exp.7.*

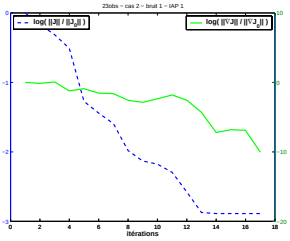

FIG. 4.35 – *exp.8.*

FIG. 4.20 à 4.27 : *représentation du LAI initial, observé, puis estimé après assimilation des observations.*
FIG. 4.28 à 4.35 : *convergence de la fonction coût caractérisée par les valeurs de* $\|J\|/\|J_0\|$ *et de* $\|\nabla J\|/\|\nabla J_0\|$.

les observations influence le nombre d'itérations lorsqu'on ne donne pas d'IAP (exp.7, en 31 itérations) mais pas du tout dans l'exp.8 (en 17 itérations), où une IAP est donnée, confirmant son intérêt en terme de vitesse de convergence.

- **Initialisation de l'algorithme :** chaque test a eu lieu avec 100 valeurs différentes de θ_{init}, le vecteur de contrôle initial, ce qui a permis de constater que cela n'influence que très rarement les résultats de l'algorithme : sauf pour quelques cas sans aucune IAP, dont les expériences 4 et le 5, toutes les optimisations convergent vers une unique solution quel que soit le point initial θ_{init}. Par ailleurs, on constate Fig. 4.19 que les solutions restent encore valables, y compris en terme de domaine d'estimation des paramètres. L'expérience 4 montre simplement qu'avec très peu d'observations et aucune information sur les valeurs probables des paramètres, l'algorithme converge vers différentes solutions, et en particulier pour un paramètre d'influence négligeable sur le LAI tel que C. Dans l'exp. 5, les distributions restent autour de l'estimation-solution et donnent une très faible RMSE sur les 100 initialisations (0.03). Pour l'exp. 4, seulement 5 observations bruitées sans IAP ne permettent pas de déterminer les paramètres optimaux, mais gardent cependant une RMSE du LAI assez faible (0.18).
- **Identification des paramètres :** dans tous les cas, le paramètre C est plutôt mal identifié, confirmant le peu de sensibilité du modèle à ce paramètre. Le paramètre t_0 ayant subi une variabilité assez faible, il reste dans les valeurs proches de 0 dans toutes les expériences. Les paramètres Ti et ΔTs se compensent lorsque l'IAP a peu de poids. Enfin, les paramètres B et L_{max} sont généralement bien estimés, sauf lorsque l'IAP influence trop la fonction coût. Toutes ces tendances sur les paramètres confirment l'analyse de sensibilité effectuée dans la partie 4.3.

  Les résidus relatifs des paramètres estimés en fonction du nombre d'observations, et pour les trois cas de variances *a priori* considérés (Fig. 4.36) mettent en valeur l'apport bénéfique d'observations supplémentaires sur l'identification. Sans IAP, des observations non bruitées permettent une estimation parfaite (ronds violets) tandis qu'une erreur sur les observations augmente la sensibilité des résultats au nombre d'observations assimilées (croix violettes). L'IAP montre que les paramètres Ti, ΔTs et L_{max} en particulier s'améliorent très nettement avec la fréquence temporelle, qu'il y ait une erreur sur les observations ou non. Enfin, l'IAP2 ne permet aucune sensibilité au nombre d'observations, ni au bruit, signifiant que le poids de l'IAP2 dans la fonction coût est nettement supérieur à celui des observations.

d. Importance de la bonne connaissance de l'IAP

Nous proposons dans cette partie de distinguer les trois niveaux d'IAP étudiés. Par rapport aux expériences choisies, ces trois niveaux correspondent à la connaissance que l'on estime avoir de l'IAP :

- aucune idée *a priori* des valeurs des paramètres optimaux : exp. 4, 5, 7 ;
- une simple connaissance des intervalles de définition des paramètres (IAP1) : exp. 3, 6, 8 ;
- ou une très bonne connaissance *a priori* de la solution (IAP2) : exp. 1, 2.

Les valeurs des paramètres estimés sont toutes récapitulées Tab. 4.13.

⇝ pas d'IAP

Les expériences 5 et 7 avec 23 observations non bruitées et bruitées de 10% convergent vers un vecteur de paramètres optimaux très proche de la solution θ_{obs}. Lorsque l'on diminue le nombre d'observations assimilées à 5 (exp. 4), l'identification des paramètres aboutit tout de même à des valeurs réalistes, avec une assez bonne estimation du LAI (RMSE de 0.18). Les bonnes performances sur la description de la dynamique du LAI s'expliquent par une répartition homogène des observations sur le cycle et l'absence d'IAP. L'erreur sur l'identification des paramètres, quant à elle, est beaucoup plus importante, et augmente avec le bruit généré sur les observations. Cependant, on est assuré, quelle que soit l'initialisation de l'algorithme, que

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 0	IAP 2				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.1)**	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	**0.00**
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 2				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.2)**	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	**0.00**
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 1	IAP 2				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.3)**	1.00	1499	801	0.00201	7.2	0.05500	**0.07**
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 1	sans IAP				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.4)**	0.05	1556	731	0.00177	7.7	0.06803	**0.18**
	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	0.84	1548	703	0.00187	11.4	0.09252	
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 0	sans IAP				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.5)**	0.05	1551	703	0.00187	11.7	0.09452	**0.03**
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 1				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.6)**	1.00	1487	787	0.00208	9.5	0.05502	**0.16**
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 1	sans IAP				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.7)**	0.05	1527	727	0.00191	10.8	0.02784	**0.10**
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 1				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.8)**	1.00	1483	790	0.00205	9.8	0.05498	**0.23**

TAB. 4.13 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour les 8 expériences, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit :* bruit 1 *signifie que les observations sont bruitées,* bruit 0 *signifie qu'elles sont parfaites.*

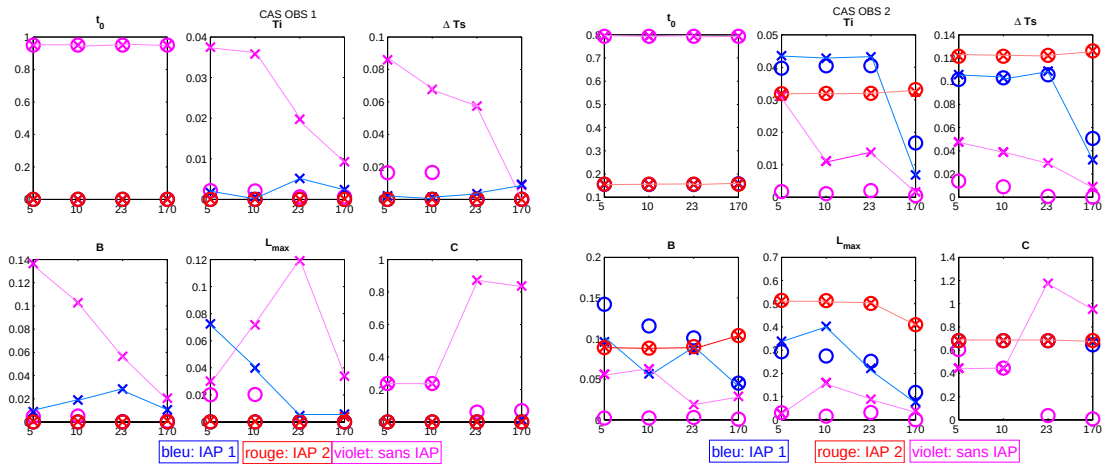

FIG. 4.36 – *Résidus relatifs des paramètres estimés par rapport aux paramètres "solutions", en fonction du nombre d'observations assimilées, pour 3 types de variance a priori : bleu : IAP1 ; rouge : IAP2 ; magenta : sans IAP. Les ronds représentent les cas où les observations sont non bruitées, les croix ceux où elles sont bruitées.*

le paramètre le plus influent L_{max} est très bien identifié (représentation des distributions Fig. 4.19).

⇝ **IAP limitée à la connaissance des intervalles de définition des paramètres**

L'expérience 6 tend à converger vers les valeurs *a priori* des paramètres, augmentant également la RMSE du LAI (jusqu'a 0.30). Cependant, les LAI simulés avec les paramètres estimés utilisant cette IAP moyenne suivent des courbes similaires aux observations et donc encore très satisfaisantes en terme d'estimation du LAI (exp.6 : Fig. 4.25 et exp.8 : Fig. 4.27). Si l'on diminue le nombre d'observations que l'on bruite, on perd très peu de précision sur l'estimation des paramètres, et on obtient une RMSE sur les LAI de 0.2 maximum, ce qui reste satisfaisant (exp. 3 : Fig. 4.22 ; Tab. D.2).

⇝ **Très bonne connaissance de l'IAP**

Lorsque l'on donne pour IAP la solution $\theta_{ap} = \theta_{obs}$, c'est-à-dire que l'on a une très bonne estimation **au départ** des valeurs des paramètres, il convient de mettre un lourd poids au terme de l'IAP dans la fonction coût, comme le montrent les expériences 1 et 2, où la RMSE du LAI est de 0, et l'identification des paramètres est parfaite avec l'IAP2 (Tab. 4.13). On remarque Tab. D.3 que le fait d'utiliser 170 observations, ou seulement 5 ne change pas du tout la qualité de l'identification des paramètres, cela rajoute seulement un bruit visible sur la RMSE du LAI.

Remarque 22.
Une IAP très contraignante mais mal connue force totalement l'optimiseur à converger vers des valeurs proches de celles a priori comme on le voit Tab. *D.6. Cependant, même dans ce cas, si les paramètres estimés sont très proches de l'IAP, la RMSE du LAI n'est pas aussi importante qu'on pourrait le craindre (moins de 1). Ceci est dû au hasard : les θ_{obs} choisis aléatoirement ont simulé un vecteur d'observations LAI_{obs} assez proche du LAI a priori. En effet, les résultats d'assimilation sur un troisième jeu d'observations* Tab. *D.7, où les θ_{obs} sont encore choisis aléatoirement, montrent que l'on obtient des RMSE plus importantes : jusqu'à* 1.38 *avec 5 observations.*

e. Conclusion

Logiquement, une bonne connaissance de l'IAP, et sa bonne pondération dans la fonction coût aboutissent aux meilleures estimations et à une vitesse de convergence optimale. Toutefois, même avec peu d'observations bien réparties, et en l'absence d'IAP, la plupart des paramètres sont relativement bien identifiés. Ceci provient sans doute du fait que les observations, même bruitées de 10%, restent très cohérentes avec le modèle et l'optimisateur trouve ainsi des combinaisons optimales *et* réalistes.

Les expériences jumelles permettent de cadrer de manière assez aisée les conditions d'assimilation idéales en termes d'information *a priori*, de nombre d'observations, dans les cas où l'on considère une erreur sur les observations ou non. On pourrait encore effectuer diverses expériences sur la répartition des observations dans le temps, par exemple. Ainsi, la compréhension de la méthode, de ses besoins en terme d'observations, et enfin la possibilité d'évaluer la qualité des résultats d'assimilation sont des avantages des expériences jumelles que l'on ne peut dénigrer. Cependant, l'esprit de l'assimilation de données réside tout de même à l'origine dans l'exploitation des observations *réelles* associées à d'autres types d'information pour améliorer la simulation d'un modèle et l'identification de ses paramètres. S'il n'est pas possible pour toutes les études en assimilation d'acquérir des mesures réelles, dans notre cas la base ADAM fournit les données agronomiques suffisantes pour passer à cette nouvelle étape d'assimilation, en utilisant des observations réelles.

4.4.2 Assimilation de pseudo-observations de télédétection de la base ADAM

Dans cette section, les paramètres du modèle BONSAÏ seront ajustés sur les valeurs de LAI estimées par **inversion du modèle de transfert radiatif**, plutôt que déduites du NDVI. En effet, comme vu précédemment, le LAI déduit du NDVI est moins bien estimé que celui issu de l'inversion

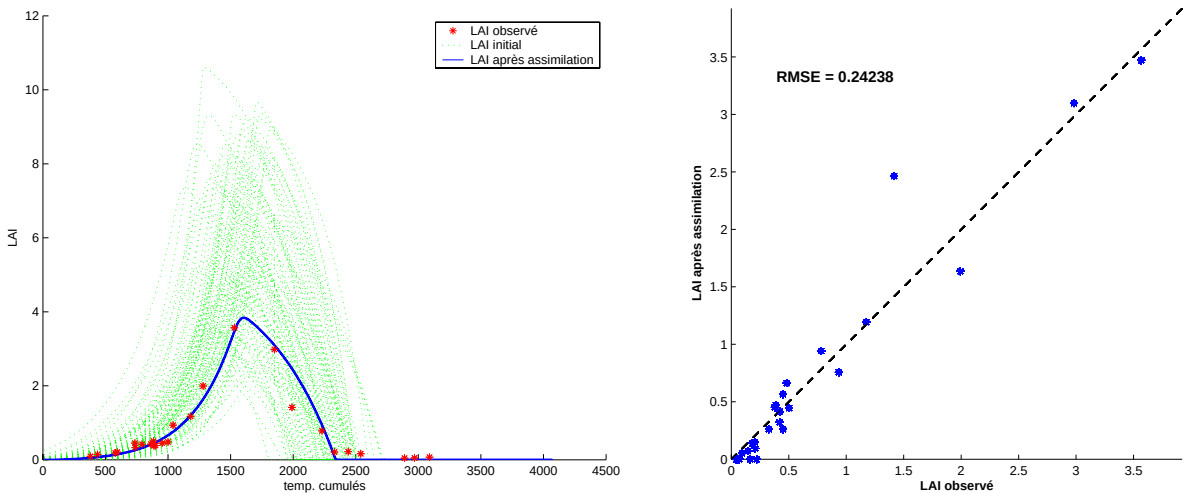

FIG. 4.37 – *Assimilation avec 100 initialisations différentes : LAI estimé après assimilation, LAI observé, et LAI initial, en fonction de la somme de températures (à gauche) pour les 100 situations ; comparaison entre LAI observés et simulés et RMSE (à droite).*

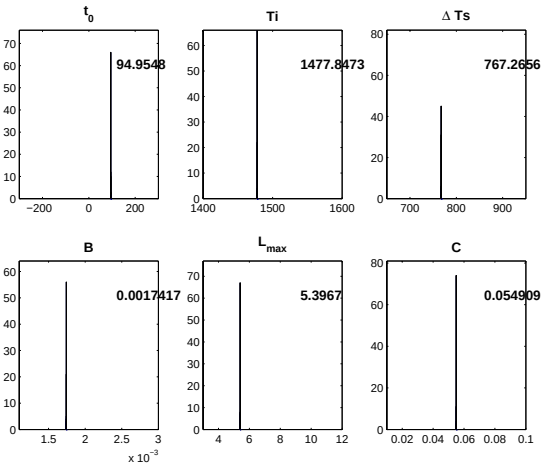

FIG. 4.38 – *Distribution des estimations de paramètres sur* 100 *initialisations.*

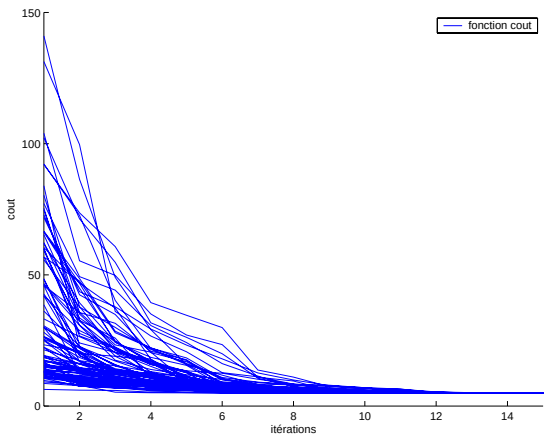

FIG. 4.39 – *Convergence de la fonction coût dans les* 100 *cas d'initialisations.*

en début et fin de cycle, périodes importantes pour l'identification des paramètres de BONSAÏ. De plus, les pseudo-observations de LAI sont celles provenant de la "grande" base de données de 253 échantillons prélevés sur l'image 4.8, qui nous permettra d'accéder à une plus grande variabilité de situations que la base initiale de 40 unités.

L'assimilation aura lieu sur différents jeux d'observations : tout d'abord les 23 dates SPOT, puis un choix de 4 observations réparties sur l'ensemble du cycle, afin de comprendre l'influence du nombre d'observations de la variable d'état dans le processus d'assimilation. Notons que les résultats obtenus avec notre méthode variationnelle ont été comparés à ceux de méthodes stochastiques (Lauvernet et al. [161]) et montrent une très bonne cohérence. Ceci constitue donc une sorte de validation de notre mise en œuvre de l'assimilation variationnelle.

a. Choix de la fonction coût, de l'IAP, et du préconditionnement

La fonction coût utilisée représente l'écart des valeurs de LAI simulées et observées, ainsi que l'information *a priori* :

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\|LAI(i) - LAI_{obs}(i)\|^2}{\sigma_{LAI_i}^2} + \sum_{k=1}^{M} \frac{\|\theta(k) - \theta_0(k)\|^2}{\sigma_{\theta_k}^2} \tag{4.5}$$

où :
- N est le nombre d'observations assimilées,
- LAI est l'indice foliaire simulé par le modèle,
- LAI_{obs} est l'indice foliaire observé,
- θ est le vecteur de paramètres, de dimension M,
- θ_0 est le vecteur d'IAP choisie sur les paramètres,
- $(\sigma_{LAI_i})_{i=1,\dots N}$ est la variance de l'erreur associée à l'estimation du LAI par inversion du modèle de transfert radiatif,
- $(\sigma_{\theta k})_{k=1,\dots M}$ est la variance associée à l'IAP.

La variance *a priori* $(\sigma_{\theta k})_{k=1,\dots M}$ a été fixée aux valeurs de l'IAP1 proposée Tab. 4.3, les expériences jumelles ayant démontré que l'IAP joue un rôle important dans la vitesse de convergence, et que l'IAP2 (plus contraignante) influe trop sur les estimations de paramètres. La variance $(\sigma_{LAI_i})_{i=1,\dots N}$ a été ajoutée par rapport à la section précédente puisqu'on n'y utilisait pas d'inversion du modèle de transfert radiatif. Il est important de prendre en compte cette erreur supplémentaire sur les pseudo-observations.

Enfin, le Hessien a été préconditionné par un changement de variable du même type que précédemment, puisque les expériences jumelles ont permis de valider la pertinence de ce choix.

b. Assimilation de 23 observations de LAI

Afin de vérifier la robustesse de l'identification des paramètres vis à vis de la solution initiale, nous avons réalisé, sur chaque pixel, 100 assimilations correspondant à 100 combinaisons de valeurs initiales des paramètres, tirées selon une loi uniforme sur le domaine de définition. Les résultats montrent que les valeurs de paramètres estimés sont pratiquement insensibles au vecteur de paramètres initiaux (Fig. 4.37 - Fig. 4.38). De plus, le nombre d'itérations à la convergence est très stable, puisque l'algorithme converge vers le minimum des fonctions coût en général en moins de 12 itérations, que la solution soit très proche ou très éloignée du vecteur initial (Fig. 4.39).

D'un point de vue général, les résultats d'assimilation sur les 253 échantillons (Fig. 4.40) montrent que les valeurs de LAI simulées par BONSAÏ à partir des 6 paramètres estimés sur les 23 observations après assimilation sont très proches des observations jusqu'à la sénescence, avec une RMSE de 0.35. Toutefois, on observe souvent en fin du cycle une légère sous-estimation, bien qu'il y ait un certain nombre d'observations pendant ce stade. La figure 4.40 de gauche montre sur certaines unités des problèmes en début de croissance qui correspondent à la période hivernale pour laquelle la somme de température n'évolue que très peu (température moyenne proche de zéro). Pendant cette période, le LAI est également relativement stable et les erreurs d'estimation du LAI

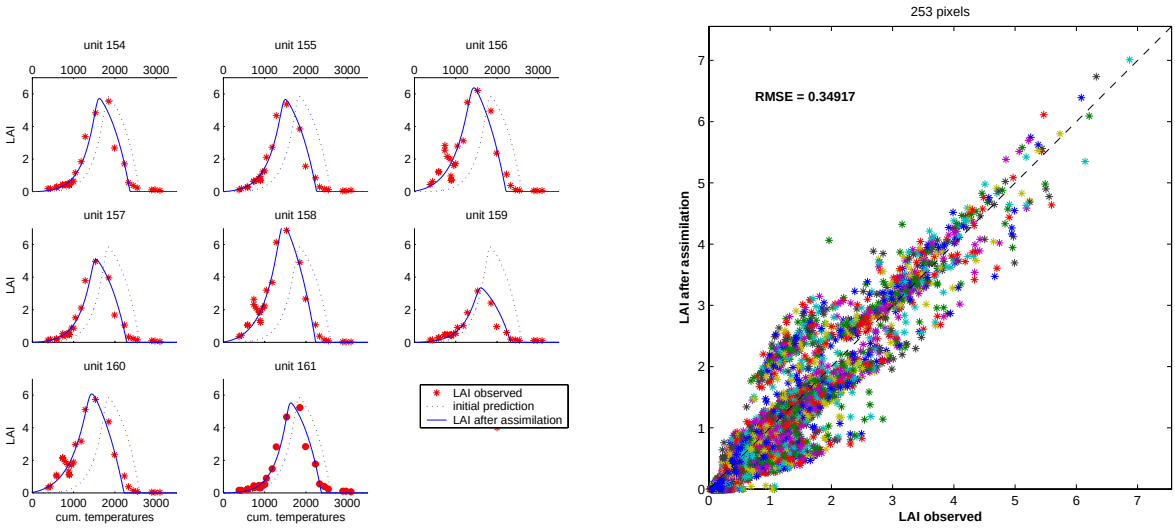

FIG. 4.40 – *Assimilation (avec estimation de C) de 23 observations de LAI : courbes du LAI initial, observé et simulé en fonction des températures cumulées, pixels 154 à 161 (à gauche) ; comparaison des observés et simulés et RMSE sur l'ensemble des 253 pixels (à droite). Estimation de 6 paramètres.*

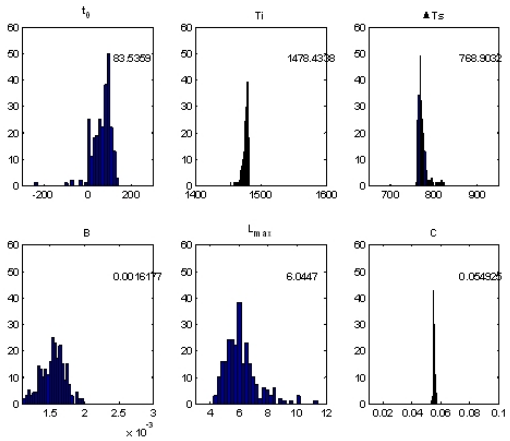

FIG. 4.41 – *Distribution des paramètres estimés sur les 253 pixels.*

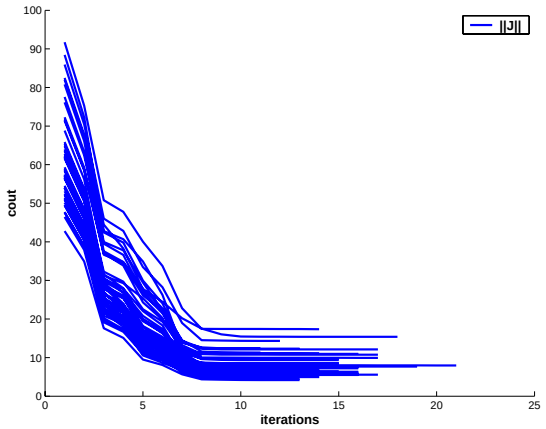

FIG. 4.42 – *Convergence de la fonction coût vers son minimum sur les 253 pixels.*

sont alors extériorisées. Les valeurs estimées du paramètre C restent en grande partie égales à leur valeur de départ (Fig. 4.41), confirmant les résultats de l'analyse de sensibilité précédente. Enfin, la convergence a lieu en moyenne en 17 itérations.

c. Assimilation de 4 observations

Dans cette partie, l'assimilation n'est effectuée que sur 4 observations bien réparties dans le cycle : début, maximum de croissance, milieu de sénescence et enfin phase finale.

De manière générale, on peut estimer que les résultats sont relativement satisfaisants, puisque sur les 253 pixels, la RMSE est assez faible, et la dynamique de LAI simulée après assimilation est réaliste et proche des observations non assimilées (Fig. 4.43) : les RMSE entre les valeurs de LAI simulées et observées sur l'ensemble des pixels sont de 0.66 par rapport aux 4 observations assimilées, et de 0.53 par rapport aux 23 observations du cycle. On peut également remarquer que le fait de n'assimiler que 4 observations ne perturbe pas le minimiseur en terme de convergence puisque la fonction coût atteint son minimum en moins de 12 itérations, comme pour 23 observations.

Cependant, on observe que si les grandes valeurs de LAI sont bien retrouvées par l'assimilation, les valeurs plus faibles (début et fin de cycle) sont plutôt mal simulées et subissent un biais spectaculaire (Fig. 4.43, figure de droite). En particulier, les observations très nombreuses dans la phase de croissance du LAI ne sont pas retrouvées précisément en n'assimilant qu'une seule observation dans cette phase du LAI (typiquement sur les unités 156, 158, et 160). A première vue, la dynamique de LAI simulée après assimilation semble très influencée par le vecteur des paramètres initiaux. Pourtant, on constate sur un test de 100 initialisations différentes (Fig. 4.45) que l'algorithme converge toujours aux mêmes valeurs. Il semble donc que la méthode ne parvient pas à assimiler la première observation, mais qu'elle corrige la dynamique du LAI par rapport à la seconde observation (située au LAI maximal) en ajustant quasiment uniquement le paramètre L_{max} (Fig. 4.44). On se trouve donc dans un système sous-déterminé, un problème mal posé pour reproduire l'ensemble de la dynamique du LAI et estimer chacun des paramètres. Cette situation se dégrade bien sûr si l'on n'assimile que 3 observations : les dynamiques simulées ne présentent plus une évolution "typique" de LAI.

d. Conclusion

L'assimilation d'observations de la base ADAM dans BONSAÏ utilisant le modèle adjoint a pu être mise en œuvre et a permis d'obtenir, sur les 253 échantillons testés, une RMSE sur le LAI satisfaisante, avec un faible coût de calcul et une estimation convergente et réaliste des paramètres. Le test avec 100 initialisations de l'algorithme a également révélé une certaine robustesse dans la recherche du minimum global. Cependant, une plus faible quantité d'observations assimilées a engendré une relative dégradation de la RMSE sur le LAI et mis en évidence de fortes difficultés à estimer chacun des paramètres du fait d'un problème sous-déterminé.

4.4.3 Amélioration de l'estimation de biomasse par assimilation du LAI

L'objectif de cette dernière étape du travail est d'évaluer l'intérêt d'assimiler des observations de LAI pour prédire la biomasse finale. Les agronomes sont particulièrement concernés par ce type de problème puisque, de manière générale, les variables qu'ils souhaitent diagnostiquer ou pronostiquer ne peuvent être observées par télédétection. Il nous a donc semblé intéressant d'étudier la difficulté de travailler sur des variables d'intérêt qui ne sont pas assimilées. Pour ce faire, nous utiliserons le modèle BONSAÏ-BIO (§ 3.2.1) qui simule la biomasse. Rappelons que BONSAÏ-BIO est constitué du modèle de dynamique de LAI BONSAÏ, et d'un module de production basé sur une approche par efficience de conversion du rayonnement photosynthétiquement actif absorbé par le couvert en biomasse.

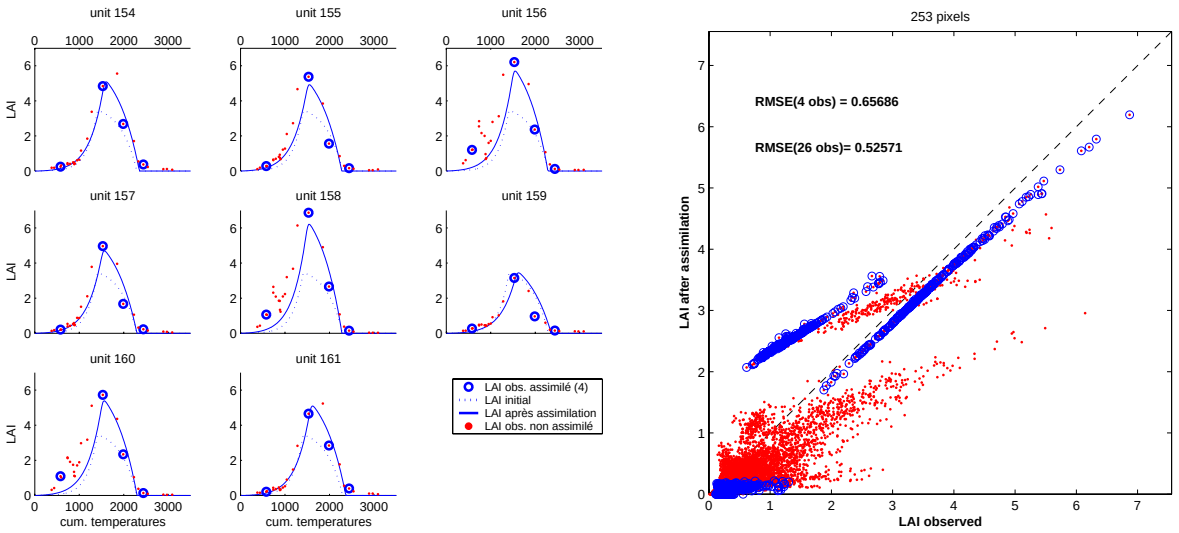

FIG. 4.43 – *Assimilation de 4 observations : courbes du LAI initial (un exemple aléatoire), observé et simulé en fonction des températures cumulées, pixels 154 à 161 (à gauche) ; comparaison des observés et simulés et RMSE par rapport aux 4 obs. et par rapport aux 23 obs. sur l'ensemble des 253 pixels (à droite). Les 4 obs. de LAI assimilées sont entourées d'un cercle bleu.*

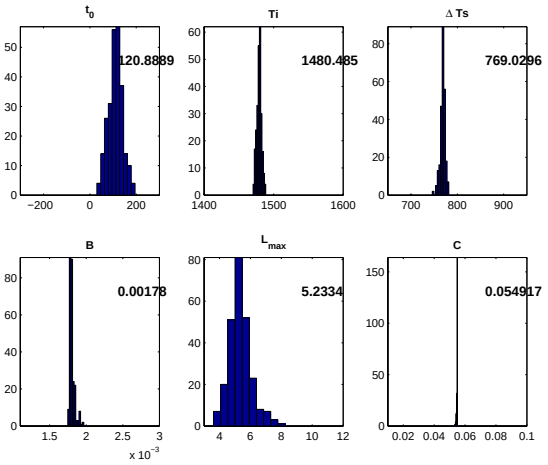

FIG. 4.44 – *Distributions des paramètres estimés par assimilation de 4 obs. sur les 253 pixels.*

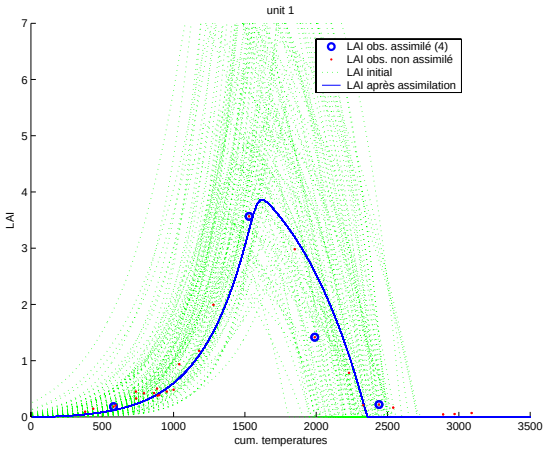

FIG. 4.45 – *Exemple de résultats d'assimilation de 4 observations sur une unité à partir de 100 initialisations différentes des paramètres. L'algorithme converge dans tous les cas vers la même solution.*

a. Les scénarios étudiés

Dans le modèle BONSAÏ-BIO, le paramètre Ei_{max} apparaît sous forme de produit avec le paramètre E_b. L'analyse de sensibilité (§ 4.3) a confirmé que ces deux paramètres ne sont pas identifiables indépendamment. Compte tenu de la relativement bonne connaissance sur le coefficient d'extinction K, nous avons donc choisi de n'ajuster que le paramètre E_b, et de fixer les paramètres $Eimax$ à 0.945 et K à 0.7.

Nous nous proposons de comparer 3 scénarios à la valeur de production obtenue à partir des paramètres *a priori* (fixes) de BONSAÏ-BIO :

- valeurs de LAI simulées par BONSAÏ à partir des valeurs *a priori* des paramètres et ajustement de E_b ;
- valeurs de LAI simulées par BONSAÏ après assimilation de quelques observations de LAI et valeur *a priori* de E_b ;
- valeurs de LAI simulées par BONSAÏ après assimilation de quelques observations de LAI et ajustement de E_b.

Nous discuterons dans un premier temps de l'intérêt de l'IAP lors de l'assimilation des observations de LAI dans BONSAÏ.

b. Les données utilisées

L'expérimentation ADAM décrite précédemment sera utilisée. Toutefois, l'homogénéité des dates de semis réduit la variabilité de la dynamique du LAI. Afin d'accroître cette variabilité, nous allons également utiliser les données d'une autre expérimentation réalisée en Camargue en 1986-1987 (Guérif and Delécolle [115]). L'ajout de cette deuxième expérimentation offre l'avantage de représenter d'autres conditions climatiques qui peuvent influencer les valeurs d'efficience E_b. La base Camargue est constituée de deux groupes de 5 parcelles de blé, "semis précoce" et "semis tardif". Dans cette base, les valeurs de LAI ont été estimées à partir d'une régression avec des mesures de réflectance au sol, à raison de 11 à 13 données par parcelles réparties le long du cycle. Par souci d'homogénéité entre les deux expérimentations, nous allons donc également assimiler les valeurs de LAI estimées par **régression** dans l'expérimentation ADAM (cf Fig. 4.2). Par ailleurs, l'utilisation de la régression assure une meilleure précision du LAI, importante pour la détermination de la production.

c. L'information *a priori*

Deux cas seront étudiés en fonction de l'utilisation de l'information *a priori* . La fonction coût s'écrit de manière générale selon l'équation suivante :

$$J(\theta_{est}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{|LAI(i) - LAI_{obs}(i)|^2}{{\sigma_{LAI}}^2} + \beta \frac{\|\theta_{est} - \theta_{ap}\|^2}{{\sigma_{ap}}^2}$$

avec les mêmes paramètres que dans l'équation (4.5). La valeur du coefficient détermine la prise en compte ou non de l'IAP :

$\cdot\beta = 0 \Rightarrow$ pas d'information *a priori* utilisée

$\cdot\beta = 1 \Rightarrow$ information *a priori* exploitée

Les valeurs *a priori* des paramètres pour le LAI sont les mêmes que ceux présentés précédemment (Tab. 4.3). Pour le paramètre relatif au calcul de la biomasse Eb, on rappelle les valeurs que nous utiliserons, qui sont tirées de la littérature (Tab. 4.14).

paramètre	min	;	max	moy
E_b	0.9	;	2.8	1.85

Tab. 4.14 – *Intervalle de définition du paramètre d'efficience Eb pour le calcul de la biomasse.*

d. Rôle de l'IAP dans l'assimilation dans BONSAÏ

Les résultats d'assimilation des données Camargue (Fig. 4.46) confirment que la prise en compte de l'IAP dégrade (si l'on considère uniquement le critère sur le LAI) légèrement les performances de l'estimation du LAI sur l'ensemble des observations utilisées dans l'assimilation, avec une RMSE de 0.21 contre 0.23. Le même phénomène est observé sur la base ADAM (Fig. 4.47) : RMSE=0.137 sans IAP, RMSE=0.189 avec IAP. On observe toutefois de meilleures performances globales d'estimation de la dynamique du LAI.

Dans le cadre de l'estimation de la production par le modèle BONSAÏ-BIO, l'ensemble des valeurs de LAI au cours du cycle sont utilisées. L'IAP devant améliorer l'estimation des paramètres de BONSAÏ, on peut supposer qu'elle conduira à une amélioration de l'estimation du LAI sur l'ensemble du cycle. Nous nous proposons donc d'évaluer l'influence de l'IAP dans l'estimation de biomasse en considérant les cas où $\beta = 0$ (sans IAP) et $\beta = 1$ (avec IAP).

e. Estimation de la biomasse

- **Valeurs *a priori* fixes pour BONSAÏ et E_b.**
  Dans ce cas le plus simple, aucun ajustement des paramètres n'est réalisé, les paramètres étant fixés à leur valeur *a priori*. L'erreur sur la biomasse produite est d'environ 200 (Camargue) et 260 $g.m^-2$ (ADAM), soit entre 12 et 20% de la biomasse finale (Tab. 4.15 ; Tab. 4.16).
- **Ajustement de E_b sans assimilation dans BONSAÏ.**
  L'ajustement de E_b a été réalisé en le faisant varier entre 1.5 et 2.5 $g.MJ^{-1}$ et en sélectionnant la valeur fournissant le plus faible RMSE sur la biomasse finale. Pour prendre en compte les conditions différentes entre les expérimentations Camargue et ADAM, l'ajustement de E_b a été réalisé de manière indépendante. Les résultats montrent que l'erreur en terme de RMSE sur la biomasse finale n'a pas été diminuée de manière significative. En effet, les valeurs de E_b *a priori* étaient, par (mal)chance, très proches des valeurs optimales.
- **Assimilation dans BONSAÏ et valeur *a priori* de E_b.**
  On constate que les performances de l'estimation se dégradent légèrement : RMSE=230 $g.m^-2$ pour Camargue (Fig. 4.48) et RMSE=275 $g.m^-2$ pour ADAM (Fig. 4.49). On perd ici une certaine cohérence entre la dynamique du LAI et E_b. Il faut donc ajuster la valeur de E_b pour améliorer les performances globales de la méthode.
- **Assimilation dans BONSAÏ et ajustement de E_b**
  Dans ce cas, on observe une légère amélioration de la précision de l'estimation de la biomasse finale de l'ordre de 35 $g.m^{-2}$. Les valeurs de E_b sont par contre assez différentes de celles *a priori*, avec une variation de l'ordre de 15%.

L'utilisation de l'information *a priori* lors de l'assimilation de LAI dans BONSAÏ ne provoque qu'un effet mineur sur l'estimation de la biomasse finale, qui s'en trouve en général légèrement dégradée. Ceci peut s'expliquer par le nombre important d'observations rendant l'influence de l'IAP faible. De plus, l'IAP tend ici à dégrader les performances de simulation de la dynamique du LAI, les valeurs *a priori* des paramètres de BONSAÏ n'étant pas nécessairement proches des valeurs vraies et le modèle étant lui-même entaché d'erreur.

4.4.4 Conclusion

La très forte sensibilité de la MST au paramètre E_b (ou au produit $E_b \cdot Ei_{max}$) met en évidence que l'on ne peut pas espérer améliorer la prévision du rendement par l'assimilation du LAI sans le prendre en compte et l'estimer.

Dans cet exercice, nous avons considéré que la valeur de E_b était la même à l'intérieur de chacune des expérimentations. Cette hypothèse n'est pas vérifiée comme l'attestent les figures 4.50, qui montre que les valeurs de E_b sur les unités ADAM peuvent varier d'une parcelle à une autre

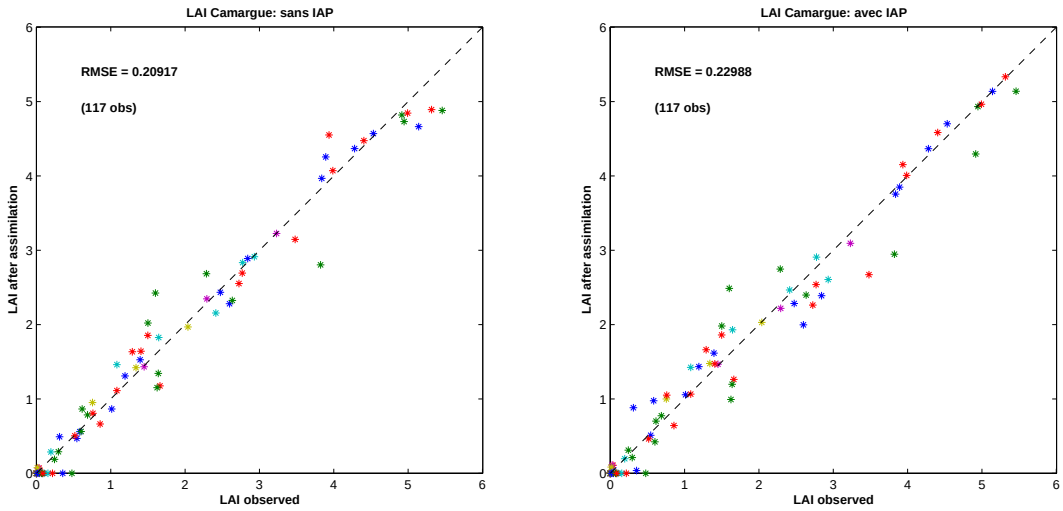

Fig. 4.46 – *Comparaison des LAI observés et assimilés sur les 10 unités* ***Camargue*** *: fonction coût sans IAP (à gauche) et avec IAP (à droite).*

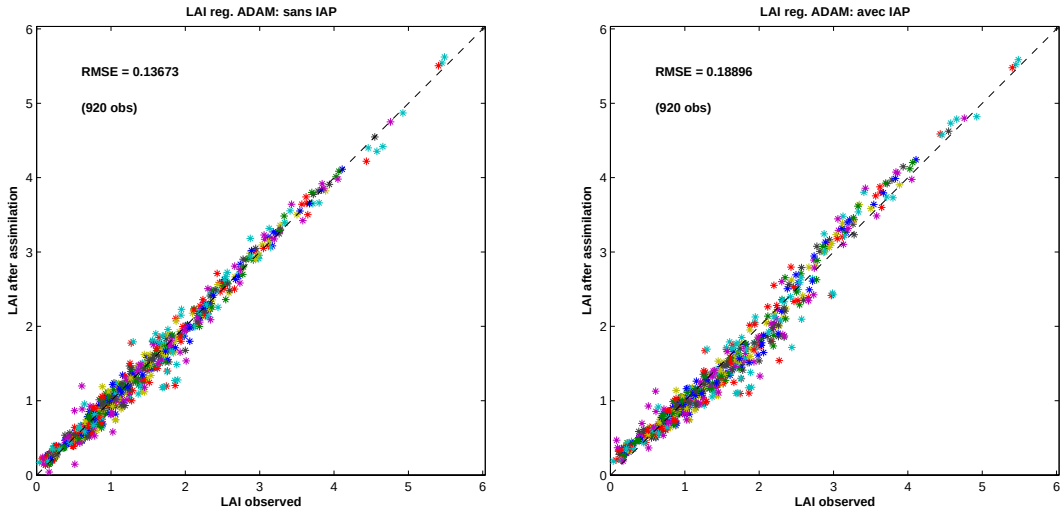

Fig. 4.47 – *Comparaison des LAI observés et assimilés sur les 40 unités* ***ADAM*** *: fonction coût sans IAP (à gauche) et avec IAP (à droite).*

LAI / E_b	$\beta = 0$			$\beta = 1$		
	E_b	*a priori*	assimilé	E_b	*a priori*	assimilé
a priori	1.85	205.34	261.44	1.85	205.34	251.55
ajusté/IAP	1.9	**200.22**	238.08	1.9	**200.22**	230.36
ajusté/assim.	2.15	260.96	**169.20**	2.1	239.53	**182.33**

Tab. 4.15 – *RMSE sur la MST obtenues avec le LAI Camargue provenant des valeurs a priori (colonne a priori), ou le LAI assimilé (colonne assimilé) ; avec les valeurs de E_b a priori (première ligne), ou ajustée par rapport aux résultats a priori (deuxième ligne), ou encore ajustée par rapport aux résultats après assimilation. $\beta = 0$ signifie que les LAI ont été assimilées sans IAP, et $\beta = 1$ avec IAP. $Ei_{max} = 0.945$ et $K = 0.7$.*

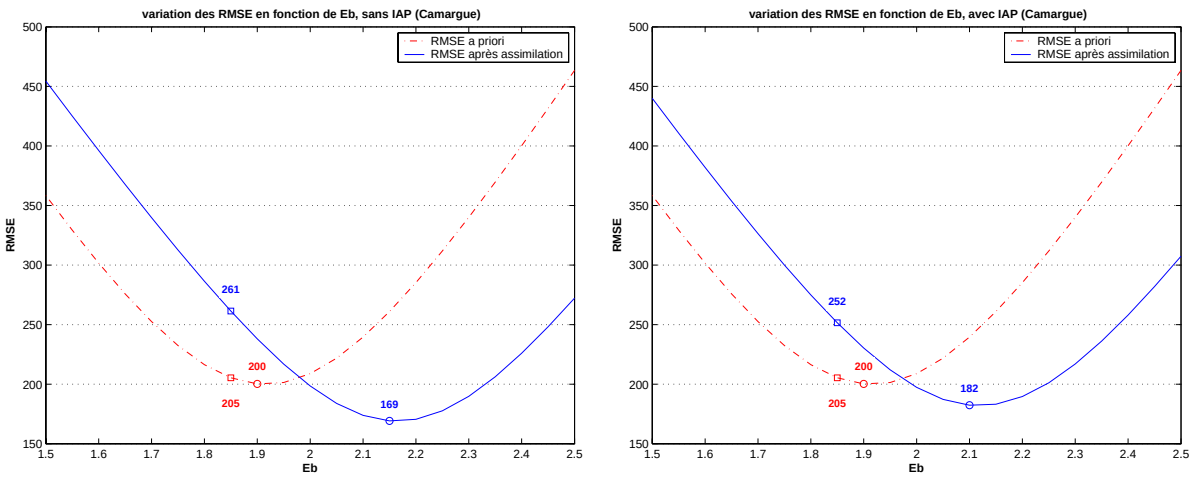

FIG. 4.48 – *RMSE sur la MST en fonction de la valeur de E_b, avec valeurs a priori du LAI Camargue en pointillés rouges et après assimilation du LAI en bleu : sans IAP à gauche et avec IAP à droite. $Ei_{max} = 0.945$ et $K = 0.7$.*

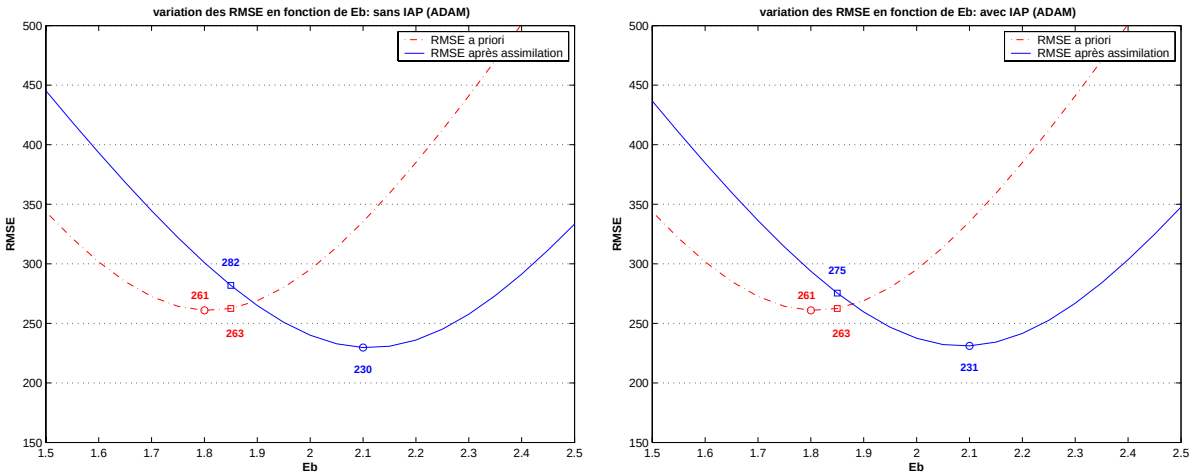

FIG. 4.49 – *RMSE sur la MST en fonction de la valeur de E_b, avec valeurs a priori du LAI ADAM en pointillés rouges et après assimilation du LAI en bleu : sans IAP à gauche et avec IAP à droite. $Ei_{max} = 0.945$ et $K = 0.7$.*

LAI / E_b	$\beta = 0$			$\beta = 1$		
	E_b	*a priori*	assimilé	E_b	*a priori*	assimilé
a priori	1.85	262.52	281.86	1.85	262.52	275.38
ajusté/IAP	1.8	**260.93**	301.01	1.8	**260.93**	293.74
ajusté/assim.	2.1	335.33	**229.73**	2.1	335.33	**231.10**

TAB. 4.16 – *RMSE sur la MST obtenues avec le LAI ADAM provenant des valeurs a priori (colonne a priori), ou le LAI assimilé (colonne assimilé) ; avec les valeurs de E_b a priori (première ligne), ou ajustée par rapport aux résultats a priori (deuxième ligne), ou encore ajustée par rapport aux résultats après assimilation. $\beta = 0$ signifie que les LAI ont été assimilées sans IAP, et $\beta = 1$ avec IAP. $Ei_{max} = 0.945$ et $K = 0.7$.*

de plus de 75% ! Pour prendre en compte cette importante source de variabilité de la biomasse, il faudrait donc modéliser les différents facteurs de stress qui jouent au niveau de chacune des parcelles en fonction, en particulier des caractéristiques du sol. C'est ce que tentent de faire les modèles de fonctionnement du couvert tels que STICS. Ces modèles permettent de plus de décrire la variabilité temporelle de E_b. Une autre approche consisterait à analyser les possibles relations entre l'expression des stress au travers de la dynamique du LAI, et de E_b. La figure 4.51 montre que sur les expérimentations Camargue et ADAM, une corrélation entre les paramètres E_b et L_{max} n'est cependant pas évidente.

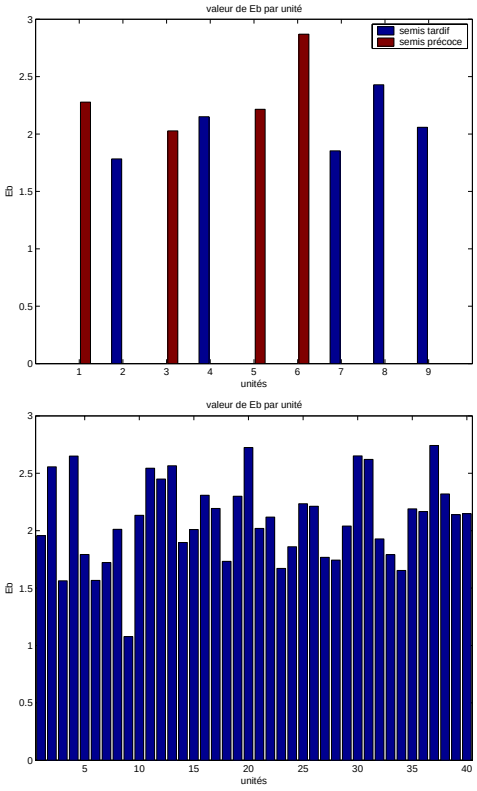

Fig. 4.50 – *Valeur de E_b par parcelle pour les bases Camargue et ADAM calculée à partir des valeurs mesurées de biomasse et du rayonnement photosynthétiquement actif absorbé par le couvert.*

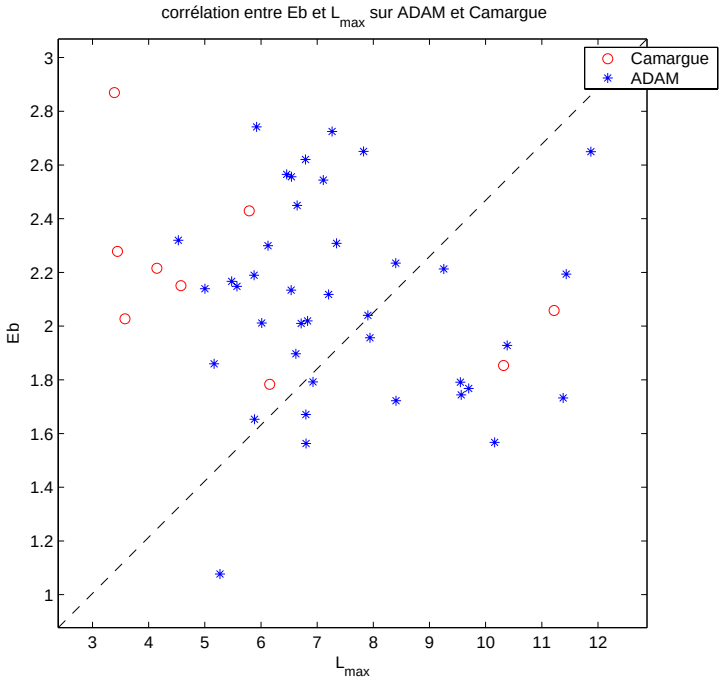

Fig. 4.51 – *Corrélation entre le paramètre d'efficience E_b (calculé) et le LAI maximal L_{max} (estimé par assimilation) sur les parcelles Camargue et ADAM.*

4.5 Conclusion

Ce chapitre est le plus conséquent en matière de résultats, puisqu'il comporte toutes les étapes depuis l'acquisition des données de télédétection jusqu'à la mise en œuvre de la méthode variationnelle d'assimilation utilisant le modèle adjoint. Les principales conclusions que nous pouvons en tirer sont les suivantes :

⇝ **Estimation de variables observables à partir des données de télédétection**

Nous avons choisi de ne pas assimiler les observations de télédétection directement dans le modèle couplé de transfert radiatif et de fonctionnement du couvert pour assurer un certain contrôle des différentes erreurs.

Pour accéder aux pseudo-observations, qui seront ainsi assimilées dans le modèle de fonctionnement, trois méthodes d'estimation du LAI à partir des données de télédétection SPOT de

la base ADAM ont été appliquées et évaluées avec les mesures terrain. La méthode d'inversion de modèle de transfert radiatif a été choisie pour sa meilleure représentativité du LAI aux périodes du cycle les plus importantes en terme de sensibilité aux paramètres. C'est d'autre part la méthode qui ne nécessite pas d'étalonnage particulier et repose sur notre connaissance des processus physiques du transfert radiatif.

Toutefois, on note un biais temporel dans la restitution du LAI pour les méthodes basées sur le NDVI et l'inversion du modèle de transfert radiatif, qui peut être dû à :

- **une initialisation particulière.** Dans le cadre de l'inversion du MTR, l'algorithme d'optimisation a été initialisé aux valeurs calculées par le NDVI, ce qui pourrait expliquer la similarité des erreurs. Toutefois, la faible sensibilité à l'information *a priori* tendrait à prouver que ce n'est sans doute pas l'explication la plus probable. Pour le vérifier, il faudrait tester d'autres valeurs initiales du LAI.
- **l'adéquation du modèle.** À la fois pour l'estimation basée sur le NDVI et pour l'inversion du MTR, le même modèle est utilisé sur tout le cycle. Pourtant, des variations significatives de structure peuvent apparaître, en particulier de part et d'autre du maximum d'indice foliaire. Cette approximation dans la représentation de la structure dans les modèles LAI-NDVI et MTR constituerait une explication plus sérieuse. Il faudrait donc envisager d'avoir une description différente suivant la partie du cycle considérée.

⇝ **Analyse de sensibilité du LAI et de la biomasse**

Nous avons montré que les modèles adjoints de BONSAÏ et de BONSAÏ-BIO fournis par le différentiateur automatique TAPENADE étaient corrects. Ces modèles adjoints ont permis d'analyser la sensibilité du LAI et de la biomasse aux paramètres, sur l'ensemble du cycle mais également de façon dynamique. Nous avons ainsi pu hiérarchiser l'influence des paramètres et leurs éventuelles interactions et compensations.

⇝ **Assimilation de pseudo-observations de LAI dans le modèle BONSAÏ**

La méthode d'assimilation dans BONSAÏ a tout d'abord été appliquée avec des expériences jumelles, puis aux pseudo-observations de LAI provenant de la base ADAM.

Les deux applications d'assimilation de données, dans un cadre virtuel et dans un cadre réel sur plusieurs quantités d'observations assimilées ont notamment permis d'établir des conclusions sur l'importance du terme d'information *a priori* . Celui-ci, s'il est défini de façon assez générale avec un poids moyen, ne joue pas un rôle indispensable quand une grande quantité d'observations est disponible (jusqu'à 23 observations sur tout le cycle). En revanche, il ajoute une certaine robustesse lorsque l'on diminue le nombre d'observations assimilées, en particulier dans les expériences jumelles. Pourtant, on observe que sur une quantité d'observations *réelles* trop faible, la méthode ne parvient plus à reproduire la dynamique du LAI et à estimer chacun des paramètres.

Enfin, nous avons proposé une dernière application de l'assimilation de données de LAI dans BONSAÏ-BIO en étudiant son intérêt pour la prévision de la biomasse finale. Nous avons constaté que l'assimilation du LAI améliorait peu la simulation de biomasse, du fait de considérer une unique valeur du paramètre d'efficience Eb sur l'ensemble du cycle et sur toutes les parcelles. Il faudrait prendre en compte les facteurs de stress subis par la culture, car ceux-ci modifient l'efficience photosynthétique. Ces facteurs dépendent des conditions environnementales et en particulier des caractéristiques du sol que le modèle BONSAÏ-BIO ne peut représenter.

Ainsi, la question la plus particulièrement ressortie de ce chapitre est celle de la sous-détermination du problème : *comment compenser un manque d'observations ?* L'utilisation de l'information *a priori* sur les paramètres rend la méthode d'assimilation sur chaque pixel plus robuste, mais dans la limite de sa capacité à résoudre un problème mal posé.

L'étape suivante consiste de façon naturelle à considérer le problème d'assimilation d'un point de vue plus ensembliste pour diminuer le nombre de degrés de liberté. Nous proposons donc d'assimiler un ensemble d'échantillons, en imposant des contraintes spatiales sur les paramètres à estimer.

5

Prise en compte de contraintes spatiales pour l'assimilation de données de télédétection

Sommaire du chapitre

5.1 Introduction . . . 151
5.1.1 Les structures spatiales exploitées . . . 151
5.1.2 Le schéma d'assimilation . . . 152
a. Le modèle MACRO-BONSAÏ . . . 152
b. La fonction coût . . . 152
5.1.3 Les différentes expériences et observations proposées . . . 153
5.2 Évaluation des contraintes spatiales par les expériences jumelles . . . 154
5.2.1 Choix des contraintes et simulation d'observations . . . 154
a. Choix des niveaux de dépendance . . . 154
b. Simulation des observations de LAI . . . 154
c. Calcul de l'adjoint de MACRO-BONSAÏ . . . 156
5.2.2 Évaluation de la méthode sur les valeurs de LAI estimées . . . 156
a. Visualisation spatio-temporelle des résultats sur le LAI . . . 156
b. Comparaison des deux méthodes d'assimilation . . . 156
5.2.3 Évaluation de la méthode sur l'identification des paramètres de MACRO-BONSAÏ . . . 156
5.2.4 Vitesse de convergence de la méthode . . . 160
5.2.5 Conclusion . . . 162
5.3 Extraction des données sur les images de la base ADAM . . . 162
5.3.1 Protocole de l'extraction pour la prise en compte des contraintes spatiales . 162
5.3.2 Création de pseudo-observations de LAI par inversion des réflectances . . . 163
5.3.3 Validation de l'estimation de LAI . . . 164
5.4 Apport des contraintes spatiales pour l'assimilation de données ADAM 165
5.4.1 Choix et mise en place des contraintes spatiales . . . 165
a. Étude des résultats d'assimilation pixel par pixel . . . 165
b. Choix des contraintes spatiales . . . 165
5.4.2 Résultats de l'assimilation avec contraintes spatiales . . . 167
5.4.3 Comparaison des deux méthodes d'assimilation . . . 168
a. Conservation des propriétés spatiales et estimation du LAI . . . 168
b. Identification des paramètres . . . 168
c. Vitesse de convergence . . . 169
d. Influence des paramètres initiaux donnés à l'algorithme de descente . . 169
d.i/ Expérience sur 100 initialisations différentes . . . 169
d.ii/ Conclusion . . . 170
5.4.4 Faible quantité d'observations assimilées . . . 170
5.5 Sensibilité de l'assimilation à la fréquence de revisite . . . 171

5.5.1 Apport des contraintes sur l'estimation du LAI 172
5.5.2 Apport des contraintes sur l'identification des paramètres 172
5.5.3 Conclusion 174
5.6 Synthèse des résultats et perspectives 176
a. Diagnostic de la méthode d'assimilation avec contraintes spatiales . . . 176
b. Fréquence de revisite 176
c. Conclusion et perspectives 176

5.1 Introduction

Lors de la revue des applications de méthodes d'assimilation de données de télédétection dans le domaine agronomique (cf § 1.3.5), ainsi que dans les résultats exposés dans ce manuscrit, on a pu constater que le travail s'effectue de manière générale pixel à pixel. Ceci signifie que, à une date donnée, on considère une observation de LAI sur un pixel (ou une moyenne de pixels proches) que l'on assimile ensuite. Le fait d'estimer les paramètres d'un pixel indépendamment des pixels voisins génère au moins trois critiques :

- on ne prend pas du tout en compte les relations de structures spatiales, alors qu'il n'y a pas forcément indépendance entre les variables décrivant les phénomènes en divers points de l'espace ;
- le problème inverse est certainement mal posé ;
- on répète la même action un très grand nombre de fois, induisant probablement un coût de calcul non optimal.

Dans les problèmes d'inversion de modèles de taille conséquente, le coût de calcul devient un véritable obstacle pour la machine, et le minimiser représente un objectif supplémentaire. Certaines contraintes sont parfois ajoutées afin de conditionner le comportement d'un pixel par celui des pixels alentours pour assurer une cohérence spatiale, mais pas sur les dépendances spatiales des paramètres à identifier. De fait, on peut se poser les questions suivantes :

1. quelles structures spatiales exploiter pour réduire la taille du problème et le rendre inversible ?
2. comment transformer le schéma d'assimilation habituel à un ensemble de pixels ?

Nous allons tenter d'y répondre dans les deux parties suivantes, 5.1.1 et 5.1.2, afin de cadrer le futur travail de ce chapitre entièrement consacré aux contraintes spatiales.

5.1.1 Les structures spatiales exploitées

Dans le but de réduire la taille du problème, le principe proposé dans cette partie consiste à considérer que les paramètres du modèle correspondent chacun à un certain *niveau de dépendance spatiale*. On parlera par exemple de paramètre *variétal* lorsque celui-ci est égal dans tous les cas à la même valeur tant qu'il s'agit de la même variété, avec par exemple les stades phénologiques ou les propriétés des feuilles pour le modèle STICS. A un degré inférieur, certains paramètres dépendent de la *parcelle*, comme les pratiques culturales (voir remarque 23). D'autres paramètres dépendent du *pixel*, tels que les paramètres du sol. Enfin, on pourra, pour affirmer la robustesse de la méthode et réduire l'espace de contrôle, considérer certains paramètres comme fixes sur toutes les parcelles et pour toutes les variétés, comme les paramètres auxquels le modèle montre peu de sensibilité, et, dans le cas de BONSAÏ, les paramètres n'ayant aucune signification physique et dont on ne peut donc décider qu'ils suivent une loi logique quelconque. On les dira *spécifiques* relativement à l'expérience considérée. On résume dans le tableau 5.1 les différents niveaux de dépendance possibles :

paramètres		caractéristique spatiale	exemple de param.
"spécifiques"	$\Rrightarrow$	égaux sur toutes les parcelles	sans signification
variétaux	$\Rrightarrow$	égaux sur les parcelles d'une même variété	stades phénol.
"parcellaires"	$\Rrightarrow$	égaux sur les pixels d'une même parcelle	techn. cult.
"pixellaires"	$\Rrightarrow$	dépendent du pixel	propriétés du sol

Tab. 5.1 – *Proposition de différents niveaux de dépendance spatiale des paramètres d'un modèle avec dans chaque cas un exemple, notamment adapté à BONSAÏ ou STICS.*

Remarque 23.
On propose ici de considérer les pratiques culturales comme constantes sur une parcelle. Pourtant, l'irrigation ne se répartit pas forcément de façon homogène sur la parcelle, en particulier si le terrain est en pente. En fait, pour l'expérimentation ADAM, les terrains sont extrêmement plats, et ont été

très peu irrigués sur ce cycle 2000-2001. Cependant, si des pratiques culturales différentes ont été appliquées de manière connue à une parcelle, on coupera la parcelle en deux parties distinctes.

Remarque 24.
Dans l'ensemble de ce travail, l'expression "contraintes spatiales" *ne signifie pas que l'on impose des contraintes aux pixels en rapport à leur distance ou connectivité les uns aux autres. Elle doit être interprétée comme des contraintes liées par une modélisation des paramètres caractérisée par leur appartenance à des pixels d'une image, avec des effets fixes parcelles, variétaux et des effets locaux relatifs au sol.*

5.1.2 Le schéma d'assimilation

Cette fois, on souhaite répondre à la question : *comment transformer le schéma d'assimilation classique à un ensemble de pixels ?* L'adaptation permettant d'introduire les contraintes spatiales se situe simplement dans les deux personnages principaux de l'assimilation : le **modèle**, et la **fonction coût**.

a. Le modèle MACRO-BONSAÏ

Une fois la caractérisation des propriétés spatiales des paramètres de BONSAÏ déterminée, on peut créer le modèle MACRO-BONSAÏ (représenté par le schéma 5.1), qui consiste en fait à lancer BONSAÏ un certain nombre de fois selon le nombre de pixels, parcelles et variétés que l'on évalue, et en prenant en compte dans leur globalité les contraintes. Pour cela, on considère le LAI comme fonction de trois vecteurs de paramètres : x dépendant de la variété, y de la parcelle, et z du pixel :

$$\text{LAI} = \text{BONSAÏ}(x, y, z)$$

puis, on contraint le vecteur de paramètres x à être constant pour tous pixels de la même variété, et le vecteur de paramètres y à être constant sur une même parcelle. On pourra également ajouter un autre vecteur de paramètres spécifiques à l'expérience si besoin, c'est-à-dire d'une valeur égale partout. Ce "macro-modèle" sera alors dérivé par rapport à l'ensemble de ses paramètres, afin d'obtenir le modèle adjoint permettant de minimiser la fonction coût.

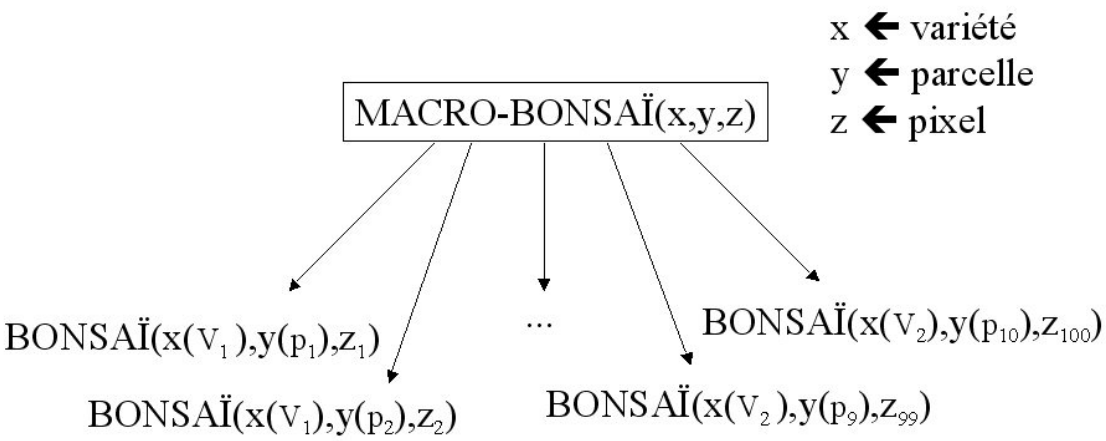

Fig. 5.1 – *Représentation du modèle MACRO-BONSAÏ prenant en compte trois niveaux de dépendance des paramètres de BONSAÏ : la variété, la parcelle, et le pixel.*

b. La fonction coût

La fonction coût J dépend de tous les paramètres de MACRO-BONSAÏ que l'on souhaite identifier. On lui ajoute un terme Bayésien permettant de prendre en compte l'information *a priori* sur

chaque type de paramètres et de régulariser le problème inverse :

$$J(x,y,z) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\|LAI(i) - LAI_{obs}(i)\|^2}{\sigma^2_{LAI}} + \sum_{v=1}^{nbVar} \frac{\|x(v) - x^0(v)\|^2}{\sigma^2_{var}(v)} + \sum_{par=1}^{nbPar} \frac{\|y(par) - y^0(par)\|^2}{\sigma^2_{par}(par)} + \sum_{pix=1}^{nbPix} \frac{\|z(pix) - z^0(pix)\|^2}{\sigma^2_{pix}(pix)}$$

où :

- $nbVar, nbPar, nbPix \in \mathbb{N}$ correspondent respectivement aux quantités de variétés, parcelles, et pixels ; $N \in \mathbb{N}$ est le nombre d'observations total (sur tous les pixels) de LAI ;
- $i \in \{1, \ldots, N\}$, $v \in \{1, \ldots, nbVar\}$, $par \in \{1, \ldots, nbPar\}$, $pix \in \{1, \ldots, nbPix\}$ des indices entiers naturels ;
- $\sigma^2_{LAI} \in \mathbb{R}$ est la variance associée à l'incertitude des pseudo-observations de LAI ;
- $\sigma^2_{var}, \sigma^2_{par}, \sigma^2_{pix}$ sont les variances *a priori* associées respectivement aux paramètres variétaux, parcellaires et pixellaires. Cette information *a priori* reste la même que celle proposée dans la partie 4.2.1, assez générale et offrant un large domaine de définition des paramètres.

Le modèle macro-BONSAÏ devra donc être dérivé par rapport à tous les paramètres de la fonction coût J, c'est-à-dire par rapport à un nombre de $x * nbVar + y * nbPar + z * nbPix$ variables.

5.1.3 Les différentes expériences et observations proposées

Après avoir compris l'application pratique des contraintes spatiales, nous présenterons donc dans ce chapitre, différentes expériences pour les mettre en place.

Si BONSAÏ est un modèle simple et permettant de manier l'adjoint sans obstacles trop handicapants, il a l'inconvénient d'avoir certains paramètres difficilement hiérarchisables par rapport à une dépendance spatiale, et de ne pas posséder vraiment de paramètres variétaux à l'instar de STICS. Par ailleurs, deux variétés (*Dropia* et *Flamura*) sont considérées dans la base ADAM. Ces deux variétés restent très proches et ne se distinguent pas spécialement pour les paramètres de notre modèle. Le risque d'utiliser des données réelles est ainsi de ne pas retrouver de différence de comportement évidente. Nous avons donc décidé d'exploiter les expériences jumelles pour évaluer l'intérêt de l'assimilation avec contraintes spatiales dans un premier temps, sur deux variétés virtuelles. Le tableau 5.2 donne les niveaux de dépendance des paramètres de BONSAÏ pour l'équation du LAI, choisis pour les expériences jumelles.

Le choix des contraintes spatiales imposées aux paramètres a ensuite naturellement évolué vers une adaptation à l'assimilation de données réelles. L'extraction d'observations de la base ADAM est tout d'abord décrite § 5.3, dirigée dans le but d'appliquer les contraintes. L'utilisation d'observations simulées aura permis d'optimiser le choix de nouvelles contraintes spatiales (Tab. 5.5) pour assimiler les données ADAM (§ 5.4).

On proposera enfin dans une dernière partie (§ 5.5) une étude sur l'apport des contraintes pour évaluer l'intérêt de la fréquence de revisite du satellite, en utilisant à nouveau les expériences jumelles et divers scénarios de fréquences temporelles. En effet, la propriété des satellites leur permettant de fournir périodiquement de l'information d'une même région de la Terre est l'un des grands avantages de la télédétection, en particulier pour le suivi de la végétation dont les caractéristiques spectrales dans une région observée peuvent changer avec le temps. La capacité à détecter ces changements dépend de la fréquence avec laquelle les données sont recueillies. Divers projets cherchent à comprendre l'intérêt de la haute fréquence temporelle. Dans le projet ADAM par exemple, on souhaite évaluer l'impact de la fréquence temporelle d'observation sur la précision de la représentation de la dynamique de l'indice foliaire, ou encore sur les résultats d'assimilation pour une bonne estimation de production. Les contraintes spatiales apportant *a priori* une certaine robustesse à la méthode d'assimilation, on peut espérer qu'elles permettront une meilleure estimation des paramètres du modèles à une fréquence plus faible que la méthode classique.

5.2 Prise en compte des contraintes spatiales pour l'assimilation : évaluation par les expériences jumelles

5.2.1 Choix des contraintes et simulation d'observations

Cette partie présente dans un premier temps les niveaux de dépendance spatiale auxquels chaque paramètre sera contraint, puis la création d'une base de données pour les expériences jumelles en conséquence de ce choix. Enfin, les contraintes étant mises en place, le modèle MACRO-BONSAÏ pourra être défini et dérivé.

a. Choix des niveaux de dépendance

Pour ces premières expériences, le choix des niveaux de dépendance (cf Tab. 5.2) a été effectué à partir d'une idée *a priori* des significations de chaque paramètre :

- les paramètres Ti et ΔTs sont considérés comme variétaux,
- t_0 sera fixe au niveau de la parcelle. Notons que que la date de levée n'est pas systématiquement égale sur une parcelle, même si la date de semis l'est. Cela fait en réalité peu de différences en sommes de températures, d'autant que les levées sont aléatoirement réparties et ne représentent de fait qu'un bruit sur la valeur moyenne de la parcelle. Considérant enfin le peu d'influence de ce paramètre sur le LAI, ce choix réducteur permettra surtout de simplifier le problème.
- Les paramètres B et C n'étant pas significatifs d'un phénomène physique ou biologique, nous avons choisi de les identifier au niveau du pixel. Enfin, le paramètre L_{max} étant le plus influent, nous avons préféré l'estimer précisément, donc à chaque pixel également.

Param.	Niveau de dépendance
t_0	parcelle
Ti	variété
$DeltaTs$	variété
B	pixel
L_{max}	pixel
C	pixel

Tab. 5.2 – *Attribution d'un niveau de dépendance de chaque paramètre du LAI dans BONSAÏ.*

vecteur	nb. de param (1)	quantité du niveau (2)	dim. (1)*(2)
x_{parcelle}	1	10	10
$y_{\text{variété}}$	2	2	4
z_{pixel}	3	100	300

Tab. 5.3 – *Quantités des paramètres à estimer par l'assimilation avec contraintes spatiales : 10+4+300 = 314.*

b. Simulation des observations de LAI

- Création de deux variétés

  Deux variétés virtuelles ont été définies, en choisissant des valeurs très différentes des paramètres variétaux Ti et ΔTs (Tab. 5.4).

param.	intervalles défin.	Variété 1.	Variété 2
Ti	500-2500	500	1500
$DeltaTs$	400-1200	600	1000

Tab. 5.4 – *Définition des deux paramètres variétaux de BONSAÏ pour la création de deux variétés V1 et V2.*

Ces deux variétés se comportent très différemment sur le cycle puisque la phase de croissance de la variété 2 recoupe en partie de la phase de sénescence de la variété 1.

- Création de 10 parcelles par variété

  Pour chaque parcelle, la date de levée t_0 est définie de manière aléatoire sur son intervalle de définition.

- Création de 10 pixels par parcelle

  Sur chaque parcelle, les paramètres dépendant du pixel tels que B , C et L_{max} prennent chacun 10 valeurs différentes, choisies aléatoirement sur leurs intervalles de définition.

Les observations de LAI ont donc été créées à partir de ces jeux de paramètres sur les 100 pixels. Les indices foliaires sont représentés FIG. 5.3, sur les 100 pixels (axe Y), en fonction des jours (axe X, DoE[1]). Les deux variétés se distinguent particulièrement bien entre les 50 premiers pixels et les 50 derniers. Chaque dizaine de pixels représente une parcelle et on constate ainsi que les dates de levée y sont constantes.

Dans la plupart des expériences, les observations créées à partir du modèle BONSAÏ seront bruitées de 10% selon une loi gaussienne de moyenne 0 et écart-type 1 (FIG. 5.5). Cependant, pour une visualisation spatio-temporelle permettant de constater la bonne (ou mauvaise) représentativité des parcelles et variétés, les résultats après assimilation seront toujours comparés aux observations *de référence*, sans bruit ajouté (FIG. 5.4).

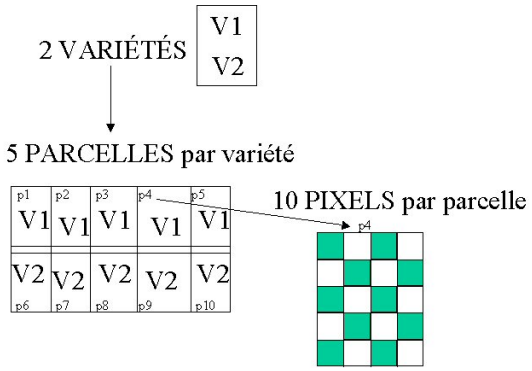

FIG. 5.2 – *Représentation des trois échelles : la variété, la parcelle et le pixel.*

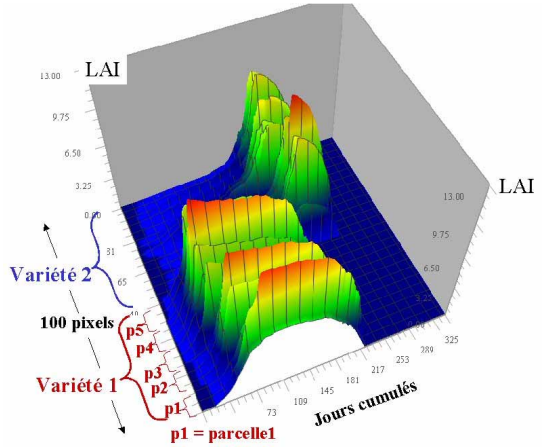

FIG. 5.3 – *Représentation des LAI pour les 2 variétés, sur les 10 parcelles.*

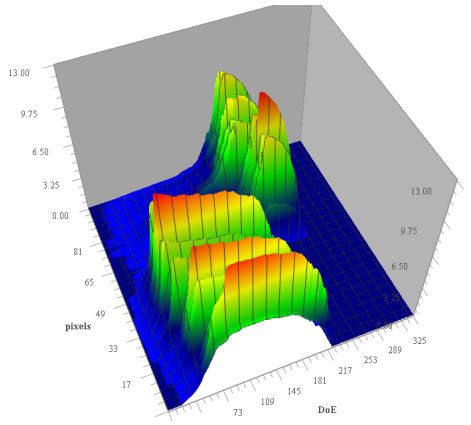

FIG. 5.4 – *Observations de LAI simulées de référence.*

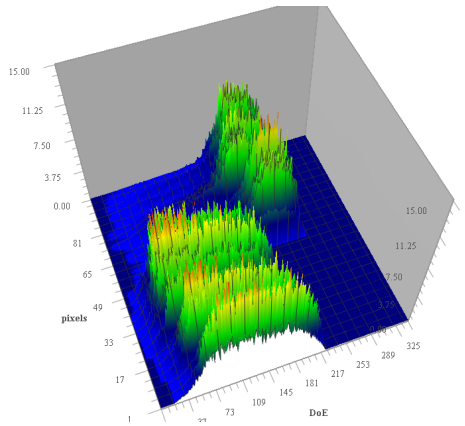

FIG. 5.5 – *Observations de LAI simulées bruitées.*

[1]DoE : Day of Experiment.

c. Calcul de l'adjoint de MACRO-BONSAÏ

Après avoir créé les deux variétés, l'adjoint de MACRO-BONSAÏ défini précédemment (Fig. 5.1) peut être calculé. La dérivation est effectuée en fonction des trois vecteurs de paramètres pour résoudre le problème de minimisation. Ainsi, sans la prise en compte des contraintes, on assimile successivement sur les 100 pixels, ce qui représente l'estimation de 600 paramètres. Par contre, avec les contraintes spatiales, on résout un problème de taille 314 seulement, comme on peut le calculer avec les dimensions du vecteur de chaque niveau données dans le tableau 5.3.

Remarque.
Il est évident que la prise en compte des propriétés spatiales permet de diminuer très fortement la quantité de paramètres à identifier, mais cela signifie une estimation ***simultanée*** *de ces paramètres, ce qui implique :*

- *la dérivation du modèle MACRO-BONSAÏ en fonction de 314 paramètres, c'est-à-dire beaucoup plus de sauvegardes de trajectoires ;*
- *la résolution d'un problème de minimisation de dimension 314 au lieu de 100 problèmes de dimension 6 chacun.*

En fait, on verra par la suite que cela n'impose pas plus d'efforts en terme de vitesse de convergence à N1QN3 que la minimisation d'une fonction à 6 paramètres. N1QN3, étant apte à résoudre des problèmes de plusieurs millions de variables, converge dans cette situation en un nombre très faible d'itérations (25 à 30 en moyenne).

5.2.2 Évaluation de la méthode sur les valeurs de LAI estimées

a. Visualisation spatio-temporelle des résultats sur le LAI

La représentation spatio-temporelle des valeurs de LAI après assimilation a pour seule fonction de vérifier que les niveaux de dépendance parcelles et variétés sont bien conservés. On constate que les LAI obtenus après assimilation des observations bruitées sans prise en compte des contraintes spatiales (Fig. 5.7) et avec prise en compte des contraintes (Fig. 5.9) tendent avec la même qualité vers les observations créées (Fig. 5.6 et 5.8). Les deux types de variété sont bien reproduits, ainsi que les tendances par parcelle. La prise en compte des propriétés spatiales n'améliore pas et ne dégrade pas non plus de façon évidente les résultats d'assimilation, tout au moins dans la visualisation globale des LAI par pixels, parcelle et variété.

b. Comparaison des deux méthodes d'assimilation

Pour évaluer la différence des résultats avec et sans l'aspect spatial, on peut comparer les résultats cumulés des 100 pixels dans les deux cas. Si aucun bruit n'est ajouté aux observations, c'est-à-dire que le modèle est considéré comme parfait, on remarque que les RMSE entre LAI observé et estimé après assimilation sont très satisfaisantes avec les deux méthodes. En effet, il est aisé pour le minimiseur de retrouver des valeurs de paramètres correspondant parfaitement au minimum de la fonction coût : sans contraintes, on obtient une RMSE sur les 100 pixels de 0.0303, et avec contraintes une RMSE de 0.0173.

Avec les observations bruitées, l'assimilation sans contraintes donne une RMSE de 0.3962 (Fig. 5.10), et avec contraintes (Fig. 5.11), une RMSE de 0.3657. Ainsi, l'ajout des contraintes ne permet pas une diminution particulièrement importante de l'écart aux observations (0.03). Cette méthode obtient une RMSE de 0.366 des LAI, ce qui est plutôt satisfaisant au vu des observations bruitées de 10 %.

5.2.3 Évaluation de la méthode sur l'identification des paramètres de MACRO-BONSAÏ

Le fait d'utiliser des observations simulées à partir d'un jeu de paramètres permet d'établir un diagnostic sur l'estimation des paramètres de MACRO-BONSAÏ. En effet, une bonne estimation du

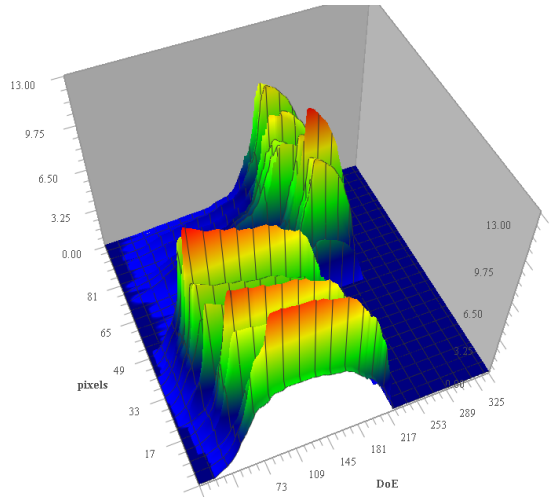

FIG. 5.6 – *LAI observés de référence.*

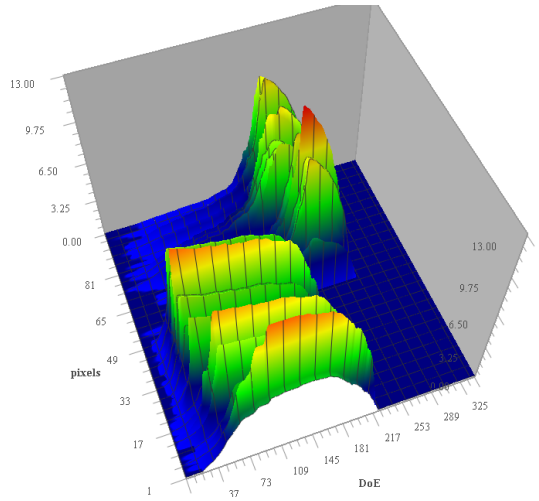

FIG. 5.7 – *LAI obtenus après assimilation sans contraintes spatiales.*

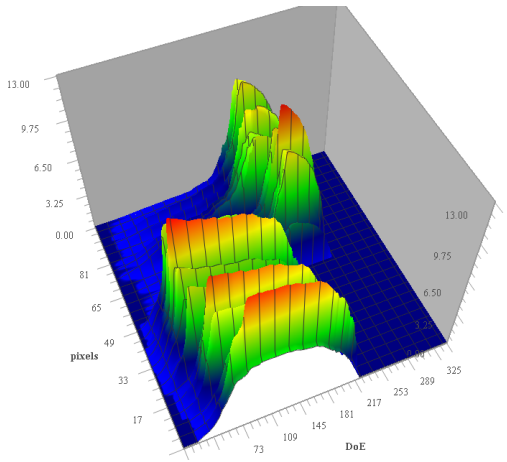

FIG. 5.8 – *LAI observés de référence.*

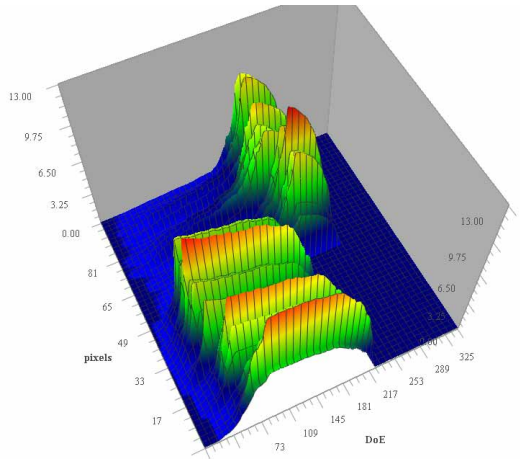

FIG. 5.9 – *LAI obtenus après assimilation avec contraintes spatiales.*

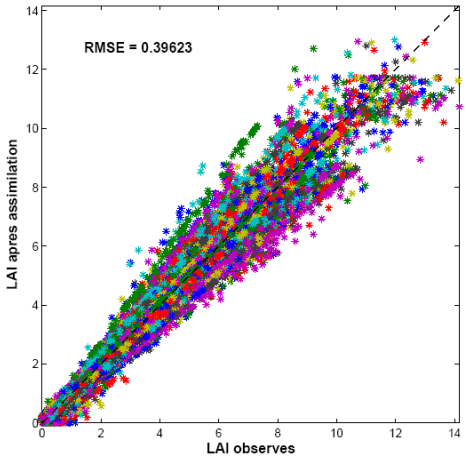

FIG. 5.10 – *Assimilation du LAI (bruité) sans contraintes spatiales*

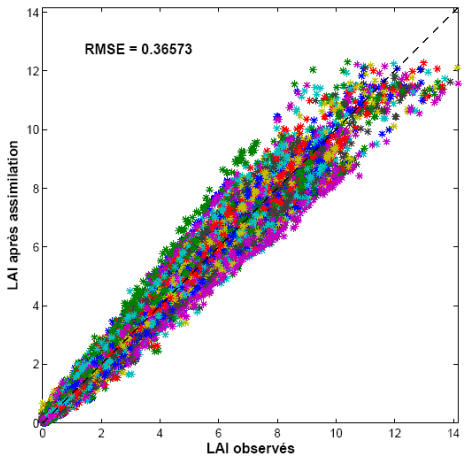

FIG. 5.11 – *Assimilation du LAI (bruité) avec contraintes spatiales*

LAI ne signifie pas forcément une identification correcte des paramètres.

Les valeurs des paramètres estimés sont donc comparées aux paramètres ayant créé les pseudo-observations, avec (Fig. 5.13 et Fig. 5.15) et sans la prise en compte des contraintes spatiales (Fig. 5.12 et Fig. 5.14), dans le cas d'observations non bruitées et bruitées. On constate que le paramètre t_0, qui représente la date de levée, est estimé de façon très disparate sans les contraintes spatiales, tandis qu'il reste proche de la solution en prenant en compte les contraintes. Pour l'estimation du LAI, cela n'a pas grande importance car il est peu sensible à ce paramètre. Cependant, si l'objectif du travail est de retrouver une date de levée qui soit la même sur toute la parcelle, alors les contraintes spatiales améliorent effectivement son estimation. Les paramètres variétaux Ti et ΔTs se compensent dans toutes les situations et leurs valeurs restent toujours très cohérentes. Pour les paramètres relatifs au pixel, B et $Lmax$ sont relativement mieux estimés avec les contraintes spatiales, en particulier lorsque les observations sont bruitées, ce qui reste plus réaliste que des observations parfaitement correspondantes au modèle.

Enfin, le paramètre C est très mal estimé si l'on ne considère pas les contraintes, ce qui a peu de conséquences sur les résultats du LAI puisque la sensibilité de celui-ci à C est très faible.

Ainsi, l'apport des contraintes spatiales en identification de paramètres se dégage particulièrement pour la date de levée relative à la parcelle et les paramètres B et L_{max} relatifs au pixel. Il est difficile de juger de la qualité des estimations des paramètres variétaux, puisque n'ayant considéré que deux variétés, on n'estime que deux valeurs de chaque paramètre, mais on peut affirmer que la contrainte imposée à ces paramètres de rester égaux pour tous les pixels de même variété joue un rôle conséquent et positif sur l'identification des paramètres relatifs au pixel. Par ailleurs, on peut remarquer que le fait d'estimer 314 paramètres ne pose aucun problème à l'algorithme de minimisation puisqu'on verra dans les diagnostics sur les fonctions coût que N1QN3 a atteint son minimum en 35 itérations, c'est-à-dire le même temps que pour estimer 6 paramètres.

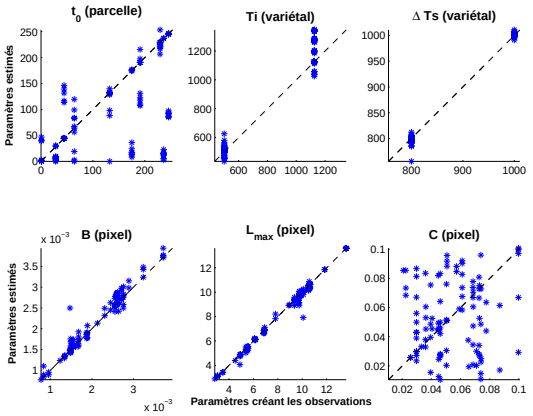

FIG. 5.12 – *Comparaison entre les paramètres d'observations et les paramètres estimés par assimilation sans prise en compte des contraintes spatiales - LAI non bruités.*

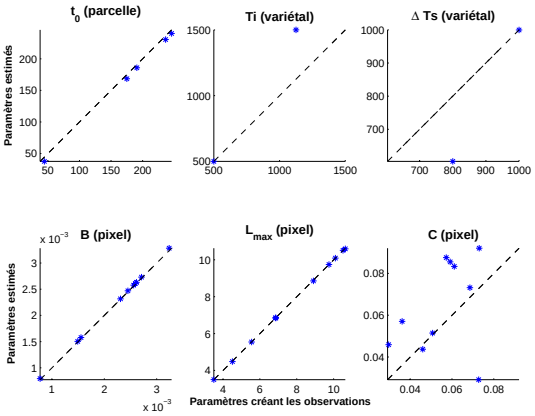

FIG. 5.13 – *Comparaison entre les paramètres d'observations et les paramètres estimés par assimilation avec prise en compte des contraintes spatiales - LAI non bruités.*

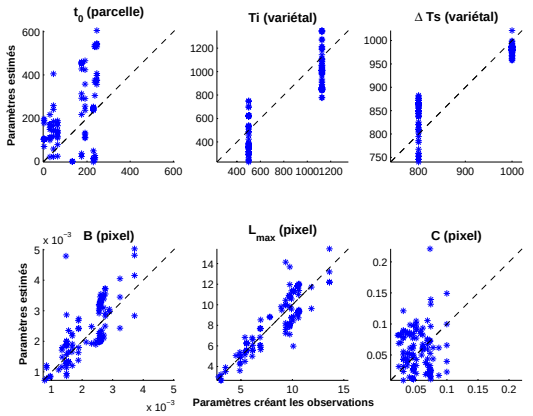

FIG. 5.14 – *Comparaison entre les paramètres d'observations et les paramètres estimés par assimilation sans prise en compte des contraintes spatiales - LAI bruités.*

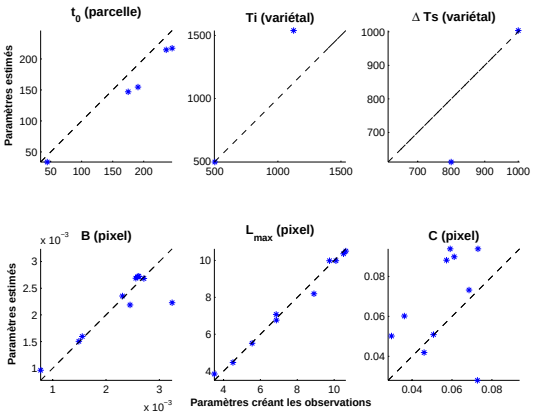

FIG. 5.15 – *Comparaison entre les paramètres d'observations et les paramètres estimés par assimilation avec prise en compte des contraintes spatiales - LAI bruités.*

5.2.4 Vitesse de convergence de la méthode

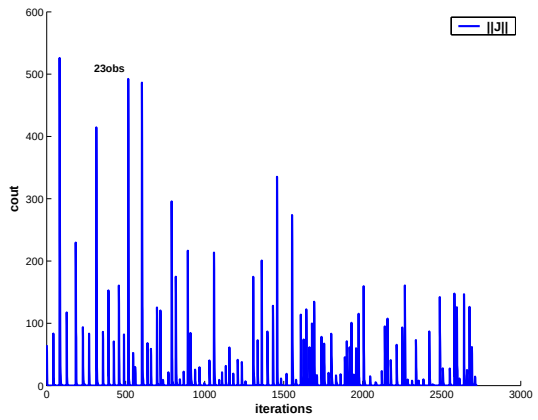

Fig. 5.16 – *Convergence de la fonction coût sur tous les pixels sans contraintes spatiales en 2725 itérations (cumulées)- LAI observés non bruités.*

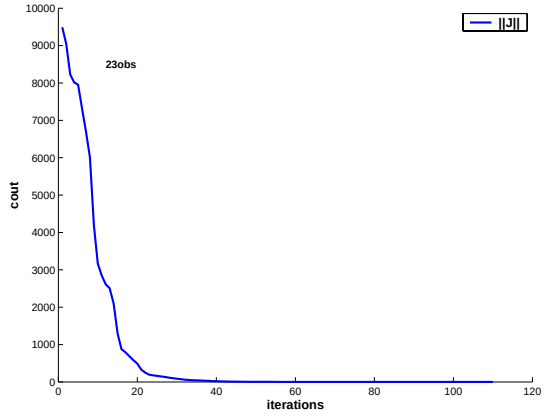

Fig. 5.17 – *Convergence de la fonction coût sur tous les pixels avec contraintes spatiales en 35 itérations (critère d'arret atteint en 110 itérations)- LAI observés non bruités.*

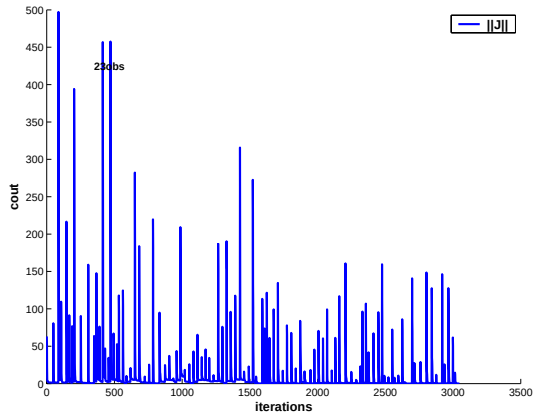

Fig. 5.18 – *Convergence de la fonction coût sur tous les pixels sans contraintes spatiales en 3048 itérations (cumulées)- LAI observés bruités.*

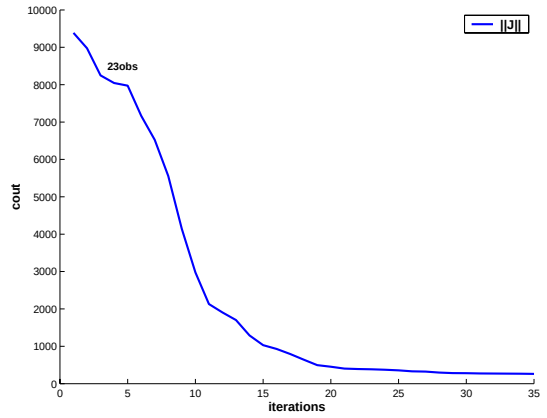

Fig. 5.19 – *Convergence de la fonction coût sur tous les pixels avec contraintes spatiales en 35 itérations - LAI observés bruités.*

On constate tout d'abord que l'algorithme présente des comportements similaires pour les deux types d'observations en terme de vitesse de convergence :

- **sans contraintes spatiales,** l'algorithme converge vers la solution en 28 à 30 itérations par pixel, ce qui aboutit à la solution sur l'ensemble du domaine en 2725 itérations cumulées pour des observations parfaites (Fig. 5.16), et 3048 itérations cumulées pour des observations bruitées (Fig. 5.18)
- **avec contraintes spatiales,** l'algorithme converge au minimum de la fonction coût appliquée aux 100 pixels à la fois en 35 itérations dans les deux cas (Fig. 5.17 et Fig. 5.19).

Le temps de calcul évalué en temps CPU est un peu supérieur lorsque l'on applique les contraintes spatiales (20s.) que l'assimilation pixel à pixel (16 s.), mais ils restent dans les deux cas très faibles.

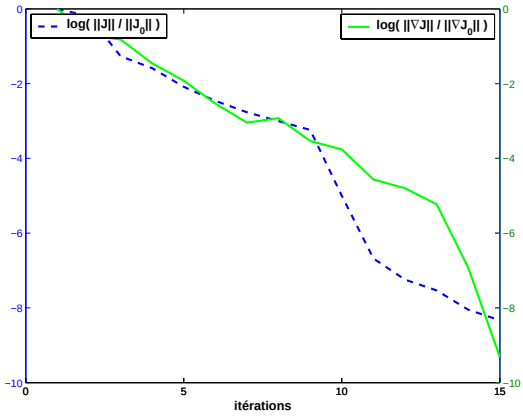

FIG. 5.20 – *log de la fonction coût et de son gradient pour un seul pixel sans contraintes spatiales - LAI observés non bruités.*

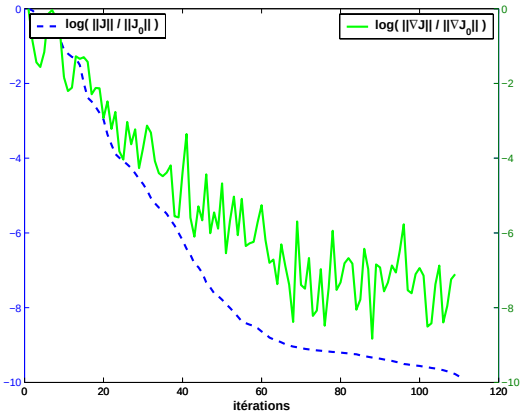

FIG. 5.21 – *log de la fonction coût et de son gradient avec contraintes spatiales - LAI observés non bruités.*

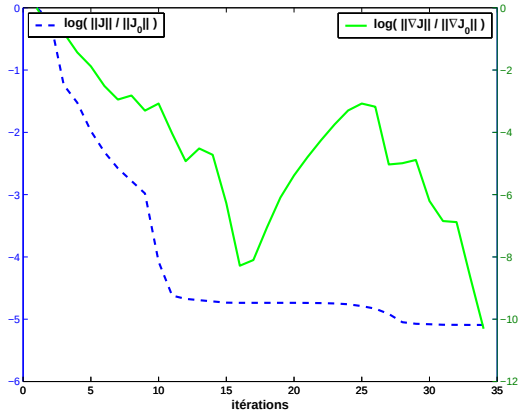

FIG. 5.22 – *log de la fonction coût et de son gradient pour un pixel sans contraintes spatiales - LAI observés bruités.*

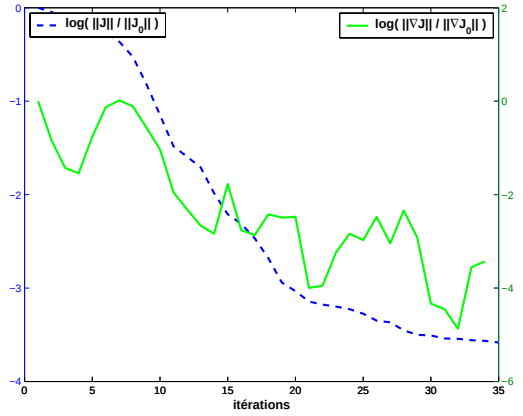

FIG. 5.23 – *log de la fonction coût et de son gradient avec contraintes spatiales - LAI observés bruités.*

Les variations du logarithme décimal de la fonction coût normalisée et du gradient normalisé par leurs valeurs à la première itération permettent également d'interpréter le comportement de l'algorithme :

- **sans contraintes spatiales,** on constate que la fonctionnelle normalisée est réduite d'un facteur 8 à l'échelle du logarithme décimal pour les observations non bruitées de même que son gradient (FIG. 5.20) ; elle est réduite d'un facteur 5 pour les observations bruitées, tandis que son gradient l'est d'un facteur 10 (FIG. 5.22).
- **avec contraintes spatiales,** la fonctionnelle normalisée est réduite d'un facteur 10 à l'échelle du logarithme décimal pour les observations non bruitées, tandis que son gradient l'est de 7.5 (FIG. 5.21) ; elle est réduite d'un facteur 3.5 pour les observations bruitées, tandis que son gradient l'est d'un facteur 4 (FIG. 5.23).

5.2.5 Conclusion

Les expériences jumelles ont permis d'évaluer l'intérêt de la mise en place des contraintes spatiales sur un cas simple : 23 observations réparties régulièrement sur tout le cycle. La prise en compte des contraintes a permis de diminuer (faiblement) la RMSE sur le LAI, mais surtout d'identifier certains paramètres plus précisément que pixel à pixel. Cependant, les observations étant simulées par le modèle, et même si elles sont bruitées, l'algorithme peut identifier les paramètres de façon nettement plus aisée que dans le cas d'assimilation de données réelles de télédétection. En effet, ces dernières comportent de nouvelles erreurs, et elles ont de plus très peu de chances d'être solution des équations du modèle dynamique. Dans la partie suivante, on propose donc de s'intéresser à des observations de télédétection extraites de la base ADAM, qui devront dans un premier temps être adaptées au modèle dynamique, pour ensuite être assimilées dans BONSAÏ.

5.3 Extraction des données sur les images de la base ADAM

5.3.1 Protocole de l'extraction pour la prise en compte des contraintes spatiales

L'extraction des données a été effectuée sur trois parcelles dont les développements en terme de valeurs de LAI sont très différents, afin d'exploiter au mieux l'effet des contraintes parcellaires sur l'identification des paramètres. Ces parcelles sont toutes composées de la même variété de blé (*Dropia*), mais l'autre variété de l'expérimentation (*Flamura*) est de toute façon très semblable. Pour chaque parcelle, on précisera quelle unité d'expérimentation elle contient. En effet, ces unités comportent des mesures au sol qui permettront de valider le LAI déterminé par l'inversion des extractions de réflectance sur les images :

p1. la première parcelle est située à Ileana. Elle a donné un très mauvais développement avec un LAI maximal de 3. Elle contient les unités ADAM U08 et U09 (figure 5.24) ;

p2. la seconde parcelle provient de Tipei et donne l'un des meilleurs développements du blé d'hiver comme on le voit sur la représentation du LAI mesuré sur l'unite ADAM U04 (figure 5.25) ;

p3. la troisième parcelle appartient au groupe des cultures irriguées et propose une croissance moyenne de la végétation avec par exemple l'unité U01 (figure 5.26).

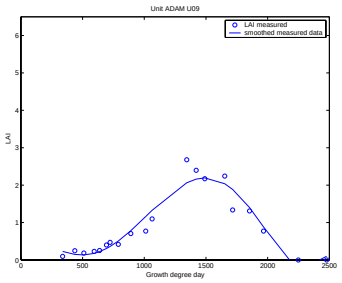

Fig. 5.24 – *LAI sur l'unité ADAM U09 (**p1**).*

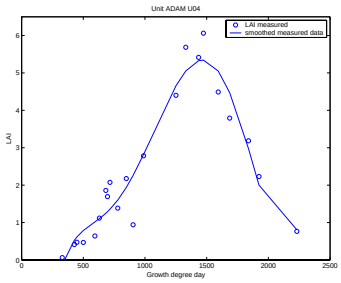

Fig. 5.25 – *LAI sur l'unité ADAM U04 (**p2**).*

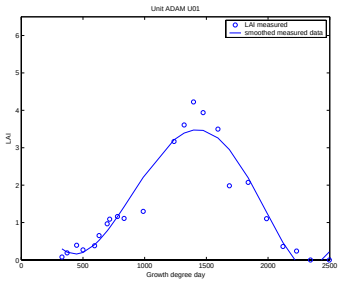

Fig. 5.26 – *LAI sur l'unité ADAM U01 (**p3**).*

5 unités de 25 pixels chacun ont ensuite été choisies aléatoirement sur chacune de ces trois parcelles (Fig. 5.27). L'extraction des réflectances a donc eu lieu sur 375 pixels pour chaque date et pour les 3 bandes SPOT. La figure 5.28 présente les réflectances extraites pour chaque bande pour les 25 pixels des 5 unités des 3 parcelles, en fonction des dates de prise d'image SPOT. Les réflectances suivent à la fois une bonne cohérence temporelle le long du cycle et une certaine variabilité, particulièrement en début de cycle et au maximum de réflectance dans le proche infrarouge.

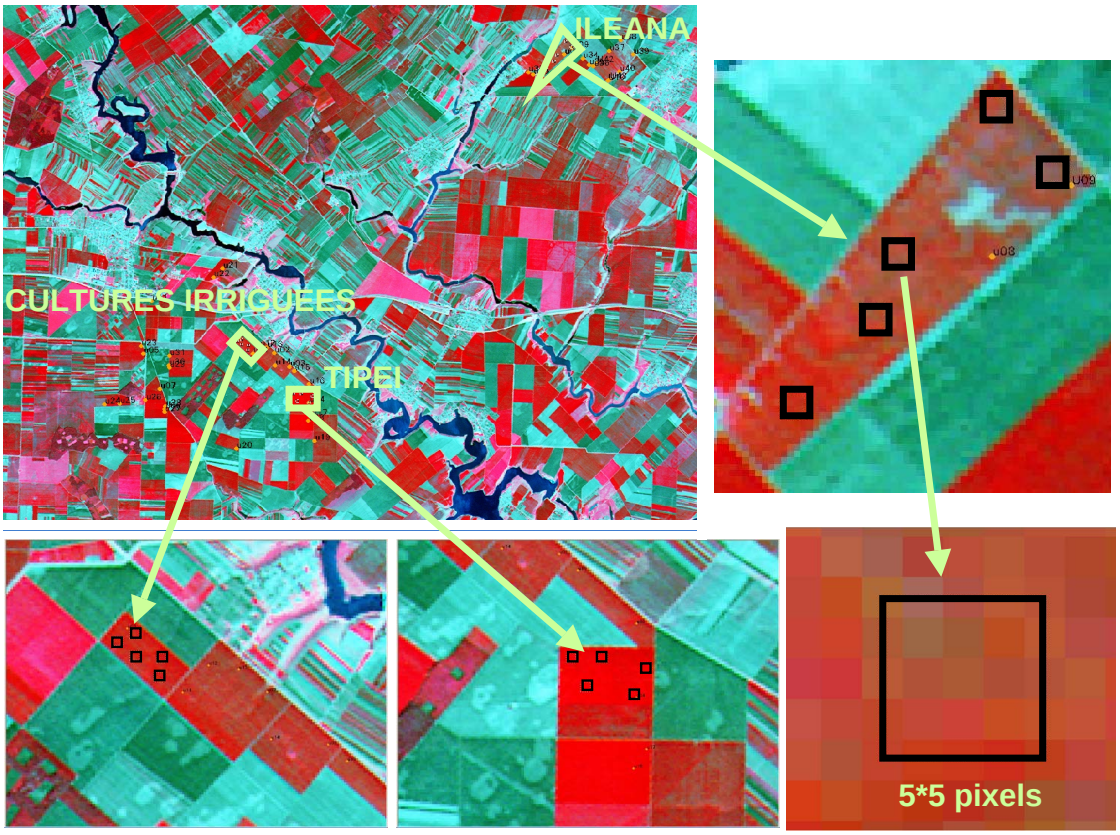

FIG. 5.27 – *Extraction sur les sites ADAM de trois parcelles (Ileana (**p1**), Tipei (**p2**), et Cultures irriguées (**p3**)), puis de 5 unités (carrées) de 25 pixels sur chacune des trois parcelles.*

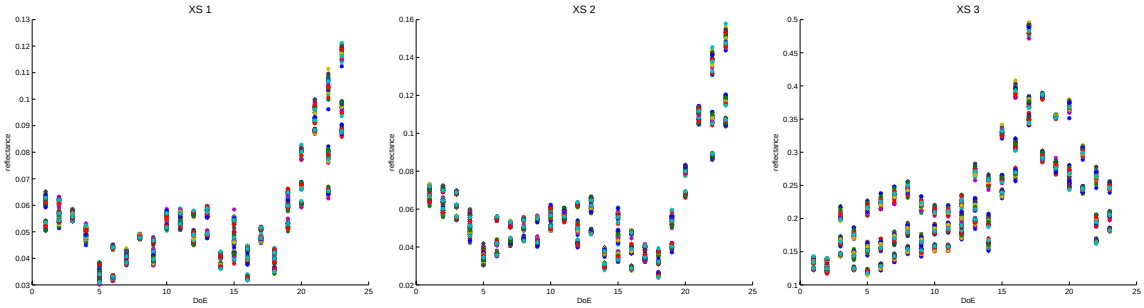

FIG. 5.28 – *Représentation globale des réflectances extraites sur les 375 pixels en fonction des dates de prise d'image SPOT, pour chaque bande (vert, rouge, proche infra-rouge).*

5.3.2 Création de pseudo-observations de LAI par inversion des réflectances

Rappelons que dans ce travail, l'assimilation est effectuée dans un modèle de simulation du LAI et nécessite donc des données de LAI et non directement des réflectances. Pour estimer ces pseudo-observations de LAI, l'inversion du modèle couplé PROSPECT+SAIL (décrite § 4.1) a été appliquée sur les réflectances de 375 pixels (3 parcelles $*$ 5 unités $*$ 25 pixels), sur 23 dates, en utilisant les bandes rouges et proche infra-rouge de SPOT. Le NDVI a également été calculé avec les valeurs de réflectance dans ces deux bandes. L'information *a priori* moyenne utilisée sur les variables de PROSAIL est celle définie § 4.1. Les trois figures 5.29 représentent les LAI après inversion sur chacune des trois parcelles pour les 5 unités de chaque parcelle, en considérant la médiane des 25 pixels pour chaque unité. Les trois parcelles sont effectivement assez différentes mais la parcelle triangulaire **p1** d'Ileana est beaucoup plus hétérogène que les deux autres et selon l'unité propose

un développement de LAI très faible ou moyen. La parcelle 2 de Tipei est assez homogène avec pour toutes les unités un très bon développement du LAI. Enfin la troisième parcelle qui a été irriguée a obtenu des valeurs de LAI moyennes de façon particulièrement homogène.

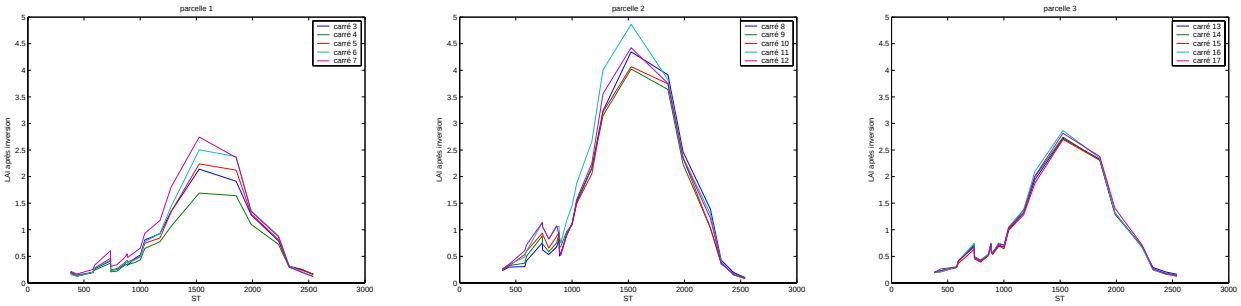

Fig. 5.29 – *Résultats de l'inversion sur les trois parcelles unité par unité.*

5.3.3 Validation de l'estimation de LAI

La validation de ces inversions a pu se faire avec les mesures terrain (cf protocole ADAM § 3.3) des unités U09 pour la parcelle p1, U04 pour la parcelle p2, et U01 pour la parcelle p3. Les erreurs entre les valeurs de LAI mesurées, estimées par inversion (RMSE=0.69) et calculées par le NDVI (RMSE=0.71) sont semblables (Fig. 5.30). Logiquement, on constate la même tendance problématique que lors de l'extraction des 40 unités ADAM (§ 4.1.2). Cette tendance se traduit par une importante sous-estimation jusqu'au maximum de LAI, puis une sur-estimation légère en fin de cycle.

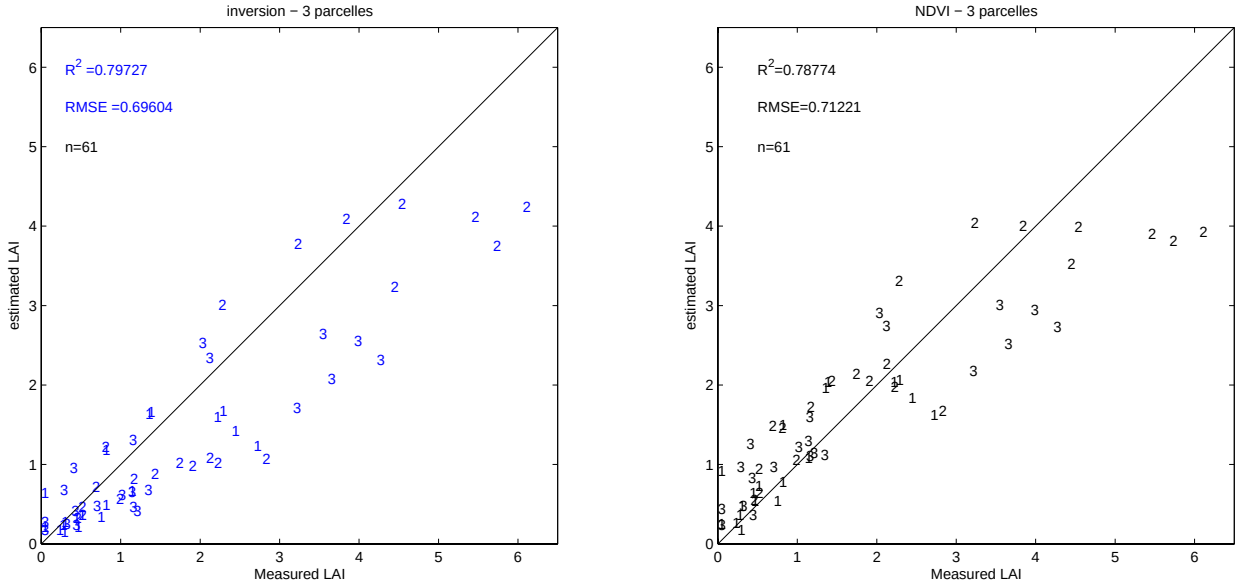

Fig. 5.30 – *Comparaison des LAI obtenus par inversion (à gauche) ou NDVI (à droite) avec les LAI mesurés sur les unités ADAM correspondantes aux 3 parcelles. Les parcelles sont représentées par leurs numéros.*

5.4 Apport des contraintes spatiales pour l'assimilation de données ADAM

5.4.1 Choix et mise en place des contraintes spatiales

Les contraintes spatiales appliquées précédemment avec des expériences jumelles ne sont plus directement transposables aux données ADAM. En effet, les parcelles se composent toutes de l'une des deux variétés, *Dropia* ou *Flamura*, qui sont très similaires. L'assimilation pixel par pixel sur les 3 parcelles devrait permettre de déceler des tendances des paramètres en fonction de la parcelle, afin de choisir les contraintes spatiales dans le cadre des données réelles. Une première partie présente donc les résultats obtenus par l'assimilation pixel par pixel, sur les 15 unités, puis un choix de contraintes sur les paramètres sera proposé.

a. Étude des résultats d'assimilation pixel par pixel

La première visualisation des observations de LAI (Fig. 5.31) est globale, afin d'apprécier la spécificité spatiale des trois parcelles représentées par les trois groupes de 5 unités sur l'axe des ordonnées. Cette spécificité est bien reproduite par l'assimilation sans les contraintes spatiales (Fig. 5.32).

La vitesse (17 itérations en moyenne sur chaque pixel) et la forme de la convergence, franche et sans oscillation (Fig. 5.33), ainsi qu'une RMSE sur les LAI observés et simulés de 0.168 permettent d'assurer une bonne cohérence des résultats de minimisation de la fonction coût. Les résultats d'assimilation pixel à pixel sur les données ADAM de Fig. 5.34 peuvent donc être considérés comme une très bonne référence en identification de paramètres dans ce contexte.

b. Choix des contraintes spatiales

Comme justifié précédemment, les résultats de l'assimilation pixel par pixel Fig. 5.34 vont servir de référence sur les comportements des paramètres et permettre de déterminer les contraintes spatiales. On constate tout d'abord que les paramètres Ti et ΔTs, que l'on a considérés comme variétaux avec les expériences jumelles où l'on créait deux variétés très différentes, se compensent lors de l'assimilation sans contraintes spatiales. On propose donc d'imposer ΔTs à une même valeur sur les trois parcelles et de laisser Ti dépendre de la parcelle. La date de levée t_0 reste également au niveau de la parcelle, même si cette variable influe très peu sur le modèle, et même si les dates de semis sont relativement proches pour les trois parcelles (**p1** : 4 octobre 2000 ; **p2** : 2 octobre 2000 ; **p3** : 2 octobre 2000). De plus, le paramètre L_{max} joue un rôle très décisif d'après l'analyse de sensibilité effectuée précédemment. Il restera donc variable à l'échelle du pixel. Pour ajouter de la robustesse à l'assimilation, et renforcer l'intérêt des contraintes en minimisant le nombre de paramètres à identifier, le paramètre C sera contraint à prendre la même valeur sur toutes les parcelles (valeur à identifier), ainsi que le paramètre B.

Le modèle MACRO-BONSAÏ représenté Fig. 5.1 a été adapté à cette nouvelle situation. Il considère le LAI comme fonction de trois vecteurs de paramètres : x prenant une valeur spécifique ; y dépendant de la parcelle ; z dépendant du pixel :

$$\text{LAI} = \text{BONSAÏ}(x, y, z)$$

où le vecteur de paramètres $x_{\text{spécifique}}$ prend la même valeur pour tous pixels des trois parcelles, et le vecteur de paramètres y_{parcelle} reste constant sur tous les pixels d'une même parcelle. Le tableau 5.5 récapitule ces choix de contraintes sur les paramètres. Comme on peut en déduire de Tab. 5.6, il reste alors **24** paramètres à estimer, contre **90** (6 paramètres *15 pixels) sans les contraintes spatiales.

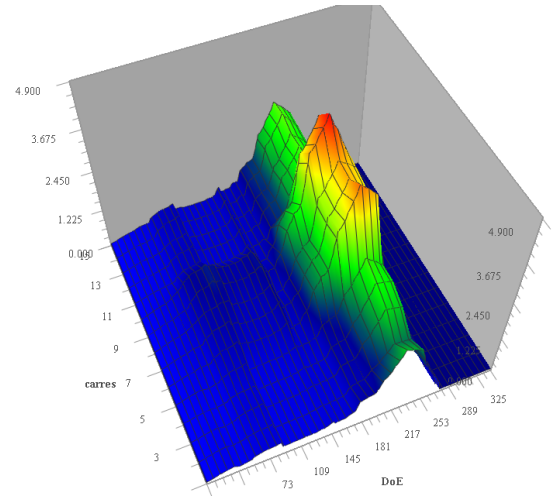

Fig. 5.31 – *LAI observés sur les 15 unités : carrés 1-5= parcelle 1 ; carrés 6-10=parcelle 2 ; carrés 11-15=parcelle 3.*

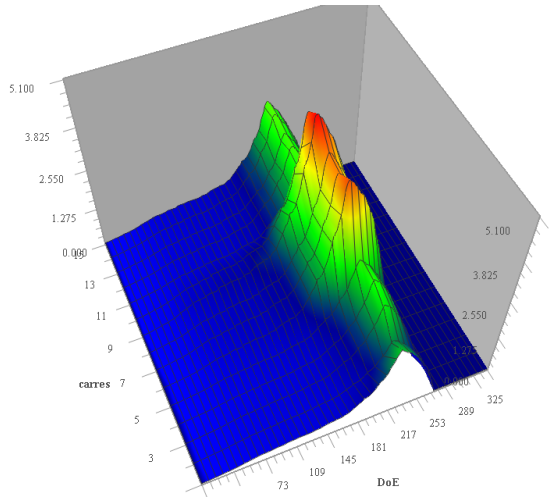

Fig. 5.32 – *LAI obtenus après assimilation sans contraintes spatiales sur les trois parcelles.*

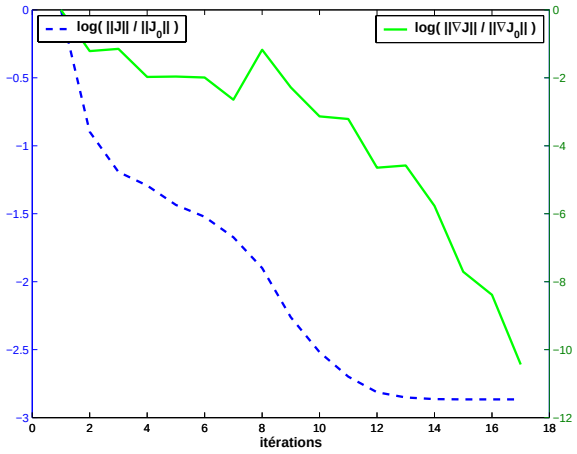

Fig. 5.33 – *log de la fonction coût et de son gradient sans contraintes spatiales, pour un seul extrait.*

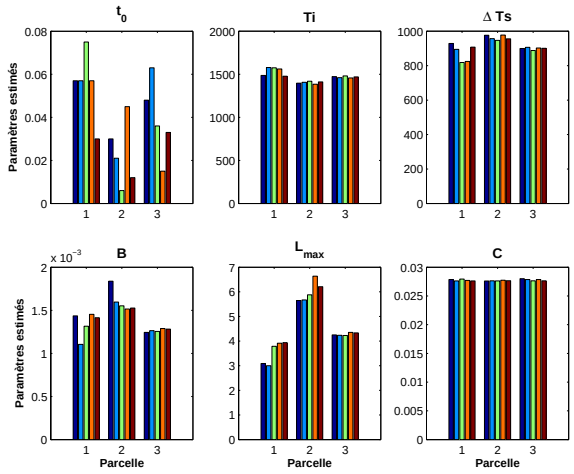

Fig. 5.34 – *Valeurs des paramètres estimés groupés par parcelles (numéros des parcelles en abscisses).*

param.	niveau de dépendance
t_0	parcelle
Ti	parcelle
$DeltaTs$	spécifique
B	spécifique
L_{max}	pixel
C	spécifique

Tab. 5.5 – *Attribution d'un niveau de dépendance de chaque paramètre du LAI dans le modèle BONSAÏ pour l'adaptation aux données ADAM.*

vecteur	nb. de param (1)	quantité du niveau (2)	dim. (1)*(2)
$x_{\text{spécifique}}$	3	1	3
y_{parcelle}	2	3	6
z_{pixel}	1	15	15

Tab. 5.6 – *Quantités des paramètres à estimer par l'assimilation avec contraintes spatiales :* $3 + 6 + 15 = 24$.

5.4.2 Résultats de l'assimilation avec contraintes spatiales

On constate tout d'abord par la visualisation globale des LAI déterminés par l'assimilation (FIG. 5.36) que ceux-ci conservent très bien l'aspect parcellaire des LAI observés (FIG. 5.35). En effet, on distingue nettement trois groupes d'unités qui déterminent les trois parcelles choisies pour leurs différences. La figure 5.37 permet de visualiser la convergence de la fonction coût représentée par le logarithme du rapport de J avec J à la première itération, puis le logarithme du gradient de J avec le gradient de J à la première itération, qui est le critère d'arrêt de N1QN3. Si l'on observe les valeurs estimées des paramètres (FIG. 5.38), on constate bien les valeurs fixes sur toutes les parcelles pour les paramètres dits spécifiques : ΔTs, B et C, et les valeurs égales par parcelle pour les paramètres t_0 et Ti.

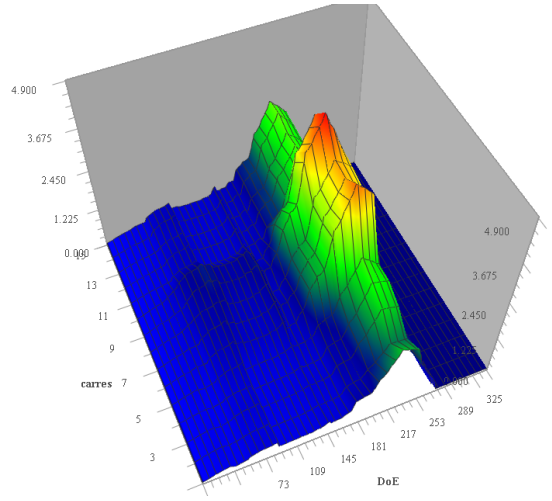

FIG. 5.35 – *LAI observés sur les 15 unités : carrés 1-5= parcelle 1 ; carrés 6-10=parcelle 2 ; carrés 11-15=parcelle 3.*

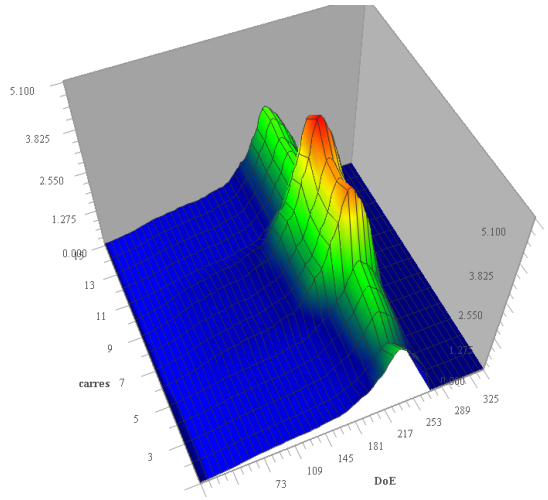

FIG. 5.36 – *LAI obtenus après assimilation avec contraintes spatiales sur les trois parcelles.*

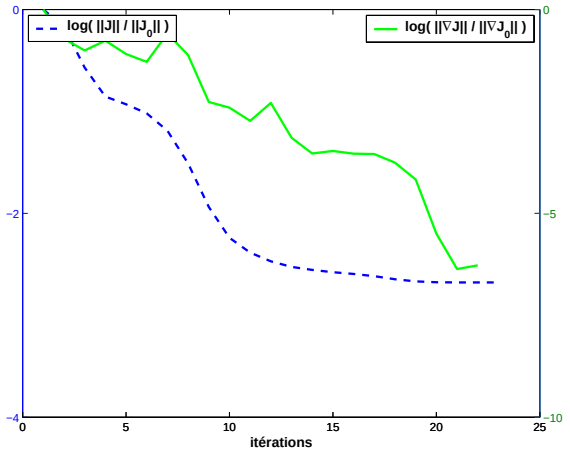

FIG. 5.37 – *logarithmes relatifs de la fonction coût et de son gradient avec les contraintes spatiales.*

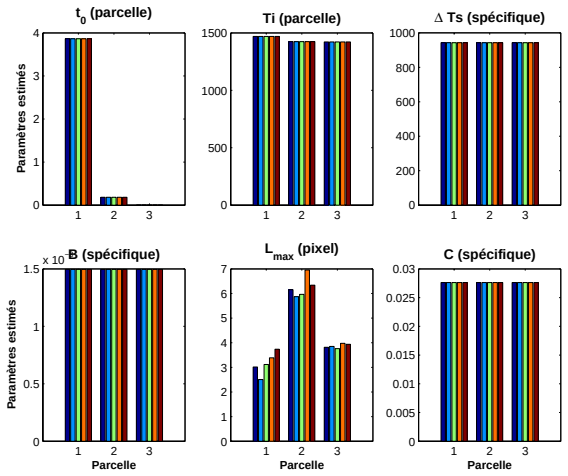

FIG. 5.38 – *Valeurs des paramètres estimés groupés par parcelles (numéros des parcelles en abcisses).*

5.4.3 Comparaison des deux méthodes d'assimilation

a. Conservation des propriétés spatiales et estimation du LAI

L'aspect spatial des trois parcelles a bien été reproduit par l'assimilation avec contraintes spatiales, ce qui était également le cas sans la prise en compte des contraintes (Fig. 5.32)). On obtient une RMSE entre les 15 jeux de LAI observés et simulés de 0.178, contre 0.168 sans les contraintes (Fig. 5.39). Les deux résultats peuvent donc être considérés comme similaires et satisfaisants en terme d'estimation du LAI. En effet, la différence de 0.01 n'est pas significative pour du LAI prenant ses valeurs entre 0 et 5, et le modèle ne peut pas reproduire mieux de façon parfaite la dynamique des valeurs de LAI observées.

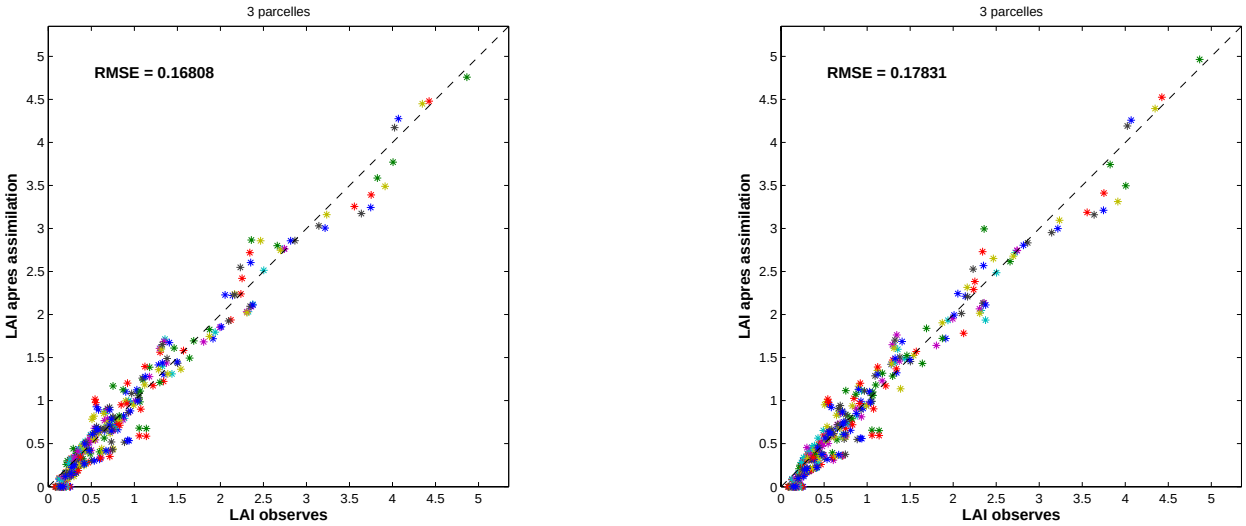

Fig. 5.39 – *Comparaison entre le LAI observé et le LAI estimé par assimilation ; à gauche, assimilation sans contraintes, pixel à pixel : $RMSE = 0.168$; à droite assimilation avec prise en compte des contraintes spatiales sur l'ensemble des pixels : $RMSE = 0.178$.*

b. Identification des paramètres

On constate cette fois que les valeurs estimées des paramètres restent très proches par assimilation avec et sans contraintes. Si t_0 variait beaucoup lors de l'assimilation sans contraintes mais dans un domaine de valeurs insignifiant (de 0 à 0.09 degrés jours), ici il se fixe entre 0 et 4 selon la parcelle. Le fait de le fixer à la parcelle influence de toute façon très peu le modèle, de même que C, évalué à la même valeur que dans l'expérience précédente. Ti était toujours estimé entre de 1400 et 1550 degrés, avec les contraintes il se fixe entre 1400 et 1450 selon la parcelle. Le paramètre B variait beaucoup selon le pixel et est ici fixé à tous les pixels à une valeur de 0.0015. Enfin, on remarque que l'assimilation avec contraintes sur les autres variables estime le paramètre L_{max} quasiment aux mêmes valeurs que l'assimilation sans contraintes pour tout pixel. Ceci peut paraître surprenant, mais c'est surtout une confirmation de la très forte influence de ce paramètre sur le modèle pour les données ADAM.

Ainsi, les contraintes spatiales confirment l'analyse de sensibilité effectuée § 4.3 :

- influence très forte de L_{max} qu'il faut estimer au pixel,
- influence très faible de t_0 et C,
- influence moyenne des autres paramètres, que l'on peut soit considérer comme spécifiques pour ces trois parcelles de même variété et de dates de semis très proches, soit identifier au niveau de la parcelle.

Notons enfin que l'assimilation avec contraintes sur ces 15 unités de pixels estime **24** paramètres au lieu de **90**, ce qui représente une réduction de l'espace de contrôle de presque 75%.

c. Vitesse de convergence

Il est important de rappeler que l'estimation pixel à pixel sur N pixels signifie une vitesse de convergence de N fois un nombre moyen d'itérations, ce qui mène dans cette situation à un total de **305 itérations** cumulées (Fig. 5.40). L'assimilation avec contraintes dans MACRO-BONSAÏ nécessite en tout seulement **23 itérations** pour converger vers des solutions similaires. Cependant, chaque itération représente une simulation de l'adjoint de MACRO-BONSAÏ, dans lequel BONSAÏ est exécuté autant de fois qu'il y a de pixels. Le coût de calcul ne peut donc pas être seulement évalué par le nombre d'itérations mais également par le temps CPU occupé dans chaque cas. En fait, le temps CPU est très court pour les deux types d'assimilation, mais la prise en compte des contraintes le diminue un peu (1.2 s. contre 1.8 s. ; voir Tab. 5.7).

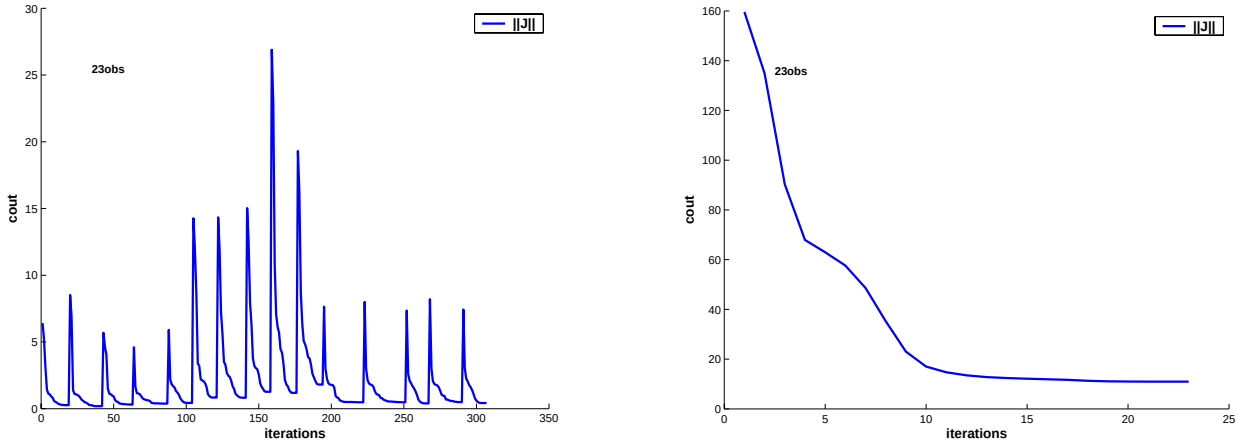

Fig. 5.40 – *Convergence des fonctions coût ; à gauche, sans contraintes spatiales, les fonctions coût cumulées pixel à pixel convergent en un total de 305 itérations ; à droite, avec la prise en compte des contraintes spatiales, une seule fonction coût pour l'estimation sur l'ensemble des pixels converge vers la solution en 23 itérations.*

d. Influence des paramètres initiaux donnés à l'algorithme de descente

d.i/ Expérience sur 100 initialisations différentes

La comparaison entre les deux méthodes d'assimilation avec comme critères la vitesse de convergence et la RMSE entre les valeurs de LAI observées et obtenues après assimilation peut être discutable. En effet, ces deux critères dépendent en réalité du point de départ de l'algorithme. Si l'on initialise à un ensemble de paramètres assez proche des paramètres optimaux, l'algorithme convergera plus vite que s'il se trouve très loin, ou trop près. De plus, le critère d'arrêt de M1QN3/N1QN3 choisi étant relatif à la valeur du gradient de la fonction coût à la première itération ($\|\nabla J\|/\|\nabla J_0\|$), cela confirme sa dépendance au choix de départ.

Pour valider ces critères d'évaluation, cette partie expose une expérience dans laquelle les vecteurs x(spécifique), y(parcelle), z(pixel) sont initialisés à 100 valeurs aléatoires. On pourra ainsi observer, d'une part le comportement de la fonction coût par le nombre d'itérations nécessaires à la convergence, et d'autre part la RMSE entre les valeurs de LAI estimé et observé. On constate Fig. 5.41 que la RMSE est de 0.178 dans 90% des cas, et que le nombre d'itérations varie entre 22 et 58 de façon plus hétérogène, avec une moyenne de 35 itérations. On voit également que les 6 cas donnant une RMSE remarquablement plus forte ($0.26 - 0.28$) correspondent aux nombres d'itérations les plus faibles. Ceci signifie que l'algorithme s'est arrêté assez tôt à cause du caractère *relatif* du critère de N1QN3, mais que la solution pourrait en fait être plus optimale par rapport à la RMSE sur les valeurs de LAI.

Les paramètres initiaux optimaux pourraient être considérés comme ceux donnant à la fois une RMSE parmi ses valeurs les plus faibles et un nombre d'itérations des plus petits. L'intersection de

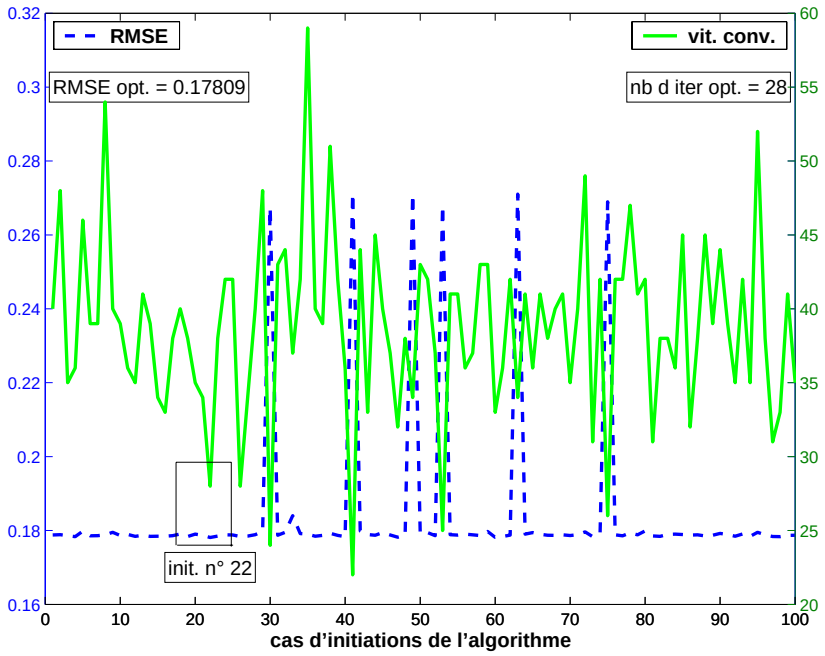

Fig. 5.41 – *Etude de la sensibilité de deux critères d'assimilation (RMSE et vitesse de convergence) en fonction de 100 jeux aléatoires de paramètres initiaux ; sur l'axe de gauche, la RMSE entre le LAI observé et le LAI obtenu après assimilation ; sur l'axe de droite, la vitesse de convergence représentée par le nombre d'itérations de l'algorithme.*

ces deux ensembles a permis de déterminer que le 22ème jeu de paramètres initiaux est optimal, en donnant une RMSE de 0.17809 en 28 itérations (petit rectangle situé à l'abscisse 22).

d.ii/ Conclusion

Dans le cas prédéfini, les paramètres initiaux choisis aléatoirement correspondaient ainsi à une condition très satisfaisante, puisque la RMSE obtenue était de 0.17831, en 23 itérations. Cette discussion a permis de confirmer que l'on n'obtiendrait pas de RMSE inférieure à 0.178 quel que soit le jeu de paramètres initiaux. Elle a également mis en évidence que les rares cas où la RMSE se démarque un peu sont dus au critère d'arrêt, qu'il faudrait par exemple modifier de façon à ce qu'il ne dépende plus du premier pas. Ceci confirme donc la confiance que l'on peut accorder en la convergence de l'algorithme de descente sur quelques tests d'initialisation.

5.4.4 Faible quantité d'observations assimilées

Les observations réelles posent le problème de ne pas être toujours accessibles à l'instant où on le souhaite. Bien que la télédétection permette *a priori* d'acquérir des données régulièrement, il arrive que de fortes couvertures nuageuses (par exemple) diminuent très fortement la quantité d'observations disponibles. On se propose donc de tester la méthode introduisant les contraintes spatiales sur une petite quantité d'observations assimilées (5).

Les résultats d'assimilation de 5 observations pixel par pixel et avec les contraintes sont représentés Fig. 5.42. La RMSE calculée sur les 5 observations juge seulement l'ajustement de la trajectoire du modèle aux données assimilées. La RMSE calculée sur toutes les observations disponibles (23) est plus significative sur le réalisme des résultats, relativement à la base de données. Cette fois, l'assimilation avec contraintes obtient des résultats plus satisfaisants sur les 23 données ($RMSE = 0.19$) que l'assimilation sans contraintes ($RMSE = 0.26$). On peut également remarquer que pour obtenir cette RMSE de 0.19, l'algorithme a nécessité 29 itérations, tandis que la RMSE

était de 0.18 en 23 itérations en assimilant les 23 observations disponibles (Fig. 5.39).

Ainsi, dans cette expérience, la prise en compte des contraintes spatiales a permis de rendre l'assimilation de 5 observations aussi satisfaisante que celle de 23 observations (à 0.01 près), contrairement à l'assimilation pixel par pixel qui subit une nette dégradation avec la baisse du nombre d'observations. La partie suivante propose d'appuyer cette conclusion préliminaire sur de nombreux tests, en considérant différentes fréquences de revisite du satellite.

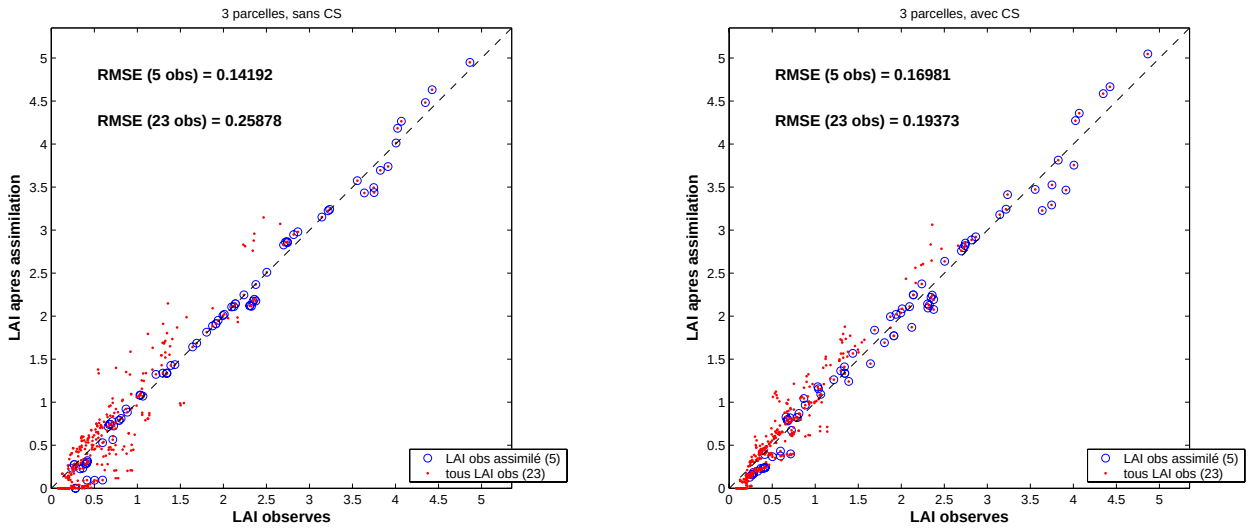

Fig. 5.42 – *Comparaison entre le LAI observé et estimé par assimilation ; à gauche, assimilation pixel par pixel ; à droite assimilation avec prise en compte des contraintes spatiales sur l'ensemble des pixels. Les 5 observations de LAI assimilées (5) sont encerclées.*

5.5 Étude de la sensibilité des résultats d'assimilation à la fréquence temporelle de revisite Apport des contraintes spatiales

On a pu constater que lors d'une diminution du nombre d'observations sur les données ADAM, les contraintes spatiales semblent apporter une certaine robustesse au processus d'assimilation de données de LAI. Cependant, dans le but de définir la fréquence de revisite de futurs capteurs pour décrire la dynamique du couvert végétal, on souhaite déterminer plus précisément l'influence de cette nouvelle méthode sur les résultats. En effet, on peut espérer qu'elle sera plus robuste que la méthode classique lors d'une faible fréquence de revisite.

On propose donc dans cette partie de réaliser divers scénarios de fréquences d'aquisition, tout en considérant une certaine probabilité de couverture nuageuse. Les expériences jumelles sont l'outil idéal pour réaliser ces scénarios et juger de l'identification des paramètres. Les observations simulées et les contraintes spatiales imposées aux paramètres sont celles développées § 5.2. Seule la quantité d'observations varie, en fonction de :

1. la fréquence de revisite du satellite : passage tous les 3 jours, 7 jours, 15 jours ou 30 jours ;
2. la probabilité de couverture nuageuse (annulant alors l'image), qui est de 0 ou 1 selon une loi uniforme.

Pour chacune des 4 fréquences de revisite proposées, 1000 probabilités de couverture nuageuse différentes sont appliquées aux observations. Sur ces 1000 simulations, on tend vers une probabilité moyenne de 0.5, et donc vers un nombre total d'observations sur tout le cycle de :

- 58 observations pour une fréquence de 3 jours (entre 0 et 120),
- 24 observations pour 7 jours (entre 0 et 50),
- 11 observations pour 15 jours (entre 0 et 22),

– 6 observations pour un mois (entre 0 et 12).

Les parties suivantes exposent donc les résultats de l'assimilation :

– dans ces 4 cas de fréquence de revisite
– sur 1000 simulations de couverture nuageuse,
– avec les deux méthodes "pixel par pixel" et "avec contraintes spatiales".

Les deux méthodes ont été appliquées sur les 5 parcelles de deux variétés virtuelles, avec le même jeu de paramètres initiaux choisi aléatoirement que dans la première partie.

5.5.1 Apport des contraintes sur l'estimation du LAI

On constate tout d'abord sur le cas médian des 1000 probabilités de nuage que l'assimilation classique devient très instable lorsque l'on considère une fréquence de 15 puis de 30 jours. En effet, on observe des valeurs irréalistes de LAI sur quelques pixels, où l'algorithme semble n'avoir pas convergé (Fig. 5.43). Par contre, l'assimilation prenant en compte les contraintes spatiales reste très homogène jusqu'à la fréquence de 15 jours comprise, et donne un résultat encore satisfaisant par sa stabilité avec une fréquence de 30 jours (Fig. 5.44).

Si l'on passe à une interprétation globale sur les 1000 cas de couverture nuageuse, on peut voir Fig. 5.45 l'évolution des RMSE entre LAI observé et estimé selon la fréquence de revisite, avec les deux types d'assimilation. Si pour une fréquence de 3 jours, les deux méthodes aboutissent à une RMSE équivalente de 0.345, dès la fréquence de 7 jours, la RMSE avec l'assimilation classique augmente de 8 % tandis que les contraintes ne font augmenter la RMSE que de 4 %. Avec une fréquence de 15 jours, on augmente la RMSE de 14 % sans contraintes (RMSE=0.57) contre 5% avec contraintes (RMSE=0.44). Enfin, le passage à 30 jours perturbe considérablement les deux méthodes, mais les contraintes obtiennent encore une fois une RMSE inférieure (RMSE=0.71) par rapport à l'assimilation pixel à pixel (RMSE=0.83).

5.5.2 Apport des contraintes sur l'identification des paramètres

Dans les premiers résultats d'expériences jumelles (§ 5.2), l'identification de paramètres semblait, avec la vitesse de convergence, être le principal critère à montrer les contraintes spatiales à leur avantage. Ces nouvelles expériences vont permettre de préciser cette influence en fonction de la fréquence de revisite.

Les deux graphiques Fig. 5.46 représentent la RMSE relative de *l'ensemble des paramètres*, pour chacun des 1000 cas de couverture nuageuse. On constate que l'assimilation pixel à pixel n'est pas tellement sensible à la fréquence puisqu'elle stabilise la RMSE relative sur les paramètres entre 40% et 60%. L'assimilation avec contraintes, elle, augmente sensiblement son erreur quand la fréquence diminue, mais elle reste toujours entre 25% et 30%. Elle est également beaucoup plus stable sur les 1000 probabilités différentes.

On peut cependant critiquer cette évaluation d'ensemble d'erreur sur l'identification des paramètres puisqu'on a deja remarqué que le paramètre C, par exemple, est très mal identifié et peut largement influencer la RMSE des 6 paramètres réunis. On propose donc d'observer la RMSE de chaque paramètre sur les 1000 cas de probabilité, pour chaque fréquence de revisite.

Avec l'assimilation pixel par pixel, on constate Fig. 5.47 l'effet important de quelques minimas locaux sur la RMSE relative de chaque paramètre. En particulier, la fréquence de 15 jours a subi plus de minima locaux que la fréquence de 30 jours, ce qui ne s'explique que par le choix aléatoire de la probabilité de couverture nuageuse. En moyennant les valeurs estimées du paramètre variétal t_0 sur l'ensemble des pixels de chaque variété, et celles des paramètres parcellaires sur l'ensemble des pixels de chaque parcelle, on minimise l'effet des minimas locaux sur les estimations de Ti et ΔTs. Les résultats de l'assimilation pixel par pixel avec ces moyennes (Fig. 5.48) sont ainsi comparables à ceux de l'assimilation utilisant les contraintes spatiales (Fig. 5.49).

Outre l'influence du nombre d'observations pour les deux types d'assimilation sur la RMSE, qui reste toujours inférieure avec les contraintes, ces figures mettent en évidence quelques résultats particuliers aux paramètres. L'estimation de la date de levée t_0 est très mauvaise sans contraintes

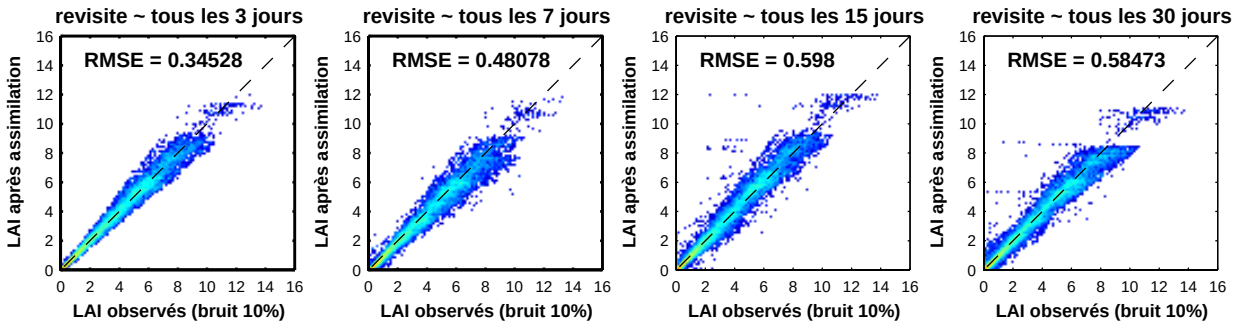

FIG. 5.43 – *Comparaison entre LAI observés et obtenus après assimilation* pixel à pixel, *dans les 4 cas de fréquence de revisite. Représentation en densité apparente (plus clair = plus dense) du cas médian de 1000 expériences de probabilités de nuages différentes.*

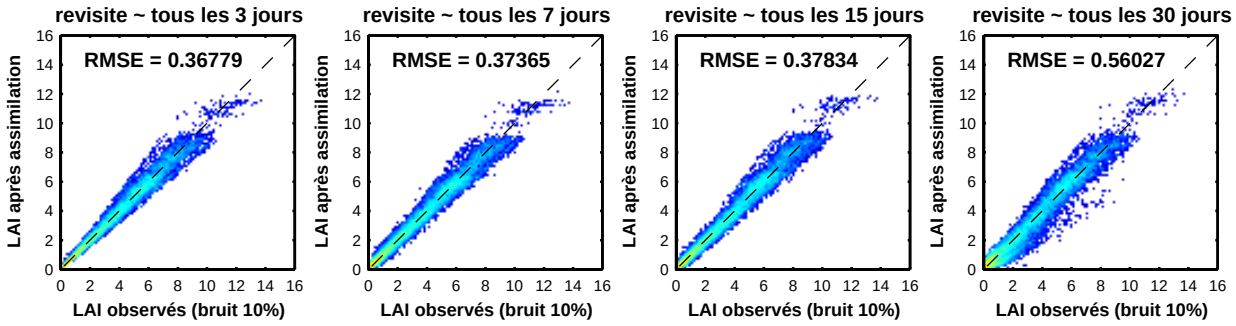

FIG. 5.44 – *Comparaison entre valeurs de LAI observées et obtenues après assimilation* avec contraintes spatiales, *dans les 4 cas de fréquence de revisite. Représentation en densité apparente (plus clair=plus dense) du cas médian de 1000 expériences de probabilités de nuages différentes.*

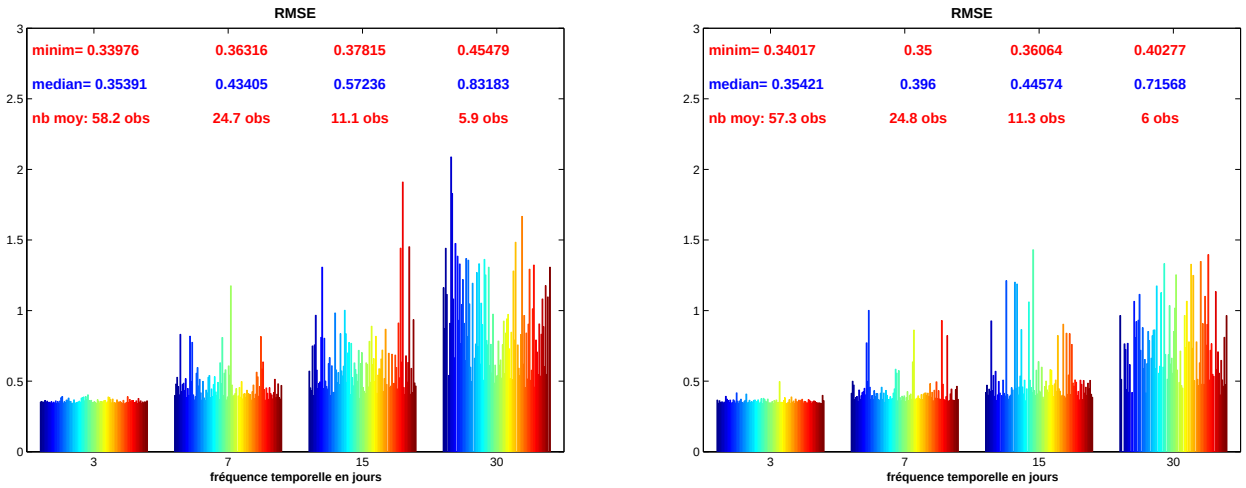

FIG. 5.45 – *Distributions des RMSE entre valeurs de LAI observées et obtenues après assimilation* classique *(à gauche) et* avec contraintes spatiales *(à droite) pour les 4 cas de fréquence de revisite, sur 1000 simulations de probabilités de nuages.*

(RMSE relative de plus de 200%) et plutôt satisfaisante avec les contraintes (RMSE relative de moins de 40% pour les trois premières fréquences). On remarque également que les identifications des paramètres variétaux Ti et ΔTs sont presque parfaites (au sens de la RRMSE) avec la prise en compte des contraintes pour les trois premières fréquences. Le paramètre le plus influent L_{max} est nettement mieux estimé dès la fréquence temporelle de 7 jours avec les contraintes. Enfin, on constate que le passage de la fréquence à 30 jours ajoute une erreur relative d'environ 10% pour l'assimilation avec contraintes, tandis que les trois premières fréquences restent assez stables.

5.5.3 Conclusion

Ces expériences montrent qu'avec une méthode d'assimilation classique, une fréquence de 3 ou 7 jours permet des résultats très satisfaisants d'estimation du LAI. Cependant, la fréquence de 7 jours ne permet pas de garantir une estimation stable des paramètres les plus influents sur le modèle. Pour ce type de situations où beaucoup d'observations sont disponibles, la prise en compte des contraintes aboutit à une meilleure identification des paramètres, en particulier de la date de levée et du paramètre le plus influent L_{max}.

De plus, dès que la fréquence diminue, l'erreur sur l'évaluation du LAI et l'estimation des paramètres est nettement moins sensible avec la prise en compte des contraintes spatiales que dans le cas d'une assimilation classique. Si, par exemple, on diminue la fréquence de revisite à 15 jours, les contraintes spatiales permettent d'assurer une bonne stabilité des résultats en identification des paramètres et estimation du LAI, tandis que l'assimilation classique ne converge pas toujours et identifie de moins en moins bien les paramètres.

Enfin, une fréquence de revisite de 30 jours ne permet à aucune des deux méthodes de garantir une identification très satisfaisante des paramètres. Cependant, les contraintes assurent une certaine stabilité à l'estimation des paramètres, et plus d'homogénéité du LAI sur les 1000 cas que l'assimilation pixel à pixel, qui converge dans de nombreux cas à des minima locaux et manque, avec si peu d'observations, de robustesse.

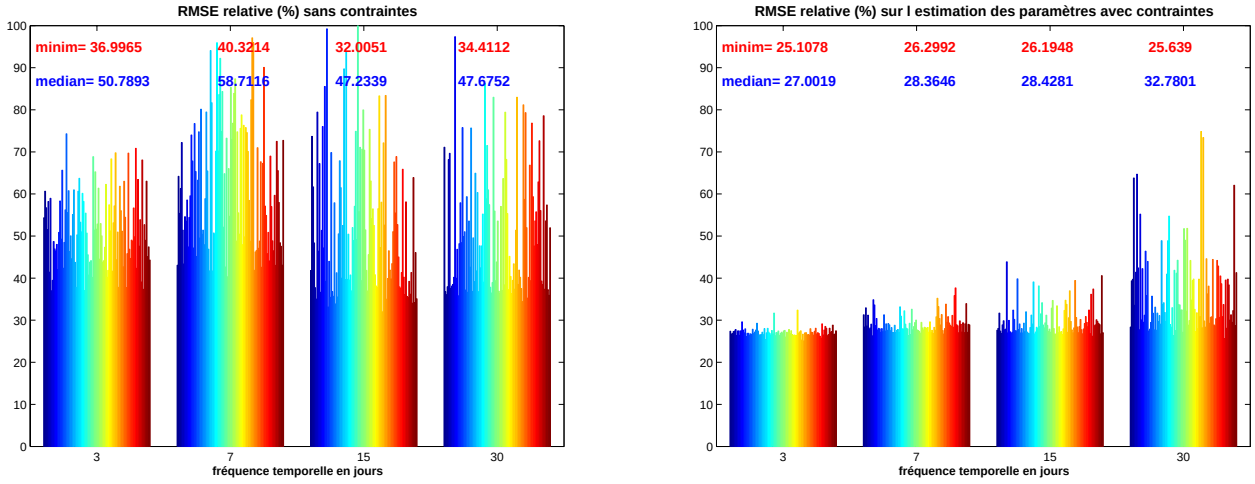

FIG. 5.46 – *Distributions des RMSE relatives en % des paramètres par assimilation* ***classique*** *et* ***avec*** *contraintes spatiales pour les 4 cas de fréquence de revisite (en abscisse), dans 1000 cas de probabilités de nuages. Les RMSE sont calculées sur les 6 paramètres.*

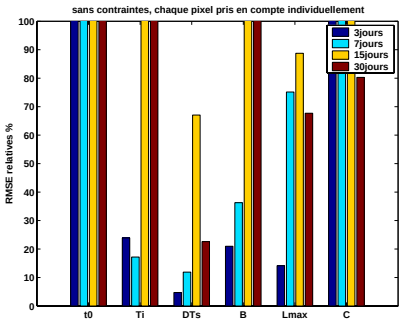

FIG. 5.47 – *Assimilation* ***classique****. Les valeurs estimées de chaque paramètre sont considérées pixel par pixel.*

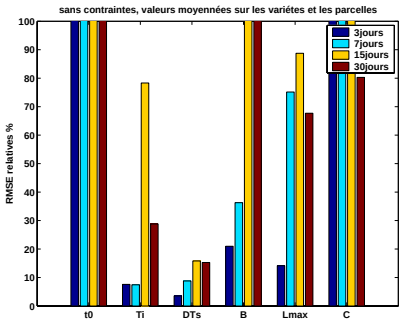

FIG. 5.48 – *Assimilation* ***classique****. Les valeurs estimées de t_0 sont moyennées sur les variétés et celles de $Ti, \Delta Ts$ sur les parcelles.*

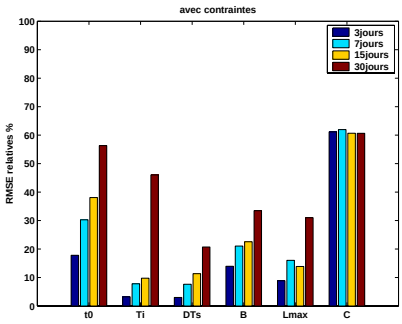

FIG. 5.49 – *Assimilation* ***avec*** *contraintes spatiales. Les valeurs estimées de t_0 sont fixes par variété et celles de Ti, ΔTs fixes par parcelle.*

FIG. 5.47-5.48-5.49 : *RMSE relative (en %), sur 1000 cas de probabilités de nuages, pour les 4 cas de fréquence de revisite représentées chacune par une barre de couleur différente. Les RMSE sont calculées pour chaque paramètre (en abscisse).*

5.6 Synthèse des résultats et perspectives

Cette dernière partie propose une synthèse de tous les résultats du chapitre dont les expériences sont résumées Tab. 5.7. Le diagnostic de la méthode d'assimilation avec prise en compte de contraintes spatiales est effectué par comparaison avec la méthode pixel par pixel.

a. Diagnostic de la méthode d'assimilation avec contraintes spatiales

⇝ **Capacité à reproduire la variable d'état assimilée**

On a pu constater avec les expériences jumelles que la prise en compte des contraintes spatiales améliorait la RMSE entre les valeurs de LAI observées et estimées de 0.03 pour des observations virtuelles mais très bruitées. Pour des mesures "réelles" de LAI, les RMSE obtenues sont équivalentes et les contraintes n'améliorent pas spécialement l'estimation du LAI sur l'ensemble des parcelles.

Pourtant, lors du passage à un nombre beaucoup plus faible d'observations assimilées, 5 par exemple, on diminue l'écart aux observations, même celles non assimilées, de 0.07 par rapport à la méthode classique, ceci en obtenant une RMSE quasiment aussi satisfaisante qu'en assimilant les 23 observations. Les contraintes spatiales assurent ainsi une importante stabilité et robustesse à l'estimation du LAI lors d'une baisse de la quantité d'observations disponibles.

⇝ **Identification des paramètres**

Les expériences jumelles ont pu prouver que la prise en compte de contraintes spatiales stabilise les solutions pour les paramètres peu influents, et améliore très nettement l'identification des paramètres relatifs au pixel et à la parcelle, tels que L_{max} et t_0 la date de levée par exemple.

Les contraintes permettent également de diminuer fortement la dimension des paramètres à estimer : leur nombre est réduit de 600 à 314 paramètres pour les expériences jumelles, et de 90 à 24 pour l'assimilation des données ADAM. La réduction serait encore plus importante si l'on avait extrait plus de parcelles.

⇝ **Coût de calcul**

La vitesse de convergence n'est pas un obstacle pour la spatialisation, puisque l'algorithme converge aussi rapidement pour estimer un grand nombre de paramètres que pour estimer 6 paramètres à chaque pixel. Le modèle adjoint est par ailleurs un outil particulièrement adapté aux problèmes à grande dimension de l'espace de contrôle. Les contraintes spatiales diminuent même un peu le temps CPU dans la plupart des cas, mais les temps sont de toute façon très faibles avec les deux méthodes.

b. Fréquence de revisite

Pour définir la fréquence de revisite des capteurs, on peut déduire de ces résultats :

⇝ qu'une fréquence de 7 jours est la limite pour assurer une certaine stabilité et une bonne estimation du LAI et de la plupart des paramètres avec de l'assimilation pixel par pixel. Au-delà de 7 jours, l'algorithme convergera dans de nombreux minima locaux.

⇝ qu'une fréquence de 15 jours associée à la prise en compte de contrainte spatiales garantit une RMSE sur le LAI et une estimation des paramètres presque aussi satisfaisante qu'avec une fréquence de 7 jours. Au-delà de 15 jours, l'algorithme obtiendra des résultats moins satisfaisants mais toujours très stables.

c. Conclusion et perspectives

Ainsi, on ne peut pas affirmer des contraintes spatiales qu'elles permettent une meilleure reproduction de la trajectoire du LAI par rapport à une méthode classique lorsque l'on assimile beaucoup d'observations, mais seulement qu'elles obtiennent un résultat tout aussi satisfaisant. Lors d'un plus faible nombre d'observations disponibles, les contraintes permettent des résultats beaucoup plus stables face au changement de fréquence de revisite, confirmant la robustesse de la méthode par

rapport à l'assimilation pixel par pixel. De plus, cette nouvelle méthode nécessite la minimisation d'une seule fonction coût, plus facile à contrôler lors de divergence ou de minimum local. Enfin, l'identification des paramètres du modèle, qui correspond en général à l'objectif principal de l'assimilation de données, dépend beaucoup moins du nombre d'observations assimilées avec la prise en compte de contraintes spatiales.

On pourrait cependant critiquer le choix déterminé *a priori* des niveaux des paramètres. En effet, BONSAÏ est un modèle semi-mécaniste, dépendant parfois de paramètres moyennement significatifs, c'est pourquoi l'intérêt des contraintes avec ce type de modèle reste assez limité. Si les contraintes spatiales étaient appliquées sur un modèle mécaniste tel que STICS, dont les paramètres ont une signification plus précise au niveau des processus, le choix des dépendances spatiales se justifierait alors nettement plus objectivement qu'une décision *a priori*. De plus, STICS dépendant d'une quantité de paramètres 100 fois supérieure à BONSAÏ, l'ajout de contraintes réduirait de façon très importante la taille du problème et représenterait un avantage encore plus évident que sur le modèle BONSAÏ.

type d'observations	N pixels	méthode d'assimilation	nb. de param. à estimer	RMSE sur le LAI	nb. d'itér.	tps CPU
exp. jumelles (23 obs.)	100	classique	600	0.396	3048	16 s.
		avec contraintes	314	0.366	35	20 s.
ADAM (23 obs.)	15	classique	90	0.168	305	1.8 s.
		avec contraintes	24	0.178	23	1.2 s.
ADAM (5 obs.)	15	classique	90	0.259	390	2 s.
		avec contraintes	24	0.194	29	1.5 s.

fréquence de revisite	N pixels	méthode d'assimilation	nb. de param. à estimer	RMSE sur le LAI	nb d'itér.	tps CPU
3 jours	100	classique	600	0.345	2900	24 s.
		avec contraintes	314	0.367	50	18 s.
7 jours	100	classique	600	0.481	2966	34 s.
		avec contraintes	314	0.373	48	18 s.
15 jours	100	classique	600	0.598	2841	16 s.
		avec contraintes	314	0.378	55	18 s.
30 jours	100	classique	600	0.585	2638	14 s.
		avec contraintes	314	0.56	47	18 s.

TAB. 5.7 – *Synthèse des comparaisons entre l'assimilation avec et sans prise en compte des contraintes spatiales dans trois types d'observations : 1/par les expériences jumelles bruitées de 10% aux 23 dates SPOT de la base ADAM ; 2/par l'extraction sur les images ADAM, en assimilant 23 puis 5 observations ; 3/ par les expériences jumelles bruitées de 10% pour quatre fréquences de revisite du satellite : tous les 3, 7, 15 puis 30 jours pour un cas moyen.*

6

Faisabilité de l'application de la méthode variationnelle au modèle Stics

Sommaire du chapitre

6.1 Étalonnage du modèle STICS sur les variétés roumaines 180
6.1.1 Choix des paramètres à calibrer 180
6.1.2 Méthode d'étalonnage 181
6.1.3 Résultats 181
6.1.4 Conclusion 181
6.2 Faisabilité de la mise en œuvre de la méthode d'assimilation variationnelle dans STICS 183
6.2.1 Difficultés de calcul du modèle adjoint de STICS 183
6.2.2 Première validation des modèles tangent et adjoint 186
6.3 Analyse de sensibilité de STICS 186
6.3.1 Sélection des paramètres d'entrée pour l'analyse de sensibilité des variables de sorties 187
6.3.2 Validation des modèles tangent et adjoint par rapport au LAI et la biomasse 188
6.3.3 Résultats de sensibilité du LAI et de la biomasse 189
6.3.4 Conclusion et perspectives sur l'analyse de sensibilité 193
6.4 Conclusion 193

Le développement de méthodes robustes d'assimilation de données dans un modèle mécaniste tel que STICS permettrait d'établir des diagnostics et des pronostics assez complets sur la culture. Cet objectif intéresse donc une grande partie de la communauté agronomique. Nous nous proposons ici de démontrer la faisabilité d'une telle méthode tout en s'attachant aux difficultés rencontrées lors de sa mise en œuvre. Dans un premier temps, nous adapterons les paramètres et variables d'entrée principaux de STICS-blé aux conditions de l'expérimentation ADAM. L'adjoint de STICS sera ensuite calculé et validé selon différentes directions. Nous proposerons enfin une analyse de sensibilité locale avec cet outil dans les conditions typiques de l'expérimentation ADAM.

6.1 Étalonnage du modèle STICS sur les variétés roumaines de la base ADAM

Le modèle STICS comporte un certain nombre de paramètres qui dépendent du cultivar[1]. Or les variétés roumaines utilisées dans l'expérimentation ADAM, *Dropia* et *Flamura*, ont des particularités vis-à-vis de la résistance au froid et de la phénologie. Elles ont un comportement très différent des variétés françaises telles que *Talent* et *Thésée*, dont les valeurs des paramètres variétaux sont bien connues.

L'aspect extrêmement complet de la base ADAM (cf § 3.3) permet de renseigner le modèle sur :

- **Le sol** : de nombreuses mesures ont été effectuées par l'ESAP sur les parcelles d'expérimentation. De plus, les compétences des pédologues de l'ICPA sur les caractéristiques du sol ont complété les mesures.
- **L'itinéraire cultural** : nous avons accès aux caractéristiques des techniques culturales appliquées sur cette expérimentation (dates de fertilisation, quantité, dates de semis, précédent cultural...) ;
- **La variété** : les connaissances précises des agronomes de l'ICCPT sur les variétés roumaines *Flamura* et *Dropia* nous ont permis de déterminer une valeur *a priori* de certains paramètres physiquement significatifs.

Cependant, les paramètres variétaux de STICS ne possèdent pas toujours une signification précise, et certains d'entre eux sont donc difficiles à évaluer par expertise. Par exemple, le paramètre *adens*, qui traduit le comportement de la plante en peuplement par rapport à la plante isolée, est difficile à quantifier. C'est donc par ajustement sur des expérimentations particulières que ces paramètres variétaux peuvent être ajustés. Considérant les itinéraires culturaux et les caractéristiques du sol bien renseignés, nous proposons donc d'effectuer un étalonnage des paramètres variétaux de STICS sur la variété *Flamura*. En effet, c'est sur celle-ci qu'a été prélevée la quasi-totalité des données terrain et la seconde variété, *Dropia*, apparaît très similaire.

6.1.1 Choix des paramètres à calibrer

Les principales différences entre les variétés s'expriment au niveau de la phénologie. Par ailleurs, la phénologie agit directement sur la dynamique de l'indice foliaire, rendant l'étalonnage d'autant plus nécessaire que le LAI constitue l'interface entre le fonctionnement du couvert et les observations de télédétection. C'est donc naturellement les principaux paramètres des modules *phénologie* et *croissance aérienne* de STICS que nous allons caractériser pour les variétés roumaines :

- $stlevamf$ (degrés.jours) représente le cumul d'unités de développement entre les stades de levée et AMF, l'accélération maximale de l'indice foliaire ;
- $stamflax$ (degrés.jours) est le cumul d'unités de développement entre les stades AMF et LAX où le LAI est maximal ;
- jvc, le nombre de jours vernalisants, exprime les besoins en froid nécessaires à la levée ;
- $durvieF$ influe sur l'amplitude du LAI et représente la durée de vie foliaire ;
- $adens$ est un paramètre de compensation entre le nombre de tiges et la densité de la plante.

[1] Le modèle STICS et ses paramètres et variables les plus importants sont décrits § 3 ainsi que dans une liste complète en annexe C.

6.1.2 Méthode d'étalonnage

Pour ce travail d'étalonnage, une méthode d'optimisation telle que le simplexe de Nelder-Mead semble tout à fait appropriée puisque nous nous trouvons dans la situation confortable d'une petite quantité de paramètres à estimer associée à un nombre important de mesures terrain (voir les éléments bibliographiques du chapitre 1). Rappelons que cette méthode minimise un critère des moindres carrés pondérés par une exploration géométrique, dont la description est proposée § 1.2.4 (Fig. 1.6).

Par ailleurs, cet algorithme possède l'avantage non négligeable d'être inclus dans l'interface utilisateur STICS. Dans ce cadre, son adaptation est limitée à l'ajustement de cinq paramètres sur une ou plusieurs variables d'état. On note que la pondération est unique pour une même variable, quelle que soit la date de mesure de la variable (Houlès [129]), ce qui est fortement discutable comme nous le verrons.

6.1.3 Résultats

La minimisation de l'erreur entre les valeurs de LAI simulées par STICS et les mesures terrain a été effectuée par rapport aux 5 paramètres variétaux cités précédemment.

La RMSE avant étalonnage calculée après l'exécution de STICS sur la variété française (*Talent*) était de 2.2 sur l'ensemble des valeurs de LAI des 40 unités ADAM. Après l'étalonnage par l'algorithme de Nelder-Mead, la RMSE est de 0.25, ce qui constitue un progrès relativement satisfaisant. La simulation de la biomasse avec des valeurs *a priori* adaptées aux conditions ADAM a également été légèrement améliorée. Cela ne se constate pas sur les RMSE (2.9 $t.ha^{-1}$ contre 3.5 $t.ha^{-1}$) mais sur les valeurs finales, pour lesquelles la valeur au plateau est beaucoup moins sur-estimée qu'avec les valeurs de la variété *Talent*, du fait d'une importante amélioration du LAI maximal.

On constate Fig. 6.1 que si les simulations de LAI après étalonnage sont très proches des observations dans la plupart des cas (*e.g.* unité 05), elles représentent avec des difficultés certaines sa dynamique (très particulière à ADAM) en phase de croissance sur d'autres unités (*e.g.* unité 01). En particulier, le stade LAX est décalé en conséquence du retard du stade AMF, dont le paramètre déterminant $stlevamf$ a pourtant été optimisé. Ainsi, l'estimation des deux paramètres $stlevamf$ et $stamflax$ n'est pas satisfaisante. On peut proposer les raisons suivantes :

- Les données climatiques jouent un très grand rôle, et sont peut-être localement différentes selon les unités (en particulier la pluviométrie).
- Certains paramètres du sol ne sont peut-être pas assez bien connus, et/ou très différents d'une unité à l'autre.
- la méthode d'optimisation n'est pas apte à estimer les paramètres influents en début et fin de cycle. En effet, une même pondération sur tout le cycle pour une variable telle que le LAI pouvant évoluer de 0 à 7 ne permettra pas la minimisation de l'écart aux observations optimale sur les faibles valeurs.

6.1.4 Conclusion

La RMSE sur le LAI a été diminuée de façon conséquente par l'étalonnage de STICS avec l'algorithme du simplexe de Nelder-Mead sur la variété *Flamura*. Cet étalonnage réalisé sur les paramètres phénologiques étant significativement satisfaisant, il servira de référence pour représenter les conditions de l'expérimentation ADAM, en particulier pour effectuer l'analyse de sensibilité locale de STICS.

Cependant, le décalage entre les valeurs simulées et observées en début de cycle indique le besoin d'une nouvelle méthode moins limitée. La méthode d'assimilation variationnelle développée dans ce manuscrit est particulièrement robuste et n'est pas contrainte par le nombre de paramètres à estimer (dans une limite raisonnable). Elle permettrait d'effectuer un ajustement de certains paramètres variétaux (en prenant en compte les contraintes spatiales) en complément de l'ajustement d'autres paramètres ou conditions initiales. Nous proposons donc d'en étudier la faisabilité dans la partie suivante.

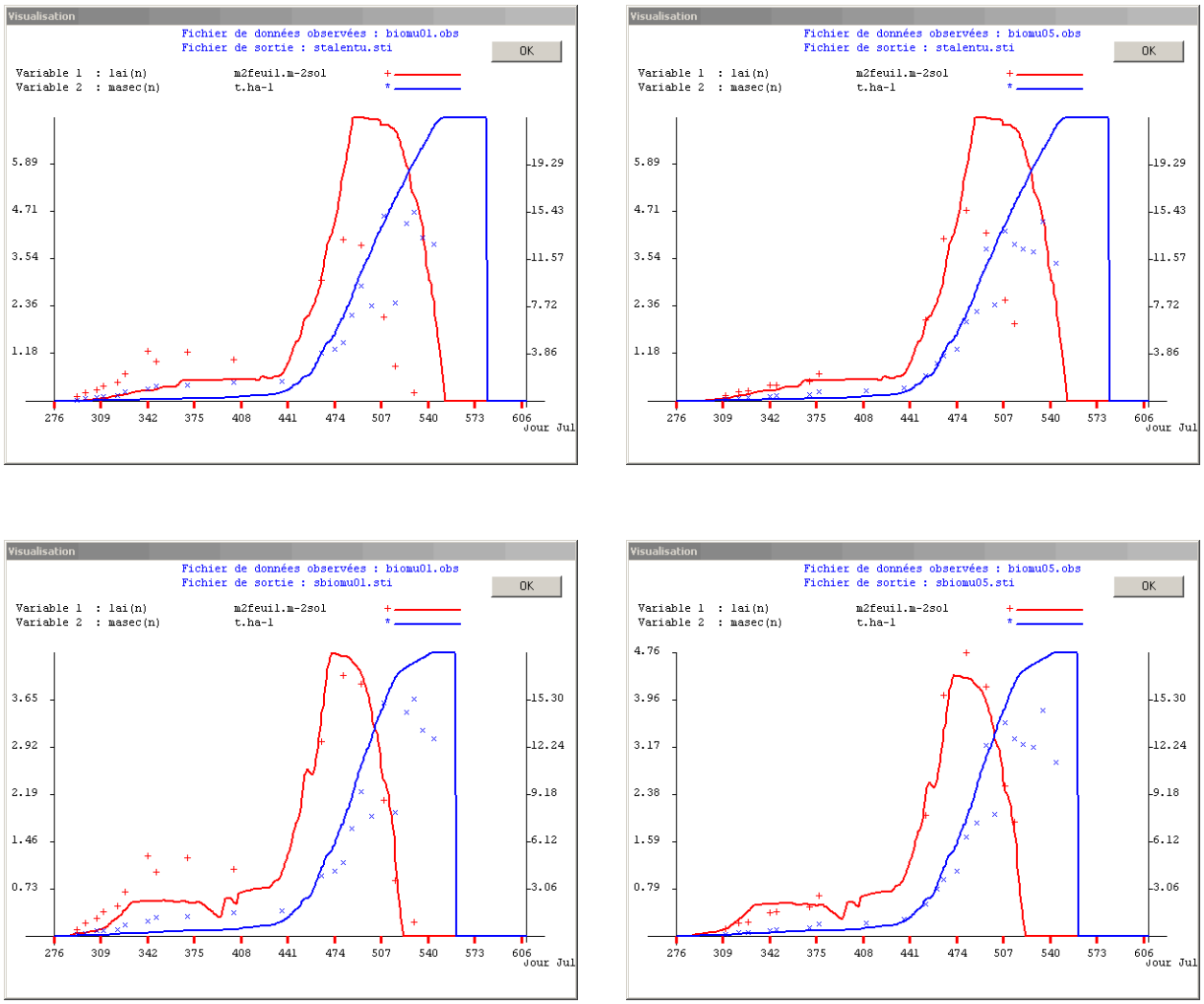

Fig. 6.1 – *Représentations effectuées par l'interface graphique de STICS des simulations de LAI et de biomasse sur deux unités différentes, avant étalonnage (figures du haut) et après étalonnage sur la variété roumaine Flamura par rapport au LAI (figures du bas).*

6.2 Faisabilité de la mise en œuvre de la méthode d'assimilation variationnelle dans STICS

La méthode d'assimilation variationnelle, si nous parvenons à la développer dans le modèle STICS, permettra de résoudre un certain nombre de problèmes d'identification de paramètres et d'analyses de sensibilité. La mise en œuvre d'une telle méthode, qui utilise le gradient de la fonction coût, nécessite la résolution du modèle adjoint. En pratique, ce modèle adjoint est obtenu par différentiation automatique. Si le code n'a pas été écrit dans le but d'être différentié, on peut se heurter à de nombreuses difficultés, comme Mazauric [183] qui en témoigne sur un modèle d'hydraulique fluviale avec le différentiateur Odyssée.

Le modèle STICS étant écrit en FORTRAN 77, il est donc théoriquement possible de calculer son adjoint avec le différentiateur automatique TAPENADE. La dernière version de TAPENADE (Version 2.1, datant de Janvier 2005), dont l'algorithme d'analyse data-flow a été largement amélioré par rapport aux premières versions, est capable de calculer les modèles tangent et adjoint de STICS en peu de temps. Cependant, les premières versions de TAPENADE, validées sur des modèles très déterministes, ne parvenaient pas à dériver ce modèle. Nous proposons donc de décrire les principaux problèmes rencontrés au cours du calcul du modèle adjoint et les raisons évoquées. Dans un second temps, nous présenterons les validations des modèles tangent et adjoint obtenus avec la dernière version de TAPENADE. Le modèle adjoint de STICS nous permettra d'analyser sa sensibilité dans la section suivante.

6.2.1 Difficultés de calcul du modèle adjoint de STICS

Avant d'appliquer la différentiation automatique (DA) à un code, il est indispensable d'avoir bien répondu aux questions suivantes :

- *Quelle est la* ***la branche du code direct à deriver et la routine tête*** *?*
- *Quelles sont les* ***variables dépendantes de sortie*** *dont on veut calculer les dérivées ?*
- ***Par rapport à quelles entrées indépendantes*** *veut-on dériver ?*

Notons que nous devons choisir des entrées et des sorties dérivables, en évitant les entiers, dont la dérivée est nulle.

Ces options de la DA sont primordiales et répondent à différents choix stratégiques. Par exemple, *préfère-t-on privilégier le temps de calcul ou l'universalité du code adjoint ?* En effet, le choix des variables de sortie dont on souhaite obtenir les dérivées n'étant pas limité, on peut demander à TAPENADE de les dériver toutes, par rapport à toutes les entrées. L'avantage incontestable de ce choix est que l'on aura ainsi à disposition toutes les dérivées. Les analyses de sensibilité au modèle, aussi variées soient-elles, ne demanderont pas de dériver à nouveau le modèle : le code adjoint *universel* aura seulement à être exécuté pour chaque nouvelle situation.

Dans un cadre général, cette option pose essentiellement des problèmes de coût de calcul. Dans le cas particulier de STICS, ceci est fortement déconseillé car le différentiateur automatique devra sauvegarder une quantité astronomique de trajectoires du fait de ses nombreux seuils. Nous pouvons cependant envisager que les progrès de TAPENADE pour effacer le "code mort" et les sauvegardes inutiles conduiraient à long terme à un unique adjoint de STICS multi-fonctions.

En pratique, de nombreux messages d'erreurs sont exprimés par TAPENADE [124]. Certains avertissements (warning) ne sont pas tous cruciaux, mais il est conseillé d'en résoudre un maximum car ils évoquent en particulier souvent un risque de discontinuité du contrôle. Il peut être utile de soulever quelques problèmes pratiques que nous avons rencontrés au cours de la dérivation de STICS, ne serait-ce que pour mieux comprendre le fonctionnement d'un différentiateur automatique :

- **Déclarations et imprécisions.** Afin de ne pas ajouter de risques d'erreur, il est préférable de déclarer clairement l'ensemble des variables et paramètres. Un "implicit none" dans chaque routine semble ainsi particulièrement raisonnable. En effet, si une variable n'est pas du tout ou mal déclarée, le différentiateur choisit implicitement le type qui lui paraît logique, ce qui génère des risques conséquents pour la cohérence du modèle. Par ailleurs, une déclaration des réels en DOUBLE PRECISION est conseillée afin d'améliorer la précision notamment

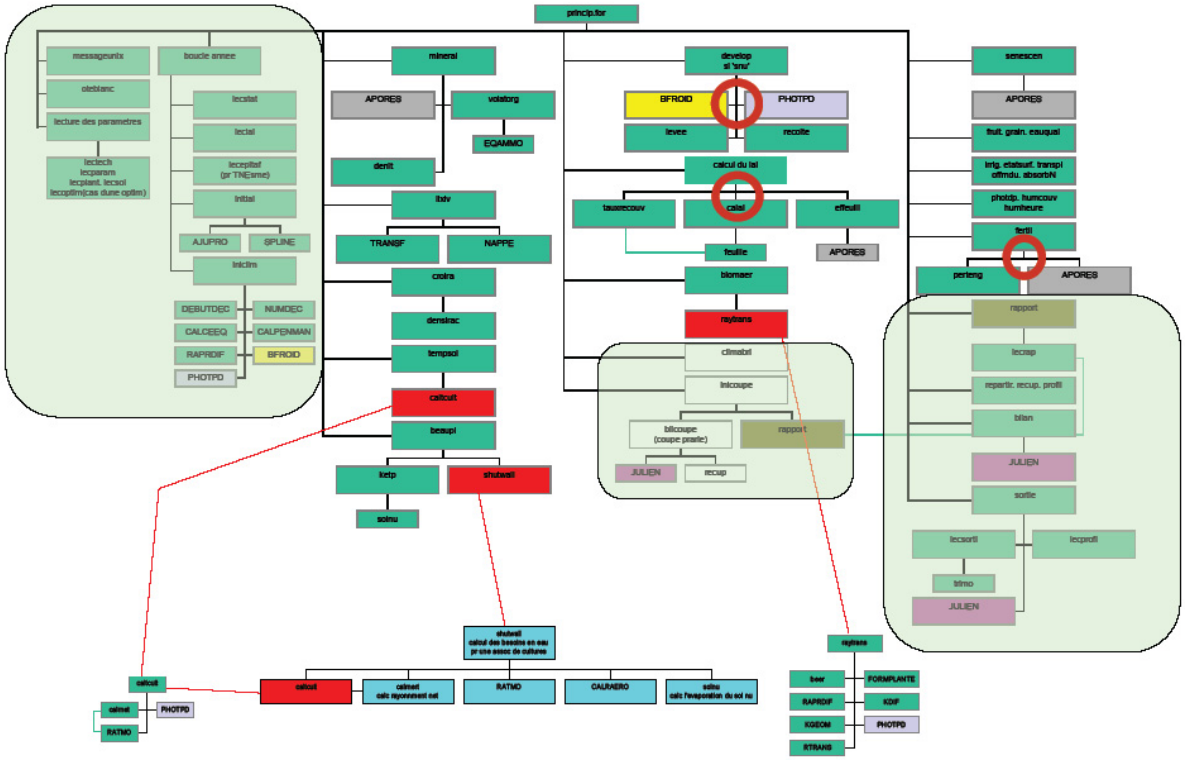

Fig. 6.2 – *Organigramme du code de STICS. Mise en évidence du code différentiable de STICS et isolement des routines de lecture et d'écriture. Les cercles rouges entourent des exemples de discontinuités dans le code.*

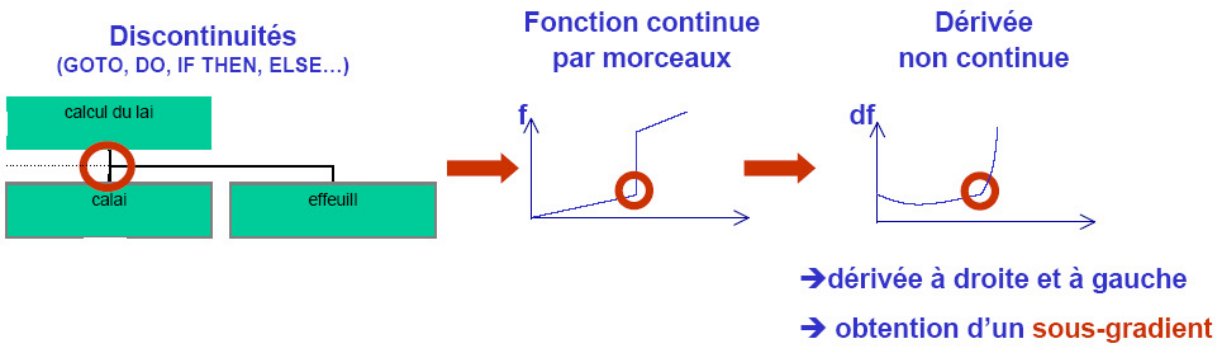

Fig. 6.3 – *Schéma représentant les conséquences d'une discontinuité dans le code : la fonction n'est pas continûment dérivable et on obtient une dérivée à gauche et à droite, autrement dit un sous-gradient au lieu d'un gradient.*

pour le calcul des dérivées. Le fait d'exécuter STICS plusieurs fois consécutivement pour effectuer les tests de validation a permis de constater que certaines variables sont légèrement modifiées. Cette dégradation très légère n'a pas de conséquence pour les variables d'intérêt de STICS, mais elle implique une perte de précision importante pour la validation avec les différences finies.

- Le second point important à considérer est l'**isolement de la partie différentiable** du code, et une mise en valeur **explicite** des variables et paramètres considérés. Nous avons isolé les parties du code correspondant à la lecture et à l'écriture de variables ainsi que certains modules inutiles dans notre situation tels que le climat sous abri (Fig. 6.2). Pour autant, TAPENADE ne parvenait pas à différentier les variables de sortie proposées par rapport aux variables d'entrée. Il est indispensable que les variables d'entrée dépendantes désignées au lancement de TAPENADE soient visibles depuis la routine tête du code : déclarées comme paramètres ou dans les fichiers COMMON. Les variables locales ne peuvent pas être prises en compte comme des directions de dérivation. STICS n'a pas été écrit de cette manière, puisqu'il lit les paramètres et variables, modifie les valeurs, les écrit dans les fichiers de sortie mais les variables d'intérêt ne sont jamais extériorisées.
- **Seuils, conditions, affectations et boucles.** Le modèle STICS contient une quantité très importante d'affectations (GOTO), de boucles (DO) et de conditions/seuils (IF THEN, ELSE), qui constituent des discontinuités dans le code (Fig. 6.2).

  Théoriquement, une fonction continue par morceaux n'est pas continûment dérivable, mais elle possède une dérivée à droite et une dérivée à gauche (Fig. 6.3). La différentiation d'un tel code ne permet donc pas d'obtenir un gradient du modèle mais un sous-gradient (voir remarque 25). Celui-ci se distingue du gradient par le fait principal qu'il dépend du point de départ du code adjoint, puisque le modèle adjoint est exécuté en sens rétrograde : partant du bas du diagramme vers le haut, il a donc autant de possibilités de chemins qu'il y a de branchages.

  En différentiation automatique, les discontinuités posent certains problèmes logiques, puisque cette méthode suppose qu'au voisinage d'un vecteur d'entrée, le contrôle du programme est constant. Or le modèle STICS est particulièrement sensible aux variations des paramètres d'entrée. Sa quantité importante de discontinuités implique que ses matrices de dépendances prennent des dimensions très larges et les épreuves que subit le différentiateur peuvent lui être fatales. Par exemple, pour chaque IF, il faut sauvegarder les trajectoires des variables, ainsi que la valeur du seuil pour appliquer la dérivation dans toutes les directions possibles. Dans le cas d'une boucle DO avec des entrées ou des sorties multiples, TAPENADE doit sauvegarder beaucoup d'information dans la boucle directe, et la boucle inverse peut être incapable de garder une structure propre [126]. Enfin, lorsque les GOTO sont imbriqués les uns dans les autres et/ou croisés, il lui est très fortement difficile de ne pas "perdre la trajectoire".

  C'est pourquoi la validation des codes tangents et adjoint par les différences finies s'avère **indispensable** dans ce type de problème.
- **Consommation de mémoire.** Le modèle adjoint initialement calculé par TAPENADE consommait trop de mémoire. Le code de STICS a donc été modifié par *checkpointing*. Cet arrangement a consisté à transformer la boucle principale de 400 itérations et deux boucles imbriquées de 20 itérations. C'est une technique simple à laquelle les spécialistes de la DA ont souvent recours, et qui permet à TAPENADE une consommation de mémoire nettement inférieure.

La dernière version du modèle STICS (STICS 6), si elle n'a pas été particulièrement adaptée à la différentiation automatique, a subi tout de même de fortes modifications allant en ce sens. De même, l'évolution constante du différentiateur automatique TAPENADE (en particulier suite aux difficultés rencontrées avec STICS) nous permettent d'envisager l'avenir de la différentiation de STICS sans plus aucune zone d'ombre.

Remarque 25.
En pratique, le fait de calculer un sous-gradient ne posera pas de problème pour l'analyse de sensibilité ou pour l'assimilation de données. En effet, la sensibilité locale se calcule et n'est valable qu'au voisinage des points où elle est évaluée et les algorithmes de minimisation tels que M1QN3 utilisés dans le processus d'assimilation résolvent les problèmes d'optimisation avec un sous-gradient.

6.2.2 Première validation des modèles tangent et adjoint

Le nombre de sorties et d'entrées par rapport auxquelles le modèle est différentié a été restreint afin de ne pas entraîner un coût de mémoire trop important sur les machines disponibles. Nous avons donc effectué différentes dérivations de STICS, selon l'objectif. Dans un premier temps, le choix s'est porté sur 6 entrées et 7 sorties particulièrement non triviales afin de pouvoir affirmer que le modèle STICS est différentiable. Les entrées sélectionnées sont les suivantes :

- *tmax* (°C) : température maximale de l'air ;
- *hcc* (% pondéral) : humidité à la capacité au champ ;
- *adens* : paramètre de compensation entre le nombre de tiges et la densité de plantes ;
- *nbgrmax* (grains m-2) : nombre maximal de grains ;
- *Norg* (% pondéral) : teneur en azote organique de la couche labourée.

et les sorties :

- *LAI* : indice foliaire
- *masec* ($t.ha^{-1}$) : biomasse
- *qnplante* ($kgN.ha^{-1}$) : quantité d'azote dans la plante
- *resmes* (mm) : quantité d'eau du sol sur la profondeur de mesure
- *azomes* ($kgN.ha^{-1}$) : quantité d'azote minéral sur la profondeur de mesure
- *et* ($mm.j^{-1}$) : évapotranspiration journalière
- *nbgrains* : nombre de grains

Pour valider le modèle tangent, le test de Taylor a été appliqué. Nous rappelons qu'il consiste à montrer que la limite de

$$\frac{N(v+\alpha\delta v)-N(v)}{\alpha < \nabla N(v), \delta v >}$$

est 1 lorsque α tend vers 0, où : v est l'ensemble des sorties non triviales sélectionnées du modèle ; δv une perturbation sur v ; et N est une fonctionnelle adaptée à notre objectif (ici la norme euclidienne), et dont le gradient est donné par le code tangent.

Le test converge effectivement vers 1 pour $\alpha = 2^{-16}$ et valide le mode tangent. Par un second test effectué dans plusieurs directions de perturbation (Tab. 6.2), le mode adjoint est validé par rapport au code tangent, et nous proposons une troisième validation avec les différences finies. Pour ce test, notons que l'exécution du mode adjoint nécessite un temps système 150 fois plus important que le mode direct :

1. modèle direct : 0.21
2. modèle tangent : 0.39
3. modèle adjoint : 30.96

Ce temps d'exécution est exceptionnel, puisque le modèle adjoint d'un code adapté nécessite théoriquement un temps au maximum 2 fois supérieur au mode direct, indépendamment du nombre de variables choisies. Ceci provient du fait que TAPENADE doit effectuer un très grand nombre de recalculs pour limiter les sauvegardes, mais également des nombreuses discontinuités du modèle STICS.

6.3 Analyse de sensibilité de STICS

Quelques analyses de sensibilité globales ayant déjà été appliquées à STICS (*e.g.* Ruget *et al.* [223] ; Houlès [129]), les paramètres les plus influents de chaque module, en particulier sur le LAI

α	limite	α	limite
$1/2$	1.025290793180800	$1/2^{14}$	1.000024253127241
$1/2^2$	0.9988155707818244	$1/2^{15}$	1.000024378663358
$1/2^3$	1.011366250397050	$1/2^{16}$	1.000022725303157
$1/2^4$	1.012128834995383	$1/2^{17}$	1.000023812143104
$1/2^5$	1.002585940421316	$1/2^{18}$	1.000026553886557
$1/2^6$	1.164728846919915	$1/2^{19}$	1.000034450295426
$1/2^7$	1.516795844871645	$1/2^{20}$	0.9999981800417959

TAB. 6.1 – *Validation du modèle tangent de STICS par le test de Taylor.*

prod. scal.	direction 1	direction 2	direction 3
$a =< V_d, V_d >$	337975.1974809250	1812380.726231579	422453.8097818732
$b =< U_b, U_d >$	337975.1974809250	1812380.726231580	422453.8097818734
$< DD, DD >$	337975.1922981086	1812636.888981656	422469.8942484537

TAB. 6.2 – *Test du produit scalaire sur le tangent (a) et l'adjoint (b) de STICS, avec une troisième validation par les différences finies($< DD, DD >$), à partir de perturbations dans trois directions $\delta u = U_d$.*

et la biomasse sont déjà bien connus. Les analyses de sensibilité globales effectuées se basent sur un échantillonnage dont les résultats dépendent fortement. Houlès montre notamment que le nombre d'itérations de la méthode MCIP ainsi que la qualité de l'information *a priori* modifie les hiérarchies. De manière générale, on constate dans ces analyses sur STICS que tout changement de situation (agronomique, pédologique, climatique) nécessite une nouvelle mise en pratique de la méthode, ce qui représente un coût de calcul relativement coûteux.

Pour autant, il n'a jamais été effectué d'analyse de sensibilité en mode inverse permettant de calculer les dérivées exactes dans le cadre de l'assimilation de données. Nous proposons donc d'exploiter le modèle adjoint pour établir une analyse de sensibilité locale et inverse par rapport aux variables de sortie qui nous intéressent *a priori* , le LAI et la biomasse. Outre une meilleure compréhension du modèle par l'interprétation des dérivées exactes de ses variables d'entrée, cette sensibilité locale sera particulièrement utile pour la mise en œuvre de la méthode d'assimilation dans STICS par le modèle adjoint.

6.3.1 Sélection des paramètres d'entrée pour l'analyse de sensibilité des variables de sorties

Le modèle adjoint de STICS a cette fois été calculé par rapport aux variables d'intérêt (LAI et $masec$). Les fonctions réponses proposées sont les intégrales du LAI et de la biomasse sur l'ensemble du cycle (jusqu'à l'instant T), afin de représenter en particulier la sensibilité de la dynamique de croissance :

$$G_{LAI} = \sum_{i=1}^{T} LAI(t)$$

$$G_{biomasse} = \sum_{i=1}^{T} masec(t)$$

Comme nous l'avons déjà précisé, les paramètres les plus influents sur le LAI sont ceux qui agissent directement sur sa dynamique, c'est-à-dire les paramètres variétaux aux valeurs étalonnées auparavant. Nous leur ajoutons le paramètre $dlai_{max}brut$ (ou $dlai_{max}$ selon l'option croissance nette ou brute du LAI), qui caractérise fortement la croissance aérienne (TAB. 3.3). De plus, les paramètres influant essentiellement sur l'accumulation de biomasse aérienne sont les paramètres d'efficience, qui sont identifiés séparément selon les stades phénologiques (cf FIG. 3.5 représentant les stades) :

- $efcroijuv$, l'efficience de croissance maximale pendant la phase juvénile, entre les stades LEV et AMF ;
- $efcroiveg$, l'efficience de croissance maximale pendant la phase végétative (AMF-DRP) ;
- $efcroirepro$, efficience de croissance maximale pendant la phase de remplissage des grains (DRP-MAT).

En plus de ces trois efficiences ($g.MJ^{-1}$), un paramètre caractéristique de la plante et *a priori* très influent sur la biomasse a été pris en compte : $vmax2$, qui exprime la vitesse maximale d'absorption du nitrate par le système des racines ($\mu mole.cm^{-1}.h^{-1}$).

Pour calculer la sensibilité locale, nous avons choisi de nous placer dans le cadre de l'expérimentation ADAM. Entre les informations accumulées dans la base de données et l'étalonnage effectué sur les paramètres variétaux, nous pouvons considérer que nous sommes, dans la limite du possible, dans des conditions représentatives des cultures de blé de Fundulea en 2000-2001. La sensibilité locale sera donc effectuée au voisinage des valeurs nominales récapitulées dans le tableau suivant :

Param.	valeur
$dlai_{max}brut$	0.00044
$stlevamf$	208.298
$stamflax$	181.688
jvc	35.00
$durvieF$	160.00
$adens$	-0.60
$efcroijuv$	2.200
$efcroiveg$	4.250
$efcroirepro$	4.250
$vmax2$	0.050

Tab. 6.3 – *Valeur des paramètres au voisinage desquels la sensibilité est calculée après étalonnage de ceux dépendant de la variété sur la base ADAM.*

6.3.2 Validation des modèles tangent et adjoint par rapport au LAI et la biomasse

Nous présentons Tab. 6.4 les résultats obtenus par les différences finies et les modèles tangent et adjoint calculés par TAPENADE par rapport aux variables de sortie LAI et $masec$. Ces résultats confirment la validité de la différentiation. Notons que le test des différences finies n'est pas égal jusqu'à la dernière décimale aux produits scalaires tangent et adjoint, ce qui provient d'une perte de précision significative du modèle STICS (en particulier due aux déclarations en REAL et non en DOUBLE PRECISION de la plupart des variables). Enfin, le temps d'exécution du modèle adjoint met en évidence les non-linéarités de STICS par rapport aux variables considérées : le modèle tangent s'exécute en 1.3 fois le temps du modèle direct. Le modèle adjoint, lui, nécessite un coût de calcul 156 fois supérieur.

prod. scal.	direction	temps rel.
$< DD, DD >$	58085689735.45715	1
$a =< V_d, V_d >$	58085668085.30157	1.3
$b =< U_b, U_d >$	58085668085.30161	156

Tab. 6.4 – *Test du produit scalaire sur le tangent (a) et l'adjoint (b) de STICS, avec validation du tangent par les différences finies($< DD, DD >$), à partir de perturbations dans une direction. La troisième colonne indique les temps relatifs d'exécution de chacun des trois modes (direct, tangent, adjoint).*

6.3.3 Résultats de sensibilité du LAI et de la biomasse

L'analyse de sensibilité de la variable LAI a mené aux conclusions suivantes : les paramètres les plus influents sur la fonction réponse G_{LAI} parmi ceux que nous avons considéré ici sont $adens$ à 47%, $dlai_{max}brut$ à 21%, $stlevamf$ à 17%, jvc à 10%, et enfin $stamflax$ à 2% (Fig. 6.4 ; Tab. 6.5).

Pour la fonction réponse $G_{biomasse}$, nous observons que la hiérarchie est modifiée par la forte influence de l'efficience $efcroiveg$ qui est similaire à celle de $adens$ (27%). $stlevmaf$ et $dlai_{max}brut$ sont également équivalents (14 et 12%). Enfin, on constate une sensibilité relativement faible (5% et 3%) de la biomasse intégrée sur le cycle aux deux autres paramètres d'efficience $efcroirepro$ et $efcroijuv$ (Fig. 6.5 ; Tab. 6.6).

Si ces conclusions vont globalement dans le sens des autres analyses de sensibilité déjà effectuées sur STICS par les méthodes globales, nous constatons deux différences principales :

- les influences des paramètres $efcroirepro$ et $efcroijuv$ sont très faibles. Ces efficiences sont caractéristiques de certains stades, de même que $efcroiveg$. Comme nous avons fait le choix d'étudier l'intégrale du LAI sur le cycle, il semble logique que $efcroiveg$ joue le rôle le plus important. Une analyse de l'intégrale du LAI entre deux stades consécutifs seulement, tels que DRP à MAT, conduirait certainement à une autre sensibilité. De même, un calcul des dérivées des variables LAI et $masec$ à chaque pas de temps mettrait en évidence ces caractéristiques liées à la phénologie.
- le paramètre $durvieF$, qui était considéré comme très influent par Houlès [129] avec la méthode MCIP, n'affecte aucunement l'intégrale du LAI dans nos conditions. Rappelons que la sensibilité avec le modèle adjoint est valable au voisinage des valeurs auxquelles elle a été calculée. Par ailleurs, les conditions de travail de Houlès et en particulier la variété utilisée sont très différentes.

Afin de compléter ces premiers résultats, il faudrait continuer sur les deux étapes suivantes :

1. effectuer l'analyse de sensibilité multi-locale comme pour BONSAÏ (§ 4.3.2), afin de généraliser la hiérarchie sur l'ensemble des valeurs possibles des paramètres dans les conditions ADAM ;
2. appliquer cette analyse dans d'autres conditions (climatiques, pédologiques...) pour vérifier que la hiérarchie est conservée de manière générale.

Appliquer l'analyse de sensibilité dans d'autres conditions ne nécessite pas, contrairement aux autres méthodes, une remise en pratique : il suffit d'exécuter le modèle adjoint avec les nouveaux fichiers climatiques et techniques.

Le test préliminaire que nous proposons en ce sens est effectué dans des conditions totalement différentes de la Roumanie, provenant de la validation de STICS (Brisson *et al.* [38]) : climat, sol et itinéraires techniques du Bassin de Paris en 1994-1995, variété *Talent* (Tab. 6.7). Pour le LAI (Fig. 6.6) comme pour la biomasse (Fig. 6.7), l'analyse détermine la même hiérarchie des paramètres que dans les conditions ADAM. La généralisation de ces premiers résultats semble cependant peu probable puisque le changement des conditions climatiques et pédologiques devrait modifier la hiérarchie des facteurs limitants (stress) et donc l'influence de certains paramètres.

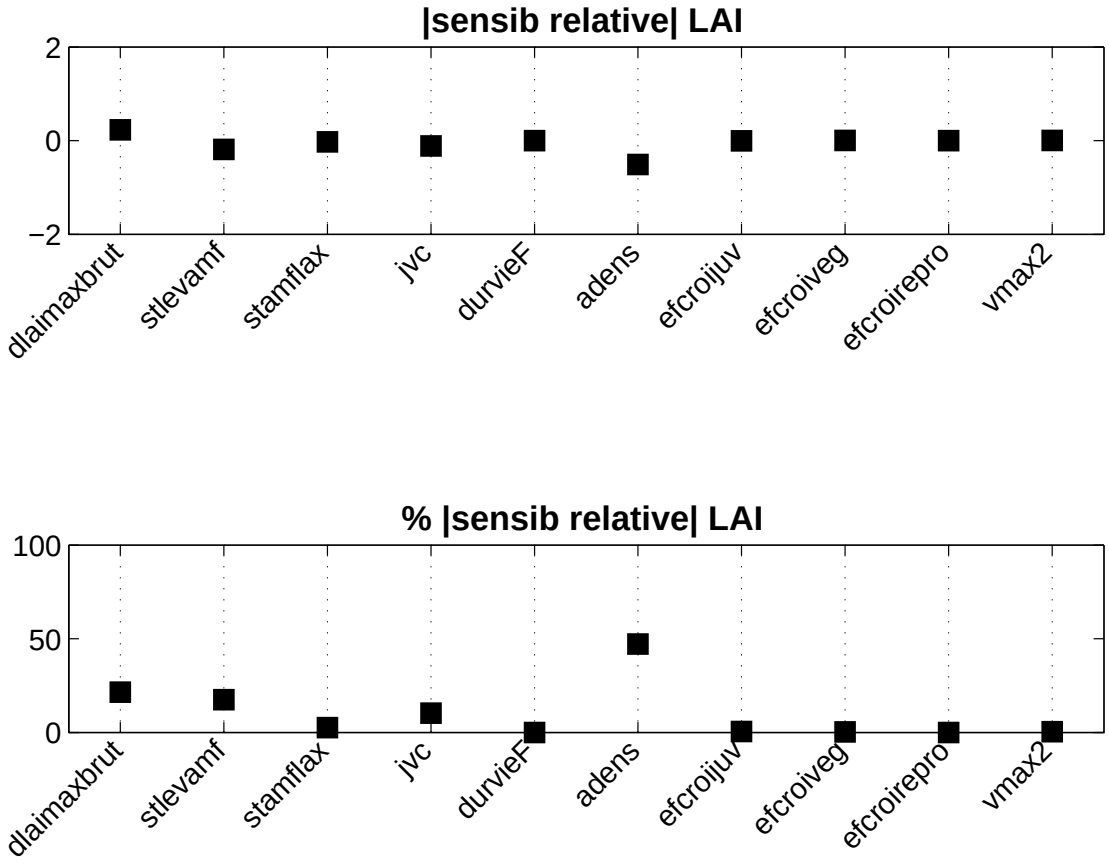

Fig. 6.4 – *Sensibilité relative du LAI en valeurs réelles et en pourcentage, au voisinage des valeurs après étalonnage sur la base ADAM.*

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% sensib. relative
$adens$	1304.48	-2.12	47.13
$dlai_{max}brut$	809538.76	0.96	21.45
$stlevamf$	-1.39	-0.78	17.42
jvc	-4.88	-0.46	10.28
$stamflax$	-0.24	-0.12	2.61
$efcroijuv$	-3.60	-0.02	0.48
$vmax2$	119.97	0.02	0.36
$efcroiveg$	1.06	0.01	0.27
$durvieF$	0.00	0.00	0
$efcroirepro$	0.00	0.00	0

Tab. 6.5 – *Sensibilité de la variable d'état LAI en fonction des paramètres au voisinage des valeurs après étalonnage sur la base ADAM.*

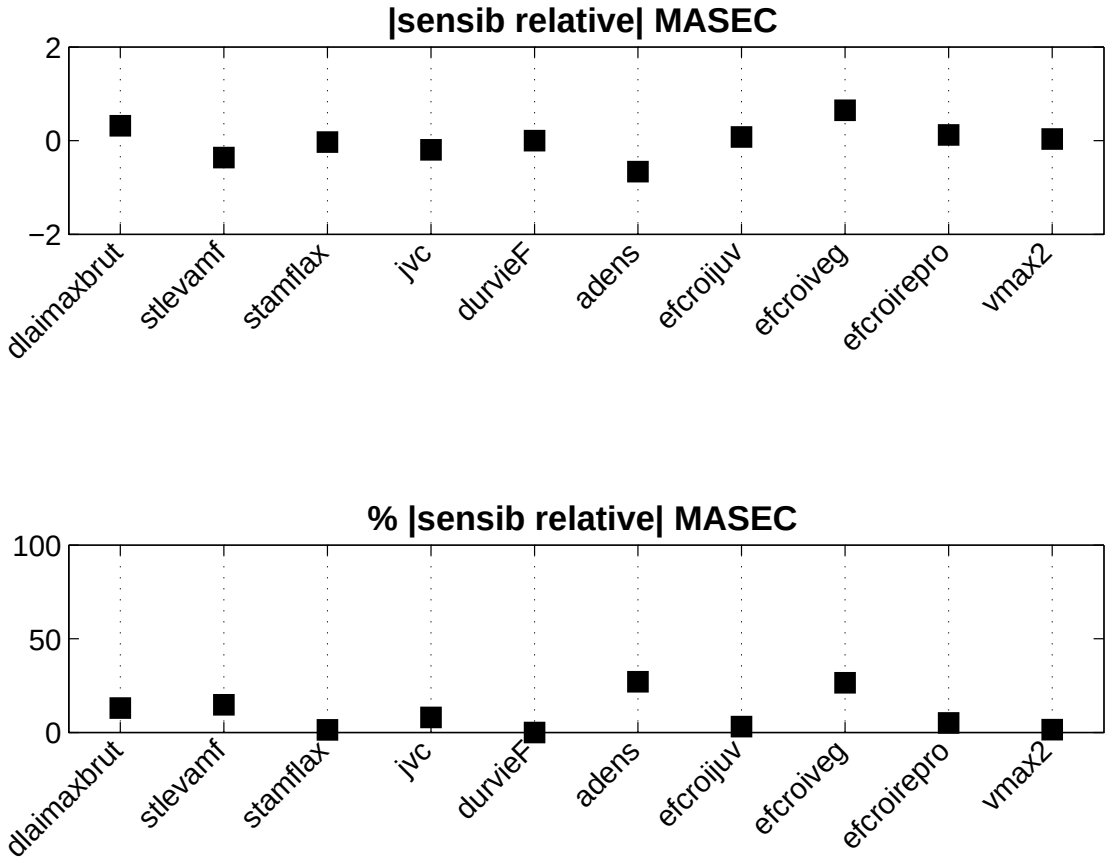

FIG. 6.5 – *Sensibilité relative de la variable masec en valeurs réelles et en pourcentage, au voisinage des valeurs après étalonnage sur la base ADAM.*

Param.	Sensib. brute	Sensib. relative	% sensib. relative
$adens$	1696.50	-0.66	27
$efcroiveg$	234.76	0.65	26,47
$stlevamf$	-2.66	-0.36	14,71
$dlai_{max}brut$	1111393.97	0.32	12,97
jvc	-8.58	-0.20	7,96
$efcroirepro$	44.63	0.12	5,03
$efcroijuv$	53.33	0.08	3,11
$vmax2$	1084.98	0.04	1,44
$stamflax$	-0.27	-0.03	1,31
$durvieF$	0.00	0.00	0

TAB. 6.6 – *Sensibilité de la variable d'état masec en fonction des paramètres au voisinage des valeurs après étalonnage sur la base ADAM.*

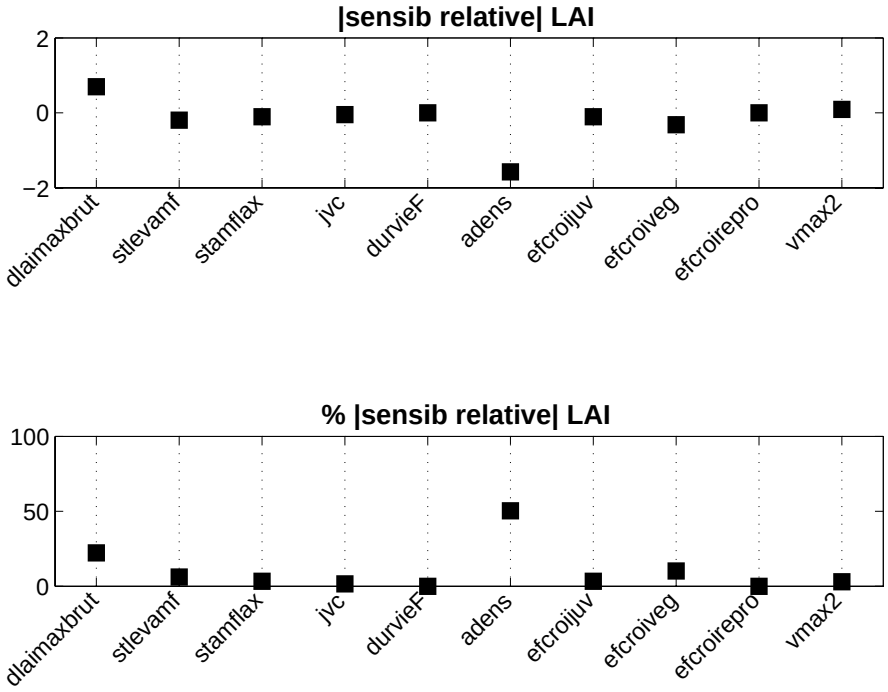

Fig. 6.6 – *Sensibilité relative de la variable masec en valeurs réelles et en pourcentage, au voisinage des valeurs de la base de données Bassin de Paris et la variété Talent.*

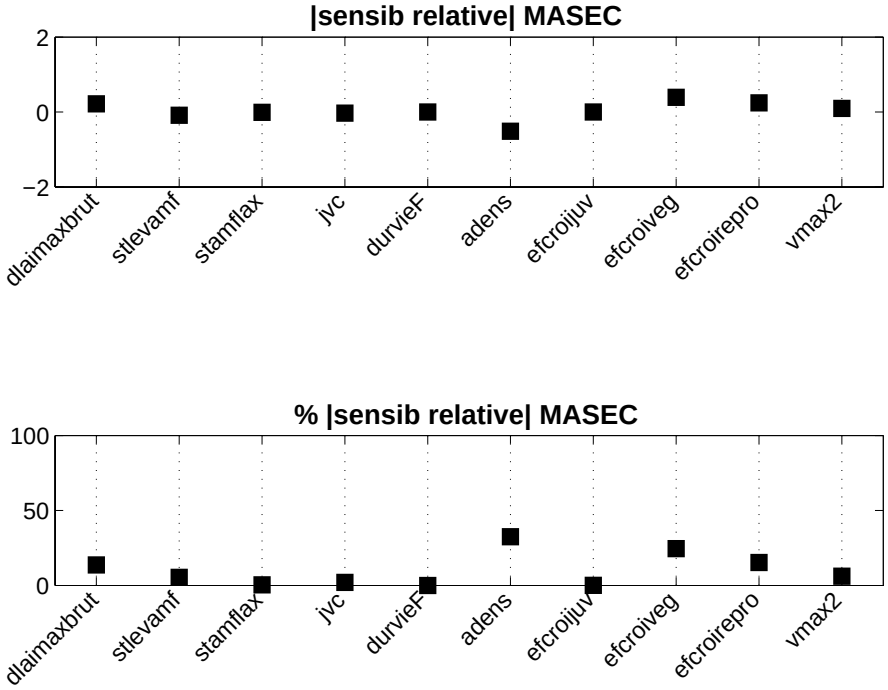

Fig. 6.7 – *Sensibilité relative de la variable masec en valeurs réelles et en pourcentage, au voisinage des valeurs de la base de données Bassin de Paris et la variété Talent.*

Param.	valeur
$dlai_{max}brut$	0.00044
$stlevamf$	246.256
$stamflax$	260.787
jvc	50.00
$durvieF$	200.00
$adens$	-0.60
$efcroijuv$	2.20
$efcroiveg$	4.250
$efcroirepro$	4.250
$vmax2$	0.050

TAB. 6.7 – *Valeur des paramètres au voisinage desquels la seconde sensibilité est calculée : climat, sol et itinéraires techniques du Bassin de Paris et variété Talent.*

6.3.4 Conclusion et perspectives sur l'analyse de sensibilité

Si la sensibilité des variables de sortie de STICS a déjà été évaluée dans plusieurs études, la méthode appliquée ici n'avait jamais été développée sur un modèle agronomique. Le modèle adjoint permet une analyse inverse interprétable dans le cadre de l'assimilation.

Cependant, l'analyse que nous avons effectuée pourra être largement approfondie. Il a été démontré que les paramètres de STICS n'ont pas tous la même sensibilité selon le stade phénologique. On peut supposer qu'une analyse de sensibilité pour chaque stade apporterait certainement plus d'information, en particulier pour les paramètres d'efficience et les durées entre deux stades.

Une analyse multi-locale s'avère également nécessaire pour établir une hiérarchie moyenne dans nos conditions. En effet, nous ne pouvons nous satisfaire d'une analyse en un seul point, puisque, de part l'aspect local de la méthode, ses résultats dépendent totalement de l'étalonnage que nous avons effectué.

6.4 Conclusion

Nous avons démontré la faisabilité de l'application de la méthode variationnelle de l'adjoint dans le modèle STICS. Le calcul de l'adjoint, avec les progrès effectués en différentiation automatique, les connaissances accumulées au cours de ces expériences, et l'adaptation du code de STICS ne représente plus une épreuve insurmontable et présente de nombreuses perspectives d'application.

- Le nombre illimité (dans la limite du coût de calcul) de variables de sorties et d'entrées par rapport auxquelles on peut calculer le modèle adjoint lui confère un aspect complet. De fait, l'**analyse de sensibilité** permettra d'anticiper le manque de déterminisme de STICS pour représenter certains processus et d'orienter l'attention des utilisateurs de STICS sur certains modules, paramètres ou variables selon leurs objectifs. Le domaine agronomique a la particularité problématique de considérer des variables d'intérêt (biomasse totale, rendement, bilans...) qui ne sont pas observables par télédétection. Elles ne peuvent donc être assimilées dans le modèle. L'analyse de sensibilité permettra de quantifier la sensibilité de ces variables à celles que nous assimilons (LAI, fAPAR...).
- Par **assimilation**, nous pourrons estimer les paramètres et variables d'entrée difficiles à déterminer pour diverses raisons et formuler un diagnostic de l'état de la culture en temps réel. Il sera également possible d'établir un pronostic de la production et donc de participer au raisonnement des pratiques culturales.

  Enfin, toutes ces opportunités pourront tenir compte de l'**aspect spatial**. Nous pourrions adapter la méthode évaluée sur BONSAÏ (cf chapitre 5), en imposant des contraintes spatiales à STICS. En effet, puisque nous avons pu calculer le modèle adjoint de STICS, nous pouvons également affirmer que le modèle adjoint de MACRO-STICS sera disponible. Ceci

représenterait un intérêt nettement supérieur à l'application avec MACRO-BONSAÏ, puisque les paramètres de STICS ont une signification plus précise au niveau des processus. Par exemple, les niveaux de dépendance suivants pourraient être considérés :
- au niveau intraparcellaire/pixellaire, les paramètres du sol tels que NO, hcc, $Ninit$, $q0\ldots$;
- au niveau parcellaire, les itinéraires techniques : quantité de fertilisation, date de semis $iplt\ldots$;
- au niveau variétal, les paramètres $durvieF$, $adens$, $stlevamf$, $stamflax\ldots$

Par ailleurs, le nombre important de paramètres de STICS mettrait d'autant plus en évidence l'intérêt des contraintes spatiales. En effet, les contraintes ajoutent de la robustesse en diminuant l'espace total de contrôle par rapport à une méthode d'assimilation pixel par pixel.

Ainsi, l'adjoint de STICS pourra être largement exploité et représente un outil opérationnel pour la communauté agronomique, tant pour effectuer des analyses de sensibilité locales dans toutes les conditions, que pour intégrer l'information satellitaire par assimilation.

Conclusion

Rappel des objectifs

Cette thèse se place dans le cadre du projet ADAM, dont la vocation est d'extraire, à l'aide de données de télédétection, l'information sur les cultures utile à une conduite optimale, à l'estimation de la production et à l'évaluation de la qualité de l'environnement.

Le développement de la modélisation du fonctionnement des couverts végétaux a ouvert de nouvelles possibilités de diagnostic et de pronostic de l'état des cultures et des bilans environnementaux. Bien que basés sur des approximations de certains processus, ces modèles sont relativement complexes et nécessitent en entrée un grand nombre de paramètres et de variables, qui peuvent évoluer dans l'espace et dans le temps et dont nous ne pouvons identifier qu'une partie. Il est donc nécessaire de proposer des techniques permettant d'estimer au mieux ces variables et paramètres mal connus, afin d'améliorer les performances de simulation de ces modèles. L'assimilation, combinant des modèles à des mesures, offre une perspective intéressante que nous nous sommes proposé d'étudier.

Les divers travaux effectués jusqu'à présent par la communauté agronomique ont montré l'intérêt potentiel de différentes approches (en grande majorité par des algorithmes de recherche directe), mais ils ont également soulevé le manque de robustesse des méthodes utilisées. Cette thèse avait pour objectif de démontrer la faisabilité et la robustesse d'une nouvelle technique d'assimilation de données de télédétection dans un modèle de fonctionnement de la végétation. Nous nous sommes posé les questions suivantes :

- *quelle méthode d'assimilation utiliser* (correction/re-calibrage) *?*
- *quelles variables d'état assimiler ?*
- *comment choisir les paramètres à estimer ?*
- *comment prendre en compte l'aspect spatial spécifique des observations de télédétection, et en particulier, quels champs de contraintes imposer ?*
- *quelle importance accorder à l'information a priori , et comment la définir ?*

Dans l'application opérationnelle de la méthode, il nous a également fallu réfléchir à l'*échantillonnage temporal optimal*. Il devra permettre de définir les spécifications de futures missions spatiales dédiées à cette thématique.

Stratégies de recherche

Parmi l'ensemble des méthodes proposées par la communauté scientifique, nous avons choisi de développer une méthode de re-calibrage, compte tenu des objectifs de prévision à moyen terme de la production et des bilans environnementaux. Nous avons opté pour une méthode fondée sur la théorie du contrôle optimal. L'originalité de notre travail a consisté à adapter cette méthode variationnelle développée et utilisée maintenant de manière opérationnelle par les météorologues et océanographes à un problème agronomique.

En effet, les problèmes des agronomes sont très différents des problèmes inverses résolus par ces deux disciplines, qui se traduisent plutôt en *contrôle de conditions initiales* afin d'intégrer le système pour faire de la prévision. La taille des problèmes agronomiques, de par leur aspect local, est nettement inférieure à celles des problèmes de prévision météorologique et océanographique dont les écoulements évoluent de façon spatiale et temporelle (4D). En agronomie, les variables assimilées (LAI) ne correspondent pas aux conditions initiales des variables d'intérêt (par exemple, le rendement). Le problème se pose donc essentiellement en *estimation de paramètres* plus qu'en estimation de variable d'état, mais l'hétérogénéité des paramètres et variables d'entrée des modèles de culture complexifie le problème. D'autre part, ces modèles ne reposent sur aucune loi exacte. De fait, l'évolution du couvert végétal est modélisée par des équations non continues et nous nous trouvons face à des processus non différentiables, ce qui peut poser de nombreux problèmes théoriques et pratiques.

La méthode d'assimilation variationnelle que nous avons développée nécessite le calcul du gradient d'une fonction coût représentant l'écart entre les observations et les simulations du modèle. Ce gradient est obtenu par la résolution du système adjoint matérialisé par la différentiation du modèle.

Le modèle adjoint, une fois calculé, présente de plus l'avantage d'effectuer de manière exhaustive et exacte diverses analyses de sensibilité des variables d'état aux entrées du modèle. L'analyse de sensibilité permettra de hiérarchiser les paramètres et éventuellement d'en sélectionner certains pour l'assimilation.

La variable d'état *indice foliaire* représente l'interface principale entre l'observation de télédétection et la modélisation du fonctionnement de la végétation. Plutôt que d'assimiler directement les observations de télédétection (réflectances), nous avons choisi de réaliser l'assimilation en deux étapes, pour en assurer un meilleur contrôle : après avoir estimé par des méthodes classiques l'indice foliaire à partir des observations satellitaires, nous avons assimilé cette pseudo-observation dans le modèle de fonctionnement de la végétation.

L'hétérogénéité des nombreux paramètres du modèle nous mène de façon générale à résoudre un problème mal posé par sa sur-détermination. La prise en compte de l'aspect spatial des données de télédétection doit permettre de réduire le nombre de degrés de liberté du problème. Pour ce faire, nous avons proposé une approche originale exploitant des contraintes spatiales définies par une hiérarchisation des paramètres. Elle nécessite de réaliser l'assimilation sur un ensemble significatif de pixels, augmentant la taille de l'espace de contrôle. L'utilisation de l'adjoint est particulièrement adaptée à la résolution de problèmes de taille importante comme celui-ci.

Enfin, nous avons considéré deux classes de modèles :

- ⇝ **le modèle d'intérêt,** un modèle de fonctionnement de la végétation mécaniste complet et complexe (STICS). L'assimilation des pseudo-observations dans le modèle STICS représente l'objectif à moyen terme que vise une bonne partie de la communauté scientifique. Ce travail constitue une étape importante de la faisabilité d'un tel objectif.
- ⇝ **le modèle d'étude,** BONSAÏ, qui nous a permis de supporter notre stratégie de recherche. Ce modèle semi-mécaniste, développé pour l'occasion, a contribué à maîtriser les différentes étapes et problèmes associés à l'assimilation variationnelle par modèle adjoint et à démontrer l'intérêt de la prise en compte des contraintes spatiales. En outre, son couplage à un modèle de biomasse (BONSAÏ-BIO) a permis d'étudier le problème, caractéristique des agronomes, de devoir assimiler des variables autres que les variables d'intérêt, puisqu'ils n'ont pas accès à ces dernières par télédétection.

L'ensemble de ce travail a été réalisé sur des expérimentations numériques (*expériences jumelles*) qui permettent de valider la mise en œuvre et de bien appréhender un certain nombre de problèmes. Il a également porté sur une expérimentation effectuée en conditions naturelles dans le cadre du projet ADAM, sur des parcelles de blé dans la plaine du Danube en 2000-2001, complétée par une importante série d'images SPOT à haute fréquence temporelle.

Synthèse des résultats et perspectives

Estimation de pseudo-observations de télédétection

Nous avons dans un premier temps estimé les pseudo-observations de LAI à partir des données de télédétection SPOT de la base ADAM. Pour ce faire, nous avons testé trois méthodes d'estimation du LAI à partir de la réflectance du couvert végétal. Ces tests ont évalué la capacité des méthodes à (`i`) reproduire les valeurs des mesures terrain et (`ii`) restituer une dynamique cohérente.

Les résultats montrent des performances relativement satisfaisantes pour les trois méthodes. La méthode basée sur des régressions empiriques assure néanmoins la meilleure précision d'estimation de l'indice foliaire. Pourtant, son extrapolation à d'autres conditions expérimentales est risquée, ce qui restreint de fait son champ d'applications. A l'opposé, la méthode semi-empirique, basée sur le calcul du NDVI, et la méthode d'inversion du modèle de transfert radiatif fournissent des performances légèrement dégradées, mais peuvent plus facilement s'appliquer dans un cadre opérationnel. On observe toutefois un décalage temporel significatif, se traduisant par une sur-estimation

ou une sous-estimation en fonction du stade phénologique. La structure temporelle des résidus est vraisemblablement liée à une imparfaite description de la variabilité phénologique de la constitution du couvert. Ces résultats mettent en évidence le besoin d'une adaptation des modèles de transfert radiatif. Les résidus caractérisent l'erreur du modèle d'observation (passage d'observations de télédétection aux pseudo-observations), nous les avons donc intégrés dans la fonction coût lors de l'assimilation de LAI.

Développement de la méthode d'assimilation dans BONSAÏ

Compte tenu de la nature souvent mal posée des problèmes, liée aux erreurs de mesure de modèle et de sous-détermination/sur-paramétrisation, nous avons choisi d'utiliser une approche bayésienne pour régulariser la fonction coût, basée sur la connaissance *a priori* des distributions des paramètres.

La méthode d'assimilation dans BONSAÏ a tout d'abord été appliquée avec des expériences jumelles, pour lesquelles les observations de LAI ont été simulées par le modèle et bruitées. De nombreuses expériences différentes ont ainsi pu être testées, afin d'étudier l'influence (`i`) du nombre d'observations assimilées, (`ii`) de l'erreur sur les observations, (`iii`) de la définition de l'information *a priori* (IAP) et enfin (`iv`) du poids de l'IAP dans la fonction coût sur l'estimation des paramètres. Les résultats ont été évalués selon les diagnostics suivants :

- leur capacité à estimer les paramètres avec les expériences jumelles,
- leur capacité à restituer le LAI, en particulier sur des données réelles,
- le coût de calcul.

Le coût de calcul, déterminé par la vitesse de convergence, n'est apparu en aucun cas problématique.

Cette méthode a permis de conforter les résultats de sensibilité du LAI aux paramètres : les paramètres peu influents sont souvent mal identifiés et les paramètres très influents sont en général très bien retrouvés. Ceci est particulièrement vrai dès lors que l'on impose une IAP moyenne représentant la connaissance des intervalles de définition des paramètres. Ce terme de régularisation réduit le nombre d'itérations nécessaires à la convergence. Enfin, les expériences jumelles ont permis de vérifier la robustesse de l'estimation des paramètres selon les différentes valeurs initiales de l'algorithme dans le cas d'un nombre suffisant d'observations. Le rôle de l'information *a priori* n'est pas apparu déterminant dans ces expériences, même dans le cas d'observations peu nombreuses. En effet, le relativement faible niveau de bruit, l'absence d'erreur de modèle (données synthétiques) et la bonne répartition dans le temps des observations expliquent certainement la robustesse des résultats.

Les expériences jumelles ont permis de valider l'algorithme d'assimilation et de passer avec confiance aux cas d'observations réelles. L'assimilation de 23 observations de l'expérimentation ADAM dans BONSAÏ utilisant le modèle adjoint a abouti, sur un grand nombre de pixels testés, à une RMSE sur le LAI satisfaisante, avec un faible coût de calcul et une estimation convergente et réaliste des paramètres. Le test avec des initialisations très différentes de l'algorithme a révélé une certaine robustesse dans la recherche du minimum global. Cependant, une forte diminution du nombre d'observations (passage de 23 à 4 observations sur tout le cycle) a mis en évidence la sensibilité du résultat à la confiance accordée à l'information *a priori* . Un très faible nombre d'observations ne permet donc pas d'estimer les paramètres pixel par pixel de manière fiable, le problème étant alors sous-déterminé.

Prise en compte de l'aspect spatial

Nous avons alors remédié à la sous-détermination du problème, lorsque celui-ci est résolu pour chaque pixel indépendamment, en proposant une nouvelle mise en œuvre de l'assimilation considérant simultanément un ensemble de pixels. Pour réduire l'espace de contrôle relativement au nombre d'observations, nous avons imposé des contraintes spatiales aux paramètres à estimer. Ces contraintes sont fournies par la hiérarchie de dépendance des paramètres vis-à-vis de la parcelle (mêmes techniques culturales) ou de la variété (même phénologie). Cette approche a nécessité le calcul de l'adjoint de MACRO-BONSAÏ, dont le nombre de paramètres à estimer est nettement

plus important que BONSAÏ. La méthode de l'adjoint, de part son aspect *inverse*, est justement particulièrement adaptée à une forte dimension de l'espace de contrôle. L'approche développée sur des données simulées a permis d'améliorer la robustesse de la méthode : nous avons constaté avec les expériences jumelles que l'identification des paramètres est très nettement améliorée pour la plupart des paramètres. De plus, l'estimation des paramètres est plus stable face à la baisse du nombre d'observations.

Cependant, BONSAÏ est un modèle semi-mécaniste dont les paramètres ne possèdent pas tous une signification physique précise. Le choix des niveaux de contraintes (pixel, parcelle, variété) de certains paramètres peut donc sembler discutable. L'intérêt de cette méthode, outre le fait qu'elle nous a permis d'en démontrer la robustesse, reste donc limité par l'aspect peu mécaniste du modèle et apparaîtrait nettement plus évident avec un modèle tel que STICS.

Échantillonnage temporel

Nous avons souhaité étudier les performances de la méthode de spatialisation en particulier par rapport à la fréquence temporelle des observations disponibles. Cette étude a permis d'évaluer l'échantillonnage temporel optimal avec une méthode classique et avec notre approche spatialisée sur des données synthétiques.

Si l'on assimile pixel par pixel, la fréquence temporelle maximale pour assurer une estimation satisfaisante du LAI et de la plupart des paramètres est de 7 jours, en prenant en compte la probabilité de couverture nuageuse de 50%. Pour des fréquences plus faibles, l'algorithme converge dans des minima locaux sur un nombre de pixels non négligeable. En revanche, la prise en compte de contraintes spatiales aboutit à des résultats beaucoup plus stables, même avec une fréquence de 30 jours. En particulier, elle garantit avec une fréquence de 15 jours une RMSE sur le LAI et les paramètres similaire à ce qui est obtenu par la méthode pixel par pixel avec une fréquence de 7 jours.

Par les expériences jumelles, nous avons pu montrer que notre approche spatialisée permet de diminuer la fréquence temporelle des observations en assurant une estimation des paramètres plus robuste. Ces résultats constituent une première étape pour la définition des caractéristiques temporelles des capteurs pour une mission dédiée à l'agriculture.

Évaluation de la méthode d'assimilation pour la prédiction d'une variable d'intérêt non assimilée

Nous avons évalué l'intérêt de l'assimilation de données de LAI dans le modèle BONSAÏ-BIO pour améliorer l'estimation de la biomasse finale. De manière générale, nous avons obtenu des résultats de prévision de biomasse finale peu satisfaisants.

Comme l'analyse de sensibilité l'avait annoncée, la biomasse est très sensible au produit des paramètres d'efficience que l'on a, dans un premier temps, fixés aux valeurs *a priori* . Un ajustement de la valeur de l'efficience photosynthétique après assimilation du LAI a ensuite été effectué, mais il n'a permis qu'une amélioration légère de l'estimation de la biomasse finale. En effet, l'hypothèse consistant à considérer que ce paramètre est égal sur l'ensemble des parcelles et des dates n'est pas vérifiée. L'efficience photosynthétique est fonction notamment du niveau de stress subi par la culture, qui lui même dépendra principalement des conditions environnementales locales, en particulier du sol. Il faut donc évaluer ces facteurs de stress à partir d'informations exogènes.

Les performances d'une telle approche dépendent donc très fortement de la qualité de la relation modélisée entre la variable assimilée et la variable d'intérêt. Nous pouvons espérer que la méthode présenterait de meilleures performances dans les modèles de fonctionnement tels que STICS. Dans la dernière partie, nous avons donc calculé l'adjoint de STICS pour évaluer la faisabilité de l'application de cette méthode variationnelle à un modèle mécaniste complexe.

Étude de la faisabilité de la méthode sur un modèle complexe

De nombreuses difficultés ont été rencontrées pour calculer l'adjoint de STICS qui n'a pas été écrit dans l'esprit d'être différentié ! Avec la dernière version du différentiateur automatique TAPENADE, dont l'algorithme a été largement amélioré par rapport aux premières versions, nous avons pu calculer les modèles tangent et adjoint, et les valider.

Le modèle adjoint de STICS a alors été exploité pour établir une analyse de sensibilité locale du LAI et de la biomasse simulés par STICS en fonction d'un certain nombre de ses paramètres. Cette sensibilité locale a été calculée sous deux conditions différentes (Plaine du Danube et Bassin de Paris). Les résultats montrent que les valeurs des sensibilités relatives sont modifiées selon les conditions, principalement le climat, l'itinéraire technique, le sol, la variété. Toutefois, la hiérarchie entre les paramètres est restée la même sur ce test. Ceci ne constitue qu'une première analyse qu'il faudrait approfondir dans de nombreuses situations et en particulier en multi-local. Cet outil permettra d'évaluer le déterminisme de STICS dans sa représentation des processus et de sélectionner les paramètres à estimer par assimilation selon notre variable d'intérêt.

Si la faisabilité semble donc démontrée, il faudrait bien sûr appliquer la technique d'assimilation à des cas réels, afin de participer à l'aide à la décision et à l'estimation de la production. En particulier, l'approche avec les contraintes spatiales dans ce modèle dont les paramètres sont pour la plupart significatifs de processus constitue une perspective importante pour la résolution de problèmes sous-déterminés.

D'un point de vue pratique, cet exercice a soulevé de nombreuses questions sur la différentiation automatique de codes présentant de fortes discontinuités. D'un point de vue mathématique, les difficultés rencontrées pour le calcul du modèle adjoint ouvrent une perspective sur le développement théorique de l'assimilation variationnelle dans des modèles non différentiables. Pour faire de la prévision de production avant la fin du cycle de manière opérationnelle, le caractère aléatoire des données climatiques pourrait également conduire à l'utilisation de méthodes d'assimilation stochastique.

La méthode proposée permet de traiter des problèmes de grande taille, et a vu son intérêt croître avec la possibilité d'exploiter les contraintes spatiales. Ceci constitue également un caractère original à ce travail. Cette approche basée sur la prise en compte simultanée d'un ensemble de pixels avec leurs relations de proximité ou de hiérarchie pourrait s'appliquer à de nombreux problèmes. En particulier, dans le domaine de la télédétection, cette technique permettrait de rendre plus précise l'estimation des caractéristiques biophysiques de la surface. En effet, la prise en compte simultanée d'un ensemble de pixels dans une série temporelle d'images devrait utilement exploiter la relative stabilité spatiale de l'atmosphère dans un périmètre de quelques kilomètres, et la forte cohérence temporelle de la surface associée à la dynamique de la végétation.

L'utilisation optimale des observations disponibles, en prenant en compte les dépendances spatiales et temporelles devrait permettre d'aboutir à des performances accrues de l'outil télédétection. Elle autorisera éventuellement une dégradation significative des spécifications de la mission en terme d'échantillonnage, notamment dans la dimension temporelle, coûteuse d'un point de vue technologique et économique.

$\therefore$

Ce travail est basé sur l'exploitation de la transversalité entre différentes thématiques et communautés qui lui confère un caractère original. En effet, nous avons transposé des méthodes mathématiques développées dans le cadre des applications météorologiques à celles de l'agriculture. Nous avons également relié la communauté des télédétecteurs à celle des agronomes modélisateurs et des mathématiciens appliqués.

Annexes

Sommaire

A Compléments du chapitre 1 **i**
A.1 Exemples de réflectance d'autres surfaces i
A.2 Les méthodes d'estimation des variables observables iii
A.2.1 Indices de végétation iii
A.2.2 Le recuit simulé iv

B Compléments du chapitre 2 **vii**
B.1 Rappels de calcul différentiel vii
B.2 Exemple de calcul des équations adjointes sur le modèle de biomasse ix
B.2.1 Différentiation manuelle ix
B.2.2 Différentiation automatique avec TAPENADE x

C Compléments du chapitre 3 **xiii**
C.1 Liste des variables et paramètres d'entrée de STICS xiv
C.2 Liste des variables et paramètres de sortie de STICS xxi

D Compléments du chapitre 4 : Résultats d'assimilation dans le cadre des expériences jumelles **xxv**

Annexe A

Compléments du chapitre 1

A.1 Exemples de réflectance d'autres surfaces

Cette partie propose une petite description des autres sources de réflectance sur la surface terrestre, qui sont essentiellement composées d'eau, de neige, de glace, de roche, ou d'objets non naturels, typiquement des zones urbaines [82].

- **l'eau.** L'eau est transparente lorsqu'elle est pure, parce qu'elle absorbe 95% du rayonnement dans le visible, et quasiment 100% tout dans l'infrarouge, la rendant très facilement repérable dans ce domaine (figure A.1). Les longueurs d'onde bleues et vertes sont tout de même moins absorbées et pénètrent donc plus profondément. Les éléments en suspension dans l'eau tels que les algues ou la matière organique jouent également un rôle très important, en particulier la teneur en chlorophylle (figure A.2).

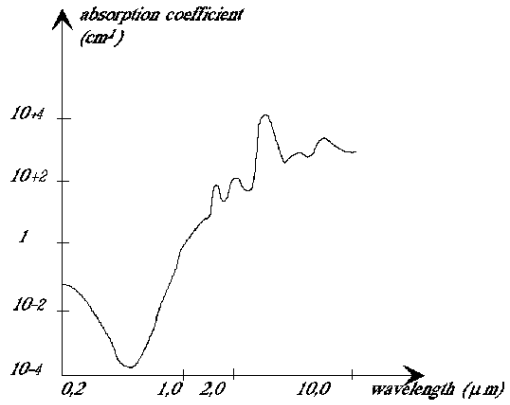

Fig. A.1 – *Coefficient d'absorption de l'eau en fonction des longueurs d'onde.*
***Source** : Open Universiteit [196]*

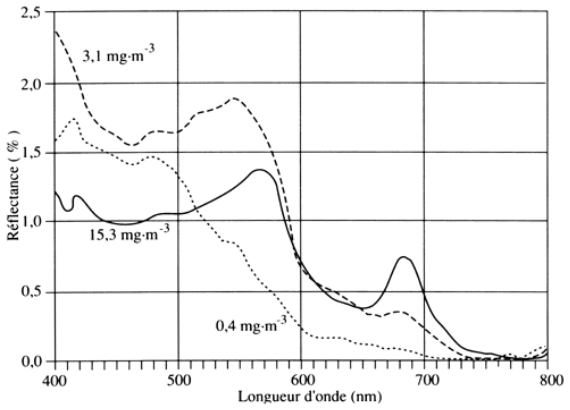

Fig. A.2 – *Réflectance de l'eau de mer en fonction de sa teneur en chlorophylle. (Gower, 1988)*

- **la neige.** La neige fraîche donne une réflectance très importante dans le visible, du fait de sa structure "poudreuse" composée de petits cristaux de glace entourés de beaucoup d'air, représentant des interfaces air-glace très réfléchissants. Son albedo est alors l'un des plus élevés dans le visible. Lorsque la neige a fondu et s'est re-cristallisée ("neige lourde"), elle a changé de granulométrie (figure A.3) : les cristaux sont plus gros et réfléchissent donc moins. L'albédo de la neige fraîche est donc beaucoup plus élevé que celui des névés et des neiges plus anciennes, plus tassées et moins pures. Dans le proche infrarouge, la réflectance de la neige diminue fortement.

- **la glace.** On pourrait penser que la glace réfléchit énormément, ce qui est vrai lorsqu'elle est lisse et que la direction de visée correspond au maximum. En revanche, si la prise de vue n'est pas optimale et si la glace contient beaucoup d'impuretés (figure A.4), ce qui est le cas de beaucoup de glaciers, elle réfléchit nettement moins.

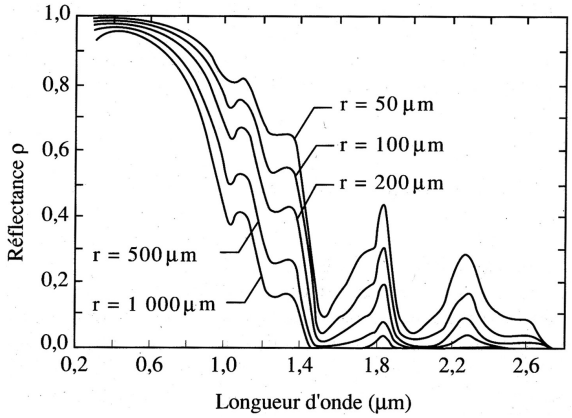

Fig. A.3 – *Réflectance de la neige selon la granulométrie des cristaux. (Bonn et Rochon, 1992 [32])*

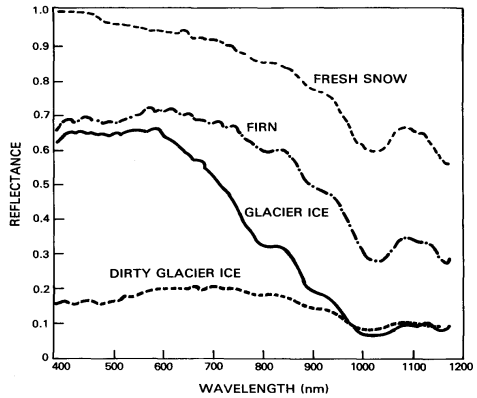

Fig. A.4 – *Réflectance de la glace en fonction des éléments de sa surface. (Hall et al., 1985 [120])*

- **les roches.** Le signal des roches "pures" se capte difficilement par satellite puisqu'elles sont généralement recouvertes en grande partie d'un sol. Leur réflectance dépend fortement de la composition physico-chimique, la granulométrie, les minéraux qui la composent, mais aussi de la *patine*. Il s'agit d'une pellicule de surface, conséquence des éléments extérieurs tels que la pluie, le vent, la température, et constituée par des produits de décomposition des minéraux et de certaines impuretés. La patine augmente la réflectance pour les roches sombres (basalte), et la diminue pour les roches claires.

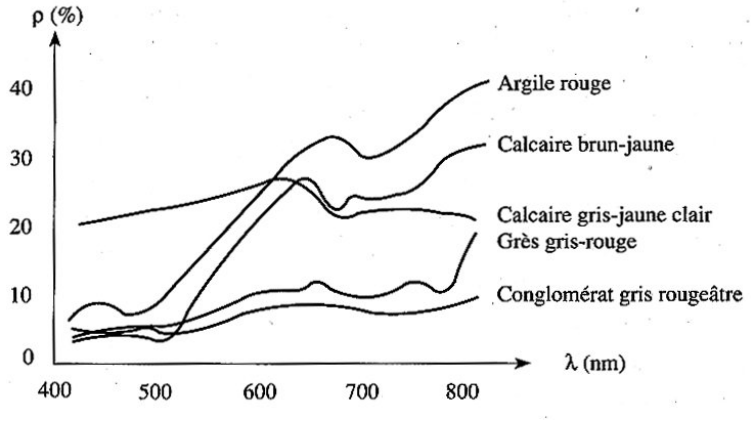

Fig. A.5 – *Réflectance de différents types de roches : argile, calcaire, conglomérats.* ***Source*** *: Bonn et Rochon, 1992 [32]*

- **les surfaces artificielles.** La réflectance des surfaces "non naturelles", en particulier les zones urbaines, peut énormément varier selon la matière concernée (aluminium, verre,...), se caractérisant par une grande complexité et une forte hétérogénéité. On ne peut affirmer comme seule tendance générale que leurs réflectances sont assez proches dans le visible et le PIR, de valeur élevée du fait de la présence de béton, matériau exclusivement minéral.

A.2 Les méthodes d'estimation des variables observables

A.2.1 Indices de végétation

a. Description des différents indices

On peut réunir les indices de végétation en deux groupes principaux (Malet [179], Guérif *et al.* [118]) :

- **Les indices de type rapport**, correspondant à la tangente d'un angle entre le point végétation (Fig. A.6), d'abscisse sa réflectance dans le rouge (R) et d'ordonnée celle dans le proche infrarouge (PIR), relatif à la diagonale à l'origine (NDVI), à la droite des sols (TSAVI), ou à la droite d'ordonnée nulle (RVI). On considère entre autres les trois indices suivants :

  RVI (Ratio Vegetation Index), Pearson et Miller, 1972 [203] :

  $$\frac{PIR}{R} \tag{A.1}$$

  NDVI (Normalised Differention Vegetation Index), Tucker, 1979 [233] :

  $$\frac{PIR - R}{PIR + R} \tag{A.2}$$

  SAVI (Soil Adapted Vegetation Index), Huete 1988 [131] :

  $$\frac{1.5(PIR - R)}{PIR + R + 0.5} \tag{A.3}$$

  TSAVI (Transformed Soil Adapted Vegetation Index), Baret et Guyot,1991 [12] :

  $$\frac{a(PIR - a \cdot R - b)}{R + a \cdot (PIR - b) + 0.08(1 + a^2)} \tag{A.4}$$

  où a et b caractérisent la droite des sols [1] avec a la pente et b l'intersection à l'ordonnée.

- **Les indice de type distance**, équivalents généralement à une distance du point végétation à la diagonale à l'origine ou à la droite des sols (Fig. A.7). On citera entre autres :

  WDVI (Weighted Difference Vegetation Index), Clevers, 1989 [54] :

  $$PIR - a \cdot R \tag{A.5}$$

  PVI (Perpendicular Vegetation Index), Richardson et Wiegand, 1977 [218] :

  $$\frac{PIR - a \cdot R - b}{\sqrt{1 + a^2}} \tag{A.6}$$

b. État de l'art et limites des IV.

- **influence du sol.** Cette approche empirique a l'inconvénient de plus ou moins bien tenir compte de la contribution du sol sous-jacent (Verstraete et Pinty [239]) pour certains indices. En particulier, les premiers indices RVI et NDVI, qui ne différencient globalement que par leur linéarité et leur intervalle de variation (NDVI = (RVI − 1)/(RVI + 1)), ne font pas référence à la droite des sols et dépendent donc très fortement des propriétés optiques du sol sous-jacent. Ceci a donné lieu à d'autres indices, comme par exemple le TSAVI (Baret et Guyot [12]) qui, dans le cas d'un faible recouvrement par la végétation chlorophyllienne, permet de minimiser l'effet du sol.

[1] La **droite des sols** est une droite exprimant la réflectance d'un sol nu dans le canal rouge par rapport à celle dans le canal PIR, puisque la reflectance d'un **sol nu** est très proche dans ces deux canaux (contrairement à la végétation). Près de l'origine, cette droite rassemble les sols nus *sombres*, et plus loin sur cette diagonale, on retrouve les sols nus *clairs*.

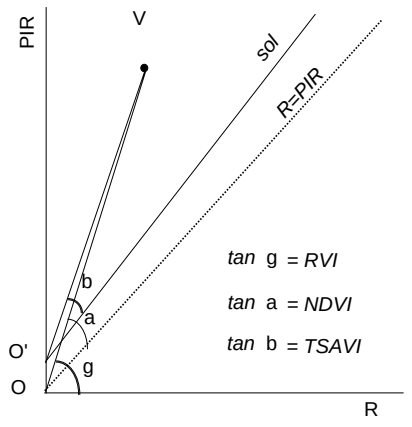

Fig. A.6 – *Représentation géométrique dans le plan* rouge-proche infrarouge *d'indices de végétation équivalents à la tangente d'un angle (d'après Malet [179]).* ***V*** *est le point végétation, ie sa réflectance R par rapport à sa réflectance PIR ;* ***sol*** *est la droite des sols.*

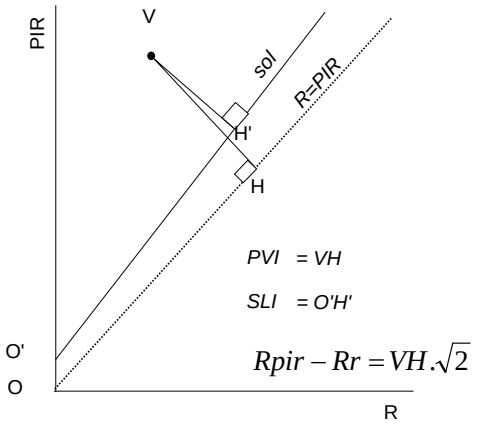

Fig. A.7 – *Représentation géométrique dans le plan* rouge-proche infrarouge *d'indices de végétation équivalents à une distance (d'après Malet [179]).* ***V*** *est le point végétation, ie sa réflectance R par rapport à sa réflectance PIR ;* ***sol*** *est la droite des sols.*

- **effets atmosphériques.** De même, de nombreux travaux ont essayé de pallier le manque de prise en compte de la diffusion atmosphérique. Qi *et al.*, 1994 [213] ont montré que le PVI et le WDVI sont très sensibles aux variations atmosphériques. En 1992, le SARVI (Soil and Atmospherically Resistant Vegetation Index) Kaufman et Tanré [153]), a pour objectif de minimiser à la fois les effets du sol et de l'atmosphère en utilisant une combinaison linéaire des bandes bleue et rouge pour prendre en compte leurs effets. Finalement, la combinaison optimale se trouve être seulement composée de la bande bleue où l'atmosphère diffuse le plus par les aérosols et les molécules gazeuses. Il sera suivi par le SARVI2 ou le EVI (Enhanced Vegetation Index, Huete *et al.* [132]) qui a permis la production de produits MODIS opérationnels (Huete *et al.* [130]). Enfin, en 2001, Karnieli *et al.* [151] proposent le AFVI (Aerosol-Free Vegetation Index), un indice similaire au NDVI par temps clair, mais utilisant la bande moyen infrarouge centrée différemment de telle sorte qu'il est insensible aux brumes, aux fumées (de feux de forêts, de volcans) et à la pollution anthropogénique, auxquels le NDVI est très sensible.
- **saturation.** Myneni et Williams, 1994 [191] ont également pu constater des effets de saturation du signal radiométrique pour de forts LAI. Ceci implique qu'à une même valeur peuvent correspondre des couverts différents, et ne permet plus de repérer l'évolution des caractéristiques du couvert au-delà d'une certaine densité de végétation. Ainsi, les indices de végétation RVI et NDVI ne sont pas très adaptés aux couverts denses, car ils saturent assez rapidement.
- **configuration de mesure.** Enfin, la plupart de ces indices dépendent des conditions d'illumination et de la direction de visée. Ceci peut être corrigé par étalonnage, mais ce dernier ne reste valable que dans un domaine bien délimité (Govaerts *et al.* [105], Leroy et Hautecoeur [169], Bégué [20]).

A.2.2 Le recuit simulé

Le recuit est une technique utilisée en métallurgie : supposons que le métal soit chauffé à une température très élevée, ses particules qui le composent s'organisent lors de sa phase liquide de façon aléatoire. En refroidissant, les particules se rangent pour la solidification du métal. Si l'on

a fait décroître la température trop brusquement, l'organisation des atomes n'est pas optimale en terme d'énergie, et ne permet pas une structure parfaite. Si par contre la température décroît très lentement, laissant le temps aux particules d'atteindre l'équilibre statique, on tendra vers des structures de plus en plus régulières pour finir à l'état parfait d'énergie minimale : le cristal. En cas d'erreur sur la progressivité de la décroissance de température, on a la possibilité de réchauffer le métal (recuit) pour libérer à nouveau le mouvement des particules, corriger les défauts, et atteindre l'état fondamental.

Cet algorithme est le recours classique pour trouver des valeurs approchées de problèmes NP-complets (typiquement le problème du voyageur de commerce décrit ci-dessous), c'est-à-dire comportant de nombreux minima locaux dans lesquels les méthodes du gradient se trouvent piégées. On comprend donc qu'il favorise les descentes (sur une fonction coût), mais sans interdire tout à fait les remontées. En effet, si le problème se trouve avoir beaucoup de conditions, une solution est tirée aléatoirement sur laquelle toutes les conditions sont testées. Si l'une des conditions n'est pas respectée, il modifie la solution de façon à ce que la condition soit respectée. Puis il teste à nouveau cette solution sur les autres conditions. Plus le temps passe (plus la température diminue), moins l'algorithme a d'énergie pour tester une valeur lointaine (puisque cela signifie remonter la pente dans une toute autre direction), diminuant donc la probabilité des valeurs lointaines d'être testées. On tend ainsi vers un minimum local assez proche de la solution.

Le problème du voyageur de commerce : Le voyageur de commerce veut visiter N villes en parcourant un minimum de chemin :

- Soit un ensemble de N villes, disposées aléatoirement sur une carte.
- Chaque ville est reliée aux N-1 autres par autant de chemins.
- Problème : Trouver le trajet de longueur minimale, passant une fois et une seule par chacune des villes.

La difficulté du problème vient de l'explosion combinatoire des chemins à explorer lorsque l'on accroît le nombre N de villes à visiter, sans qu'on ne puisse démontrer la meilleure solution. Sa complexité algorithmique $(N-1)!/2$ est de type exponentielle, ce qui le range dans la catégorie des problèmes NP-complet. On est donc obligé de trouver une solution s'approchant le plus possible de la solution optimale (sans que l'on sache de combien bien sûr) puisque tester toutes les solutions est impossible.

Ce problème peut se résoudre par la méthode du Recuit Simulé, les algorithmes génétiques, ou encore les réseaux de neurones.

Annexe B

Compléments du chapitre 2

B.1 Rappels de calcul différentiel

On considère dans ces rappels de définitions et théorèmes classiques de calcul différentiel que l'on parle toujours d'une fonction f multivariable scalaire : $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$.

Définition B.1. Dérivée directionnelle

On dit qu'une fonction $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}$ a une dérivée directionnelle dans la direction $h \in \mathbb{R}^m$ si :

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{f(x + \alpha \cdot h) - f(x)}{\alpha}, \ \alpha \in \mathbb{R}^+$$

existe et est finie. Dans ce cas, on a la dérivée directionnelle de f dans la direction h qui vaut :

$$\hat{f}(x, h) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{f(x + \alpha \cdot h) - f(x)}{\alpha} \tag{B.1}$$

Définition B.2. Dérivée partielle

On définit la dérivée partielle comme la dérivée directionnelle dans une direction canonique de $\mathbb{R}^m$, où h la direction est une direction canonique de la base de l'espace de départ de f :

$$\frac{\partial f}{\partial e_i}(x) = \hat{f}(x, e_i) = \lim_{\alpha \to 0} \frac{f(x + \alpha \cdot e_i) - f(x)}{\alpha}, \ i = 1, ..., m \tag{B.2}$$

Définition B.3. Gateaux-différentiabilité

f est (Gateaux) différentiable en x si :

1. *f est continue en x*
2. *f admet des dérivées directionnelles en x suivant tout vecteur $h \in \mathbb{R}^m$*
3. *l'application $h \mapsto \hat{f}(x, h)$ est linéaire continue.*

Alors on a :

$$\hat{f}(x, h) = \hat{f}(x) \cdot h$$

et $\hat{f}(x)$ est dite Gateaux-dérivée de f en x.

Définition B.4. Gradient

On définit le gradient de f comme le vecteur colonne (ce sera une matrice si f est à valeurs dans un ensemble de dimension supérieure à 1) des dérivées partielles dans toutes les directions données par la base canonique :

$$\nabla f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(x)}{\partial e_1} \\ \frac{\partial f(x)}{\partial e_2} \\ \dots \\ \frac{\partial f(x)}{\partial e_n} \end{pmatrix}$$

On a pour toute direction $h \in \mathbb{R}^m$,

$$< \nabla f(x), h >= \hat{f}(x, h) \tag{B.3}$$

ce qui signifie qu'on exprimera le gradient de la fonction f en mettant en évidence sa linéarisation des dérivées directionnelles par rapport à la direction h.
Pour une fonction $f : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$, si chaque composante $(f_i)_{i=1,\dots n}$, est (continûment) differentiable, alors f est dite (continûment) differentiable. Son gradient en x est donnée par la matrice $m \times n$ dont la colonne i est le gradient $\nabla f_i(x)$.

Par exemple, la norme dans le cas d'un produit scalaire, et la norme au carré ont les dérivées directionnelles exprimées de cette manière :

$$\forall x \neq 0, \quad \nabla(\|x\|) = \frac{x}{\|x\|}$$

$$\forall x \neq 0, \quad \nabla\|x\|^2 = 2 \cdot \|x\|$$

Définition B.5. Jacobien

La transposée du vecteur ou de la matrice gradient $\nabla f(x)$ est appelée Jacobien ou matrice jacobienne de f en x.

Définition B.6. Hessien

La matrice hessienne (matrice symétrique) ou la matrice des dérivées, ou encore le Hessien de f une fonction deux fois différentiable en x est composée des dérivées partielles au second ordre dans toutes les directions :

$$Hess\ f(x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_1 \partial e_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_1 \partial e_m} \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_2 \partial e_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_2 \partial e_m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_m \partial e_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial e_m \partial e_m} \end{pmatrix} \tag{B.4}$$

Théorème des fonctions implicites (1)

Soit f une application continûment différentiable de U un ouvert de $E_1 \times E_2$ dans F avec E_1, E_2 et F des espaces de Banach. Si f est différentiable par rapport à la deuxième variable en (a, b) et si cette différentielle est un isomorphisme, alors il existe définie Φ continûment différentiable $\Phi : U_1 \subset E_1 \to U_2 \subset E_2$, U_1 et U_2 contenant respectivement a et b,telle que pout tout $(y_1, y_2) \in U_1 \times U_2$ on ait :

$$f(y_1, y_2) = f(a, b) \iff y_2 = \phi(y_1)$$

et pour tout $x \in U_1$ on a :

$$D\phi(x) = -[D_2 f(x, \phi(x))]^{-1} \circ D_1 f(x, \phi(x))$$

Théorème de Riesz simplifié (2)

L'opérateur adjoint existe toujours et est unique, si l'on suppose les espaces de dimension finie.

B.2 Exemple de calcul des équations adjointes sur le modèle de biomasse

Cet exemple décrit le calcul pratique du code adjoint d'un modèle simple, le modèle de biomasse défini § 3.2.1. Il expose une première différentiation manuelle, puis les résultats obtenus par le différentiateur automatique TAPENADE et leur validation.

B.2.1 Différentiation manuelle

Considérons l'équation calculant la biomasse à partir du LAI :

$$biom(i) = biom(i-1) + Eb \cdot Eimax(1 - e^{-K \cdot LAI(i)}) \cdot PAR \tag{B.5}$$

On rappelle que *biom* est le vecteur de biomasse du pas de temps 0 au pas de temps final T. LAI est le LAI calculé précédemment à chaque pas de temps, PAR est la radiation active. Eb, $Eimax$ et K sont les variables définies dans § 3. On obtient le modèle tangent :

$$\begin{aligned} biom_d(i) \quad &= biom_d(i-1) + Eb_d \cdot Eimax(1 - e^{-K \cdot LAI(i)}) \cdot PAR \\ &+ Eb \cdot Eimax_d(1 - e^{-K \cdot LAI(i)}) \cdot PAR \\ &- (K_d \cdot LAI(i) + K \cdot LAI_d) \cdot Eb \cdot Eimax \cdot e^{-K \cdot LAI(i)} \cdot PAR \end{aligned} \tag{B.6}$$

Le suffixe "$_d$" (notation de TAPENADE) désigne les variables différentiées dans le mode tangent : $biom_d$ est la variable tangente de $biom$, c'est-à-dire la dérivée de $biom$ en fonction de toutes les variables de l'équation.

On peut maintenant définir le système tangent (B.6) en termes matriciels :

$$\begin{aligned} tp = & \quad (1 - e^{-K \cdot LAI(i)}) \cdot PAR \\ tp_2 = & \quad Eb \cdot Eimax \cdot e^{-K \cdot LAI(i)} \cdot PAR \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} biom_d(i) \\ biom_d(i-1) \\ Eb_d \\ Eimax_d \\ K_d \\ LAI_d(i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & Eimax \cdot tp & Eb \cdot tp & -LAI(i) \cdot tp_2 & -K \cdot tp_2 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} biom_d(i) \\ biom_d(i-1) \\ Eb_d \\ Eimax_d \\ K_d \\ LAI_d(i) \end{pmatrix} \tag{B.7}$$

et l'étape finale consiste à transposer la matrice :

$$\begin{pmatrix} biom_b(i) \\ biom_b(i-1) \\ Eb_b \\ Eimax_b \\ K_b \\ LAI_b(i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ Eimax \cdot tp & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ Eb \cdot tp & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -LAI(i) \cdot tp_2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ -K \cdot tp_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} biom_b(i) \\ biom_b(i-1) \\ Eb_b \\ Eimax_b \\ K_b \\ LAI_b(i) \end{pmatrix} \tag{B.8}$$

où le suffixe "$_b$" désigne les variables différentiées en mode adjoint. On obtient alors les équations adjointes lues dans le sens rétrograde :

$$\begin{aligned} tp & = (1 - e^{-K \cdot LAI}) \cdot PAR \\ LAI_b & = LAI_b(i) - K \cdot Eb \cdot Eimax \cdot e^{-K \cdot LAI(i)} \cdot PAR \cdot biom_b(i) \\ K_b & = K_b - LAI(i) \cdot Eb \cdot Eimax \cdot e^{-K \cdot LAI(i)} \cdot PAR \cdot biom_b(i) \\ Eimax_b & = Eimax_b + (Eb \cdot tp) \cdot biom_b(i) \\ Eb_b & = Eb_b + (Eimax \cdot tp) \cdot biom_b(i) \\ biom_b(i-1) & = biom_b(i-1) + biomb(i) \\ biom_b(i) & = 0 \end{aligned} \tag{B.9}$$

B.2.2 Différentiation automatique avec TAPENADE

a. Visualisation des codes déterminés par TAPENADE

Revenons au même exemple et étudions le résultat donné par TAPENADE, qui a dérivé la variable de sortie *biom* en fonction des variables et paramètres d'entrée $Eb, Eimax, K, LAI$. Le suffixe "$_b$" désigne les variables différentiées en mode inverse : biom_b est la variable adjointe de biom.

Le code tangent calculé par TAPENADE est décrit Tab. B.1, et le code adjoint Tab. B.2. On constate que le différentiateur a d'abord décomposé l'équation de la biomasse en plusieurs équations (création du terme intermédiaire **arg1**) afin de simplifier les calculs. Il a ensuite opéré comme décrit dans la partie manuelle. Dans TAPENADE, les mémorisations de contrôle sont effectuées à l'aide de routines en C notées PUSHINTEGER4 et POPINTEGER4, comme on peut le voir sur le code adjoint rendu.

b. Validation du tangent et de l'adjoint

Le test de Taylor permet d'effectuer de valider le modèle tangent comme décrit § 2.3.3. Rappelons que l'on veut montrer que pour toute direction $\delta v \in \mathbb{R}^m$, on a

$$\lim_{\alpha \to 0} \frac{N(v + \alpha \delta v) - N(v)}{\alpha < \nabla N(v), \delta v >} = 1$$

DO i=2,T	boucle dans le sens direct
arg1d = -(Kd*LAI(i)+K*LAId(i))	équation tangente
arg1 = -(K*LAI(i))	équation directe
biomd(i) = biomd(i-1)	équation tangente
+ PAR(i)*((Ebd*Eimax+Eb*Eimaxd)	
*(1-EXP(arg1))-Eb*Eimax*arg1d*EXP(arg1))	
biom(i) = biom(i-1)	équation directe
+ Eb*Eimax*(1-EXP(arg1))*PAR(i)	
ENDDO	
RETURN	
END	

TAB. B.1 – *code tangent de la partie biomasse de BONSAÏ-BIO*

.....	*code direct*
DO i=2,T	boucle dans le sens direct
CALL PUSHREAL8(arg1)	Sauvegardes des valeurs à chaque pas
arg1 = -(K*LAI(i))	
biom(i) = biom(i-1)	
+ Eb.Eimax.(1-EXP(arg1)).PAR(i)	
ENDDO	
CALL PUSHINTEGER4(i - 1)	Sauvegardes des valeurs du pas
.....	*code adjoint*
CALL POPINTEGER4(T)	Rappel de la valeur du pas final
DO i=T,2,-1	boucle dans le sens rétrograde
tempb = PAR(i)*(-EXP(arg1)+1)*biomb(i)	
biomb(i-1) = biomb(i-1) + biomb(i)	
Ebb = Ebb + Eimax*tempb	
Eimaxb = Eimaxb + Eb*tempb	
arg1b =	
-(PAR(i)*Eb*Eimax*EXP(arg1)*biomb(i))	
biomb(i) = 0.D0	Initialisation des variables adjointes
CALL POPREAL8(arg1)	Rappel des valeurs
Kb = Kb - LAI(i)*arg1b	
LAIb(i) = LAIb(i) - K*arg1b	
ENDDO	
RETURN	
END	

TAB. B.2 – *code adjoint de la partie biomasse de BONSAÏ-BIO*

Le test est présenté Tab. B.3, pour α variant de $1/2$ à $1/2^{20}$. La convergence de la limite vers 1 quand α tend vers 0 est satisfaite autour de $\alpha = 2^{18}$. Il n'a bien sûr pas pu être effectué dans toutes les directions, et les résultats présentés dans le tableau ne sont ceux qu'en un point et pour une direction donnée. Cependant, on obtient bien le même type de résultats dans d'autres directions.

La figure Fig. B.1 représente la formule de Taylor : en posant $N_\alpha = N(v + \alpha\delta v)$ et $N_0 = N(v)$, on veut :

$$\frac{[N_\alpha - N_0]}{\alpha} \xrightarrow[\alpha \to 0]{} < \nabla N_0, \delta V >$$

On constate que le terme $< \nabla N_0, \delta V >$ (en pointillés rouges) donné par TAPENADE, est bien tangent à $[N_\alpha - N_0]/\alpha$ (en bleu) quand α tend vers 0, ce qui confirme la validité de la dérivée. Cette fois, les résultats sont exposés pour des perturbations dans quatre directions canoniques différentes.

Le test de Taylor obtient des résultats très satisfaisants, et la linéarisation du code par TAPENADE est donc correcte.

α	limite	α	limite
$1/2$	1.00988755	$1/2^{11}$	1.00000970
$1/2^2$	1.00495593	$1/2^{12}$	1.00000485
$1/2^3$	1.00248102	$1/2^{13}$	1.00000243
$1/2^4$	1.00124127	$1/2^{14}$	1.00000119
$1/2^5$	1.00062082	$1/2^{15}$	1.00000059
$1/2^6$	1.00031046	$1/2^{16}$	1.00000024
$1/2^7$	1.00015524	$1/2^{17}$	1.00000013
$1/2^8$	1.00007762	$1/2^{18}$	1.00000002
$1/2^9$	1.00003881	$1/2^{19}$	0.99999979
$1/2^{10}$	1.00001941	$1/2^{20}$	0.99999967

Tab. B.3 – *Test de Taylor pour valider le modèle tangent de la partie biomasse de BONSAÏ-BIO.*

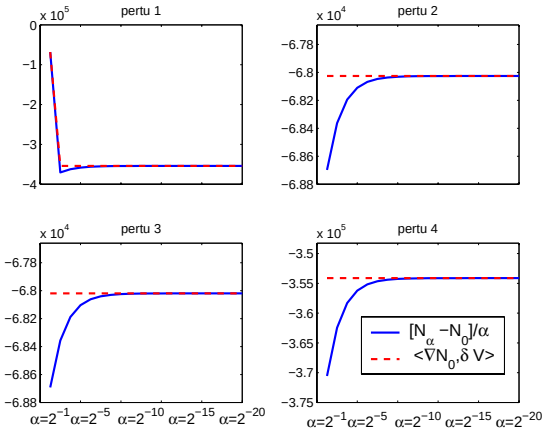

Fig. B.1 – *Représentation de la formule de Taylor, pour 4 directions de perturbations.*

Après application de l'algorithme expliqué Tab. 2.3, le test du produit scalaire donne des résultats tout aussi satisfaisants que le test de Taylor, confirmant la validité de l'adjoint relativement au tangent, ainsi que la sauvegarde des trajectoires. Le tableau B.4 montre les résultats des trois produits scalaires dans trois directions différentes, mais il faudrait, pour être exact, effectuer ceci dans toutes les directions canoniques de U. Les différences simple et relative des deux premiers gradients sont nulles à 10^{-15} près, ce qui correspond à un très bonne validation. Le test est également validé en comparant avec les différences finies centrées ($< DD, DD >$), avec $\epsilon = 10^{-8}$.

prod. scal.	direction 1	direction 2	direction 3
$a =< V_d, V_b >$	96.321823525626	95.249273722370	385.94782737664
$b =< U_b, U_d >$	96.321823525625	95.249273722369	385.94782737663
$< DD, DD >$	96.321822562407	95.249272769877	385.94782351715
diff.=(b-a)	$1.0942358131\text{E}^{-12}$	$6.2527760747\text{E}^{-13}$	$2.7284841053\text{E}^{-12}$
diff.rel.=(b-a)/b	$1.1360206576\text{E}^{-14}$	$6.5646443593\text{E}^{-15}$	$7.0695672103\text{E}^{-15}$

Tab. B.4 – *Résultats du test du produit scalaire sur le tangent et l'adjoint de la partie biomasse de BONSAÏ-BIO à partir de perturbations dans trois directions $\delta u = U_d$.*

Annexe C

Compléments du chapitre 3

Cette annexe présente la liste des variables d'entrée et de sortie de STICS. Elle est prélevée de la documentation de STICS 5 [36]).

C.1 Liste des variables et paramètres d'entrée de STICS

nom	définition	unite	fichier
aclim	composante climatique de A	mm	PARAM
adens	paramètre de compensation entre le nombre de tiges et la densité de plantes	SD	PARPLT
adil	paramètre de la courbe de dilution critique [Nplante]=adil MS^(-bdil)	N% MS	PARPLT
adilmax	paramètre de la courbe de dilution maximale [Nplante]=adilmax MS^(-bdilmax)	N% MS	PARPLT
afpf	paramètre de la logistique définissant la force des puits fruits (croissance indéterminée) : age relatif du fruit où la vitesse de croissance est maximale	SD	PARPLT
afruitpot	nombre maximal de fruits noués par jour (croissance indéterminée)	nbfruits jour-1	PARPLT
ahres	paramètre d'humification des résidus organiques: hres=1-ahres*CsurNres/(bhres+CsurNres)	g g-1	PARAM
akres	paramètre de décomposition des résidus organiques: kres=akres+bkres/CsurNres	jour-1	PARAM
albedo	albédo du sol nu sec	SD	PARSOL
albedomulch	albédo du mulch végétal ou du paillage plastique	SD	PARTEC
albedomulch	albédo du mulch végétal ou du paillage plastique	SD	PARAM
alphaCO2	coefficient de modification de l'efficience de conversion en cas d'augmentation du CO2 atmosphérique		PARPLT
anitcoupe	quantité d'engrais azoté apporté à chaque coupe (cultures fourragères)	kg N ha-1	PARTEC
argi	teneur en argile (après décarbonatation) de la couche de surface	%	PARSOL
arnet	coefficient de la relation empirique rnet= arnet*(1-albedo)*rg+brnet	SD	PARAM
awb	paramètre de décomposition des résidus organiques: CsurNbio=awb+bwb/CsurNres	SD	PARAM
bdens	densité minimale à partir de laquelle il y a compétition entre plantes pour la croissance foliaire	plantes m-2	PARPLT
bdil	paramètre de la courbe de dilution critique [Nplante]=adil MS^(-bdil)	*	PARPLT
bdilmax	paramètre de la courbe de dilution maximale [Nplante]=adilmax MS^(-bdilmax)	*	PARPLT
belong	paramètre de la courbe d'élongation du coléoptile	degré.jour -1	PARPLT
beta	paramètre d'accroissement de la transpiration maximale en cas de stress hydrique	SD	PARAM
bfpf	paramètre de la logistique définissant la force des puits fruits (croissance indéterminée) : vitesse de croissance maximale en proportion du poids maxi du fruit	*	PARPLT
bhres	paramètre d'humification des résidus organiques: hres=1-ahres*CsurNres/(bhres+CsurNres)	g g-1	PARAM
bkres	paramètre de décomposition des résidus organiques: kres=akres+bkres/CsurNres	g g-1	PARAM
brnet	coefficient de la relation empirique rnet= arnet*(1-albedo)*rg+brnet	SD	PARAM
bwb	paramètre de décomposition des résidus organiques: CsurNbio=awb+bwb/CsurNres	g g-1	PARAM
cailloux	teneur volumique en cailloux par horizon	m3 m-3	PARSOL
calc	teneur en CaCO3 de la couche de surface	%	PARSOL
celong	paramètre de la courbe d'élongation du coléoptile	SD	PARPLT
cfes	paramètre de décroissance de l'évaporation en fonction de la profondeur	SD	PARAM
cgrain	nombre de grains produits (par g MS/j) pendant la période NBJGRAIN qui précède le stade NDRP	grains gMS -1 jour	PARPLT
cgrainv0	nombre de grains produits lorsque la vitesse de croissance est nulle	grains m-2	PARPLT
CNresmin	valeur minimale observée du rapport C/N des résidus organiques	g g-1	PARAM
CNresmax	valeur minimale observée du rapport C/N des résidus organiques	g g-1	PARAM
CO2	teneur en CO2 de l'atmosphère [entre 330 et 660]	vpm	PARAM
codebeso	option calcul des besoins en eau par l'approche k.ETP (1) ou l'approche résistive (2)	code 1/2	PARPLT
codecailloux	option prise en compte des cailloux dans le bilan hydrique: oui (1), non (0)	code 0/1	PARSOL
codecalferti	option calcul automatique des fertilisations: oui (2), non (1)	code 1/2	PARTEC
codecalirrig	option calcul automatique des irrigations: oui (2), non (1)	code 1/2	PARTEC
codecaltemp	option calcul de la température de culture: oui (2), non (1)	code 1/2	PARAM
codeclichange	option changements climatiques: oui (2), non (1)	code 1/2	PARAM

Entrées de STICS

codecroijuv	option croissance juvénile gérée par le paramètre MSAER0 (1) ou par une efficience de croissance juvénile (2)	code 1/2	PARPLT
codefauche	option de fauche pour les cultures fauchées: oui (1), non (2)	code 1/2	PARTEC
codefente	option création d'un compartiment supplémentaire dans le bilan hydrique pour les sols argileux gonflants: oui (1), non (0)	code 0/1	PARSOL
codeffeuil	option technique d'effeuillage: oui (1), non (2)	code 1/2	PARTEC
codegermin	option de passage par une phase de germination ou un délai au démarrage de la culture (1) ou démarrage direct (2)	code 1/2	PARPLT
codeh2oact	code d'activation de l'effet du stress hydrique sur la plante: oui (1), non (0)	code 0/1	PARAM
codehypo	option de passage par une phase de croissance de l'hypocotyle (1) ou plantation d'une plantule (2)	code 1/2	PARPLT
codeindetermin	option de simulation de la croissance des feuilles et des fruits : indéterminée (2) ou déterminée (1)	code 1/2	PARPLT
codeinnact	code d'activation du stress azoté sur la plante: oui (1), non (0)	code 0/1	PARAM
codeintercept	option de simulation de l'interception de la pluie par le feuillage (1) ou non (2)	code 1/2	PARPLT
codeir	option de calcul du rapport masse grains/biomasse totale : proportionnel au temps (1), proportionnel aux sommes de températures (2)	code 1/2	PARPLT
codelegume	1 si la plante est une légumineuse, sinon 2	code 1/2	PARPLT
codemacropor	option de simulation de la circulation d'eau dans la macroporosité des sols pour estimer exces d'eau et ruissellement par "débordement": oui(1), non (0)	code 0/1	PARSOL
codemodfauche	option définissant le mode de fauche: (1) calcul automatique en fonction de l'état phénologique et trophique de la culture, (2) calendrier préétabli en jours, (3) calendrier préétabli en degrés.jours	code 1/2/3	PARTEC
codemulch	typologie des mulchs végétaux : canne de maïs, feuilles de canne à sucre,…	code 1 à 10	PARAM
codepaillage	option: aucun paillage (1), paillage végétal (2), paillage plastique recouvrant partiellement le sol (3)	code 1/2/3	PARTEC
codepfzrac	activation du frein hydrique sur la croissance racinaire: oui (1), non (2)	code 1/2	PARPLT
codephot	option de photopériodisme de la plante: oui (1), non (2)	code1/2	PARPLT
codeplante	nom codifié de la plante en 3 lettres	*	PARPLT
coderacine	choix du module d'estimation de la croissance racinaire en volume : par profil type (1) ou par la densité vraie (2)	code 1/2	PARPLT
coderapport	code permettant d'avoir deux dates supplémentaires de sortie dans le fichier rapport	code 0/1	PARAM
coderes	type de résidus: 1=résidus de culture, 2=résidus de CI, 3=fumier, 4=compost OM, 5=boue SE, 6=vinasse, 7=corne, 8=autre	code 1 à 10	PARTEC
coderetflo	option d'action retard du stress hydrique avant le stade DRP: oui (1), non (2)	code 1/2	PARPLT
codesenes	option d'activation du module de calcul de la sénéscence en biomasse: oui (1), non (2)	code 1/2	PARPLT
codeseuilgrain	option limitation (mini et maxi) du nombre de grains produits: oui (1), non (2)	code 1/2	PARPLT
codeSIG	code d'écriture: de tous les fichiers de sortie (0), des fichiers bilan et rapport (1), ou du fichier rapport seul (2)	code 0/1/2	PARAM
codestade	option de forçage d'un ou plusieurs stades de développement: oui (2), non (1)	code 1/2	PARTEC
codetemp	option mode de calcul du temps thermique pour la plante : avec la température de l'air (1) ou avec la température de culture (2)	code 1/2	PARPLT
codetemprac	option mode de calcul du temps thermique pour les racines : avec la température de culture (1) ou avec la température du sol (2)	code 1/2	PARPLT
codetradtec	description de la structure de plantation en cas d'utilisation des transferts radiatifs: oui (2), non (1)	code1/2	PARTEC
codetransrad	option de simulation de l'interception du rayonnement : loi de Beer (1), transferts radiatifs (2)	code 1/2	PARPLT
codetremp	option d'effet thermique sur le remplissage des grains: oui (2), non (1)	code 1/2	PARPLT
codevar	code des variétés	code 1 à 10	PARAM
codevolat	option d'activation du module de volatilisation de l'ammoniac: oui (1), non (0)	code 0/1	PARSOL
codlocferti	code de localisation de la fertilisation : 1: à la surface du sol, 2 = dans le sol	code 1/2	PARTEC
codlocirrig	code de localisation de l'irrigation : 1=sur-frondaison, 2= sous-frondaison au dessus du sol, 3 = dans le sol	code 1/2/3	PARTEC
codNH4	option de création d'un compartiment ammoniacal dans l'azote minéral du sol: oui (1), non (0)	code 0/1	PARSOL

Entrées de STICS

codtefcroi	option utilisation de températures seuils spécifiques pour le calcul de l'efficience de croissance (2) ou identiques à celles utilisées pour l'indice foliaire (1)	code 1/2	PARPLT
coefb	paramètre définissant l'effet radiatif sur l'efficience de conversion	SD	PARAM
coefmshaut	rapport biomasse/hauteur utile de fauche des cultures	t ha-1 m-1	PARPLT
concirr	concentration en azote minéral de l'eau d'irrigation	kgN mm-1	PARTEC
concN	concentration résiduelle minimale du sol en N-NH4	kgN ha-1	PARSOL
concseuil	concentration minimale du sol en NH4	kgN ha-1 mm-1	PARSOL
concrr	concentration en azote minéral de l'eau de pluie	kgN mm-1	PARAM
couvermulch	proportion de sol couvert par le paillage	SD	PARTEC
croirac	vitesse de croissance du front racinaire	cm degré.jour-1	PARPLT
CsurNres	rapport C/N des résidus de culture ou amendements organiques	g g-1	PARTEC
cwb	rapport C/N minimal de la biomasse microbienne dans la relation: CsurNbio=awb+bwb/CsurNres	g g-1	PARAM
DAF	tableau des densités apparentes des 5 couches de sol	g cm-3	PARSOL
daseuilbas	seuil de densité apparente du sol en dessous de laquelle la croissance racinaire n'est pas contrainte	g cm-3	PARAM
daseuilhaut	seuil de densité apparente du sol au dessus de laquelle la croissance n'est plus possible	g cm-3	PARAM
debsenrac	somme de degrés.jours définissant le début de la sénescence racinaire (durée de vie d'une racine)	degrés.jours	PARPLT
decomposmulch	vitesse de décomposition du paillage végétal	jour-1	PARAM
densite	densité de semis	plantes.m-2	PARTEC
dessecgrain	vitesse de dessèchement du grain	g eau.g MF-1.°C-1	PARPLT
dessecplt	vitesse de dessèchement de la plante à partir du stade NLAX	g eau.g MF-1.°C-1	PARAM
dfol	densité foliaire dans la forme du végétal considérée	m2 feuille m-3	PARPLT
difN	coefficient de diffusion apparente du nitrate dans le sol humide	cm2 jour-1	PARAM
dlaimax	vitesse maximale de production de surface foliaire	m2 feuille plante-1 degré j-1	PARPLT
dosimx	quantité maximale d'eau d'irrigation autorisée à chaque pas de temps (mode irrigation automatique)	mm jour-1	PARTEC
dosimxN	quantité maximale de fertilisant azoté autorisée à chaque pas de temps (mode fertilisation automatique)	kg N ha-1	PARTEC
draclong	vitesse maximale de production de longueur racinaire	cm racine plante-1 degré.jour-1	PARPLT
dureefruit	durée de croissance d'un fruit de la nouaison à la maturité physiologique	degrés.jours	PARPLT
eaures	teneur en eau des résidus organiques	% matière fraiche	PARTEC
efcroijuv	efficience de croissance maximale pendant la phase juvénile (LEV-AMF)	g MJ-1	PARPLT
efcroirepro	efficience de croissance maximale pendant la phase de remplissage des grains (DRP-MAT)	g MJ-1	PARPLT
efcroiveg	efficience de croissance maximale pendant la phase végétative (AMF-DRP)	g MJ-1	PARPLT
effeuil	proportion de la production de feuille journalière supprimée par effeuillage	0-1	PARTEC
effirr	coefficient d'efficacité de l'irrigation	SD	PARTEC
effN	coefficient d'efficacité des engrais azotés	SD	PARTEC
elmax	élongation maximale du coléoptile ou de l'hypocotyle à l'obscurité	cm	PARPLT
epc	épaisseur de chaque horizon de sol (tableau)	cm	PARSOL
extin	coefficient d'extinction du PAR dans le couvert végétal	SD	PARPLT
fhum	paramètre de la fonction teneur en eau du sol sur la vitesse de décomposition des matières organiques	SD	PARAM
finert	fraction du stock d'humus inactive pour la minéralisation et l'humification (= MO stable/MO totale)	SD	PARAM
fmin1	paramètre de la constante de vitesse potentielle de minéralisation: K2=fmin1/(fmin2+argi)/(fmin3+calc)	10000.jour-1	PARAM
fmin2	paramètre de la constante de vitesse potentielle de minéralisation: K2=fmin1/(fmin2+argi)/(fmin3+calc)	%	PARAM
fmin3	paramètre de la constante de vitesse potentielle de minéralisation: K2=fmin1/(fmin2+argi)/(fmin3+calc)	%	PARAM
forme	forme du profil de densité foliaire du végétal : rectangle (1), triangle (2)	code 1/2	PARPLT
ftem	paramètre de la fonction température sur la vitesse de minéralisation de l'humus	SD	PARAM

Entrées de STICS

ftem1	paramètre 1 de la fonction température sur la vitesse de décomposition des résidus organiques	°K-1	PARAM
ftem2	paramètre 2 de la fonction température sur la vitesse de décomposition des résidus organiques	*	PARAM
ftem3	paramètre 3 de la fonction température sur la vitesse de décomposition des résidus organiques	*	PARAM
ftem4	paramètre 4 de la fonction température sur la vitesse de décomposition des résidus organiques	*	PARAM
gpreco	numéro du groupe variétal	*	PARTEC
h2ograin	teneur en eau du grain à la récolte	g eau g MFgrain -1	PARPLT
h2ogrmat	teneur en eau du grain à la maturité physiologique	g eau g MFgrain -1	PARPLT
h2oplante	teneur en eau de la plante pendant la phase végétative	g eau g MFgrain -1	PARPLT
hautbase	hauteur de base du végétal	m	PARPLT
hautcoupe	hauteur de coupe pour les cultures fourragères (calendriers imposés)	m	PARTEC
hautcoupedefaut	hauteur de coupe pour les cultures fourragères (calendriers calculés)	m	PARTEC
hautmax	hauteur maximale du végétal	m	PARPLT
HCCF	humidité à la capacité au champ de chaque horizon (terre fine) (tableau)	% pondéral	PARSOL
hcccx	humidité à la capacité au champ de chaque type de cailloux (tableau)	% pondéral	PARAM
HMINF	humidité au point de flétrissement permanent de chaque horizon (terre fine) (tableau)	g eau g sol -1	PARSOL
iamf	jour julien du stade AMF (accélération maximale de croissance foliaire, fin de phase juvénile), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
idrp	jour julien du stade DRP (début de remplissage des grains), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
ilan	jour julien du stade LAN (indice foliaire nul), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
ilax	jour julien du stade LAX (indice foliaire maxi), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
ilev	jour julien du stade LEV (levée), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
imat	jour julien du stade MAT (maturité physiologique), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
infil	infiltrabilité à la base de chaque horizon	mm jour-1	PARSOL
iniprofil	option de lissage (fonction spline) des profils initiaux de teneur en eau et en azote: oui (1), non (0)	code 0/1	PARAM
INNmin	valeur minimale de INN possible pour la culture	SD	PARPLT
interrang	largeur de l'interrang	m	PARTEC
iplt	jour julien de la date de semis ou de plantation	*	PARTEC
irec	jour julien du stade REC (récolte), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
irecbutoir	jour julien de récolte butoir (si la plante n'a pas fini son cycle à cette date, la récolte est imposée)	*	PARTEC
irmax	indice de récolte maximal	SD	PARPLT
isen	jour julien du stade SEN (début de sénescence nette), si ce stade est observé (sinon 999)	*	PARTEC
julappmulch	jour julien d'application du mulch	*	PARTEC
julfauche	jour julien de chaque fauche (tableau)	*	PARTEC
jultrav	jour julien de travail du sol et/ou d'apport de résidus organiques	*	PARTEC
jvc	nombre de jours vernalisants	*	PARPLT
jvcmini	nombre minimal de jours vernalisants	*	PARAM
kbio	constante de vitesse de mortalité de la biomasse microbienne	jour -1	PARAM
kcouvmlch	coefficient "d'extinction" reliant la quantité de paillis végétal au taux de couverture du sol	*	PARAM
khaut	coefficient "d'extinction" reliant l'indice foliaire à la hauteur	*	PARAM
Kmabs1	constante d'affinité du nitrate par le système d'absorption 1 (à forte affinité) des racines	µmole. cm racine-1	PARAM
Kmabs2	constante d'affinité du nitrate par le système d'absorption 2 (à faible affinité) des racines	µmole. cm racine-1	PARAM
kmax	coefficient cultural maximal de la culture (= ETM/ETP)	SD	PARPLT
kstemflow	coefficient d'"extinction" reliant LAI et stemflow	*	PARPLT
ktrou	coefficient d'extinction du PAR à travers le végétal (transferts radiatifs)	*	PARPLT
laiplantule	Indice foliaire LAI de la plantule au moment de la plantation	m2 feuilles m-2 sol	PARPLT

Entrées de STICS

lairesiduel	indice foliaire résiduel après chaque fauche (tableau)	m2 feuilles m-2 sol	PARTEC
locferti	profondeur d'apport des engrais (en cas d'apport en profondeur dans le sol)	cm	PARTEC
locirrig	profondeur d'apport de l'eau d'irrigation (en cas d'apport en profondeur dans le sol)	cm	PARTEC
lvfront	densité racinaire au niveau du front d'enracinement	cm racine.cm-3 sol	PARPLT
lvopt	densité racinaire optimale pour l'extraction de l'eau et l'azote	cm racine.cm-3 sol	PARAM
masecNmax	biomasse aérienne à partir de laquelle il y a dilution de l'azote (courbes critique et maximale)	t ha-1	PARPLT
masvolcx	masse volumique (apparente) des cailloux	g cm-3	PARAM
mouillabil	rétention d'eau maximale sur les feuilles	mm LAI-1	PARPLT
mouillabilmulch	rétention d'eau maximale dans le mulch végétal	mm t-1 ha	PARAM
msaer0	valeur seuil de matière sèche aérienne initiale attribuable à des racines	t ha-1	PRAIRIE
mscoupemini	valeur seuil de matière sèche pour le déclenchement de la fauche	t ha-1	PRAIRIE
msresiduel	matière sèche résiduelle après une fauche	t ha-1	PARTEC
nbgrmax	nombre maximal de grains	grains m-2	PARPLT
nbgrmin	nombre minimal de grains	grains m-2	PARPLT
nbinterventions	nombre d'interventions: apports de résidus, irrigations, fertilisations, fauches	SD	PARTEC
nbjgrains	période de latence avant DRP pour la mise en place du nombre de grains	jours	PARPLT
nboite	nombre de "boites" ou "classes d'age" de fruits pour la croissance des fruits des plantes indéterminées	SD	PARPLT
NH3ref	concentration en NH3 de l'atmosphère	10 ug.m-3	PARAM
Nminres	teneur en N minéral des résidus organiques	% matière fraîche	PARTEC
Norg	teneur en azote organique de la couche labourée (supposée constante sur la profondeur *profhum*)	% pondéral	PARSOL
numsol	numéro du sol dans le fichier PARAM.SOL	*	USM
obstarac	profondeur de sol à laquelle apparaît un obstacle infranchissable à l'enracinement	cm	PARSOL
orientrang	orientation des rangs	rd (0=NS)	PARTEC
pgrainmaxi	poids maximal d'un grain (à 0% d'eau)	g	PARPLT
pH	pH du mélange sol + amendement organique	SD	PARSOL
phobase	photopériode de base	heures	PARPLT
phosat	photopériode saturante	heures	PARPLT
plNmin	quantité de pluie minimale pour prévoir une fertilisation	mm jour-1	PARAM
pminruis	quantité minimale de pluie pour le déclenchement du ruissellement	mm jour-1	PARAM
profhum	profondeur maximale du sol sur laquelle se produit la minéralisation d'azote (max.60 cm)	cm	PARSOL
profmes	profondeur de mesure de la réserve en eau du sol	cm	PARTEC
profsem	profondeur de semis	cm	PARTEC
proftrav	profondeur de travail du sol et/ou d'incorporation des résidus organiques (max. 40 cm)	cm	PARTEC
proprac	rapport masse de racines / masse de parties aériennes à la récolte	g.g -1	PARAM
proppfz	activité racinaire autorisée quand l'humidité du sol est en dessous de l'humidité minimale (actif sur germination, croissance racinaire)	0-1	PARPLT
psisto	valeur absolue du potentiel de fermeture stomatique	bars	PARPLT
psiturg	valeur absolue du potentiel de début de diminution de l'expansion cellulaire	bars	PARPLT
q0	paramètre d'évaporation en sol nu (fin de phase I)	mm	PARSOL
qmulch0	quantité de mulch initial	t ha-1	PARTEC
qmulchruis0	quantité de mulch annulant le ruissellement	t ha-1	PARAM
qres	quantité de résidus de culture ou d'amendements organiques apportés au sol (matière fraîche)	t MF ha-1	PARTEC
ra	résistance aérodynamique par défaut (utilise au module volatilisation quand on utilise l'approche ETP)	sm-1	PARAM
rapforme	rapport épaisseur/largeur de la forme du végétal (négatif quand base de la forme < sommet)	SD	PARPLT
ratiol	indice de stress hydrique en-dessous duquel on déclenche une irrigation en mode automatique (0 en mode manuel)	entre 0 et 1	PARTEC
ratioN	indice de stress azoté en-dessous duquel on déclenche une fertilisation N en mode automatique (0 en mode manuel)	entre 0 et1	PARTEC
ratiosen	fraction de biomasse sénescente (par rapport à la biomasse totale)	entre 0 et 1	PARPLT

Entrées de STICS

rayon	rayon moyen des racines	cm	PARAM
remobil	fraction de biomasse remobilisable (par rapport à la biomasse totale) au stade DRP	entre 0 et 1	PARPLT
ressuite	nom du type de résidus restitués au sol après la récolte (pour la culture suivante)	pailles, racines, culture, rien	PARTEC
rsmin	résistance stomatique minimale	s m-1	PARPLT
ruisolnu	fraction de la pluie ruisselée (par rapport à la pluie totale) en conditions de sol nu	entre 0 et 1	PARSOL
sbv	rapport surface foliaire/biomasse végétative	cm g-1	PARPLT
splaimin	valeur minimale du rapport sources/puits pour la croissance foliaire	entre 0 et 1	PARAM
stadecoupedf	stade de coupe automatique	*	PARTEC
stamflax	cumul d'unités de développement entre les stades AMF et LAX	degrés.jours	PARPLT
stdrpmat	cumul d'unités de développement entre les stades DRP et MAT	degrés.jours	PARPLT
stdrnou	cumul d'unités de développement entre les stades DRP et NOU (fin de nouaison)	degrés.jours	PARPLT
stemflowmax	fraction maximale de la pluie qui s'écoule le long des tiges	entre 0 et 1	PARPLT
stlaxsen	cumul d'unités de développement entre les stades LAX et SEN	degrés.jours	PARPLT
stlevamf	cumul d'unités de développement entre les stades LEV et AMF	degrés.jours	PARPLT
stlevdrp	cumul d'unités de développement entre les stades LEV et DRP	degrés.jours	PARPLT
stlevsenms	cumul d'unités de développement entre les stades LEV et le début de sénescence brute	degrés.jours	PARPLT
stpltger	cumul d'unités de développement permettant la germination	degrés.jours	PARPLT
stsenlan	cumul d'unités de développement entre les stades SEN et LAN	degrés.jours	PARPLT
tcmax	température maximale de croissance	°C	PARPLT
tcmin	température minimale de croissance	°C	PARPLT
tdmax	température seuil maximale pour le développement	°C	PARPLT
tdmin	température seuil minimale pour le développement	°C	PARPLT
temax	température seuil maximale pour la croissance en biomasse	°C	PARPLT
temin	température seuil minimale pour la croissance en biomasse	°C	PARPLT
tempfauche	cumul d'unités de développement entre deux fauches	degrés.jours	PARTEC
teopt	température optimale pour la croissance en biomasse	°C	PARPLT
tgmin	température seuil minimale utilisée pour la phase de levée	°C	PARPLT
tmaxremp	température maximale pour le remplissage des grains	°C	PARPLT
tminremp	température minimale pour le remplissage des grains	°C	PARPLT
TREF	température de référence pour les paramètres de minéralisation du sol	°C	PARAM
tustressmin	seuil de stress (min(turfac,inns)) à partir duquel il y a un effet sur le LAI (sénescence supplémentaire par rapport à la sénescence naturelle)	SD	PARPLT
typecailloux	type de cailloux : 1=calcaires B1, 2=calcaires B2, 3=calcaires L, 4=caillasses L, 5=graviers m, 6=silex, 7=granits a, 8=calcaires J, 9=autre1, 10=autre2	SD	PARSOL
typemulch	type de mulch : 1=cannes de mais, 2= feuilles de canne à sucre	entre 0 et 10	PARTEC
typsol	type de sol	*	PARSOL
vitirazo	vitesse d'augmentation de l'indice de récolte azote	g grain g plante -1 jour-1	PARPLT
vitircarb	vitesse d'augmentation de l'indice de récolte carbone	g grain g plante -1 jour-1	PARPLT
vitircarbT	vitesse "thermique" d'augmentation de l'indice de récolte carbone	g grain g plante-1 degré.jour-1	PARPLT
vlaimax	ULAI au point d'inflexion de la fonction DELTAI=f(ULAI)	SD	PARAM
Vmax1	vitesse maximale d'absorption du nitrate par le système d'absorption 1 (à forte affinité) des racines	µmole cm-1 h-1	PARAM
Vmax2	vitesse maximale d'absorption du nitrate par le système d'absorption 2 (à faible affinité) des racines	µmole cm-1 h-1	PARPLT
Wh	rapport N/C de l'humus	g g–1	PARAM
yres	rendement d'assimilation du carbone par la microflore décomposant les résidus organiques	g g-1	PARAM
zesx	profondeur maximale du sol affectée par l'évaporation du sol	cm	PARAM
zlabour	profondeur de labour	cm	PARTEC

Entrées de STICS

zpente	profondeur du niveau où la densité racinaire est réduite de moitié par rapport à la surface pour le profil de référence	cm	PARPLT
zprlim	profondeur maximale du profil racinaire pour le profil de référence	cm	PARPLT
zr	hauteur de référence de mesure des données météo	m	PARAM
Hinitf	tableau des humidités initiales des 5 horizons de sol pour la terre fine	% pondéral	USM
Ninitf	tableau des quantités d'azote minéral initiales des 5 horizons de sol pour la terre fine	kg ha-1	USM
densinitial	tableau des densités racinaires initiales pour les 5 horizons	cm cm-3	USM
lai0	indice foliaire initial	m2 m-2	USM
masec0	biomasse initiale	t ha-1	USM
zrac0	profondeur du front racinaire initiale	cm	USM
magrain0	biomasse initiale des grains	g m-2	USM
QNplante0	quantité d'azote initiale dans la plante	kg ha-1	USM
stade0	stade cultural pris en compte au demarrage de la simulation	*	USM
nometp	code du mode de calcul de l'ETP [pt/pe]	*	CLIMAT
alphapt	paramètre de Priestley-Taylor	*	CLIMAT
parsurrg	coefficient PAR/RG pour le calcul du rayonnement photosynthétiquement actif	*	CLIMAT
latitude	latitude du lieu pour le calcul de la photopériode	degrés	CLIMAT

C.2 Liste des variables et paramètres de sortie de STICS

Nom variable	Définition	unité
abso	vitesse d'absorption d'azote par la plante	kgN.ha-1.j-1
allocfruit	taux d'allocation des assimilats vers les fruits 0 à 1	
anoxmoy	indice d'anoxie moyen sur la profondeur racinaire	0 à 1
AZ(1)	quantité d'azote minéral de chaque horizon (tableau)	kgN.ha-1
AZ(2)	quantité d'azote minéral de chaque horizon (tableau)	kgN.ha-2
AZ(3)	quantité d'azote minéral de chaque horizon (tableau)	kgN.ha-3
AZ(4)	quantité d'azote minéral de chaque horizon (tableau)	kgN.ha-4
AZ(5)	quantité d'azote minéral de chaque horizon (tableau)	kgN.ha-5
azomes	quantité d'azote minéral sur la profondeur de mesure	kgN.ha-1
bouchon	indice indiquant si les fentes de retrait sont ouvertes (0) ou fermées (1)	0/1
Cb	quantité de C contenu dans la biomasse décomposant les résidus organiques	kgC.ha-1
cdemande	demande cumulée en azote de la plante	kgN.ha-1
cep	transpiration cumulée sur la saison de culture	mm
cestout	évaporation cumulée sur l'ensemble de la simulation	mm
chargefruit	quantité de fruits en cours de remplisage présents sur la plantenb	nb fruits
Chumt	quantité totale de C humus (fractions active + inerte) dans le sol	kgC.ha-1
CNgrain	teneur en azote des grains	% MS
CNplante	concentration en azote de la plante entière	% MS
couvermulch	taux de couverture du mulch	0 à 1
cpreciptout	apports d'eau cumulés sur l'ensemble de la simulation	mm
cumlracz	longueur totale de racines (efficaces pour l'absorption d'eau et d'azote)	cm.cm -2 sol
cumraint	rayonnement intercepté cumulé	MJ.m-2
cumrg	cumul semis-récolte du rayonnement global	MJ.m-2
deltai	accroissement journalier de l'indice foliaire	m2.m-2 sol.j-1
deltaz	vitesse de croissance du front racinaire	cm j-1
demande	demande instantanée en azote de la plante	kgN.ha-1.j-1
dltags	vitesse de croissance des grains	t ha-1.j-1
dltams(n)	vitesse de croissance de la plante	t ha-1.j-1
dltamsen	vitesse de sénescence	t ha-1.j-1
drain	quantité d'eau drainée sous la base du profil de sol	mm j-1
drat	cumul d'eau drainée à la base du profil de sol	mm
dtj(n)	température journalière active pour la croissance racinaire	°C.j
Edirect	eau évaporée par le sol + interceptée par les feuilles + interceptée par le mulch	mm j-1
EmPd	évaporation directe de l'eau interceptée par les feuilles	mm j-1
Emulch	évaporation directe de l'eau interceptée par le mulch	mm j-1
eo	évaporation maximale par le sol et la plante	mm j-1
eop	évaporation maximale par la plante	mm j-1
eos	évaporation maximale par le sol	mm j-1
ep	transpiration réelle journalière	mm j-1
epsib	efficience de conversion	g MJ-1
es	évaporation réelle journalière	mm j-1
et	évapotranspiration journalière	mm j-1
etm	évapotranspiration maximale (= eop + es)	mm j-1
exces(1)	quantité d'eau présente dans la macroporosité de l'horizon 1	mm
exces(2)	quantité d'eau présente dans la macroporosité de l'horizon 2	mm
exces(3)	quantité d'eau présente dans la macroporosité de l'horizon 3	mm
exces(4)	quantité d'eau présente dans la macroporosité de l'horizon 4	mm
exces(5)	quantité d'eau présente dans la macroporosité de l'horizon 5	mm
flurac	flux d'absorption d'azote associé à la capacité limitante d'absorption par la plante	kgN.ha-1.j-1
flusol	flux d'absorption d'azote associé au transfert limitant sol --> racine	kgN.ha-1.j-1
fpft	force de puits des fruits	g.m-2 j-1
fpv(n)	force de puits des organes végétatifs	g.j-1.m-2
FsNH3	Volatilisation de NH3	µg.m-2.j-1
ftemp	facteur de réduction de EPSIBMAX lié à la température	0-1
hauteur	hauteur du couvert	m
HR(1)	teneur en eau de chaque horizon (tableau)	% pondéral
HR(2)	teneur en eau de chaque horizon (tableau)	% pond.
HR(3)	teneur en eau de chaque horizon (tableau)	% pond.
HR(4)	teneur en eau de chaque horizon (tableau)	% pond.
HR(5)	teneur en eau de chaque horizon (tableau)	% pond.
humidite	humidité à l'intérieur du couvert	0 à 1
inn	indice de nutrition azotée	SD

Sorties de STICS

inns	indice de stress azoté	0 à 1
intermulch	eau interceptée par le mulch végétal	mm
interpluie	eau interceptée par le feuillage	mm
irazo	indice de récolte azote	gN grain gN plante-1
ircarb	indice de récolte carbone	g grain g plante-1
lai(n)	indice foliaire de la culture (tableau)	m2 feuille m-2 sol
laisen(n)	indice foliaire des feuilles sénescentes	m2 feuille m-2 sol
largeur	largeur de la forme du végétal	m
LRAC	densité racinaire efficace en l'absence de stress hydrique	cm.cm-3 sol
LRACH(1)	densité racinaire	cm.cm-3 sol
LRACH(2)	densité racinaire	cm.cm-3 sol
LRACH(3)	densité racinaire	cm.cm-3 sol
LRACH(4)	densité racinaire	cm.cm-3 sol
LRACH(5)	densité racinaire	cm.cm-3 sol
lracsentot	longueur totale des racines sénescentes	cm.cm -2 sol
mafrais	matière fraîche aérienne	t.ha-1
magrain(n)	matière sèche grain	g.m-2
masec(n)	matière sèche aérienne	t.ha-1
masecneo	matière sèche néoformée	t.ha-1
msneojaune	matière sèche néoformée senescente	t.ha-1
msresjaune	matière sèche résiduelle senescente	t.ha-1
Nb	quantité de N contenu dans la biomasse décomposant les résidus organiques	kgN.ha-1
NCbio	rapport N/C de la biomasse décomposant les résidus organiques	gN.gC-1
nfruit(1)	nombre de fruits dans la boite 1	nb fruits
nfruit(2)	nombre de fruits dans la boite 2	nb fruits
nfruit(3)	nombre de fruits dans la boite 3	nb fruits
nfruit(4)	nombre de fruits dans la boite 4	nb fruits
nfruit(5)	nombre de fruits dans la boite 5	nb fruits
nfruit(nboite)	nombre de fruits dans la dernière boite	nb fruits
nfruit(nboite-1)	nombre de fruits dans l'avant dernière boite	nb fruits
nfruitnou	nombre de fruits noués	nb fruits noués.m-2
Nhum	"quantité de N humus ""actif"" dans le sol"	kgN.ha-1
Nhumt	quantité totale de N humus (fractions active + inerte) dans le sol	kgN.ha-1
Nr	quantité de N contenu dans les résidus organiques en décomposition dans le sol	kgN.ha-1
pdsfruit(1)	poids de fruits dans la boite 1	g m-2
pdsfruit(2)	poids de fruits dans la boite 2	g m-2
pdsfruit(3)	poids de fruits dans la boite 3	g m-2
pdsfruit(4)	poids de fruits dans la boite 4	g m-2
pdsfruit(5)	poids de fruits dans la boite 5	g m-2
pdsfruit(nboite)	poids de fruits dans l'avant dernière boite	g m-2
pdsfruit(nboite)	poids de fruits dans la dernière boite	g m-2
pdsfruitfrais	poids de fruit total frais	g m-2
pousfruit	nombre de fruits passant d'une boite à la suivante	nb fruits
poussracmoy	indice moyen d'effet des contraintes sol sur le profil d'enracinement (option densité vraie)	0 à 1
precip	apport journalier d'eau	mm j-1
qeffeuil	fraction de surface de feuille verte supprimée par effeuillage	SD
QLES	cumul de N-NO3 lessivé à la base du profil de sol	kgN.ha-1
Qminh	cumul d'azote minéralisé provenant de l'humus	kgN.ha-1
Qminr	cumul d'azote minéralisé provenant des résidus organiques	kgN.ha-1
qmulch	quantité de mulch végétal	t.ha-1
QNgrain	quantité d'azote dans les grains/fruits	kgN.ha-1
QNplante	quantité d'azote dans la plante	kgN.ha-1
ra	résistance aérodynamique entre le couvert et le niveau de référence zr	s.m-1
raint	rayonnement intercepté par le couvert	MJ.m-2
ras	résistance aérodynamique entre le sol et le couvert	s.m-1
Ratm	rayonnement atmosphérique	MJ.m-2
rcP	résistance du couvert	s.m-1
rdif	rapport entre rayonnement diffus et rayonnement global	0 à 1
remobilj	quantité de biomasse remobilisée au profit des fruits	g.m-2.j-1
resmes	quantité d'eau du sol sur la profondeur de mesure	mm
resrac	réserve en eau dans la zone racinaire	mm
rfpi	indice de réduction du développement lié à la photopériode	0 à 1
rfvi	indice de réduction du développement lié à la vernalisation	0 à 1

Sorties de STICS

rltot	longueur totale des racines présentes	cm.cm -2 sol
rnet	rayonnement net	MJ.m-2
rnetS	rayonnement net sol	MJ.m-2
rombre	fraction du rayonnement à l'ombre	0 à 1
rsoleil	fraction de rayonnement au soleil	0 à 1
RsurRU	fraction de la réserve utile (R/RU) sur l'ensemble du profil	0 à 1
ruissel	ruissellement journalier	mm
ruisselsurf	ruissellement de surface	mm
ruisselt	quantité d'eau ruisselée totale (surface + débordement)	mm
saturation	quantité d'eau présente dans la macroporosité du sol	mm
somcour	cumul d'unités de développement entre deux stades	°C.j
sourcepuits	rapport sources/puits	0 à 1
splai	rapport sources/puits appliqué aux feuilles	0 à 1
stemflowP	eau s'écoulant le long de la tige	mm
surfAO	fraction de la surface à l'ombre	0 à 1
surfAS	fraction de la surface au soleil	0 à 1
swfac	indice de stress hydrique stomatique	0 à 1
tairveille	température moyenne de l'air du jour précédent	°C
tcult	température de culture (moyenne journalière)	°C
tcult-tairveille	ecart entre la température de surface et la température de l'air	°C
tcultmax	température de culture maximale journalière	°C
tcultmin	température de culture minimale	°C
tetstomate	seuil de teneur en eau du sol limitant la transpiration et la photosynthèse	% volum.
teturg	seuil de teneur en eau du sol limitant la croissance en surface des feuilles	% volum.
tmax(n)	température maximale de l'air (tableau)	°C
tmin(n)	température minimale de l'air (tableau)	°C
tmoy(n)	température moyenne de l'air (tableau)	°C
tnhc	"temps ""normalisé"" cumulé pour la minéralisation de l'humus"	jours
tnrc	"temps ""normalisé"" cumulé pour la minéralisation des résidus organiques"	jours
TS(1)	température moyenne du sol (moyenne des 5 horizons) (tableau)	°C
TS(2)	température moyenne du sol (moyenne des 5 horizons) (tableau)	°C
TS(3)	température moyenne du sol (moyenne des 5 horizons) (tableau)	°C
TS(5)	température moyenne du sol (moyenne des 5 horizons) (tableau)	°C
TS(5)	température moyenne du sol (moyenne des 5 horizons) (tableau)	°C
turfac	indice de stress hydrique de turgescence	0-1
udevair	unité de développement journalière en température de l'air	°C.j
udevcult	unité de développement journalière en température de culture	°C.j
upvt(n)	unité de développement journalière	°C.j
xmlch1	épaisseur du mulch créé par l'évaporation du sol	cm
zrac	profondeur atteinte par le système racinaire	cm

Annexe D

Compléments du chapitre 4 : Résultats d'assimilation dans le cadre des expériences jumelles

Cette annexe présente l'ensemble des résultats du plan d'expérience sur les données simulées assimilées dans BONSAÏ (§ 4.4.1).

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 1	sans IAP				
$\boldsymbol{\theta_{\mathbf{est}}(\mathbf{exp.4})}$	0.05	1556	731	0.00177	7.7	0.06803	**0.18**
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1503	787	0.00206	7.7	0.06803	0.18
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1554	746	0.00184	8.0	0.06804	0.12
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1503	787	0.00206	7.7	0.06804	0.13
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1530	754	0.00217	8.4	0.00698	0.07
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1501	800	0.00205	7.5	0.05836	0.01
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1514	793	0.00201	7.8	0.00896	0.19
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1501	800	0.00205	7.5	0.05887	0.01

Tab. D.1 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 1 et sans IAP, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit :* bruit 1 *signifie que les observations sont bruitées,* bruit 0 *signifie qu'elles sont parfaites.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1503	798	0.00203	7.0	0.05500	0.08
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.00
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 1	IAP 1				
$\theta_{\mathbf{est}}(\mathbf{exp.3})$	1.00	1499	801	0.00201	7.2	0.05500	**0.07**
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.00
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1508	797	0.00211	7.5	0.05517	0.14
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05499	0.00
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1504	793	0.00203	7.5	0.05418	0.20
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05501	0.00

Tab. D.2 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 1 et l'IAP 1, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.15
cas obs. 1	nb. obs. 5	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.00
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.10
cas obs. 1	nb. obs. 10	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.00
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	0.10
cas obs. 1	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 2				
$\theta_{\mathbf{est}}(\mathbf{exp.2})$	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	**0.00**
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05501	0.18
cas obs. 1	nb. obs. 170	bruit 0	IAP 2				
$\theta_{\mathbf{est}}(\mathbf{exp.1})$	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	**0.00**

Tab. D.3 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 1 et l'IAP 2, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	0.84	1548	703	0.00187	11.4	0.09252	
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1501	741	0.00199	11.2	0.06804	0.07
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1550	692	0.00188	11.6	0.05923	0.05
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1564	672	0.00200	12.6	0.06804	0.07
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1549	696	0.00188	11.5	0.06804	0.03
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 1	sans IAP				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.7)**	0.05	1527	727	0.00191	10.8	0.02784	**0.10**
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 0	sans IAP				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.5)**	0.05	1551	703	0.00187	11.7	0.09452	**0.03**
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 1	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1545	696	0.00193	11.7	0.14498	0.24
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 0	sans IAP				
θ_{est}	0.05	1548	703	0.00187	11.4	0.09296	0.00

TAB. D.4 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 2 et sans IAP, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	0.84	1548	703	0.00187	11.4	0.09252	
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1482	787	0.00207	8.9	0.05500	0.23
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1488	784	0.00216	9.2	0.05500	0.30
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1483	785	0.00199	8.4	0.05500	0.13
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1487	785	0.00211	9.4	0.05500	0.23
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 1				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.8)**	1.00	1483	790	0.00205	9.8	0.05498	**0.23**
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 1				
$\theta_{\mathbf{est}}$**(exp.6)**	1.00	1487	787	0.00208	9.5	0.05502	**0.16**
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 1	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1537	729	0.00196	10.8	0.05554	0.30
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 0	IAP 1				
θ_{est}	1.00	1523	743	0.00196	10.5	0.05704	0.10

TAB. D.5 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 2 et l'IAP 1, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	0.84	1548	703	0.00187	11.4	0.09252	
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.6	0.05500	0.97
cas obs. 2	nb. obs. 5	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.6	0.05500	0.81
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.6	0.05500	0.84
cas obs. 2	nb. obs. 10	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	800	0.00205	7.6	0.05500	0.61
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	801	0.00205	7.6	0.05498	0.62
cas obs. 2	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1500	801	0.00206	7.7	0.05498	0.59
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1499	804	0.00208	8.3	0.05498	0.55
cas obs. 2	nb. obs. 170	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1498	804	0.00208	8.3	0.05496	0.46

Tab. D.6 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 2 et l'IAP 2, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

	t_0	Ti	ΔTs	B	L_{max}	C	RMSE(LAI)
θ_{ap}	1.00	1500	800	0.00205	7.5	0.05500	
θ_{obs}	-0.70	1540	764	0.00273	10.7	0.06342	
cas obs. 3	nb. obs. 5	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	802	0.00206	7.6	0.05500	1.37
cas obs. 3	nb. obs. 5	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	802	0.00206	7.6	0.05500	1.38
cas obs. 3	nb. obs. 10	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	802	0.00206	7.6	0.05500	0.95
cas obs. 3	nb. obs. 10	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	802	0.00206	7.6	0.05500	0.98
cas obs. 3	nb. obs. 23	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	804	0.00208	7.8	0.05494	1.15
cas obs. 3	nb. obs. 23	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1501	803	0.00208	7.8	0.05495	1.04
cas obs. 3	nb. obs. 50	bruit 1	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1506	815	0.00218	8.7	0.05490	0.77
cas obs. 3	nb. obs. 50	bruit 0	IAP 2				
θ_{est}	1.00	1506	815	0.00218	8.8	0.05492	0.73

Tab. D.7 – *Estimation des 6 paramètres et RMSE du LAI (dernière colonne) pour le cas d'observation 3 et l'IAP 2, en fonction du nombre d'observations (nb. obs.) et du bruit.*

Références bibliographiques

[1] J.D. Aber, K.L. Bolster, S.D. Newman, M. Soulia, and M.E. Martin. Analyses of forest foliage II : measurement of carbon fraction and nitrogen content by end-member analysis. *J. Near Infrared Spectrosc.*, 2 :15–23, 1994.

[2] E. Andersson, J. Haseler, P. Undén, P. Courtier, G. Kelly, D. Vasiljevic, C. Brankovic, C. Cardinali, C. Gaffard, A. Hollingsworth, C. Jakob, P. Janssen, E. Klinker, A. Lanzinger, M. Miller, F. Rabier, A. Simmons, B. Strauss, J.-N. Thépaut, and P. Viterbo. The ECMWF implementation of three dimensional variational assimilation (3d-var). Part III : Experimental results. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 1998.

[3] C.P.Jr. Arnold and C.H. Dey. Observing-system simulation experiments : Past, present, and future. *Bull. Am. Meteor. Soc.*, 67 :687–695, 1986.

[4] G. Asrar, R.B. Myneni, Y. Li, and E.T. Kanemasu. Measuring and modelling spectral characteristics of a Tallgrass Prairie. *Remote Sens. Environ.*, 27 :143–155, 1989.

[5] C. Bacour. *Contribution à la détermination des paramètres biophysiques des couverts végétaux par inversion de modèles de réflectance : analyses de sensibilité comparatives et configurations optimales.* Thèse de Doctorat, Université D. Diderot - Paris VII, 2001.

[6] C. Bacour, S. Jacquemoud, Y. Tourbier, M. Dechambre, and J.P. Frangi. Design and analysis of numerical experiments to compare four canopy reflectance models. *Remote Sens. Environ.*, 79(1) :72–83, 2001b.

[7] C. Bacour, S. Jacquemoud, P. Vogt, B. Hosgood, G. Andreoli, and J.-P. Frangi. Optimal sampling configurations for the estimation of canopy properties from BRDF data acquired with the EGO/JRC. In *Proc. 8th Int. Symp. Physical Measurements & Signatures in Remote Sensing*, pages 481–486, Aussois (France), 8-12 January 2001a. CNES.

[8] F. Baret. *Contribution au suivi radiométrique de cultures de céréales.* Thèse de Doctorat, Université d'Orsay, 1986.

[9] F. Baret. ReSeDA - assimilation of multisensor and multitemporal remote sensing data to monitor soil and vegetation functioning. Technical Report (final), European Community, Environment and Climate Program, 2000.

[10] F. Baret, J. Clevers, and M.D. Steven. The robustness of canopy gap fraction estimates from red and near-infrared reflectances :a comparison of approaches. *Remote Sens. Environ.*, 54 :141–151, 1995.

[11] F. Baret and T. Fourty. Estimation of leaf water content and specific leaf weight from reflectance andtransmittance measurements. *Agronomy*, 17 :455–464, 1997.

[12] F. Baret and G. Guyot. Potentials and limits of vegetation indices for LAI and APAR assessment. *Remote Sens. Environ.*, 35(2-3) :161–173, February-March 1991.

[13] F. Baret, G. Guyot, and D. Major. Crop biomass evaluation using radiometric measurements. *Photogrammetria*, 43 :241–256, 1989a.

[14] F. Baret, G. Guyot, and D. Major. TSAVI : a vegetation index which minimizes soil brightness effects on LAI and APAR estimation. In *12th Canadian Symposium on Remote Sensing and IGARSS90*, page 4, Vancouver, 1989b.

[15] F. Baret, C. Lauvernet, O. Marloie, L. Prévot, and N. Rochdi. Projet ADAM : Assimilation des données de télédétection dans les agro- modèles. Rapport final 2003, INRA, Avignon, Mai 2003.

[16] F. Baret and A. Olioso. Estimation à partir de mesures de réflectance spectrale du rayonnement photosynthétiquement actif absorbé par une culture de blé. *Agronomie*, 9 :885–895, 1989.

[17] F. Baret, R. Vintila, C. Lazar, N. Rochdi, L. Prévot, C. Lauvernet, J.-C. Favard, H. De Boissezon, E. Petcu, G. Petcu, P. Voicu, J.-P. Denux, V. Poenaru, C. Simota, O. Marloie, F. Cabot, and P. Henry. The ADAM experiment : investigating high temporal revisit frequency at high spatial satellite resolution for crop monitoring. In A. Canarache, editor, *International Conference - Soils under Global Change - a Challenge for the 21st Century*, Constanta (Romania), Sept 2002.

[18] L.A. Bastidas, S. Gupta, H.V. ans Sorooshian, W.J. Shuttleworth, and Z.L. Yang. Sensitivity analysis of a land surface scheme using multicriteria methods. *J. of Geophysical Res.*, 104(D16)(19) :481,490, 1999.

[19] A. Bégué. *Estimation de la production primaire en zone sahé lienne à partir de données radiométriques.* Thèse de Doctorat, Université D. Diderot - Paris VII, 1991.

[20] A. Bégué. Leaf area index, intercepted photosynthetically active radiation, and spectral vegetation indices : a sensitivity analysis for regular-clumped canopies. *Remote Sens. Environ.*, 46 :45–59, 1993.

[21] E. Bélanger. Assimilation de données variationnelle quadridimensionnelle pour les écoulements turbulents biphasiques en eaux peu profondes. Mémoire de maitrise, Université de Montreal, 2003.

[22] A.F. Benett. *Inverse Modeling of the Ocean and Atmosphere.* Cambridge University Press, Oregon State University, 2002.

[23] L. Bertino. *Assimilation de données pour la prédiction de paramètres hydrodynamiques et écologiques : cas de la lagune de l'Oder.* Thèse de Doctorat, Ecole des Mines de Paris, 2001.

[24] K. Beven and A. Binley. The future of distributed models : model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, 6 :279–298, 1992.

[25] P. Bicheron and M. Leroy. A method of biophysical parameter retrieval at global scale by inversion of a vegetation reflectance model. *Remote Sens. Environ.*, 67 :251–266, 1999.

[26] C.H. Bischof, H.M. Bücker, B. Lang, A. Rasch, and A. Vehreschild. Combining source transformation and operator overloading techniques to compute derivatives for MATLAB programs. In *Proceedings of the Second IEEE International Workshop on Source Code Analysis and Manipulation (SCAM 2002)*, pages 65–72, Los Alamitos, CA, USA, 2002. IEEE Computer Society.

[27] C.H. Bischof, A. Carle, P.D. Hovland, P. Khademi, and A. Mauer. ADIFOR 2.0 user's guide (Revision D). Technical report, Mathematics and Computer Science Division Technical Memorandum no. 192 and Center for Research on Parallel Computation Technical Report CRPC-95516-S, 1998.

[28] C.H. Bischof, L. Roh, and A. Mauer. ADIC — An extensible automatic differentiation tool for ANSI-C. *Software–Practice and Experience*, 27(12) :1427–1456, 1997.

[29] E. Blayo, J. Blum, and J. Verron. *Assimilation variationnelle de données en océanographie et réduction de la dimension de l'espace de contrôle*, pages 199–219. Gauthier-Villars, 1998.

[30] E. Boegh, M. Thorsen, M.B. Butts, S. Hansen, J.S. Christiansen, P. van der Keur, P. Abrahamsen, H. Soegaard, K. Schelde, A. Thomsen, Hasager C.B., N.O. Jensen, and J.C. Refsgaard. Incorporating remote sensing data in physically based distributed agro-hydrological modelling. *Journal of Hydrology*, 287 :279–299, 2004.

[31] R. Bonhomme, J.-L. Drouet, and T. Ameglio. Introduction à la modélisation du fonctionnement physiologique d'un couvert. In *Ecole-Chercheur en Bioclimatologie (Tome 1)*, pages 647–667. INRA Editions, 1995.

[32] F. Bonn and G. Rochon. *Précis de télé détection*, volume 3 vol. Presses de l'Université du Qué bec, Québec, 1992.

[33] G. Boulet. Techniques d'assimilation : définitions, bref état de l'art et bibliographie succincte.

[34] F. Bouttier and P. Courtier. Data assimilation concepts and methods. In *Meteorological Training Course Lecture Series*, Toulouse, mars 1999.

[35] N. Brisson, C. Gary, E. Justes, R. Roche, B. Mary, D. Ripoche, D. Zimmer, J. Sierra, P. Bertuzzi, P. Burger, F. Bussière, Y.M. Cabidoche, P. Cellier, P. Debaeke, J.P. Gaudillière, C. Hénault, F. Maraux, B. Seguin, and H. Sinoquet. An overview of the crop model STICS :. *European Journal Of Agronomy*, 18 :309–332, 2003.

[36] N. Brisson and B. Mary. STICS VERSION *5.0, Notice concepts et formalismes.* INRA, Février 2002.

[37] N. Brisson, B. Mary, D. Ripoche, M.-H. Jeuffroy, F. Ruget, B. Nicoullaud, P. Gate, F. Devienne-Barret, R. Antonioletti, C. Dürr, G. Richard, N. Beaudoin, S. Recous, X. Tayot, D. Plénet, P. Cellier, J.-M. Machet, J.-M. Meynard, and R. Delécolle. STICS : a generic model for the simulation of crops and their water and nitrogen balances. I. theory and parameterisation applied to wheat and maize. *Agronomie*, 18 :311–346, 1998.

[38] N. Brisson, F. Ruget, P. Gate, J. Lorgeou, B. Nicoullaud, X. Tayot, D. Plénet, M.-H. Jeuffroy, A. Bouthier, D. Ripoche, B. Mary, and E. Justes. STICS : a generic model for simulating crops and their water and nitrogen balances. II. model validation for wheat and maize. *Agronomie*, 22 :69–92, 2002.

[39] C.G. Broyden. The convergence of a class of double rank minimization algorithms, part i. *Journal of the Institute of Mathematics and its Applications*, 6 :76–90, 1970.

[40] F. Cabot. *Estimation de l'albedo de surface à l'échelle globale, à l'aide de mesures satellitaires.* Thèse de Doctorat, Université d'Orsay-Paris Sud, 1995.

[41] D.G. Cacuci. Sensitivity theory for nonlinear systems. i. nonlinear functional analysis approach. *J. Math. Phys*, 12(22) :2794–2802, 1981.

[42] D.G. Cacuci. Global optimization and sensitivity analysis. *Nucl. Sci. Eng.*, 104(78), 1990.

[43] J.C. Calvet, J. Noilhan, J.-L. Roujean, P. Bessemoulin, M. Cabelguenne, A. Olioso, and J.-P. Wigneron. An interactive vegetation svat model tested against datafrom six contrasting sites. *Agric. Forest. Meteorol.*, 92 :73–95, 1998.

[44] A. Canarache. A soil-management-yield system : Case study in fundulea- ileana area. *Romanian Soil Science Journal*, XXXVI(1) :20–32, 2002.

[45] G.J. Carbone, S. Narumalani, and M. King. Application of remote sensing and gis technologies with physiological crop models. *Photogramm. Eng. Remote Sens.*, LXII(2) :171–179, February 1996.

[46] W. Castaings, D. Dartus, M. Honnorat, F.-X. Le Dimet, Y. Loukili, and J. Monnier. Automatic differenciation : a tool for variational data assimilation and adjoint sensitivity analysis for flood modeling. In *AD2004*, Chicago, 2004.

[47] W. Castaings, F.-X. Le Dimet, and D. Dartus. Assimilation de données in situ et télédétection pour la modélisation hydrologique. *Bull. Soc. Fr. de Photogrammétrie et Télédétection*, 2004. à paraître.

[48] P. Cayrol. *Assimilation de données satellitales dans un modèle de croissance de la végétation et de bilan d'énergie : application à des zones semi-arides.* Thèse de Doctorat, Institut national polytechnique de Toulouse, 2000.

[49] I. Charpentier. Checkpointing schemes for adjoint codes : Application to the meteorological model Meso-NH. *SIAM J. Sci. Comput.*, 22(6) :2135–2151, 2000.

[50] I. Charpentier and M. Ghemires. Génération automatique de codes adjoints : strategies d'utilisation pour le logiciel odyssée, application au code météorologique Meso-NH. Rapport de recherche 3251, INRIA, Sophia Antipolis, France, 1997.

[51] H. Chauki. *Assimilation des données optiques et radar dans un modèle de fonctionnement des cultures.* Thèse de Doctorat, Institut National Agronomique Paris-Grignon, 2002.

[52] H.T. Chuah. An artificial neural network for inversion of vegetation parameters from radar backscatter coefficients. *Journal of Electromagnetic Waves and Applications*, 7 :1075–1092, 1993.

[53] P.G. Ciarlet. *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation.* Masson, Paris, 1990.

[54] J.G.P.W. Clevers. The application of a weighted infrared-red vegetation index for estimating leaf area index by correcting for soil moisture. *Remote Sens. Environ.*, 29 :25–37, 1989.

[55] J.G.P.W. Clevers. A simplified approach for yield prediction of sugar beet on optical remote sensing data. *Remote Sens. Environ.*, 61 :221–228, 1997.

[56] J.G.P.W. Clevers, O. W. Vonder, R.E.E. Jongschaap, J.-F. Desprats, C. King, L. Prévot, and N. Bruguier. Using SPOT data for calibrating a wheat growth model under mediterranean conditions. *Agronomie*, 22 :687–694, 2002.

[57] S.E. Cohn. *Methods of Sequential Estimation for Determining Initial Data in Numerical Weather Prediction.* Thèse de Doctorat, New York University, 1982.

[58] B. Combal, F. Baret, M. Weiss, A. Trubuil, D. Macé, A. Pragnère, R. Myneni, Y. Knyazikhin, and L. Wang. Retrieval of canopy biophysical variables from bi-directional reflectance. Using prior information to solve the ill- posed inverse problem. *Remote Sens. Environ.*, 84 :1–15, 2002.

[59] P. Courtier, E. Andersson, W. Heckley, J. Pailleux, D. Vasiljevic, M. Hamrud, A. Hollingsworth, F. Rabier, and M. Fisher. The ECMWF implementation of three dimensional variational assimilation (3d-var). i : Formulation. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 124 :1783–1807, 1998.

[60] P. Courtier, J. Derber, R. Errico, J.-F. Louis, and T. Vukicevic. Important literature on the use of adjoint, variational methods and the kalman filter in meteorology. *Tellus*, 45A :342–357, 1993.

[61] P. Courtier and O. Talagrand. Variational assimilation of meteorological observations with the adjoint equation – Part II. Numerical results. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 113 :1329 – 1347, 1987.

[62] P. Courtier and O. Talagrand. Variational assimilation of meteorological observations with the direct and adjoint shallow-water equations. *Tellus*, 42A :531–549, 1990.

[63] P. Courtier, J.-N. Thépaut, and A. Hollingsworth. A strategy for operational implementation of 4d-var, using an incremental approach. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 120 :1367–1388, 1994.

[64] P.J. Curran. Remote sensing of foliar chemistry. *Remote Sens. Environ.*, 30 :271–278, 1989.

[65] K. Dabrowska-Zielinska, F. Kogan, A. Ciolkosz, M. Gruszczynska, and W. Kowalik. Modelling of crop growth conditions and crop yield in poland using AVHRR-based indices. *Int. J. Remote Sens.*, 23 :1109–1123, 2002.

[66] C.T. De Wit. Photosynthesis of leaf canopies. Technical report, Agric. Res. Rept., 1965.

[67] M. Dechambre and C. Le Gac. Comparison of two microwave backscattering models by means of sensitivity study based on an experimental design method. *Remote Sens. Environ.*, 2001.

[68] G. Dedieu, P.-Y. Deschamps, and Y. Kerr. Satellite estimation of solar irradiance at the surface of the earth and of surface albedo using a physical model applied to meteosat data. *J. Clim. appl. Met.*, 26(1) :79–87, January 1987.

[69] R. Delécolle and M. Guérif. Introducing spectral data into a plant process model for improving its prediction ability. In *Proc. 4th Int. Coll. Signatures Spectrales d 'objets en Télédétection*, ESA-SP287, pages 125–127, Aussois, France, 18th-22th January 1988.

[70] R. Delécolle, S.J. Maas, M. Guérif, and F. Baret. Remote sensing and crop production models : present trends. *ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing*, 47(Issues 2-3) :145–161, 1992.

[71] V. Demarez, J.-P. Gastellu-Etchegorry, E. Mougin, G. Marty, and C. Proisy. Seasonal variation of leaf chlorophyll content of a temperate forest. Inversion of the PROSPECT model. *Int. J. Remote Sens.*, 20(5) :879–894, 1999.

[72] J. Demarty. *Développement et application du modèle SiSPAT- RS à l'échelle de la parcelle et dans le cadre de l'expérience Alpilles ReSeDA*. Thèse de Doctorat, Université D. Diderot - Paris VII, 2001.

[73] J. Demarty, A. Olioso, O. Marloie, and V. Rivalland. étalonnage et validation du modèle isba-ags à l'aide d'une méthode stochastique et multicritère : Application à l'échelle locale dans un contexte de télédétection, 29-30 Décembre 2004. présentation orale.

[74] J. Demarty, C. Ottlé, I. Braud, A. Olioso, J.-P. Frangi, L.A. Bastidas, and H. Gupta. Using a multiobjective approach to retrieve information on surface properties used in a svat model. *Journal of Hydrology*, 287(1-4) :214–236, 2004.

[75] J. Demarty, C. Ottlé, I. Braud, A. Olioso, J.-P. Frangi, H.V. Gupta, and L.A. Bastidas. Constraining a physically based svat model with surface water content and thermal infrared brightness temperature measurements using a multiobjective approach. *Water Resources Res.*, 2005. in press.

[76] J.-P. Denux. *Combined use of satellite images and vegetation process model as decision making tool in agriculture.* Thèse de Doctorat, Ecole Supérieure d'Agrigulture de Purpan, 2005.

[77] G. Evensen. Sequential data assimilation with a nonlinear quasi-geostrophic model using monte carlo methods to forecast error statistics.

[78] R. Faivre, Ch. Bastié, and A. Husson. Integration of vegetation and hrvir into yield estimation. In *VEGETATION - 2000*, Lake Maggiore - Italy, 3-6 April 2000. CNES.

[79] H. Fang and S. Liang. Retrieving leaf area index with a neural network method : simulation and validation. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 41(9) :2052– 2062, Sept. 2003. Dept. of Geogr., Maryland Univ., College Park, MD, USA.

[80] B. Faugeras. *Assimilation variationnelle de données dans un modèle couplé océan-biogéochimie.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, oct 2002.

[81] C. Faure and Y. Papegay. Odyssée User's Guide. Version 1.7. Technical Report RT–0224, INRIA, Sophia-Antipolis, France, September 1998. See also .

[82] A. Fischer. Physical bases in remote sensing. CDROM CEOS (Committee on Earth Observation Satellites), 2000. consulté en Septembre 2004. disponible sur `http://ceos.cnes.fr:8100/cdrom-00b2/astart.htm`.

[83] A. Fischer, L. Kergoat, and G. Dedieu. Coupling satellite data with vegetation functional models : Review of different approaches and perspectives suggested by the assimilation strategy. *Remote Sens. Review*, 15 :283–303, 1997.

[84] R. Fletcher. A new approach to variable metric algorithms. *The Computer Journal*, 13 :317–322, 1970.

[85] T. Fourty. *Méthodes d'estimation du contenu biochimique d'un couvert végétal à partir de mesures haute résolution spectrale acquises au niveau satellitaire.* Thèse de Doctorat, Université Sabatier, Toulouse 3, 1996.

[86] T. Fourty and F. Baret. Vegetation water and dry matter contents estimated from top-of-the-atmosphere reflectance data :a simulation study. *Remote Sens. Environ.*, 61 :34–45, 1997.

[87] T. Fourty, F. Baret, S. Jacquemoud, G. Schmuck, and J. Verdebout. Leaf optical properties with explicit description of its biochemical composition : direct and inverse problems. *Remote Sens. Environ.*, 56 :104–117, 1996.

[88] C. François, P. Cayrol, L. Kergoat, and S. Moulin. Assimilation techniques of remote sensing measurements into vegetation models : overview, limits and promises. In *Proceedings du 8ème Symposium International Mesures Physiques et Signatures en Télédétection*, pages 649–658, Aussois, France, 8-12 Janvier 2001. ISPRS-CNES.

[89] C. François, A. Quesney, and C. Ottlé. Sequential assimilation of ERS-1 SAR data into a Coupled Land Surface-Hydrological Model using an Extended Kalman Filter. *Journal of Hydrometeorology*, 4(2) :473–487, Avril 2003.

[90] J.-S. Frossard, C. Gary, N. Brisson, F. Tabourel, and B. Adam. Energétique et croissance : du tissu à la plante entière. In *Ecole-Chercheur en Bioclimatologie (Tome 1)*, pages 181–196. INRA Editions, 1995.

[91] J.-P. Gastellu-Etchegorry and V. Bruniquel-Pinel. A modeling approach to assess the robustness of spectrometric predictive equations for canopy chemistry. *Remote Sens. Environ.*, 76 :1–15, 2001.

[92] P. Gauthier. Operational implementation of variational data assimilation. *Data Assimilation for the Earth System. NATO Science Series. IV. Earth and Environmental Sciences*, 26 :167–176, 2003.

[93] P. Gauthier and J.-N. Thepaut. Impact of the digital filter as a weak constraint in the pre-operational 4d-var assimilation system of meteo-france. *Submitted to Mon. Weather Rev.*, 2001.

[94] M. Ghil, S.E. Cohn, J. Tavantzis, K. Bube, and E. Isaacson. *Dynamical Meteorological : Data Assimilation Methods*, chapter Application of estimation theory to numerical weather prediction, pages 139–224. Spring-Verlag, 1981. L. Bengtsson, M. Gill and E. Kallen, Eds.

[95] M. Ghil and P. Malanotte-Rizzoli. Data assimilation in meteorology and oceanography. *Adv. in Geophys.*, 33 :141–266, 1991.

[96] J.-Ch. Gilbert. Automatic differentiation and iterative processes. *Optimization Methods and Software*, 1991. Also appeared as Preprint, INRIA, Le Chesnay, France, 1991.

[97] J.-Ch. Gilbert. Optimisation différentiable : Théorie et algorithmes, 2002.

[98] J.-Ch. Gilbert and C. Lemaréchal. Some numerical experiments with variable storage quasi-newton algorithms. *Math. Prog.*, 45 :407–435, 1989.

[99] J.-Ch. Gilbert and C. Lemaréchal. *The modules M1QN3 and N1QN3, Version 2.0c.* INRIA, 78153 Le Chesnay, France, June 1995.

[100] J.-Ch. Gilbert, G. Le Vey, and J. Masse. La différentiation automatique de fonctions représentées par des programmes. Rapport de Recherche 1557, INRIA, Le Chesnay, France, 1991.

[101] N. Gobron, B. Pinty, and M.M. Verstraete. Theorical limits to the estimation of the leaf area index on the basis of visible and near-infrared remote sensing data. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 35(6) :1438–1445, 1997.

[102] N.S. Goel and R.L. Thompson. Inversion of vegetation canopy reflectance models for estimating agronomic variables. IV Total inversion of the SAIL model. *Remote Sens. Environ.*, 15 :237–253, 1984.

[103] D. Goldfarb. A family of variable metric method derived by variational means. *Mathematics of Computation*, 24 :23–26, 1970.

[104] G. Gosse, C. Varlet-Grancher, R. Bonhomme, M. Chartier, J.-M. Allirand, and G. Lemaire. Production maximale de matière sèche et rayonnement solaire intercepté par un couvert végétal. *Agronomie*, 6(1) :47–56, 1986.

[105] Y. Govaerts, M.M. Verstraete, B. Pinty, and N. Gobron. Designing optimal spectral indices :a feasibility and proof of concept study. *Int. J. Remote Sens.*, 20(9) :1853–1873, 1999.

[106] C.F. Green. Nitrogen nutrition and wheat growth in relation to absorbed solar radiation. *Agric. Forest. Meteorol.*, 41 :207–248, 1987.

[107] A. Griewank. On automatic differentiation. In M. Iri and K. Tanabe, editors, *Mathematical Programming : Recent Developments and Applications*, pages 83 – 108. Kluwer Academic Publishers, 1989.

[108] A. Griewank and G.F. Corliss. *Automatic Differentiation of Algorithms : Theory, Implementation, and Application.* SIAM, Philadelphia, PA, 1991.

[109] A. Griewank, D. Juedes, and J. Utke. ADOL–C, a package for the automatic differentiation of algorithms written in C/C++. *ACM Trans. Math. Software*, 22(2) :131–167, 1996.

[110] P. Grosbuis. Analyse de sensibilité d'un modèle de prédiction de rendement. Mémoire de D.A.A., ENSA Rennes, 1998.

[111] Y.L. Grossman, S.L. Ustin, S. Jacquemoud, E.W. Sanderson, G. Schmuck, and J. Verdebout. Critique of stepwise multiple linear regression for the extraction of leaf biochemistry information from leaf reflectance data. *Remote Sens. Environ.*, 56(3) :182–193, 1996.

[112] M. Guérif. Utilisation d'indices issus de données SPOT pour estimer la biomasse et le rendement de cultures de blé dur. *Bulletin de la Société Fran caise de Photogrammétrie et Télédétection*, 114 :49–52, 1989.

[113] M. Guérif, D. Courault, and N. Brisson. Assimilation des données de té lédétection dans les modèles de fonctionnement des cultures. In *Ecole-Chercheur en Bioclimatologie*, chapter 2 : du couvert végétal à la région, pages 169–191. INRA Editions, 1996.

[114] M. Guérif, S. De Brisis, and B. Seguin. Combined NOAA-AVHRR and SPOT HRV data for assessing crop yields of semiarid environments. *EARSeL Advances in Remote Sensing*, 2(2-VI) :110–123, 1993.

[115] M. Guérif and R. Delécolle. *Methods of characterization and applications*, chapter Introducing remotely sensed estimates of canopy structure into plant models. Canopy structure and light microclimate, pages 479–490. Science Update, INRA. C. Varlet-Grancher(ed), Bonhomme R. (ed), Sinoquet H. (ed), 1993.

[116] M. Guérif and C. Duke. Calibration of the SUCROS emergence and early growth module for sugar beet using optical remote sensing data assimilation. *European Journal of A gronomy*, 9 :127–136, 1998.

[117] M. Guérif and C.-L. Duke. Adjustment procedures of a crop model to the site specific characteristics of soil and crop using remote sensing data assimilation. *Agric. Ecosyst. Environ.*, 81 :57–69, 2000.

[118] M. Guérif, J.-P. Lagouarde, and H. Nicolas. Variables de fonctionnement des couverts vé gétaux issues des données de té lédétection dans les domaines optique et infrarouge thermique. In *Ecole-Chercheur en Bioclimatologie*, chapter 2, pages 285–294. INRA Editions, 1995.

[119] G. Guyot. *Signatures spectrales des surfaces naturelles.* 5. Paradigme, 1989. collection Télédétection satellitaire, 178 p.

[120] D.K. Hall and J. Martinec. *Remote sensing of ice and snow.* Chapman and Hall, New York, 1985. 189 pp.

[121] D.M. Hamby. A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models. *Environ. Monit. Assess.*, 32(2) :135–154, 1994.

[122] N.P. Hanan and A. Bégué. A method to estimate instantaneous and daily intercepted photosynthetically active radiation using a hemispherical sensor. *Agric. Forest. Meteorol.*, 74 :155–168, 1995.

[123] L. Hascoët, S. Fidanova, and C. Held. Adjoining independent computations. In G. Corliss, C. Faure, A. Griewank, L. Hascoët, and U. Naumann, editors, *Automatic Differentiation of Algorithms : From Simulation to Optimization*, Computer and Information Science, chapter 35, pages 299–304. Springer, New York, NY, 2001.

[124] L. Hascoët. TAPENADE : a tool for automatic differentiation of programs. In *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering :* ECCOMAS, Jyväskylä, July 25-28 2004.

[125] L. Hascoët, R.-M. Greborio, and V. Pascual. Computing adjoints by automatic differentiation with TAPENADE. In *Ecole INRIA-CEA-EDF Problemes non-lineaires appliques 2003*. Springer, To appear.

[126] L. Hascoët and V. Pascual. Rt-0300 - TAPENADE 2.1 user's guide. Rapport technique, INRIA, Sophia Antipolis, Septembre 2004. 78 pages.

[127] C.A. Hlavka, D.L. Peterson, L.F. Johnson, and B. Ganapol. Analysis of forest foliage spectra using a multivariate mixture model. *J. Near Infrared Spectrosc.*, 5 :167–173, 1997.

[128] C. Homescu and I.M. Navon. Optimal control of flow with discontinuities. *J. Comput. Phys.*, 187(2) :660–682, 2003.

[129] V. Houlès. *Mise au point d'un outil de modulation intra-parcellaire de la fertilisation azotée du blé d'hiver basé sur la télédétection et un modèle de culture.* Thèse de Doctorat, Institut National Agronomique Paris-Grignon, 2004.

[130] A. Huete, K. Didan, T. Miura, E. Rodriguez, X. Gao, and L. Ferreira. Overview of the radiometric and biophysical performance of the modis vegetation indices. *Remote Sens. Environ.*, 83 :195–213, 2002.

[131] A.R. Huete. A soil adjusted vegetation index (SAVI). *Remote Sens. Environ.*, 25 :285–309, 1988.

[132] A.R. Huete, H.Q. Liu, K. Batchily, and W. van Leeuwen. A comparison of vegetation indices over a global set of tm images. *Remote Sens. Environ.*, 59 :440–451, 1997.

[133] M.J. Huiskes. Automatic differentiation and uncertainty analysis. Interim Report IR-98-083, IIASA, 1998.

[134] J. Iaquinta and B. Pinty. Adaptation of a bidirectional reflectance model including the hot-spot to an optically thin canopy. In Éditions du CNES, editor, *Proc. 6e Symposium International Mesures Physiques et Signatures en Télédétection*, pages 683–690, Val d'Isère, France, 17-21 janvier, 1994.

[135] J. Iaquinta, B. Pinty, and J.L. Privette. Inversion of a physically based bidirectional reflectance model of vegetation. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 35(3) :687–698, 1997.

[136] K. Ide, A. Bennett, P. Courtier, M. Ghil, and A. Lorenc. Unified notation for data assimilation : operational, 1995.

[137] projet IDOPT. Rapport d'activité. Technical report, INRIA, 1998-2002.

[138] H. Ikeda, K. Okamoto, and M. Fukuhara. Estimation of aboveground grassland phytomass with a growth model using landsat TM and climate data. *Int. J. Remote Sens.*, 20(11) :2283–2294, 1999.

[139] M. Ionescu-Bujor and D.G. Cacuci. A comparative review of sensitivity and uncertainty analysis of large-scale systems - i : Deterministic methods. *Nucl. Sci. Eng.*, 147(3) :189–203, July 2004.

[140] S. Jacquemoud. *Utilisation de la haute résolution spectrale pour l'étude des couverts végétaux : développement d'un modèle de réflectance spectrale.* Thèse de Doctorat, Université D. Diderot - Paris VII, 1992.

[141] S. Jacquemoud, C. Bacour, H. Poilvé, and J.-P. Frangi. La télédétection optique et radar et la géomatique pour la gestion des problèmes environnementaux. In A. Bannari, editor, *Proc. Coll. Int.*, pages 113–125, Ottawa (Canada), mai 1999.

[142] S. Jacquemoud, C. Bacour, H. Poilvé, and J.-P. Frangi. Comparison of four radiative transfer models to simulate plant canopies reflectance : direct and inverse mode. *Remote Sens. Environ.*, 74 :471–481, 2000.

[143] S. Jacquemoud and F. Baret. PROSPECT : A model of leaf optical properties spectra. *Remote Sens. Environ.*, 34 :75–91, 1990.

[144] S. Jacquemoud, F. Baret, B. Andrieu, F.M. Danson, and K. Jaggard. Extraction of vegetation biophysical parameters by inversion of the PROSPECT + SAIL models on Sugar B eet canopy reflectance data. Application to TM and AVIRIS sensors. *Remote Sens. Environ.*, 52 :163–172, 1995.

[145] S. Jacquemoud and S. Ustin. Leaf optical properties : a state of the art. In *Proc. 8e Symposium International Mesures Physiques et Signatures en Télédétection*, pages 223–232, Aussois, France, 2001.

[146] S. Jacquemoud, S.L. Ustin, J. Verdebout, G. Schmuck, and G. Andreoli ans B. Hosgood. Estimating leaf biochemistry using the PROSPECT leaf optical properties model. *Remote Sens. Environ.*, 56(3) :194–202, 1996.

[147] S. Jacquemoud, J. Verdebout, G. Schmuck, G. Andreoli, and B. Hosgood. Investigation of leaf biochemistry by statistics. *Remote Sens. Environ.*, 54 :180–188, 1995.

[148] J. Jacques, C. Lavergne, and N. Devictor. Analyse de sensibilité globale. In *XXXVIèmes Journées de Statistiques*, Montpellier, France, 24-28 mai 2004.

[149] R.H. Jones. Optimal estimation of initial conditions for numerical predictions. *J. of the Atmos. Sc.*, 22 :658–663, 1965.

[150] R.E. Kalman. A new approach to linear filtering and prediction problems. *Journal of Basic Engineering*, pages 35–45, 1960.

[151] A. Karnieli, Y.J. Kaufman, L.A. Remer, and A. Wald. Afri-aerosol free vegetation index. *Remote Sens. Environ.*, 77(1) :10–21, 2001.

[152] Y. J. Kaufman and D. Tanré. Strategy for direct and indirect methods for correcting the aerosol effect on remote sensing : from AVHRR to EOS-MODIS. *Remote Sens. Environment*, 55 :65–79, 1996.

[153] Y.J. Kaufman and D. Tanré. Atmospherically resistant vegetation index (ARVI for EOS-MODIS). *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 30(2) :261–270, 1992.

[154] D.S. Kimes, K.J. Ranson, and G. Sun. Inversion of a forest backscatter model using neural networks. *Int. J. Remote Sens.*, 18 :2181–2199, 1997.

[155] M.D. King, Y.J. Kaufman, D. Tanré, and T. Nakajima. Remote sensing of tropospheric aerosols from space : past, present, and future. *Bulletin of the American Meteorological Society*, 80(11) :2229–2259, 1999.

[156] Y. Knyazikhin, J.V. Martonchik, R.B. Myneni, D.J. Diner, and S.W. Running. Synergistic algorithm for estimating vegetation canopy leaf area index and fraction of absorbed photosynthetically active radiation from modis and misr data. *J. Geophys. Res.*, 103(D24) :32257–32276, 1998.

[157] M. Kumar and J.L. Monteith. *Remote sensing of crop growth*, chapter Plants and the Daylight Spectrum, pages 133–144. H. Smith ed., Academic, New York, 1981.

[158] A. Kuusk. A Markov chain model of canopy reflectance. *Agric. Forest. Meteorol.*, 76 :221–236, 1995.

[159] J.P. Lagouarde, Y. Brunet, Y.H. Kerr, and J. Imbernon. Estimating the daily upward longwave radiation from NOAA-AVHRR data for mapping net radiation. *Adv. Space Res.*, 11(3) :151–161, 1991.

[160] M. Launay. *Diagnostic et prévision de l'é tat des cultures à l'échelle régionale : couplage entre modèle de croissance et télédétection. Application à la betterave sucrière.* Thèse de Doctorat, Institut National Agronomique Paris-Grignon, 2002.

[161] C. Lauvernet, D. Makowski, C. Hue, M. Guérif, and F. Baret. Comparison of different methods for assimilate data into canopy functioning models. *à soumettre*, 2005.

[162] F.-X. Le Dimet. Une étude générale d'analyse objective variationnelle des champs météorologiques. Rapport Scientifique 28, L.A.M.P., Clermont-Ferrand, 1980.

[163] F.-X. Le Dimet and J. Blum. Assimilation des données pour les fluides géophysiques. *Matapli*, 67, 2002.

[164] F.-X. Le Dimet, I.M. Navon, and D.N. Daescu. Second order information in data assimilation. *Monthly Weather Review*, 130, No. 3 :629–648, 2002.

[165] F.-X. Le Dimet, H.-E. Ngodock, B. Luong, and J. Verron. Sensitivity analysis in variational data assimilation. *Journal of the Meteorological Society of Japan*, 75(1B) :245–255, 1997.

[166] F.-X. Le Dimet and O. Talagrand. Variational algorithms for analysis and assimilation of meteorological observations : Theoretical aspects. *Tellus*, 38A :97–110, 1986.

[167] X. Le Roux, H. Gauthier, A. Bé gué, and H. Sinoquet. Radiation absorption and use by humid savanna grassland : assessment using remote sensing and modelling. *Agric. Forest. Meteorol.*, 85 :117–132, 1997.

[168] B. Leblon, M. Guérif, and F. Baret. The use of remotely sensed data in estimation of par use efficiency and biomass production of flooded rice. *Remote Sens. Environ.*, 38 :147–158, 1991.

[169] M. Leroy and O. Hautecoeur. Anisotropy-corrected vegetation indices derived from POLDER/ADEOS. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 37(3) :1698–1708, 1999.

[170] P. Lewis, M. Disney, and P. Saich. Vegetation science lecture #4 : Non-linear canopy reflectance model inversion. (MSc. Remote Sensing), February 2003. Remote Sensing Unit, Dept. Geography, University College London.

[171] S. Liang. *Quantitative Remote Sensing of Land Surfaces.* Wiley-Interscience, 2003.

[172] J.-L. Lions. *Optimal Control of Systems Governed by Partial Differential Equations.* Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1971. 396 pp.

[173] W.T. Liu and F. Kogan. The use of multi-temporal NDVI measurements from AVHRR data for crop yield estimation and prediction. *Int. J. Remote Sens.*, 23 :1161–1179, 2002.

[174] S.J. Maas. Use of remotely sensed information in agricultural crop growth models. *Ecological Modelling*, 41 :247–268, 1988a.

[175] S.J. Maas. Using satellite data to improve model estimates of crop yield. *Agron. J.*, 80 :655–662, 1988b.

[176] S.J. Maas. Use of remotely sensed information in plant growth simulation models. *Adv. Agron.*, 1 :17–26, 1991.

[177] D. Makowski. Parameter estimation. In *Working with dynamic crop models.* Wallach D. (ed.), 2005.

[178] D. Makowski, M. Guérif, V. Houlès, J. Jones, W. Graham, and C. Lauvernet. An introduction to data assimilation with crop models. In *Working with dynamic crop models.* Wallach D. (ed.), 2005.

[179] P. Malet. Classifying the geometry of canopies from time variations of red and near-infrared reflectance. *Remote Sens. Environ.*, 56 :164–171, 1996.

[180] K.R. Manjunath and M.B. Potdar. Large area operational wheat yield model development and validation based onspectral and meteorological data. *Int. J. Remote Sens.*, 23 :3023–3038, 2002.

[181] O. Marloie. Report on weather measurments during ADAM experimentation. Technical report, CNES, 2002.

[182] F. Maselli, C. Conese, L. Petkov, and M. Gilabert. Use of NOAA-AVHRR NDVI data for environmental monitoring and crop forecasting in the sahel : Preliminary results. *Int. J. Remote Sens.*, 13 :2743–2749, 1992.

[183] C. Mazauric. *Assimilation de données pour les modèles d'hydraulique fluviale. Estimation de paramètres, analyse de sensibilité et décomposition de domaine.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, December 2003.

[184] C. Mazauric, V.D. Tran, W. Castaings, D. Froehlich, and F.-X. Le Dimet. Parallel algorithms and Data Assimilation for flood modeling. In *Parallel Computing 2003, ParCo2003*, Dresde, Allemagne, September 2003. Elsevier.

[185] N. Molinari. Analyse de sensibilité. In *Ecole-Chercheur. Pour une bonne utilisation des modèles de culture*, chapter 3. Wallach D. (ed.), 2002.

[186] J.L. Monteith. Solar radiation and productivity of tropical ecosystems. *Journal of Applied Ecology*, 9 :747–766, 1972.

[187] J.L. Monteith. Climate and the efficiency of crop production in Britain. *Philos.Trans. R. Soc. Lond.*, B281 :277–294, 1977.

[188] S. Moulin. *Assimilation d'observations satellitaires courtes longueurs d'onde dans un modèle de fonctionnement de culture.* Thèse de Doctorat, Université Paul Sabatier, Toulouse 3, 1995.

[189] S. Moulin, A. Bondeau, and R. Delécolle. Combining agricultural crop models with satellite observations : from field to regional scales. *Int. J. Remote Sens.*, 19(6) :1021–1036, 1998.

[190] R.B. Myneni, S. Maggion, J. Iaquinta, J.L. Privette, N. Gobron, B. Pinty, D.S. Kimes, M.M. Verstraete, and J.L. Williams. Optical remote sensing of vegetation : modeling, caveats, and algorithms. *Remote Sens. Environ.*, 51 :169–188, 1995.

[191] R.B. Myneni and D.J. Williams. On the relationship between fAPAR and NDVI. *Remote Sens. Environ.*, 49 :200–211, 1994.

[192] J.A. Nelder and R. Mead. A simplex method for function minimization. *Comp. J.*, 7 :308–313, 1965.

[193] P. Ngnepieba. *Assimilation de données et identification de paramètres : une application en hydrologie.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1 et université de Yaoundé 1, 2001.

[194] H.-E. Ngodock. *Assimilation de données et analyse de sensibilité. Une application à la circulation océanique.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, 1996.

[195] Y. Nouvellon. *Modélisation du fonctionnement des prairies semi-arides et assimilation de données radiométriques dans le modèle.* Thèse de Doctorat, Institut National Agronomique Paris-Grignon, 1999.

[196] Open Universiteit of the Netherlands. Remote sensing course, 1989.

[197] A. Olioso, H. Chauki, D. Courault, and J.-P. Wigneron. Estimation of evapotranspiration and photosynthesis by assimilation of remote sensing data into SVAT models. *Remote Sens. Environ.*, 68 :341–356, 1999a.

[198] A. Olioso, D. Courault, H. Chauki, J.-P. Wigneron, C. Ottlé, and D. Vidal-Madjar. Estimation de l' évapotranspiration et de la photosynthèse à l'aide de modèles de tsva et de la tempé rature de surface. In G. Guyot and T. Phulpin, editors, *Physical Measurements and Signatures in Remote Sensing*, volume 40, pages 841–851, Courchevel, France, 1997.

[199] A. Olioso, Y. Inoue, J. Demarty, J.P. Wigneron, I. Braud, S. Ortega-Farias, P. Lecharpentier, C. Ottlé, J.P. Calvet, and N. Brisson. Assimilation of remote sensing data into crop simulation models and svat models. In José A. Sobrino, editor, *Symposium RAQRS : Recent Advances in Quantitative Remote Sensing*, Valencia, 16-20 Sept 2002.

[200] F. Oro, F. Baret, and R. Vintila. Evaluation of SPOT/HRV data over temporal series acquired during the ADAM project. In IEEE, editor, *2003 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*, Toulouse, jul 2003. cd-rom.

[201] C. Ottlé and D. Vidal-Madjar. Assimilation of soil humidity inversed from infrared remote sensing in an hydrological model over hapex-mobilhy region. *J. Hydrol.*, 158 :241–264, 1994.

[202] Gate P. *Écophysiologie du blé : de la plante à la culture.* Tec & Doc Lavoisier, Paris, France, 1995. 429 p.

[203] R.L. Pearson and L.D. Miller. Remote mapping of standing crop biomass for estimation of the productivity of the short-grass Prairie, Pawnee National Grasslands, Colorado. In *8th International Symposium on Remote Sensing of Environment*, pages 1357–1381. ERIM, Ann A rbor MI, 1972.

[204] J. Pellenq and G. Boulet. An observing system simulation experiment for remote-sensing data assimilation into eco-hydrological models. *Agronomie*, 24 :197–204, 2004.

[205] D.L. Peterson and G.S. Hubbard. Scientific issues and potential remote-sensing requirements for plant biochemical content. *J. Imaging Sci. Technol.*, 36 :446–456, 1992.

[206] D. Pham, J. Verron, and M.C. Roubaud. A singular evolutive extended kalman filter for data assimilation in oceanography. *Journal of Marine Systems*, 16(3 & 4) :323–340, 1998.

[207] J.R. Porter. AFRCWHEAT2 : a model of the growth and development of wheat incorporating responses to water and nitrogen. *Eur. J. Agron.*, 2 :69–92, 1993.

[208] T. Pouchin. Glossaire de spatiologie, consulté en Octobre 2004. disponible sur `http://perso.club-internet.fr/tpouchin/index.htm`.

[209] L. Prévot, H. Chauki, D. Troufleau, M. Weiss, F. Baret, and N. Brisson. Assimilating optical and radar data into the STICS crop model for wheat. *Agronomie*, 23 :297–303, 2003.

[210] W.L. Price. A controlled random search procedure for global optimisation. *The Computer Journal*, 20 :367–370, 1979.

[211] J.L. Privette, W.J. Emery, and D.S. Schimel. Inversion of a vegetation reflectance model with NOAA- AVHRR data. *Remote Sens. Environ.*, 58 :187–200, 1996.

[212] J.L. Privette, R.B. Myneni, Y. Knyazikhin, M. Mukufute, G. Roberts, Y. Tian, Y. Wang, and S.G. Leblanc. Early spatial and temporal validation of MODIS LAI product in africa.

[213] J. Qi, A. Chehbouni, A.R. Huete, Y.H. Kerr, and S. Sorooshian. A modified soil adjusted vegetation index. *Remote Sens. Environ.*, 48 :119–126, 1994.

[214] N.A. Quarmby, M. Milnes, T.L. Hindle, and N. Silleos. The use of multi-temporal NDVI measurements from AVHRR data for crop yield estimation and prediction. *Int. J. Remote Sens.*, 14(2) :199–210, 1993.

[215] N.A. Quarmby, J.R.G. Townshend, J.J. Settle, K.H. White, M. Milnes, T.L. Hindle, and N. Silleos. Linear mixture modelling applied to AVHRR data for crop area estimation. *Int. J. Remote Sens.*, 13(3) :415–425, 1992.

[216] A. Quesney. *Assimilation de mesures d'humidite de surfacedans un modele hydrologique conceptuel global. Apport de la teledetection radar ERS-SAR.* Thèse de Doctorat, Université D. Diderot - Paris VII, 1999.

[217] F. Rabier, A. McNally, E. Andersson, P. Courtier, P. Undén, J. Eyre, A. Hollingsworth, and F. Bouttier. The ECMWF implementation of three dimensional variational assimilation (3d-var). ii : Structure funtions. *Q. J. R. Meteorol. Soc.*, 1998.

[218] A.J. Richardson and C.L. Wiegand. Distinguishing vegetation from soil background information. *Photogramm. Eng. Remote Sens.*, 43 :1541–1552, 1977.

[219] C. Robert. *Développement et comparaison de méthodes d'assimilation de données de rang réduit dans un modèle de circulation océanique : application à d'Océan Pacifique Tropical.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, dec 2004.

[220] N. Rochdi. *Un modèle générique d'agrégation des feuilles dans un couvert végétal : application à la simulation du transfert radiactif.* Thèse de Doctorat, Institut National Agronomique Paris-Grignon, 2003. n 2003INAP0033.

[221] N.J. Rosenberg, B.L. Blad, and S.B. Verma. *Microclimate : the biological environment.* Wiley (Interscience), New-York, 2e edition, 1983.

[222] J. Roujean and F.M. Breon. Estimating par absorbed by vegetation from bi-directional reflectance measurements. *Remote Sens. Environ.*, 51 :375–384, 1995.

[223] F. Ruget, N. Brisson, R. Delécolle, and R. Faivre. Sensivity analysis of a crop simulation model, STICS, in order to choose the main parameters to be estimated. *Agronomie*, 22 :133–158, 2002.

[224] A. Saltelli, K. Chan, and E.M. Scott. *Sensitivity Analysis.* John Wiley, Chichester, 2000.

[225] Y.K. Sasaki. An objective analysis based on the variational method. *J. Meteor. Soc. Japan*, 36 :77–88, 1958.

[226] B. Seguin, J.P. Lagouarde, and M. Savane. The assessement of regional crop water conditions from meteorological satellite thermal infrared data. *Remote Sens. Environ.*, 35 :141–148, 1991.

[227] D.F. Shanno. Conditioning of quasi- Newton methods for function minimization. *Mathematics of Computation*, 24 :647–656, 1970.

[228] S. Sorooshian and H.V. Gupta. *Model Calibration*, volume Computer Models of Watershed Hydrology. Water Resources Publication, singh v.p. edition, 1193. 1130 p.

[229] C.J.T. Spitters, H. Van Keulen, and D.W.G. Van Kraalingen. *A simple and universal crop growth simulator :* SUCROS87, chapter Simulation and system management in crop protection., pages 147–181. Rabbinge R., Ward S.A., Van Laar H.H., Simulation Monographs,Purdoc, Wageningen, 1989.

[230] S. Steinmetz, M. Guérif, R. Delécolle, and F. Baret. Spectral estimates of the absorbed photosynthetically active radiation and light-use efficiency of a winter wheat crop subjected to nitrogen and water deficiencies. *Int. J. Remote Sens.*, 11(10) :1797–1808, 1990.

[231] E.R. Stoner and M.F. Baumgardner. Characteristic variations in reflectance of surface soils. *Soil Sci. Soc. Am. J.*, 45 :1161–1165, 1981.

[232] O. Talagrand. Assimilation of observations, an introduction. *J. of the Meteorol. Soc. of Japan*, 75(1B) :191–209, 1997.

[233] C.J. Tucker. Red and photographic infrared linear combinations for monitoring vegetation. *Remote Sens. Environ.*, 8 :127–150, 1979.

[234] C.J. Tucker, B.N. Holben, J.H. Elgin, and J.E. McMurtrey. Relationship of spectral data to grain yield variation. *Photogramm. Eng. Remote Sens.*, 6(5) :657–666, 1980.

[235] L.S. Unganai and F.N. Kogan. Drought monitoring and corn yield estimation in southern africa from AVHRR data. *Remote Sens. Environ.*, 63 :219–232, 1998.

[236] C. Varlet-Grancher, R. Bonhomme, M. Chartier, and P. Artis. Efficience de la conversion de l'énergie solaire par un couvert végétal. *Acta Oecologica, Oecol. Plant.*, 3(17) :3–26, 1982.

[237] F. Veersé and D. Auroux. Some numerical experiments on scaling and updating L- BFGS diagonal preconditioners. Research Report 3858, INRIA, 2000.

[238] W. Verhoef. Light scattering by leaf layers with application to canopy reflectance modeling : The SAIL model. *Remote Sens. Environ.*, 16 :125–141, 1984.

[239] M. Verstraete and B. Pinty. Designing optimal spectral indexes for remote sensing applications. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 24(5) :1254–1264, 1991.

[240] P. Vidard. *Vers une prise en compte de l'erreur modèle en assimilation de données 4D-variationnelle.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, dec 2001.

[241] R. Vintila. Agriculture monitoring at the field scale using GPS and multi-temporal remote sensing data within the framework of the ADAM project. In *United Nations Office for Outer Space Affairs : Workshop on the Use of GNSS Jointly Organized by UN / USA / Austria*, Nov. 2001.

[242] N. Viovy, C. François, A. Bondeau, G. Krinner, J. Polcher, L. Kergoat, G. Dedieu, N. de Noblet, P. Ciais, and P. Friedlingstein. Assimilation of remote sensing measurements into the ORCHIDEE/STOMATE DGVM biosphere model. Technical report, IPSL, December 2000.

[243] M. Weiss. *Développement d'un algorithme de suivi de végétation à large échelle.* Thèse de Doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, 1998.

[244] M. Weiss and F. Baret. Evaluation of canopy biophysical variable retrieval performances from the accumulation of large swath satellite data. *Remote Sens. Environ.*, 70 :293–306, 1999.

[245] M. Weiss, F. Baret, M. Leroy, A. Begué, O. Hautecoeur, and R. Santer. Hemispherical reflectance and albedo estimates from the accumulation of across track sun synchroneous satellite data. *Journal of Geophysical Research*, 104(D18) :22,221–22,232, 1999.

[246] M. Weiss, F. Baret, M. Leroy, O. Hautecoeur, C. Bacour, L. Prévot, and N. Bruguier. Validation of neural net techniques to estimate canopy biophysical variables from remote sensing data. *Agronomie : Agriculture and Environment*, 22 :547–553, 2002.

[247] M. Weiss, F. Baret, R.B. Myneni, A. Pragnère, and Y. Knyazikhin. Investigation of a model inversion technique to estimate canopy biophysical variables from spectral and directional reflectance data. *Agronomie*, 20 :3–22, 2000.

[248] M. Weiss, D. Troufleau, F. Baret, H. Chauki, L. Prévot, A. Olioso, N. Bruguier, and N. Brisson. Coupling canopy functioning and radiative transfer models for remote sensing data assimilation. *Agric. Forest. Meteorol.*, 108 :113–128, 2001.

[249] P.W. White. Part ii : Data assimilation. IFS documentation CY23r4, ECMWF, 2002. Text written and updated by members of the ECMWF Research Department.

[250] L. Wu. *Variational methods applied to plant functional-structural dynamics : parameter identification, control and data assimilation.* Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier - Grenoble 1, 2005.

[251] H.P. Yan, M.Z. Kang, P. De Reffye, and M. Dingkuhn. A dynamic, architectural plant model simulating resource- dependent growth. *Annals of Botany*, 93 :1–12, 2004.

[252] Y. Zhang, Y. Tian, Y. Knyazikhin, J.V. Martonchik, D.J. Diner, M. Leroy, and R.B. Myneni. Prototyping of MISR LAI and FPAR algorithm with POLDER data over Africa. *IEEE Trans. Geosci. Remote Sens.*, 38(5) :2402–2418, 2000.

[253] X. Zou, A. Barcilon, I.M. Navon, J. Whitaker, and D.G. Cacuci. An adjoint sensitivity study of blocking in a two-layer isentropic model. *Mon. Wea. Rev*, 121 :2833–2857, 1993.

Résumé

La gestion de l'environnement et des ressources disponibles nécessite de caractériser l'état de la végétation. Les modèles agronomiques simulent le fonctionnement du couvert à partir du climat, des pratiques culturales et des propriétés de la plante et du sol. Le projet ADAM, dans lequel s'inscrit cette thèse, a pour objectif de combiner les données de télédétection avec l'information fournie par les modèles agronomiques afin de participer au raisonnement des cultures et à l'évaluation de l'environnement. Sur un modèle d'étude, nous avons proposé une approche originale d'assimilation simultanée sur une scène, en imposant des contraintes sur les paramètres en fonction de leur variabilité au niveau du pixel, de la parcelle, de la variété... La taille de l'espace de contrôle est ainsi diminuée par rapport à un problème résolu pixel par pixel et qui se trouve être mal posé lorsque l'on dispose de peu d'observations. Cette technique a permis d'améliorer fortement l'estimation des paramètres d'entrée et de réduire la fréquence temporelle d'observation. Nous avons ensuite étudié la faisabilité d'une telle méthode sur un modèle mécaniste complexe de fonctionnement de la végétation (STICS), dont la différentiation a présenté des difficultés théoriques et pratiques. En effectuant une analyse de sensibilité utilisant le modèle adjoint de STICS, nous avons pu hiérarchiser ses paramètres selon leur influence sur la croissance de la culture. Nous avons démontré la faisabilité d'une technique d'assimilation avec contraintes dans STICS, ce qui permet d'envisager de nombreuses applications dans le domaine agronomique.

⇝**Mots-clés :** Assimilation variationnelle, télédétection, modélisation des cultures, contraintes spatiales, estimation de paramètres, contrôle optimal, optimisation, inversion de modèle de transfert radiatif, code adjoint, différentiation automatique, analyse de sensibilité.

Summary

Environment and resources management requires characterizing vegetation status. Crop models simulate canopy functioning from climate, cultural practices and plant / soil properties. The ADAM project, in which this thesis fits, aims at combining remote sensing data with information provided by agronomic models, in order to take part in crops reasoning and environment assessment. Through a study model, we proposed an original approach of simultaneous assimilation on a scene, by applying constraints on model parameters according to their variability linked to the pixel, the field, the cultivar... The dimension of the control space is thus decreased, as compared to a pixel by pixel solved problem, the latter being ill-posed when few observations are available. This technique allowed both improving strongly retrievals of canopy biophysical variables and reducing the satellite temporal frequency. We then studied the feasibility of applying such a method for a complex mechanist crop model (STICS), which differentiation presented theoretical and practical difficulties. Developing a sensitivity analysis using the STICS adjoint model, we could perform a hierarchical sort of its parameters according to their influence on crop growth. We proved the feasibility of an assimilation technique with spatial constraints in STICS model, which makes it possible to consider many applications in agronomic research.
⇝**Key words :** Variational data assimilation, remote sensing, canopy functioning models, spatial constraints, parameters estimation, optimal control, optimisation, inversion of radiative transfert model, adjoint model, automatic differentiation, sensitivity analysis.