

Université du Québec  
INRS-ETE

**La calibration de modèle hydrologique par  
analyse Bayésienne**  
**Théorie et application aux modèles “abc” et GR2M**

par  
DAVID HUARD

Thèse présentée  
pour l’obtention  
du grade de Philosophiæ doctor (Ph.D.)  
en sciences de l’eau

Jury d’évaluation

Président du jury et examineur externe	M. Jim Freer, professeur Centre for Sustainable Water Management Lancaster Environment Centre
Examineur externe	François Brissette, professeur École de Technologie Supérieure
Examineur interne	M. Taha Ouarda, professeur INRS-ETE Université du Québec
Directeur de recherche	M. Alain Mailhot, professeur INRS-ETE Université du Québec

Thèse présentée le 7 septembre 2007



# Résumé

---

Les méthodes de calibration standard font l'hypothèse que les données d'entrée sont exactes. Lorsque cette condition n'est pas satisfaite, les paramètres estimés lors de la calibration du modèle risquent d'être biaisés. Or, en hydrologie et dans la plupart des sciences environnementales, il est difficile d'obtenir des valeurs expérimentales qui ne soient pas affectées par des erreurs de toutes sortes. Bien qu'il soit difficile d'estimer l'impact de telles erreurs sur les prédictions des modèles, les hydrologues s'entendent pour dire que le développement de méthodes de calibration tenant compte des diverses sources d'incertitudes constitue une étape essentielle au développement des modèles hydrologiques. Cette thèse présente une telle méthode, basée sur l'analyse Bayésienne. Cette méthode greffe au modèle hydrologique divers modèles d'erreurs (entrée, sortie, structural), ce qui permet lors de la calibration d'interpréter les données afin d'estimer de manière cohérente la probabilité d'un jeu de paramètres. Bien que conceptuellement simple, cette méthode nécessite la résolution d'intégrales de très grandes dimensions, ce qui freine son application aux modèles hydrologiques journaliers utilisés couramment. Afin d'en étudier les propriétés, elle est donc appliquée à deux modèles hydrologiques mensuels simples : "abc" et GR2M. Le premier étant linéaire, il est possible, sous certaines conditions, de dériver une solution analytique permettant le calcul de la distribution *a posteriori* (*posterior*) de manière directe. Les résultats issus de ces simulations indiquent que la méthode permet effectivement de tenir compte des incertitudes sur les données d'entrée lors

de la calibration. Pour les modèles non linéaires tels que GR2M, l'intégration doit se faire de manière numérique. La solution choisie utilise un algorithme de type *chaînes de Markov Monte Carlo* (MCMC), permettant de générer un ensemble de paramètres dont la distribution converge vers le *posterior* lorsque le nombre d'itérations Monte Carlo augmente. Bien que cette solution soit fonctionnelle, son application aux modèles journaliers (ou horaires) requiera des ressources numériques importantes.

L'analyse des résultats obtenus avec "abc" et GR2M suggèrent que des modèles d'erreurs vagues (peu informatifs) ne permettent pas d'améliorer significativement l'efficacité des modèles et la qualité des prédictions. Par contre, en spécifiant des modèles d'erreurs qui décrivent fidèlement la probabilité d'occurrence des erreurs, on s'assure que l'incertitude sur les prédictions reflète l'incertitude sous-jacentes aux données et au modèle. Il apparaît donc que l'intérêt d'utiliser une telle méthode de calibration est étroitement liée à la capacité du modélisateur de formuler des modèles d'erreurs réalistes et informatifs, ce qui, en hydrologie est loin d'être trivial. Il n'en reste pas moins que la calibration bayésienne de ces modèles simples permet de tirer des conclusions générales et d'identifier certains enjeux importants. En effet, l'application au modèle "abc" souligne l'importance de la sélection du *prior* sur les vraies données d'entrée. L'application au modèle GR2M, quant à elle, aborde l'effet de l'incertitude des conditions initiales, l'interprétation des résultats de calibration dans le contexte de multiples sources d'incertitude, l'effet du choix des modèles erreurs et la validation des hypothèses sous-jacentes à ces modèles d'erreurs. De plus, l'application montre que l'intégration explicite des erreurs structurales permet d'inférer séparément les différentes erreurs, et par exemple, de discerner les erreurs structurales des erreurs de mesures.

# Abstract

---

Standard calibration methods assume that the input data is known exactly. In hydrology, as well as in most environmental sciences, it is extremely difficult to gather experimental data uncorrupted by all kinds of errors. When this exactness condition is not met, hydrologists face the possibility that the parameters estimated during calibration are biased by the input errors. Although it is difficult to generalize the effect of such biases on the predictions of calibrated models, the consensus in the hydrological community is that a crucial step in the improvement of hydrological models is the development of calibration methods taking into account multiple sources of uncertainties. This thesis proposes such a method, based on Bayesian analysis. This method grafts various error models (input, output, structural) to the hydrological model, which interpret the data for the model and allow the estimation of coherent probabilities for parameter sets. Although conceptually simple, the use of the method relies on the resolution of high-dimensional integrals, hindering its application to the daily hydrological models commonly used. In order to study the method's properties and better understand the effect of errors on calibration, we apply it to two simple monthly models: "abc" and GR2M. The first one being linear, it is possible, under certain conditions, to derive an analytical solution and compute directly the *posterior* probability. Results obtained from these simulations suggest that Bayesian calibration reduces slightly the bias on the parameters. For nonlinear models such as GR2M, the integration cannot be done analytically. The

solution adopted was to perform Markov chain sampling using the Metropolis algorithm (MCMC) to approximate the posterior distribution. Although this solution is functional, its application to daily (or hourly) models requires significant numerical resources due, again, to the high dimensionality of the problem.

Results obtained for the two models suggest that vague errors models (uninformative) do not improve significantly the efficiency of the calibrated models. On the other hand, specifying realistic error models ensures that the prediction uncertainty is coherent with data and model uncertainty. Hence, the interest for using such a calibration method is closely dependent on the modeller's ability to define realistic and informative error models, which is not a trivial task in hydrology. Nevertheless, the calibration of simple models by a Bayesian uncertainty assessment method allows certain general conclusions to be drawn and the identification of a number of interesting issues. Indeed, the "abc" application underlines the importance of the prior selection for the true input on parameter inference. The GR2M application discusses the effect of initial state uncertainty, the interpretation of calibration results in the context of multiple sources of error, the effect of error models on the parameters and the validation of their underlying assumptions. Also, the GR2M study shows that by explicitly integrating structural errors, the different types of errors can be inferred, and structural errors can be explicitly separated from data errors.

# Avant propos / Foreword

---

Cette thèse présente les travaux de recherche menés au cours de mes études doctorales. Les résultats principaux se trouvent sous la forme d'articles insérés en deuxième partie. La première partie consiste en une synthèse permettant de donner au lecteur une vue d'ensemble des travaux effectués, ainsi qu'une occasion de tirer des conclusions générales sur leur portée. Pour les lecteurs ne maîtrisant pas l'anglais, un résumé en français de la synthèse est inclus au premier chapitre de la première partie (page 1).

This document covers the work done during my PhD studies. Its format is that of a thesis by article, in which a relatively brief discussion about the context, methodology, general results and conclusion (part I) precedes published or submitted articles (part II). The reader will also find in the first chapter a French synthesis of this document. Although this thesis may be read from first page to last, I would suggest reading the articles just before chapter 4, as some of the topics rely heavily on the theory and results presented in the papers.





# Papers and authors contribution

---

David Huard and Alain Mailhot. A bayesian perspective on input uncertainty in model calibration: Application to hydrological model “abc”. *Water Resources Research*, 42:W07416, 2006. doi: 10.1029/2005WR004661.

David Huard and Alain Mailhot. Calibration of hydrological model GR2M using Bayesian uncertainty analysis. *Submitted to Water Ressources Research*, 2007.

David Huard, Guillaume Évin and Anne-Catherine Favre. Bayesian Copula selection *Computation statistics & data analysis*, 51, pp, 809–822, 2006. doi: 10.1016/j.csda.2005.08.010

In the first article, A. Mailhot is responsible for the theoretical computations related to the matrix form of the ABC model and the integration of input errors. D. Huard extended the framework suggested by Kavetski by adding a structural error term and realizing the importance of the prior for the true input. Numerical implementation, simulations and redaction of the article were done by D. Huard.

The second article is entirely the result of D. Huard work. A. Mailhot reviewed the final version of the written paper.

The original idea and the theoretical development leading to the third paper are contributions from D. Huard. A-C. Favre and G. Évin wrote respectively the sections on copula theory and the literature review on copula selection methods. Coding and simulations were done collaboratively by G. Évin and D. Huard.



# Contribution to science

---

The thesis discusses issues related to the calibration of hydrological model in presence of multiple sources of uncertainties. More precisely, the work explores the subtleties that affect calibration and influence the calibration results and their interpretation. The methods used in this thesis, Bayesian analysis and various integration methods, are commonplace, and the originality of the thesis lies in their application to specific issues such as: the influence of the prior for the true input variable, the influence of the initial state uncertainty, the selection of priors for model comparison, the effect of error model assumptions on posterior parameter distributions and the validation of models calibrated in presence of input errors. The thesis also shows how structural errors can be identified and separated from input and output errors based on assumptions about their respective distribution. Although the conclusions are based on simulations run with monthly models, the general ideas and constataions are likely to hold for higher resolution models, once appropriate error models are defined for those cases.



# Remerciements

---

J'ai peur de décevoir le lecteur qui s'attendrait au récit de mes épreuves car, pour ma part, l'expérience doctorale se compare à un fleuve tranquille, parsemé de quelques rapides en fin de parcours, certes, mais sans chavirement, et dans l'ensemble, fort agréable (ahh, c'est beau, le recul).

Il n'en reste pas moins qu'éviter les ennuis est un art bien plus grand que de les résoudre, et c'est en ce sens que vont mes remerciements. À Alain, donc, pour la direction de ce doctorat, les discussions, les voyages, l'appui inconditionnel, la confiance et les encouragements ; j'espère un jour pouvoir te rendre un service comparable à celui que tu m'as rendu. À mes collègues de l'INRS, Guillaume, Romain, Sophie, Dany, Jean-Philippe, Renaud, Julia pour les bons moments passés ensemble, l'amitié et la camaraderie qui sont les éléments nutritifs essentiels d'un milieu de travail. À ceux de McGill (LP, JF, Yan, Bruno) pour leur accueil chaleureux, la pétanque et les barbecues. À Anne-Catherine pour le support, les encouragements et les multiples lettres de références. À Marie-Claude et Bernard pour les vacances reposantes. À Pierre et Marcelle pour tout. Et finalement, à Laurence, Jeanne, Madeleine et Marie qui sont la source de mon inspiration et mon énergie, le moteur et le catalyste de ce travail.



# Contents

---

Résumé	iii
Abstract	v
Foreword	vii
Papers and authors contributions	ix
Contribution to science	xi
Remerciements	xiii
Contents	xvii
List of tables	xix
List of figures	xxi
<b>1 Résumé</b>	<b>1</b>
1.1 Introduction . . . . .	1
1.2 Revue de littérature . . . . .	3
1.2.1 Les moindres carrés . . . . .	3
1.2.2 Les sources d'incertitudes . . . . .	5
1.2.3 Les impacts des incertitudes . . . . .	7
1.2.4 Méthodes de calibration . . . . .	8
1.3 Discussion . . . . .	12
1.3.1 Schéma conceptuel . . . . .	13
1.3.2 Solution analytique : application au modèle "abc" . . . . .	14
1.3.3 Solution générale : Application à GR2M . . . . .	16
1.3.4 Sélection de modèle . . . . .	18
1.3.5 Pistes de recherche . . . . .	19
1.4 Conclusion . . . . .	21
<b>I Synthesis</b>	<b>25</b>
<b>2 Introduction</b>	<b>27</b>

2.1	Standard calibration procedure . . . . .	27
2.2	Impact of input errors . . . . .	28
2.3	Objectives . . . . .	29
2.4	Methodology . . . . .	30
<b>3</b>	<b>Literature review</b>	<b>33</b>
3.1	Sources of errors in hydrological modeling . . . . .	33
3.1.1	Rainfall uncertainty . . . . .	33
3.1.2	Evapotranspiration uncertainty . . . . .	38
3.1.3	Discharge uncertainty . . . . .	39
3.1.4	Structural uncertainty . . . . .	42
3.2	Impact of errors on calibration . . . . .	44
3.3	Calibration methods . . . . .	45
3.3.1	Standard optimization . . . . .	45
3.3.2	GLUE . . . . .	47
3.3.3	BATEA . . . . .	49
3.3.4	Kalman filters . . . . .	51
3.3.5	Sequential Monte Carlo . . . . .	54
3.3.6	Gaussian processes . . . . .	57
3.3.7	Comments . . . . .	59
<b>4</b>	<b>Discussion</b>	<b>61</b>
4.1	Conceptual framework . . . . .	63
4.2	An equation for the posterior distribution . . . . .	64
4.3	Linear case: “abc” model . . . . .	65
4.3.1	Objectives and methodology . . . . .	66
4.3.2	Discussion . . . . .	67
4.4	Non linear case: GR2M model . . . . .	69
4.4.1	Objectives . . . . .	69
4.4.2	Methodology . . . . .	70
4.4.3	Discussion . . . . .	72
4.5	Model selection and the parent prior . . . . .	75
4.5.1	Objectives . . . . .	76
4.5.2	Methodology . . . . .	76
4.5.3	Discussion . . . . .	78
4.6	Challenges for the future . . . . .	80
4.6.1	Defining informative error models . . . . .	81
4.6.2	Application to daily and hourly models . . . . .	84
4.6.3	Structural error analysis . . . . .	85
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>89</b>
<b>A</b>	<b>Bayesian analysis</b>	<b>93</b>
A.1	Bayes’ theorem . . . . .	94



A.2 Continuous variables . . . . .	95
A.3 Latent variables . . . . .	95
<b>B Numerical implementation</b>	<b>97</b>
<b>References</b>	<b>99</b>
<b>II Articles</b>	<b>109</b>
A bayesian perspective on input uncertainty in model calibration: Application to hydrological model “abc”	111
Calibration of hydrological model GR2M using Bayesian uncertainty analysis	127
Bayesian copula selection	195



# List of Tables

---

3.1	Kalman filtering algorithm (from <i>Welch and Bishop (2006)</i> ). . . . .	52
4.1	Error models linking known data and model to idealized true values and processes. . . . .	64
A.1	Laws of probability theory . . . . .	95
A.2	Logical operators . . . . .	95



## List of Figures

---

3.1	Streamlines colored by velocity magnitude with static pressure contours on the rain gauge (from <i>Newman and Kucera (2005)</i> ). . . . .	35
3.2	River cross section (from <i>Fenton and Keller (2001)</i> ). . . . .	40
3.3	Rating curve of the Chunky River used by the USGS. The dots indicate individual stage-discharge measurements. . . . .	41
3.4	Difference in discharge caused by variations in river slope during a flood event, compared to the steady flow state approximated by the rating curve (from <i>Fenton and Keller (2001)</i> ). . . . .	42
3.5	Conceptual uncertainty framework (from <i>Kavetski et al. (2003)</i> ). . . . .	49
4.1	Uncertainty framework proposed and used in the thesis. . . . .	64
4.2	Diagram of GR2M (from <i>Mouelhi et al. (2006)</i> ). . . . .	72



# Résumé

---

## 1.1 Introduction

Un modèle hydrologique est un algorithme permettant de prédire l'écoulement de l'eau d'un bassin versant vers un exutoire à partir de mesures expérimentales. Ces mesures peuvent être, par exemple, de type météorologiques (précipitation, température, ensoleillement), géographiques (topographie), pédologique (perméabilité, niveau de la nappe) ou humaines (présence de puits, gestion de barrage). Il existe une énorme variété de modèles, certains possédant seulement quelques paramètres et une structure simple, et d'autres plus complexes, décrivant l'écoulement souterrain, les interactions de surface, l'utilisation du sol, etc, et ce à des résolutions spatiales et temporelles élevées. Pour pratiquement tous ces modèles, une étape préalable à leur utilisation s'impose : la calibration. Calibrer un modèle consiste à estimer les paramètres permettant à celui-ci de satisfaire optimalement à une ou plusieurs conditions. Généralement, les paramètres sont choisis de manière à maximiser une fonction décrivant la concordance entre les prédictions du modèle et des mesures expérimentales. Or, pour être utilisé, le modèle doit être conditionné par des données d'entrée (par exemple la précipitation et l'évapotranspiration), qui sont mesurées sur le terrain et souvent entachées d'incertitudes de toutes sortes.

Une question préoccupant énormément les hydrologues est de savoir quelle sera l'influence de ces erreurs sur la calibration du modèle. Il se trouve que plusieurs études ont montrées que les erreurs sur les données d'entrée des modèles corrompent la calibration, et donc peuvent fausser les prédictions subséquentes de ces modèles. La réaction des hydrologues a été de chercher des méthodes de calibration permettant de tenir compte de ces erreurs sur les données, ainsi que des erreurs commises par le modèle lui-même. Cette prise en compte du modèle d'erreur structural permet de définir une approche qui intègre l'ensemble des sources possibles d'incertitude associés à la mise en place d'un modèle hydrologique. Ce travail de doctorat s'inscrit dans cette mouvance et étudie une méthode de calibration permettant de tenir compte de multiples sources d'incertitude.

La méthode proposée s'appuie sur un article publié récemment par *Kavetski et al.* (2003) qui propose de considérer les erreurs sur les données d'entrée et de sortie par le biais de modèles d'erreurs. Ces modèles d'erreurs, qui permettent d'interpréter les données en spécifiant les caractéristiques des erreurs (biais, corrélation, hétéroscédasticité) sont en quelque sorte *greffés* au modèle hydrologique via l'analyse bayésienne. Dans cette thèse, nous généralisons cette idée par l'ajout d'un modèle d'erreur structural permettant de traiter les erreurs imputables au modèle lui-même. La thèse présente deux applications de la méthode à deux modèles hydrologiques simples. Bien que les modèles hydrologiques soient d'un intérêt pratique limité, ils permettent d'étudier certaines questions d'ordre théorique : l'influence des modèles d'erreurs, leur sélection, la validation des modèles dans un contexte d'erreur sur les entrées, l'impact des distributions *a priori* (*priors*) et la mesure de l'efficacité de la calibration.

Dans les pages qui suivent, nous discuterons d'abord plus en détail de la problématique et des méthodes de calibration ayant été publiées au cours des dernières



années. Suit une description de la méthode proposée, puis les résultats principaux issues des expériences menées avec les modèles “abc” et GR2M. Finalement, des conclusions générales sur les défis soulevés par la calibration de modèles plus complexes sont émises, en parallèle avec des pistes de solutions à envisager.

## 1.2 Revue de littérature

Selon *Gupta et al.* (2003), l’amélioration de la calibration des modèles hydrologiques passe par la résolution de deux problèmes majeurs : arriver à tenir compte des incertitudes sur les données et le modèle, et élargir le spectre des indicateurs de performance des modèles. Cet intérêt des hydrologues pour les incertitudes vient de la combinaison de deux facteurs : 1. les données d’entrée des modèles hydrologiques (précipitation, évapotranspiration) sont parfois entachées d’incertitudes importantes, 2. ces erreurs sur les données biaisent les paramètres estimés par les méthodes de calibration traditionnelles.

### 1.2.1 Les moindres carrés

La méthode la mieux connue et probablement la plus utilisée pour calibrer un modèle est la méthode imaginée par Gauss il y a plus de deux cent ans, les moindres carrés (SLS). Cette méthode consiste à estimer les paramètres  $\theta$  minimisant la différence élevée au carré entre les prédictions d’un modèle  $f(\mathbf{x}, \theta)$  et des données expérimentales  $\tilde{\mathbf{y}}$  :

$$\hat{\theta} = \underset{\theta}{\operatorname{argmin}} \left\{ \sum_i [\tilde{y}_i - \mathcal{M}(\tilde{x}_i, \theta)]^2 \right\}.$$

Cette méthode fonctionne admirablement bien lorsqu’une condition essentielle est respectée, soit que les données d’entrée du modèle,  $\tilde{\mathbf{x}}$ , sont exactes. Le succès obtenu

par cette méthode est dû en grande partie au fait qu'elle se base sur la représentation du modèle d'erreur par une distribution normale. En effet, la minimisation des différences carrées est équivalente à la maximisation de la probabilité d'occurrence des données lorsque la probabilité est définie par une loi normale centrée :

$$\hat{\theta} = \operatorname{argmax}_{\theta} \{ \mathcal{N}(\tilde{\mathbf{y}} \mid f(\tilde{\mathbf{x}}, \theta), \sigma) \},$$

où  $\sigma$  dénote la déviation standard des erreurs. Or, l'une des propriétés de la loi normale est qu'elle est la distribution maximisant l'entropie lorsque seule la moyenne et la variance d'une variable stochastique sont connues. Autrement dit, c'est la distribution la plus générale qui soit pour décrire une erreur aléatoire typique. En conséquence, en l'absence d'information sur la distribution des résidus, il est tout à fait correct d'utiliser la méthode des moindres carrés, et ce, même si, *a posteriori*, il se trouve que la distribution des résidus ne suit pas une loi normale.

Malgré les remarquables propriétés de cette méthode, certaines difficultés surviennent lorsque le nombre de paramètres à estimer augmente. En effet, à mesure que l'on ajoute des paramètres, la dimension de l'espace à explorer pour trouver le minimum augmente, ainsi que les risques de tomber sur un minimum local, plutôt que le minimum global. Afin de pallier ces difficultés, des méthodes telles que SCE-UA (*Duan et al.*, 1992) ou les algorithmes génétiques sont utilisées (voir *Duan* (2003) pour une revue des méthodes d'optimisation globales.)

En hydrologie, l'utilisation de la méthode des moindres carrés pose également un autre type de difficulté. En effet, les sorties d'un modèle hydrologique incluent généralement des régimes au comportement fort différents : les crues et les étiages. En appliquant directement la méthode des moindres carrés, il arrive souvent que les paramètres choisis reproduisent mal les périodes d'étiage pour la simple raison que

les sorties sont faibles et donc les erreurs commises par une mauvaise paramétrisation sont également comparativement faibles. Une solution peut être alors d'utiliser une loi normale hétéroscédatique (*Sorooshian and Dracup, 1980*) ou bien de minimiser d'autres fonctions qu'une différence élevée au carré (*Gupta et al., 1998*).

La calibration de modèles hydrologiques constitue donc un problème complexe : le comportement à reproduire possède une grande variabilité, le nombre de paramètres est souvent élevé, et finalement, les données servant à calibrer le modèle sont incertaines, ce qui invalide l'hypothèse de base de la méthode des moindres carrés.

### 1.2.2 Les sources d'incertitudes

Les données de base servant à forcer et à calibrer les modèles hydrologiques sont, de façon générale, les précipitations, l'évapotranspiration et les débits. D'autres variables peuvent être considérées selon le modèle, telles que le niveau de la nappe phréatique, le pompage (lorsqu'il est connu), l'utilisation du sol, les cycles végétatifs, etc. Dans les climats humides, la variable qui domine est la précipitation. Les précipitations sont traditionnellement mesurées par une station météorologique, typiquement un entonnoir collectant l'eau de pluie. Ces stations sont parfois automatisées, parfois opérées par du personnel. Dans tous les cas, les mesures tendent à sous-estimer la précipitation réelle en raison de nombreux facteurs, le principal étant le vent. En effet, à mesure que la vitesse du vent augmente, il se crée une zone de haute pression autour de l'appareil, qui dévie les gouttes de pluie de l'entonnoir. Les pertes peuvent aller jusqu'à 30% de la précipitation totale, et jusqu'à 100% pour la neige (*Yang et al., 1999*). Une autre source d'erreur provient de l'évaporation des gouttelettes d'eau qui adhèrent à l'entonnoir. Enfin, les stations automatisées fonctionnant sous le principe de l'auge à bascule doivent être calibrées (ajustement

de la fréquence de l'oscillation à l'intensité de la pluie), et cette calibration peut constituer une source significative d'incertitude. À ces différentes sources d'erreurs vient s'ajouter des considérations plus pragmatiques : le déplacement de la station, le changement du type de station, le remplacement du personnel, la modification de l'environnement (la végétation qui grandit, la construction de bâtiments), le dysfonctionnement de l'appareil, la négligence de l'opérateur, les pertes de données, etc.

Enfin, même si la mesure de la précipitation était parfaite, un problème de taille subsiste, nommément la représentativité de la mesure. En effet, une station ne mesure la précipitation que sur une surface équivalente à celle d'une assiette. De l'autre côté, le modèle hydrologique nécessite une mesure de la précipitation à l'échelle du bassin versant ou dans les modèles distribués, à l'échelle des points de grilles, espacés dans le meilleur des cas de quelques kilomètres. Or, les précipitations peuvent exhiber une variabilité spatiale importante. La mesure expérimentale (en un point précis) et la variable du modèle (moyenne spatiale) sont donc fondamentalement différentes. Pour estimer la précipitation globale, on doit ainsi extrapoler les valeurs ponctuelles à l'aide de méthodes de krigeage. La validité de l'extrapolation dépendra de la superficie sur laquelle elle est appliquée, du nombre de stations incorporées et du type d'averse. Les orages courts et intenses sont généralement très localisés alors que les averses qui s'étalent sur plusieurs heures couvrent des territoires plus vastes. Si une averse passe directement au-dessus de la station et possède une superficie inférieure à celle du territoire d'extrapolation, la précipitation sera surévaluée. À l'inverse, si l'averse évite la station, la précipitation sera sous-estimée. Ce problème de représentativité de la mesure est discuté dans *Habib et al.* (2001).

La situation n'est pas tellement plus reluisante pour l'évapotranspiration et les

débits. L'évapotranspiration dépend principalement de la température, du rayonnement solaire et du type de végétation. Le grand nombre de modèle d'évapotranspiration en circulation témoigne de la difficulté d'estimer celle-ci adéquatement (*Oudin et al.*, 2005b). Les débits, quant à eux, sont mesurés par des relations hauteur-débit (*stage-discharge*), ou plus récemment par des sonars Doppler. Les incertitudes sur les décharges proviennent donc directement de l'incertitude sur la relation entre le niveau d'eau et le débit, affectée, entre autre, par la morphologie changeante du lit des rivières et les courtes périodes de mesures disponibles pour effectuer la calibration.

Ces sources d'incertitudes qui affectent les données de calibration des modèles hydrologiques se mêlent aux incertitudes issues du modèle lui-même. Ces incertitudes structurales peuvent être divisées en deux grandes catégories: l'incertitude associée aux processus stochastiques, et celle provenant du fait que le modèle est une représentation simplifiée des processus naturels. Bien que cette division soit légèrement artificielle (un processus stochastique n'est au fond qu'un processus déterministe extrêmement sensible aux conditions environnantes), elle en demeure pertinente puisqu'elle sous-entend qu'il est possible d'améliorer la représentation des processus hydrologiques de manière à ce que l'erreur structurale ne soit finalement dû qu'aux processus stochastiques.

### 1.2.3 Les impacts des incertitudes

Les incertitudes associées aux données sont par nature aléatoire. On pourrait donc espérer que ces erreurs, en moyenne, s'annulent et que le comportement du modèle n'est pas affecté outre mesure par ces erreurs. Ce n'est toutefois pas la cas. En effet, il semble y avoir consensus parmi la communauté hydrologique pour dire que les

erreurs aléatoires sur les précipitations peuvent affecter les modèles hydrologiques et nuire à la qualité des prédictions (*Oudin et al.*, 2005a; *Kavetski et al.*, 2003; *Andréassian et al.*, 2001; *Troutman*, 1982) ; c'est-à-dire que la performance des modèles, mesurée notamment par le critère de Nash-Sutcliffe, diminue à mesure que l'amplitude des erreurs augmente. Il est à noter que l'influence des erreurs d'entrée varie considérablement selon le modèle, le climat et plus généralement, par le type de bassin considéré.

#### 1.2.4 Méthodes de calibration

L'intérêt pour des méthodes de calibration tenant compte des incertitudes ne date pas d'hier et il existe bon nombre de méthode de calibration cherchant à réduire l'effet des erreurs sur la calibration. Les prochaines pages présentent brièvement quelques unes des méthodes proposées récemment permettant de tenir compte des multiples sources d'incertitude pouvant affecter la modélisation hydrologique.

#### **BATEA**

BATEA, *Bayesian Total Error Analysis* (*Kavetski et al.*, 2003) est une méthode bayésienne fondée sur les moindres carrés totaux (Total Least Squares). L'idée de base est de ne plus assumer que les entrées sont exactes, mais plutôt d'inférer leur valeurs, au même titre que les paramètres du modèle. Ainsi, en faisant la distinction entre les vraies entrées  $\mathbf{x}$  et les entrées mesurées  $\tilde{\mathbf{x}}$ , nous pouvons écrire :

$$p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x} \mid \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}}) = p(\tilde{\mathbf{y}} \mid \boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}) p(\tilde{\mathbf{x}} \mid \mathbf{x}) p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}), \quad (1.1)$$

où les termes de droites représentent respectivement le modèle d'erreur de sortie (la vraisemblance), le modèle d'erreur d'entrée et les *prior* des paramètres et des vraies valeurs d'entrée. Dans l'article cité, les auteurs appliquent cette méthode au modèle "abc" (sur une base horaire) et à TopModel. En utilisant des données synthétiques auxquelles ils imposent un bruit aléatoire, ils parviennent à montrer que la méthode de calibration standard (SLS) ne converge pas vers les vraies valeurs de paramètres. Par contre, en utilisant BATEA, ils parviennent à estimer adéquatement la distribution des paramètres.

Afin de bien comprendre les problématiques reliées à la calibration, il faut réaliser que le fait que SLS ne parvienne pas à estimer les vrais paramètres du modèle n'est pas problématique en soi. En effet, les paramètres des modèles sont très souvent de nature conceptuels ; ils n'ont pas d'équivalent physique mesurable. Le fait que l'on estime ou non leur vraie valeur n'a pas réellement d'importance, tant que les prédictions réalisées par les paramètres demeurent réalistes. Nous reviendrons sur cet aspect de la validation plus loin.

Fait à noter, le modèle d'erreur d'entrée utilisé par les auteurs de BATEA découpe la série de précipitations en averses : ils supposent que, pour une averse donnée, toutes les précipitations sont affectées par la même erreur (un facteur multiplicatif). Autrement dit, si une averse dure 15 heures, ils supposent qu'en multipliant les 15 mesures de précipitations par un seul facteur, on obtiendra les 15 vraies valeurs de précipitation.

Le schéma d'incertitude utilisé dans cette thèse ajoute à celui de *Kavetski et al.* (2003) deux sources d'incertitude: l'incertitude structurale et celle dûe à l'ignorance des conditions initiales. De plus, les hypothèses sur les erreurs d'entrée sont relaxées, permettant de considérer n'importe quel type d'autocorrélation entre erreurs.

## SODA

Dans un article de *Vrugt et al.* (2005), la méthode de calibration SODA est proposée, basée sur les ensembles de filtres de Kalman. L'idée maîtresse est que l'évolution d'un modèle déterministe dépend étroitement des conditions initiales qui sont souvent difficiles à estimer. Autrement dit, pour décrire de manière réaliste les prédictions d'un modèle, il faut considérer un ensemble de conditions initiales (des états), et faire évoluer chacun de ces états afin d'obtenir un portrait complet de la situation. Évidemment, pour des modèles complexes comme les modèles atmosphériques ou océaniques, il est hors de question de faire tourner le modèle les milliers de fois nécessaires pour obtenir ce type de portrait.

Au lieu de décrire l'évolution individuelle des états, les équations de Kalman permettent de calculer l'évolution moyenne du modèle, ainsi que la matrice de covariance décrivant l'étalement des états autour de la moyenne. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de tenir compte en une seule itération de l'incertitude sur les conditions initiales. Le désavantage majeur est que ce faisant, elle linéarise le comportement du modèle. Pour des modèles hautement nonlinéaires tels les modèles hydrologiques, cela peut conduire à des résultats erronés. La solution à ce problème est de considérer un ensemble de solutions moyennes (EnKF, *Ensemble Kalman Filters*, (Evensen, 1994)). De plus, en joignant une boucle Monte Carlo, il devient possible d'intégrer les incertitudes structurales et les incertitudes sur les données d'entrée à l'analyse, plutôt que de se limiter à l'incertitude sur les conditions initiales. Toutefois, la méthode EnKF fait l'hypothèse que les paramètres sont fixées, et donc ne permet pas directement d'en estimer la valeur à partir d'une série de données expérimentales.

La méthode SODA vient combler cette lacune et proposant de combiner EnKF



avec une boucle d'estimation des paramètres. L'idée est donc d'utiliser EnKF pour calculer une série temporelle de sorties pour un ensemble de paramètres, calculer la probabilité *a posteriori* de la série générée par chaque paramètre, et se servir de cette probabilité pour explorer l'espace des paramètres. Cette exploration utilise la méthode SCEM-UA (*Vrugt et al., 2003*) afin de minimiser le nombre de calculs et converger rapidement vers la distribution *a posteriori* des paramètres. L'avantage principal de cette combinaison EnKF+optimisation est qu'il devient possible d'estimer récursivement les paramètres. Autrement dit, si une nouvelle donnée devient disponible, il est possible d'utiliser cette méthode pour mettre à jour la distribution de paramètres, sans avoir à traiter à nouveau la série entière. Les auteurs appliquent SODA au modèle hydrologique HYMOD et rapportent des résultats jugés satisfaisants (basés sur des données synthétiques).

### Filtre de particules

Les filtres de particules (*Doucet et al., 2000*) permettent de calculer la distribution des paramètres d'un modèle de manière relativement simple (du moins en théorie.) L'avantage principal de cette méthode est qu'elle se prête naturellement à l'estimation récursive des paramètres. L'idée maîtresse est de générer des particules, chacune représentant une réalisation aléatoire des paramètres du modèle, et d'assigner à chacune d'elles un poids proportionnel à la probabilité des paramètres qu'elle représente. Lorsqu'un nouveau jeu de donnée est disponible, il est aisé d'en calculer la vraisemblance et mettre à jour le poids de chaque particule. Les particules associées à des paramètres probables finissent par obtenir un poids élevé, alors que le poids des particules improbables tend vers zéro. L'espérance d'une fonction peut être calculée en pesant la contribution de chaque particule par son poids.

Si la méthode est simple en théorie, son application comporte quelques difficultés techniques. La principale vient du fait qu'après quelques itérations, la plupart des particules obtiennent des poids proches de zéro. Conséquemment, le nombre de particules qui contribuent de manière significative à l'espérance d'une fonction diminue rapidement, ce qui dégrade la qualité des résultats. Il est possible de pallier ce problème en ré-échantillonnant des particules à chaque itération, mais cela entraîne un appauvrissement de la diversité des particules, ce qui exige d'autres mesures correctives.

*Moradkhani et al.* (2005) applique le filtre de particules afin de calibrer le modèle hydrologique HYMOD. Bien que les auteurs rapportent des résultats satisfaisants, il est à noter que, dans leurs simulations, les incertitudes sur les données d'entrée et les erreurs structurales ne sont pas considérées. Néanmoins, le filtre de particule se prête admirablement bien à l'estimation récursive des paramètres et cela constitue probablement son principal atout.

### 1.3 Discussion

Le point de départ de toute méthode de calibration est le schéma d'incertitude qui décrit la relation entre les données, les erreurs et le modèle. Dans les lignes qui suivent, nous définissons un tel schéma englobant les erreurs sur les données d'entrée, les données de sortie et sur le modèle lui-même. Par la suite, le schéma est converti, grâce à l'analyse bayésienne, en une équation décrivant la distribution *a posteriori* des paramètres. Cette équation est résolue analytiquement pour le modèle "abc", puis par simulations Monte Carlo pour le modèle GR2M. Ces deux méthodes de résolution font l'objet des articles constituant la seconde partie de cette thèse. Les

résultats issus de ces simulations sont analysés et discutés dans les sections 1.3.2 et 1.3.3.

### 1.3.1 Schéma conceptuel

Avant d'attaquer la question de la calibration en présence d'incertitudes, un schéma décrivant la relation entre les différentes sources d'incertitudes, les données et le modèle doit d'abord être proposé. Ce schéma est décrit dans *Huard and Mailhot* (2006) et reproduit à la figure 4.1. L'hypothèse de base est qu'il existe des variables, les *vraies* données d'entrée et les *vraies* données de sortie, liées entre elles par un *vrai* processus physique. Les mesures de laboratoires ou de terrain, quant à elles, sont une approximation des vraies valeurs, et le modèle, une simplification du vrai processus. Pour arriver à calibrer le modèle, on doit inférer les vraies valeurs à partir des données, et comparer les sorties simulées aux sorties mesurées. L'inférence des vraies valeurs se base sur des modèles d'erreurs, décrivant la distribution de probabilité pour chaque source d'erreur. On retrouve donc un modèle d'erreurs d'entrée, de sortie et un modèle d'erreurs structurales, qui doivent être défini *a priori*.

À partir du schéma conceptuel, il est relativement aisé de passer aux équations en utilisant le théorème de Bayes (une dérivation complète est donnée dans l'annexe A de *Huard and Mailhot* (2006)) :

$$\begin{aligned} p(\boldsymbol{\theta} \mid \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}}, \boldsymbol{\phi}_0) &= \iint p(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}, \mathbf{y} \mid \tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}}, \boldsymbol{\phi}_0) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \\ &= \iint p_{out}(\tilde{\mathbf{y}} \mid \mathbf{y}) p_{in}(\tilde{\mathbf{x}} \mid \mathbf{x}) p_{str}(\mathbf{y} \mid \mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}, \boldsymbol{\phi}_0) \pi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} d\mathbf{y} \cdot \frac{\pi(\boldsymbol{\theta})}{p(\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{y}}, \boldsymbol{\phi}_0)}, \quad (1.2) \end{aligned}$$

où  $p_{out}$ ,  $p_{in}$ ,  $p_{str}$  sont respectivement les modèles d'erreurs de sortie, d'entrée et

structurales. La distribution *a posteriori*  $p(\boldsymbol{\theta} \mid \tilde{\boldsymbol{x}}, \tilde{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{\phi}_0)$  décrit la probabilité des paramètres d'un modèle, connaissant les données d'entrée et de sorties mesurées, ainsi que les conditions initiales  $\boldsymbol{\phi}_0$ . La formule (1.2) contient une intégration multiple sur  $\boldsymbol{x}$  et sur  $\boldsymbol{y}$ , les variables de nuisance décrivant les vraies valeurs d'entrée et de sortie. C'est en traitant les vraies valeurs d'entrée comme des variables de nuisance et en intégrant sur celles-ci qu'il est possible de tenir compte de l'effet des erreurs d'entrée lors de la calibration et de la validation. Toutefois, cette intégrale est typiquement insoluble analytiquement, sauf dans quelques cas où le modèle est linéaire et les modèles d'erreurs ont une forme gaussienne. La première application de la méthode considère un tel cas, où il est possible d'intégrer sur les variables de nuisance de manière relativement directe. La deuxième application, traite un cas plus général de modèle nonlinéaire, où l'intégrale doit se faire de manière numérique en utilisant les méthodes de chaînes de Markov Monte Carlo (MCMC).

### 1.3.2 Solution analytique : application au modèle "abc"

L'équation 1.2 possède une solution analytique si certaines conditions précises sont satisfaites : le modèle est une fonction linéaire des données d'entrée, les modèles d'erreurs sont de types gaussiens, tout comme la distribution *a priori* des données d'entrée. La dérivation de la solution pour la distribution *a posteriori* est donnée dans ce cas par l'équation (18) de *Huard and Mailhot (2006)*. Ceci dit, la grande majorité des modèles hydrologiques sont fortement nonlinéaires. La solution analytique a donc un intérêt pratique limitée, et nous l'étudions ici afin de de vérifier et d'étudier un certain nombre de questions théoriques. Le modèle choisi est "abc" (*Fiering, 1967*), un modèle mensuel à trois paramètres, fréquemment utilisé parce que très simple et pédagogique.