

## Payote septembre 2023

une modélisation du paysage et de l'habitat avec des EDP,  
aspects numériques de l'estimation

BioSp, Olivier Bonnefon

jeudi 19 octobre 2023

## plan:

- Environnement de simulation et d'estimation
- Modéliser des haies avec des EDP
- Optimisation de la forme d'un habitat favorable

# pourquoi un environnement dédié à l'approche mécanistico-statistiques ?

**Faciliter l'utilisation de modèles basés sur des équations aux dérivées partielles (EDP) pour des études spatialisées en épidémiologie ou en dynamique des populations**

**Lien modèle-paramétré  $\longleftrightarrow$  observations**

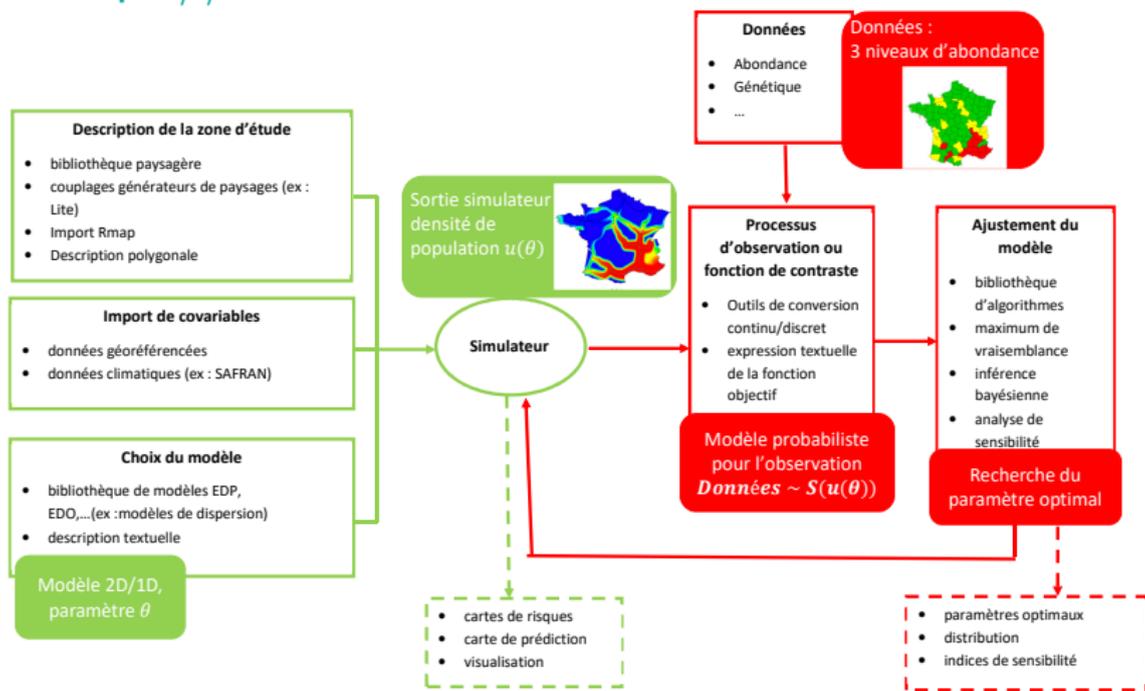
Environnement portable et utilisable par des non spécialistes du calcul

Proposer des modèles originaux

Disposer de méthodes d'estimations ad'hoc

Volonté d'aller vers une version 100 % python pour rendre accessible la simulation et l'ajustement de modèles EDP

$\implies$  Environnement Mécanistico-Statistique: MSE



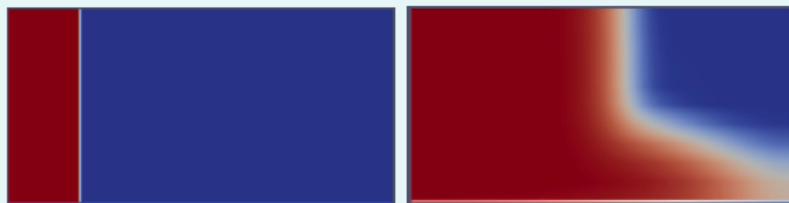
Projet soutenu par le CATI IMOTEP (visibilité et collaborations)

# Modéliser des haies avec des EDP, c'est possible!

EDP 1D-2D, inspiré de *H. Berestycki et al., 2014*

$$\begin{cases} \partial_t u - D\partial_{xx}u = v(x, 0, t) - u & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R}, \\ \partial_t v - d\Delta v = v(1 - v) & \forall t > 0, \forall (x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \\ -d\partial_y v(x, 0, t) = u(x, t) - v(x, 0, t) & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Accélération si  
 $D > 2d$

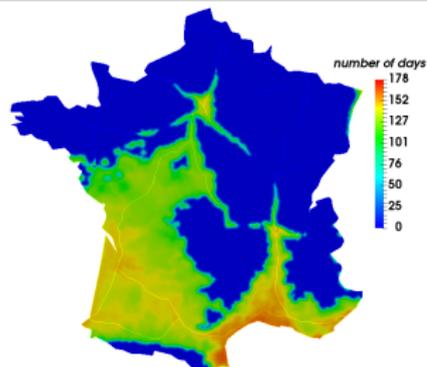
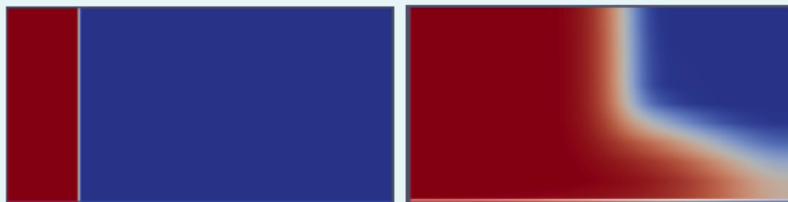


# Modéliser des haies avec des EDP, c'est possible!

EDP 1D-2D, inspiré de *H. Berestycki et al., 2014*

$$\begin{cases} \partial_t u - D\partial_{xx}u = \mathbf{v}(x, 0, t) - u & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R}, \\ \partial_t \mathbf{v} - d\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}(1 - \mathbf{v}) & \forall t > 0, \forall (x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \\ -d\partial_y \mathbf{v}(x, 0, t) = u(x, t) - \mathbf{v}(x, 0, t) & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Accélération si  
 $D > 2d$



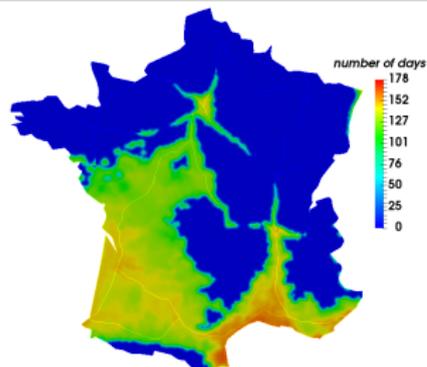
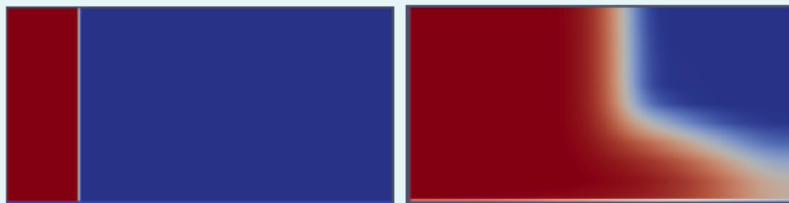
**propagation du moustique tigre  
via le réseau routier (2D1D)**

# Modéliser des haies avec des EDP, c'est possible!

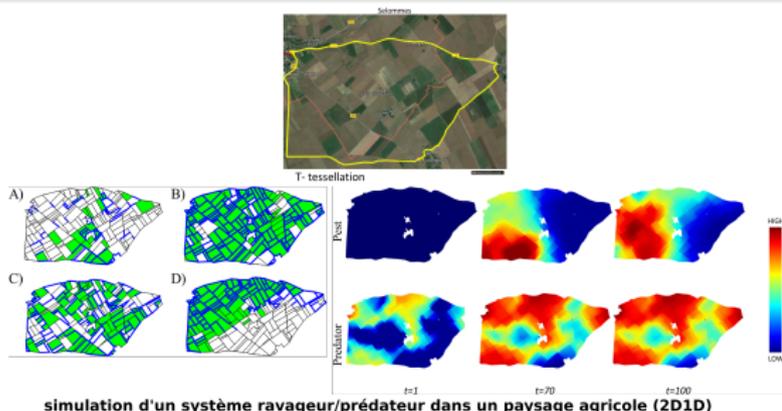
EDP 1D-2D, inspiré de *H. Berestycki et al., 2014*

$$\begin{cases} \partial_t u - D\partial_{xx}u = \mathbf{v}(x, 0, t) - u & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R}, \\ \partial_t \mathbf{v} - d\Delta \mathbf{v} = \mathbf{v}(1 - \mathbf{v}) & \forall t > 0, \forall (x, y) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^+ \\ -d\partial_y \mathbf{v}(x, 0, t) = u(x, t) - \mathbf{v}(x, 0, t) & \forall t > 0, \forall x \in \mathbb{R} \end{cases}$$

Accélération si  
 $D > 2d$



propagation du moustique tigre  
via le réseau routier (2D1D)



simulation d'un système ravageur/prédateur dans un paysage agricole (2D1D)

# Généralités sur l'estimation des paramètres du modèle par maximum de vraisemblance

On dispose de:

- un modèle paramétré par  $\theta \in \mathbb{R}^n$ ,
- une fonction d'état  $F(\theta, U_\theta) = 0$ , (ex: une EDP),
- une vraisemblance  $P(Obs|U)$ .

Optimisation: On cherche  $\theta^* = \operatorname{argmax}(J(\theta) = P(Obs|U_\theta))$

# Généralités sur l'estimation des paramètres du modèle par maximum de vraisemblance

On dispose de:

- un modèle paramétré par  $\theta \in \mathbb{R}^n$ ,
- une fonction d'état  $F(\theta, U_\theta) = 0$ , (ex: une EDP),
- une vraisemblance  $P(Obs|U)$ .

Optimisation: On cherche  $\theta^* = \operatorname{argmax}(J(\theta) = P(Obs|U_\theta))$

## algorithmes d'optimisation envisageables

- exploration de l'espace  $\mathbb{R}^n$ :  $\exp(n)$  évaluations de  $J(\theta)$
- méthode de itérative de descente  $(J(\theta_i), \nabla J(\theta_i))_{i < \approx 30}$ 
  - évaluation de  $J$  + différence finie dans chaque direction,  $n + 1$
  - évaluation de  $J$  + dérivation automatique,  $1, n$  EDP linéaires
  - évaluation de  $J$  + état adjoint,  $1, 1$  EDP linéaire et  $n$  calculs de  $\int U$

# Optimisation de forme: recherche d'un habitat favorable

modèle Fisher-KPP: EDP non-linéaire paramétrée

$$\begin{cases} \partial_t u & = \Delta u + R_\theta u(1 - u) - \mu u & \forall (t, x) \in Q, \\ u(0, x) & = u_0(x) & \forall x \in \Omega \\ \partial_n u & = 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$

Formes souvent utilisées pour  $R_\theta$ :

- $R_\theta(x, y) = \sum_{i \in \{\text{type de sol}\}} \theta_i 1_i(x, y)$
- $R_\theta(x, y) = \theta_1 T(x, y) + \theta_2 \text{COV}(x, y)$

Avec  $\theta \in \mathbb{R}^{<20}$

# Optimisation de forme: recherche d'un habitat favorable

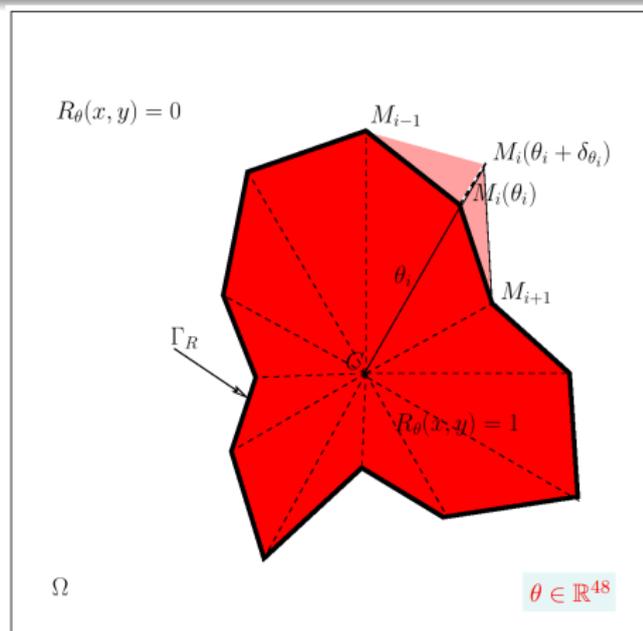
modèle Fisher-KPP: EDP non-linéaire paramétrée

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta u + R_\theta u(1-u) - \mu u & \forall (t, x) \in Q, \\ u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in \Omega \\ \partial_n u &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$

Formes souvent utilisées pour  $R_\theta$ :

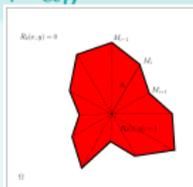
- $R_\theta(x, y) = \sum_{i \in \{\text{type de sol}\}} \theta_i 1_i(x, y)$
- $R_\theta(x, y) = \theta_1 T(x, y) + \theta_2 \text{COV}(x, y)$

Avec  $\theta \in \mathbb{R}^{<20}$



# 1) simulation d'un modèle Fisher-KPP: EDP non-linéaire $\rightarrow u_\theta$

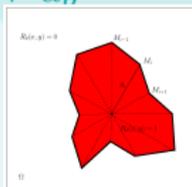
$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta u + R_\theta u(1 - u) - \mu u & \forall (t, x) \in Q, \\ u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in \Omega \\ \partial_n u &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$



Calcul de la vraisemblance ( $R_{ref}$ ):  $J(\theta) = \int_Q v(u_\theta)$  avec  $\theta \in \mathbb{R}^{48}$

## 1) simulation d'un modèle Fisher-KPP: EDP non-linéaire $\rightarrow u_\theta$

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta u + R_\theta u(1 - u) - \mu u & \forall (t, x) \in Q, \\ u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in \Omega \\ \partial_n u &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$



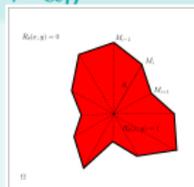
Calcul de la vraisemblance ( $R_{ref}$ ):  $J(\theta) = \int_Q v(u_\theta)$  avec  $\theta \in \mathbb{R}^{48}$

## 2) calcul de l'état adjoint en $u_\theta$ : EDP linéaire, rétrograde en temps $\rightarrow p_\theta$

$$\begin{cases} -\partial_t p &= \Delta p + R_\theta p(1 - 2u_\theta) - \mu p + v'(u_\theta) & \forall (t, x) \in Q, \\ p(T, x) &= 0 & \forall x \in \Omega \\ \partial_n p &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$

## 1) simulation d'un modèle Fisher-KPP: EDP non-linéaire $\rightarrow u_\theta$

$$\begin{cases} \partial_t u &= \Delta u + R_\theta u(1 - u) - \mu u & \forall (t, x) \in Q, \\ u(0, x) &= u_0(x) & \forall x \in \Omega \\ \partial_n u &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$



Calcul de la vraisemblance ( $R_{ref}$ ):  $J(\theta) = \int_Q v(u_\theta)$  avec  $\theta \in \mathbb{R}^{48}$

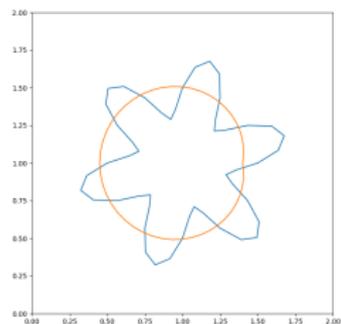
## 2) calcul de l'état adjoint en $u_\theta$ : EDP linéaire, rétrograde en temps $\rightarrow p_\theta$

$$\begin{cases} -\partial_t p &= \Delta p + R_\theta p(1 - 2u_\theta) - \mu p + v'(u_\theta) & \forall (t, x) \in Q, \\ p(T, x) &= 0 & \forall x \in \Omega \\ \partial_n p &= 0 & \forall t \in [0, 1], \forall x \in \delta\Omega, \end{cases}$$

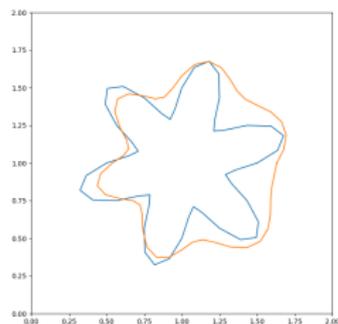
## 3) calcul de $\nabla J(\theta)$

$$\nabla J(\theta)_i = \int_t \int_{M_{i-1}, M_{i+1}} d(M, M_i) p_\theta(t, M) u_\theta(t, M) (1 - u_\theta(t, M))$$

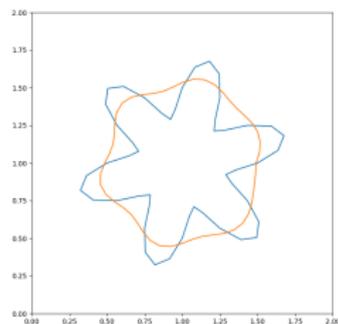
# Exemple 1: trajectoire optimisation (Quasi-Newton)



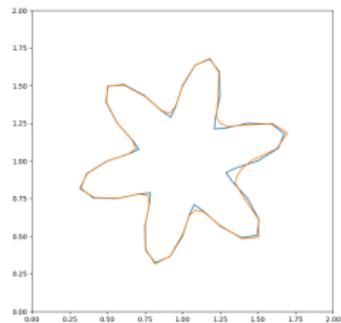
it 0



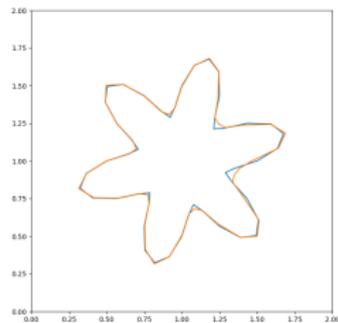
it 1



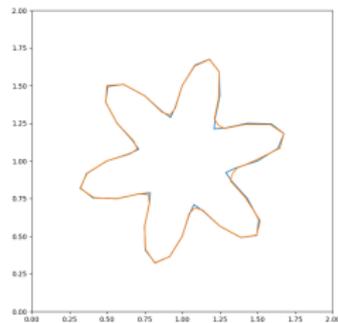
it 2



it 9

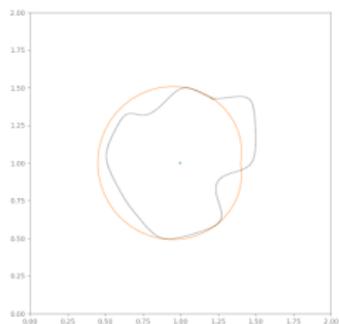


it 17

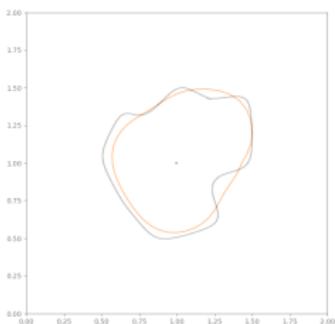


it 20

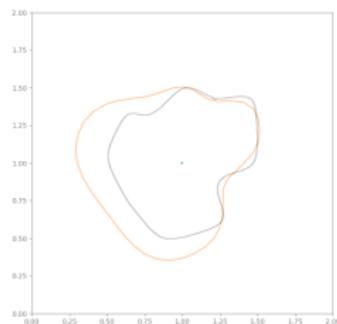
## Exemple 2 : trajectoire optimisation (Quasi-Newton)



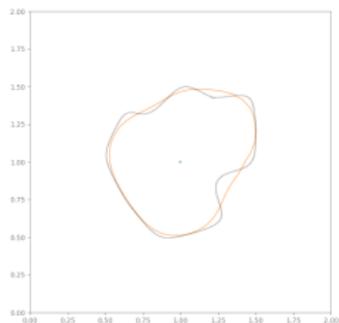
it 0



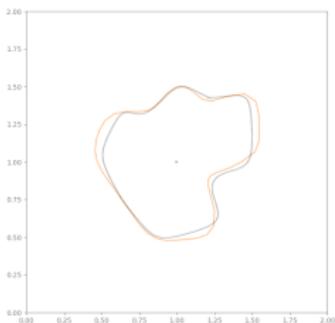
it 1



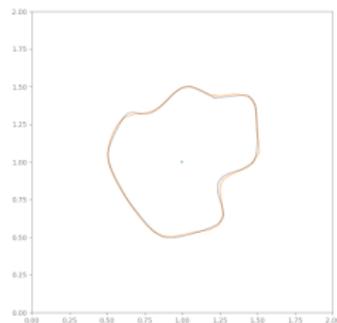
it 2



it 3

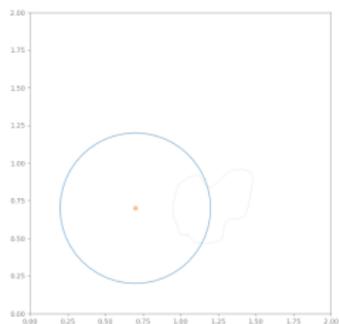


it 6

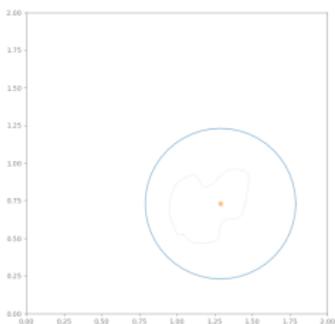


it 10

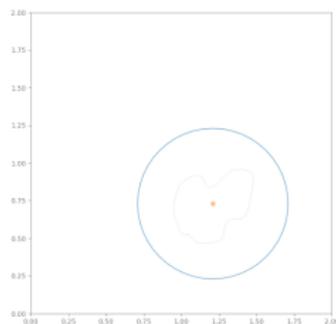
## Exemple 3 : trajectoire optimisation (Quasi-Newton)



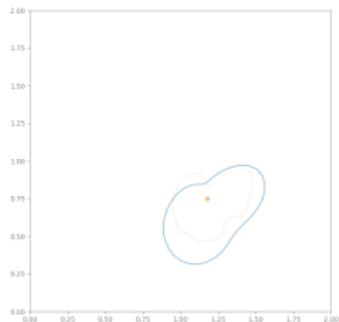
it 0



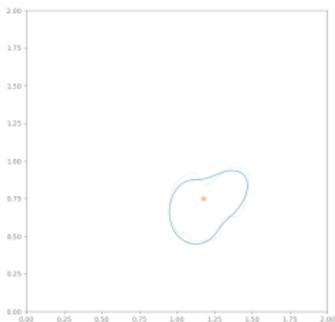
it 1



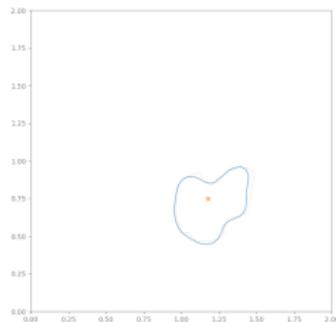
it 2



it 10



it 15



it 35

# Conclusion

## Objectifs 2024 pour d'environnement informatique MSE:

- rendre accessible la simulation et l'estimation de modèles EDP
- paysage: intégrer les fonctionnalités parcelles-haies
- calcul des variations ad'hoc

Pour cela, un CDD d'un an d'IE calcul est recruté (BPMP).

⇒ catalyser dès maintenant des collaborations