

28 nov. - 1 déc. 2005

Formation INRA ACTA ICTA

La Rochelle

Estimation des paramètres des modèles

« Comment combiner *Observations* et *Informations a priori* ? »

Le cas du modèle *Mini-STICS*

David Makowski

UMR Agronomie INRA/INA-PG

makowski@grignon.inra.fr

Les différent types d'informations disponibles pour estimer les paramètres d'un modèle

- Un échantillon d'observations des variables simulées par le modèle.

Exemple: N mesures de surfaces foliaires

- Des informations a priori sur les valeurs possibles des paramètres
 - connaissances des experts,
 - valeurs fournies par la littérature,
 - estimations obtenues à partir de travaux antérieurs.

Exemple: la température minimale de croissance du tournesol est comprise entre 4 et 10°C.

Pourquoi combiner « *Observations* » et « *Informations a priori* » ?

- Pour utiliser toutes les informations disponibles.
- Pour obtenir des estimations plus précises.
- Pour éviter d'obtenir des valeurs irréalistes des paramètres.
- Pour limiter les problèmes numériques.

**C'est utile pour les modèles complexes et lorsque le ratio
nb. données / nb. paramètres est faible.**

Trois approches

- Fixer certains paramètres à des valeurs « raisonnables ».
- Borner les valeurs des paramètres.
- Méthodes Bayésiennes.

Cas d'étude: Le modèle

- Modèle Mini-STICS (Tremblay, 2004).
- Prédit la surface foliaire du tournesol pendant 20 jours.

$$lai(t) = lai(t-1) + \Delta lai(t)$$

$$lai(t) = f(t, X; \theta)$$

$$\Delta lai(t) = \left\{ \frac{DLAIMAX}{1 + \exp[5.5(2.2 - ulai(t))]} \right\} \times [temp(t-1) - TCMIN] \times$$
$$turfac(t) \times densite \times \left[\frac{densite}{BDENS} \right]^{ADENS}$$

Estimation des paramètres des modèles

Cas d'étude: Information *a priori* sur les 14 paramètres

Paramètre	Signification	Valeur centrale	Intervalle de variation
ADENS	Parameter of compensation between stem number and plant density.	-0.696	-0.974, -0.417
BDENS	Maximum density above which there is competition between plants.	1.1029 plants.m ⁻²	0.662, 1.544
CROIRAC	Growth rate of the root front.	0.2913 cm.°C·Day ⁻¹	0.175, 0.407
DLAIMAX	Maximum rate of the setting up of LAI.	0.0061 m ² leaves.plant ⁻¹ .°C·Day ⁻¹	0.00366, 0.0085
EXTIN	Extinction coefficient of photosynthetic active radiation in he canopy.	0.6396	0.384, 0.895
KMAX	Maximum crop coefficient for water requirements.	1.4101	0.846, 1.974
LVOPT	Optimum root density.	0.5672 cm root/cm ⁻³ soil	0.34, 0.794
PSISTO	Absolute value of the potential of stomatal closing.	12.29 bar	7.37, 17.21
PSISTURG	Absolute value of the potential of the beginning of decrease of the cellular extension.	3.79 bar	2.27, 5.31
RAYON	Average radius of roots.	0.0167 cm	0.010, 0.023
TCMIN	Minimum temperature for growth.	7.1 °C	4.26, 9.94
TCOPT	Optimum temperature for growth.	32.1 °C	19.26, 44.94
ZPENTE	Depth where the root density is ½ of the surface root density for the reference profile.	113.1 cm	67.86, 158.3
ZPRLIM	Maximum where the root profile for the reference profile.	154.9 cm	92.94, 216.9

Cas d'étude: Les données

Parcelle	LAI
1	3.89
2	3.67
3	4.54
4	4.25
5	4.84
6	3.66
7	3.02
8	3.58
9	2.79
10	4.59
11	3.76
12	3.30
13	4.90
14	3.87

Méthode A: Fixer les valeurs de certains paramètres

Pour appliquer cette méthode, il faut:

- i. Sélectionner les paramètres qui seront estimés à partir des données (voir les méthodes de sélection décrites dans le cours précédent).
- ii. Fixer les paramètres non sélectionnés à des valeurs « raisonnables ».
- iii. Estimer les autres à partir des données.

Méthode A: Exemple

- Estimation des paramètres de Mini-STICS.
- Sélection « ascendantes » des paramètres pour minimiser les erreurs de prédiction (Wallach et al, 2001).
- On fixe les paramètres non sélectionnés aux valeurs centrales fournies par les experts.
- Estimation des paramètres sélectionnés par la méthode des moindres carrés.

Méthode A: Exemple

ETAPE 1

- On choisit d'estimer un seul paramètre de Mini-STICS, θ_1 .
- Les 13 autres paramètres sont fixés, $\theta_2 = \theta_2^*$, $\theta_3 = \theta_3^*$, ...
- La valeur de θ_1 est estimée par la méthode des moindres carrés.

On calcule la valeur de θ_1 qui minimise

$$SCE = \sum_{i=1}^{20} \left[lai_j - f \left(t = 20, X_i; \theta_1, \theta_2 = \theta_2^*, \dots, \theta_{14} = \theta_{14}^* \right) \right]^2$$

Estimation des paramètres des modèles

Méthode A: Exemple (suite)

Résultats obtenus lorsque la méthode est appliquée à chaque paramètre

Paramètre estimé	Valeur estimée	SCE
ADENS	-0.5460	6.0937
BDENS	1.6002	5.8386
CROIRAC	-	-
DLAIMAX	0.0079	5.8386
EXTIN	-0.3102	9.0716
KMAX	-0.6112	9.0716
LVOPT	6.4951	9.0716
PSISTO	-	-
PSISTURG	55.69	9.0716
RAYON	-	-
TCMIN	3.6045	5.7219
TCOPT	32.01	9.6983
ZPENTE	19591.54	9.4679
ZPRLIM	-387.57	9.4637



Méthode A: Exemple (suite)

ETAPE 2

On répète la procédure pour déterminer la meilleure combinaison de 2, 3, 4 paramètres:

- On associe TCMIN avec chacun des 13 autres paramètres et on estime chaque paire de paramètres.

$$SCE = \sum_{i=1}^{20} \left[lai_j - f \left(t = 20, X_i; \theta_1, \theta_2, \theta_3 = \theta_3^*, \dots, \theta_{14} = \theta_{14}^* \right) \right]^2$$


- On choisit la paire de paramètres conduisant à SCE minimale.
- On recommence avec des triplets de paramètres...

Méthode A: Exemple (suite)

Nombre de paramètres estimés	Paramètres sélectionnés
1	TCMIN
2	TCMIN, ADENS
3	TCMIN, ADENS, KMAX
4	TCMIN, ADENS, KMAX, EXTIN
5	TCMIN, ADENS, KMAX, EXTIN, LVOPT

Méthode A: Exemple (suite)

ETAPE 3. Combien de paramètres doit on estimer pour minimiser les erreurs de prédiction ?

Nombre de paramètres estimés	Paramètres sélectionnés	MSEP
1	TCMIN	0.47
 2	TCMIN, ADENS	0.46
3	TCMIN, ADENS, KMAX	0.49
4	TCMIN, ADENS, KMAX, EXTIN	0.54
5	TCMIN, ADENS, KMAX, EXTIN, LVOPT	0.55

Limites de la méthode A

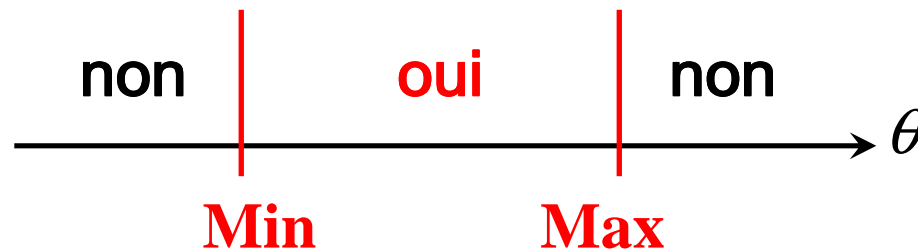
- Les valeurs auxquelles les paramètres non estimés sont fixés ont une influence sur le résultat.
- Les valeurs estimées peuvent être irréalistes.

Exemple: On obtient ici TCMIN $< 0^{\circ}\text{C}$

Méthode B: Borner les valeurs des paramètres

Pour appliquer cette méthode, il faut:

- i. Sélectionner les paramètres à estimer.
- ii. Fixer les paramètres non sélectionnés à des valeurs «raisonnables».
- iii. Définir un intervalle de valeurs possibles pour chaque paramètre.
- iv. Estimer les valeurs des paramètres à partir des données en limitant les valeurs possibles aux intervalles définies ci-dessus.



Méthode B: Exemple

- On choisit de n'estimer que deux paramètres, les autres sont fixés aux valeurs centrales définies par les experts.
- Les deux paramètres sélectionnés sont estimés en minimisant

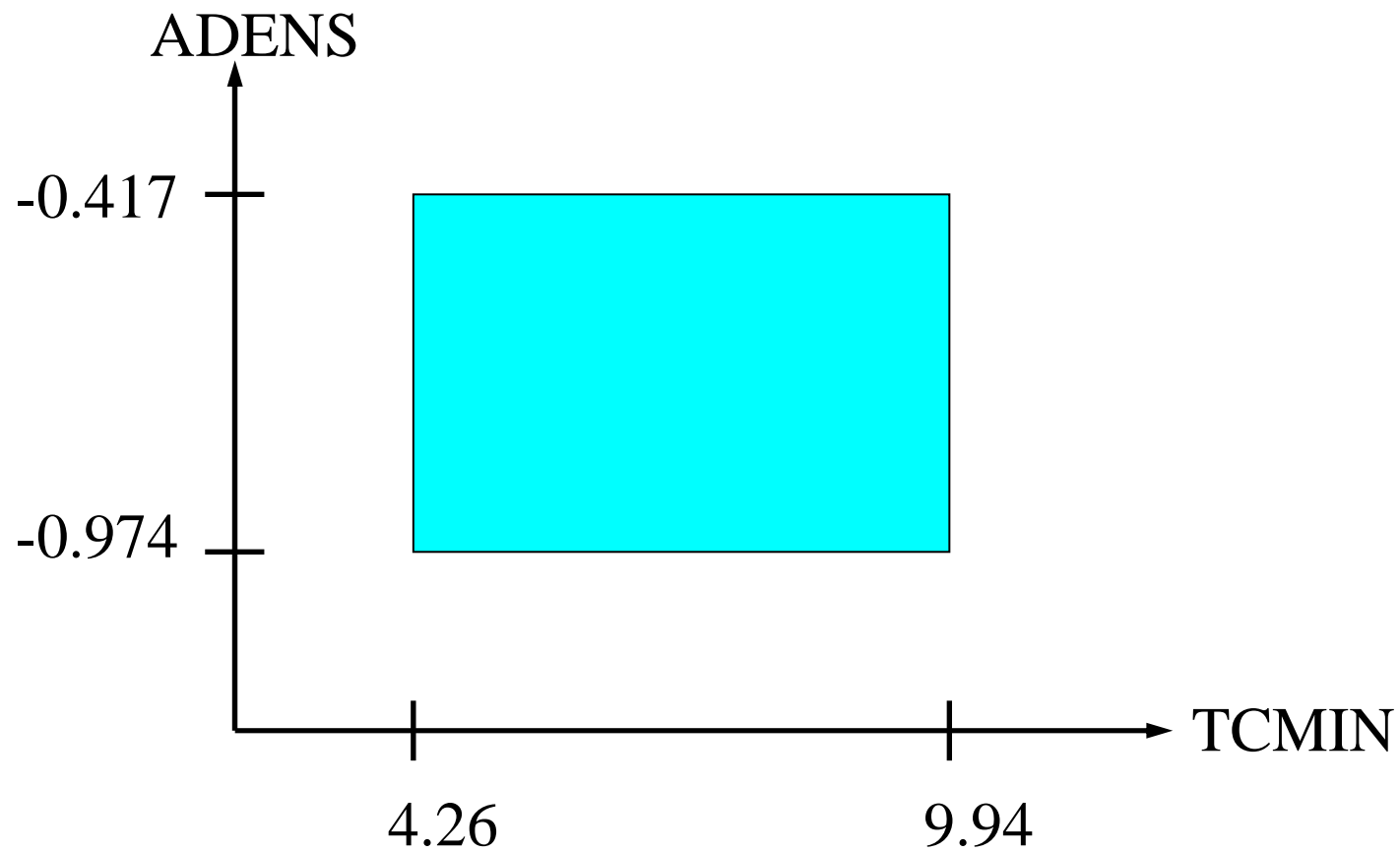
$$SCE = \sum_{i=1}^{20} \left[lai_j - f \left(t = 20, X_i; \theta_1, \theta_2, \theta_3 = \theta_3^*, \dots, \theta_{14} = \theta_{14}^* \right) \right]^2$$

avec comme contraintes

$$4.26 \leq TCMIN \leq 9.94$$

$$-0.974 \leq ADENS \leq -0.417$$

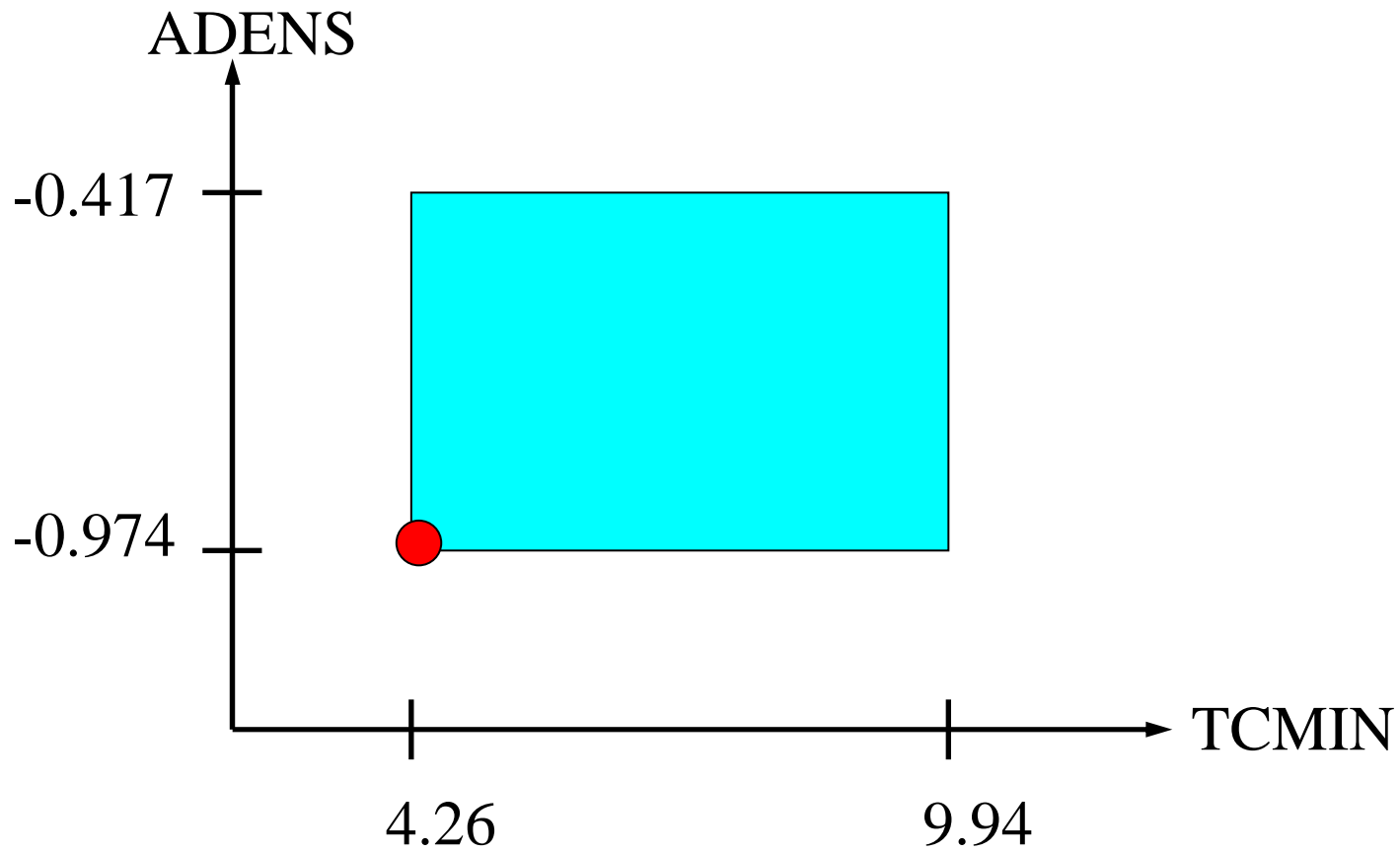
Méthode B: Exemple



Méthode B: Exemple

Paramètres	Valeurs estimées sans contraintes	Valeurs estimées avec contraintes
ADENS	-2.2082	-0.974
TCMIN	-1019.61	4.26

Méthode B: Exemple

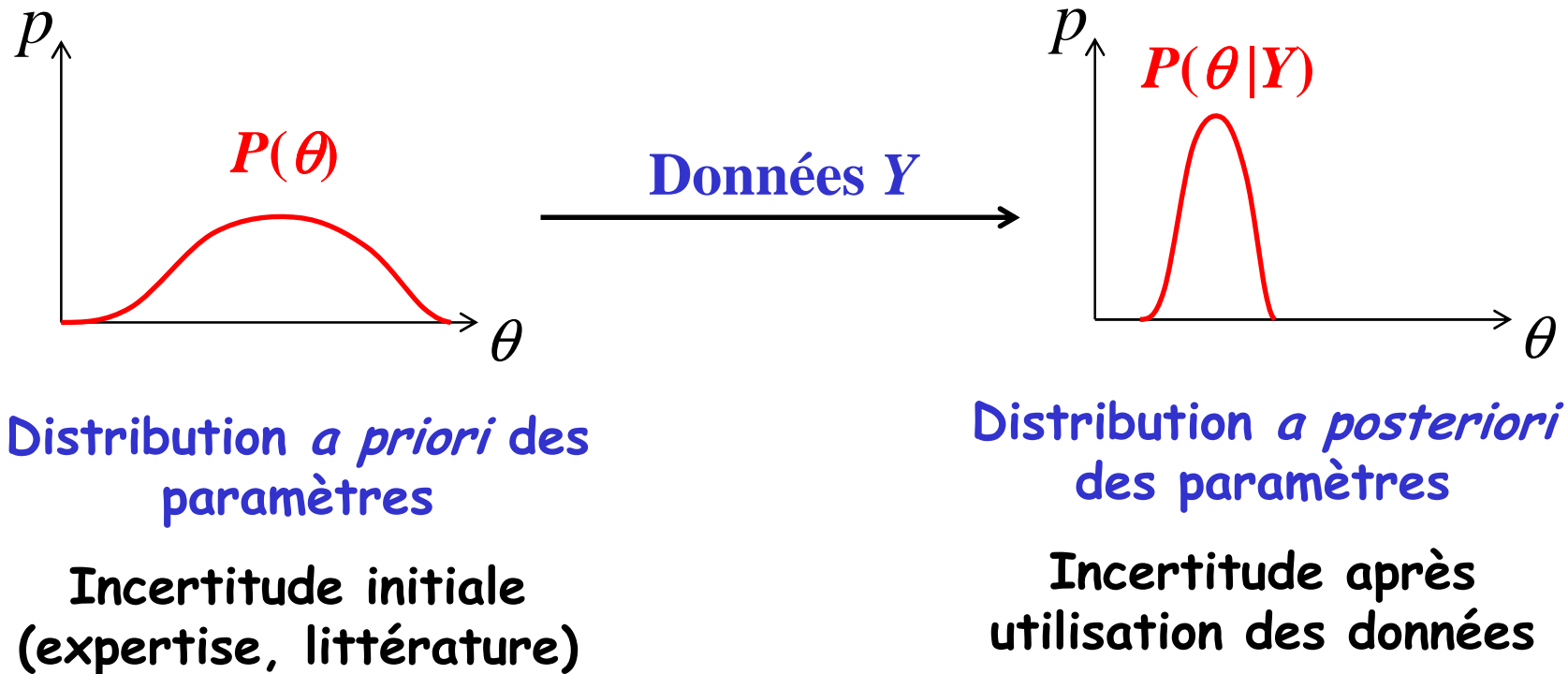


Méthode C: L'approche Bayésienne

- C'est à la mode (beaucoup d'applications récentes).
- Une approche plus générale que les deux approches précédentes.
- Des logiciels « conviviaux » ont été développés pour appliquer cette approche.

Principe des méthodes Bayésiennes

Représentation de l'incertitude dans les valeurs des paramètres par des distributions de probabilité



Principe des méthodes Bayésiennes

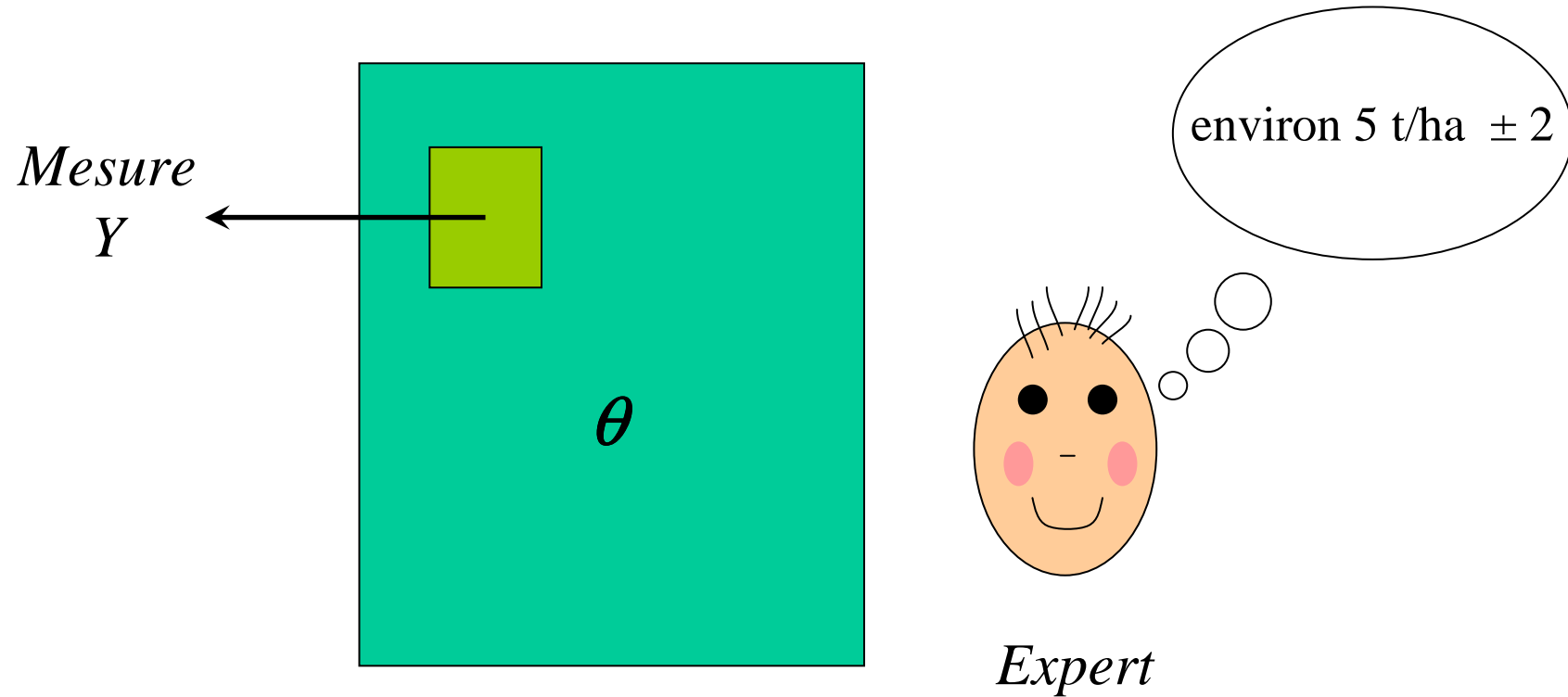
Le théorème de Bayes

Distribution *a posteriori* Vraisemblance Distribution *a priori*

$$P(\theta|Y) = \frac{P(Y|\theta)P(\theta)}{P(Y)}$$

Un exemple simple

Estimation du rendement d'une parcelle à partir d'une mesure réalisée sur une placette et de l'avis d'un expert



Un exemple simple

- **ETAPE 1.** Définition d'une distribution *a priori* à partir de l'avis d'expert.

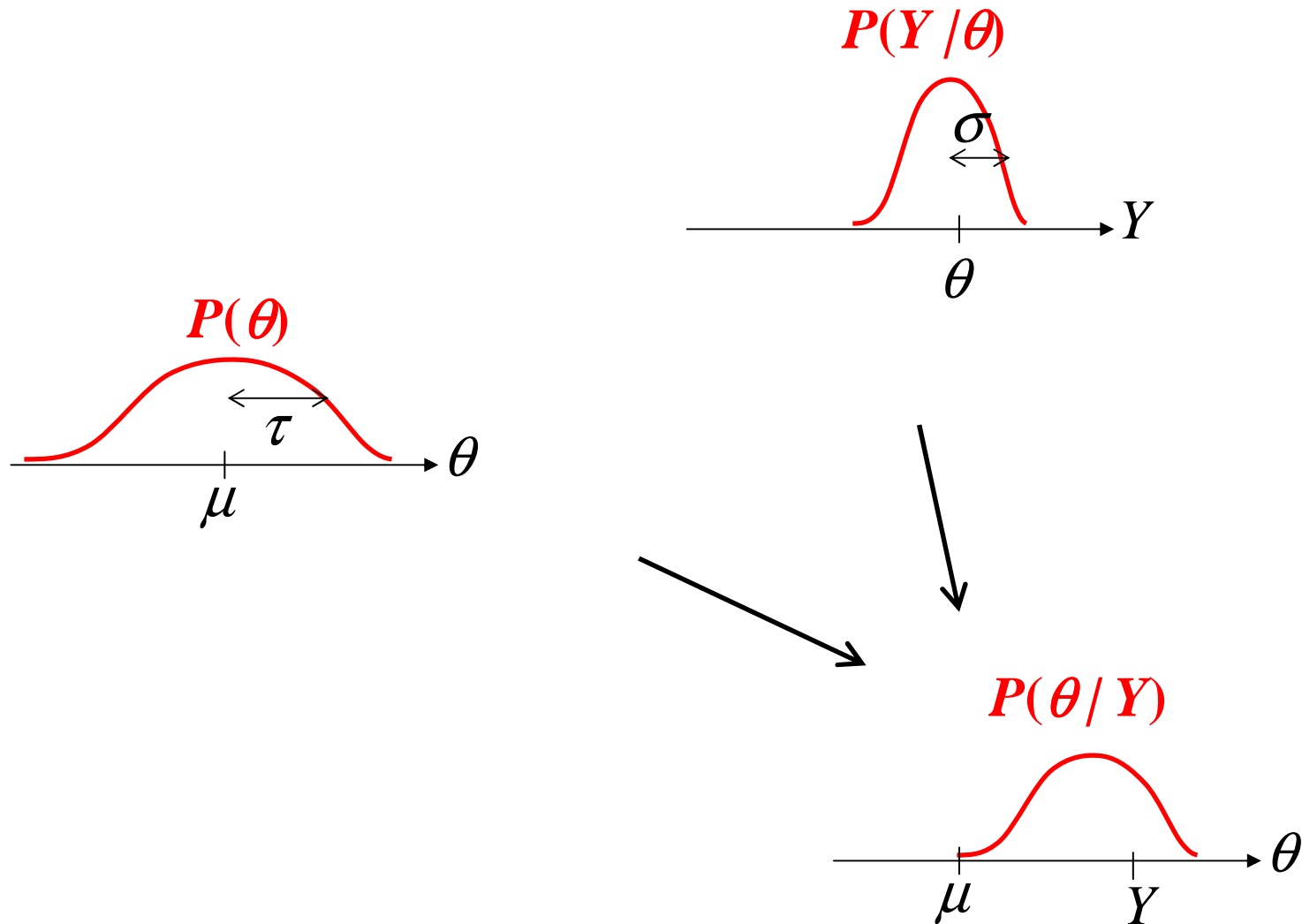
$$P(\theta) = N(\mu, \tau^2)$$

- **ETAPE 2.** Définition d'une fonction de vraisemblance.

$$P(Y|\theta) = N(\theta, \sigma^2)$$

- **ETAPE 3.** Calcul de la distribution *a posteriori*.

Un exemple simple



Un exemple simple

Espérance et variance de la distribution *a posteriori*

$$E(\theta|Y) = B\mu + (1-B)Y$$

$$\text{var}(\theta|Y) = (1-B)\sigma^2$$

$$B = \frac{\sigma^2}{\sigma^2 + \tau^2}$$

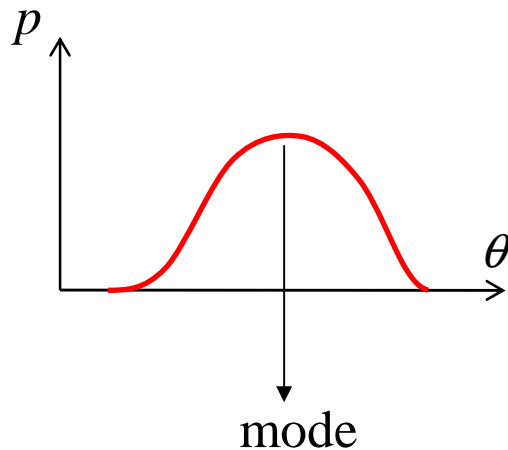
Un exemple simple, application numérique

- Distribution *a priori*: $N(5, 4)$
- Mesure: $Y=9$ t/ha, $\sigma=1$ t/ha
- Distribution *a posteriori*: $N(8.2, 0.8)$

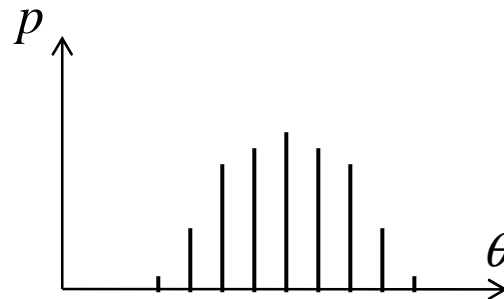
L'estimation des paramètres des modèles non linéaires avec une méthode Bayésienne est plus délicate

- Pas possible d'obtenir une expression analytique de la distribution *a posteriori* avec un modèle complexe.
- On va chercher à décrire la distribution *a posteriori*.

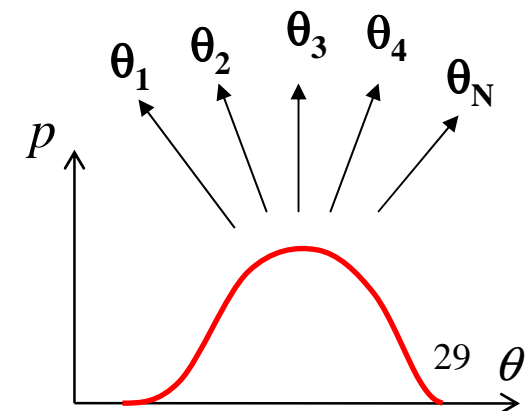
1. Calcul du mode



2. Discrétisation

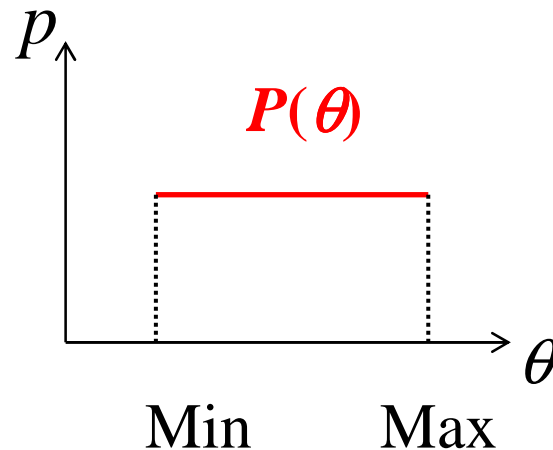


3. Génération de valeurs de paramètres



Application à Mini-STICS de la méthode Bayésienne « Calcul du mode »

Lorsque la distribution *a priori* est une loi uniforme,
calculer le mode de la distribution *a posteriori* revient à
borner les valeurs des paramètres.



Application à Mini-STICS de la méthode Bayésienne « Calcul du mode »

Lorsque la distribution *a priori* et que la fonction de vraisemblance sont des lois gaussiennes,

calculer le mode de la distribution *a posteriori* revient à minimiser la fonction suivante

$$\sum_{j=1}^{14} \frac{\left[lai_j - f(X_j; \theta) \right]^2}{\sigma^2} + \sum_{k=1}^K \frac{(\theta_k - \mu_k)^2}{\sigma_k^2}$$

Estimation des paramètres des modèles

Application à Mini-STICS de la méthode Bayésienne « Calcul du mode »

Paramètre	Valeur estimée
ADENS	-0.6468
BDENS	1.1707
CROIRAC	0.2853
DLAIMAX	0.0067
EXTIN	0.6385
KMAX	1.4383
LVOPT	0.5672
PSISTO	12.31
PSISTURG	3.7789
RAYON	0.0167
TCMIN	6.6961
TCOPT	32.01
ZPENTE	113.09881
ZPRLIM	154.9017

Conclusion

- Il est souvent intéressant d'estimer les paramètres en utilisant à la fois des données et des informations *a priori*.
 - Valeurs estimées plus réalistes
 - Amélioration des performances du modèle
- Plusieurs méthodes sont possibles
 - Fixer certains paramètres à des valeurs « raisonnables ».
 - Borner les valeurs des paramètres.
 - Méthodes Bayésiennes (plus générales).