28 nov. – 1 déc. 2005 Formation INRA ACTA ICTA

La Rochelle

Estimation des paramètres des modèles
« Principes généraux »

David Makowski

UMR Agronomie INRA/INA-PG

makowski@grignon.inra.fr

Paramètres

$$f\left(x;\theta\right)$$

Les équations

Les variables d'entrée

<u>Les paramètres</u>

« ***Un paramètre*** *est une valeur numérique qui n'est pas calculé par le modèle et qui n'est pas une variable d'entrée mesurée ou observée* »

Estimation des paramètres

« consiste à approcher les valeurs des paramètres à partir *de données expérimentales* et/ou *d'informations issues de l'expertise* »

C'est important car

« Les *performances d'un modèle* vont dépendre de la méthode utilisée pour estimer les paramètres »

Trois problèmes d'estimation de complexité croissante

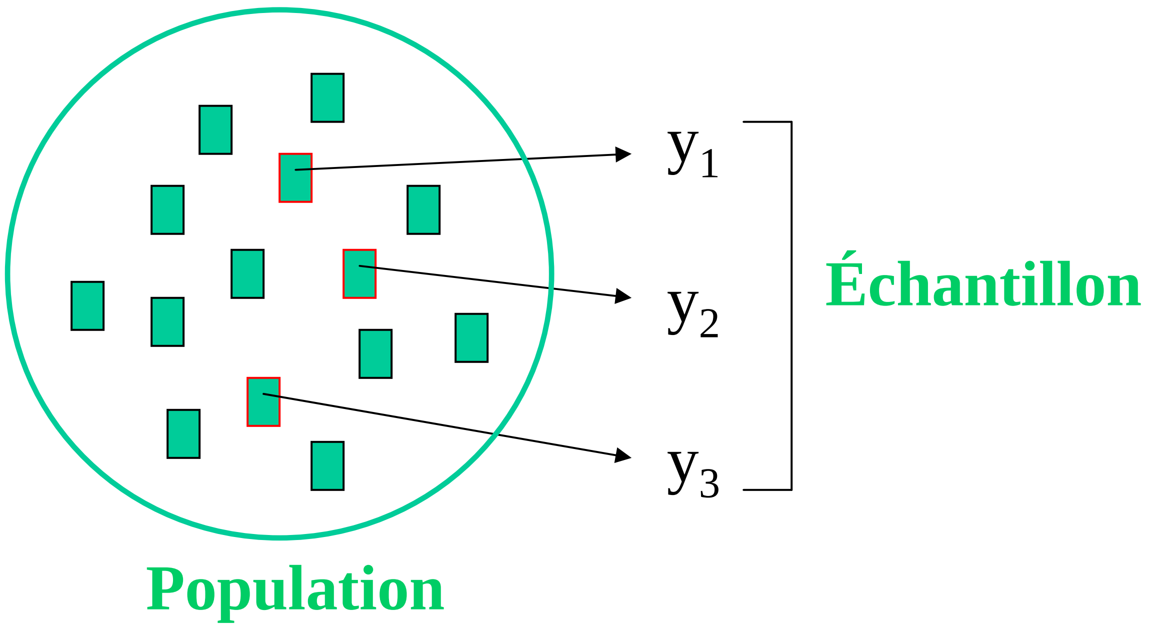
Pb.1: **Modèle linéaire avec un seul paramètre.**

Pb.2 : **Modèle linéaire avec 2 paramètres.**

Pb.3 : **Modèle non linéaire avec 18 paramètres.**

Problème 1

« Estimer le rendement moyen du colza en 2004 dans une petite région à partir de 3 mesures de rendement obtenues sur 3 parcelles »



Quels paramètres doit-on estimer ?

Un seul paramètre à estimer, le rendement moyen de la région noté θ.

Quelle information utiliser ?

Information disponible: un ***échantillon*** de trois mesures obtenues sur 3 parcelles de la ***population*** d'intérêt.

Quelle méthode d'estimation ?

Un estimateur du rendement de la parcelle est :

$$\hat{\theta} = \frac{y_1 + y_2 + y_3}{3}$$

Exemple :

- Si y_1=30, y_2=39 et y_3=35, la valeur estimée du rendement moyen est 34.7 q/ha.
- Si y_1=32, y_2=38 et y_3=39, la valeur estimée du rendement moyen est 36.3 q/ha.

« Un estimateur est une fonction qui relie le paramètre à des observations »

Cet estimateur est-il précis ?

$$E\left[\left(\hat{\theta}-\theta\right)^2\right]=\left[E\left(\hat{\theta}\right)-\theta\right]^2+\mathrm{var}\left(\hat{\theta}\right)$$

Erreur quadratique moyenne **Biais²** **Variance**

Cet estimateur est-il précis ?

a. Aspect théorique

« Sous certaines conditions, notre estimateur est ***sans biais*** et de ***variance minimale*** parmi les estimateurs sans biais »

Cet estimateur est-il précis ?

b. Variance de l'estimateur

On peut estimer $\mathrm{var}\left(\hat{\theta}\right)$ à partir des données

Exemple :

• Si y_1=30, y_2=39 et y_3=35, la valeur estimée de la variance est 6.78 q²/ha², soit e.t=2.6 q/ha.

• Si y_1=32, y_2=38 et y_3=39, la valeur estimée de la variance est 4.78 q²/ha², soit e.t=2.19 q/ha.

Problème 2

« *Estimer les paramètres du modèle f($x;\theta_1,\theta_2$)* »

$$f(x;\theta_1,\theta_2) = \theta_1 + \theta_2\, x$$

Azote absorbé par le colza

Dose d'engrais

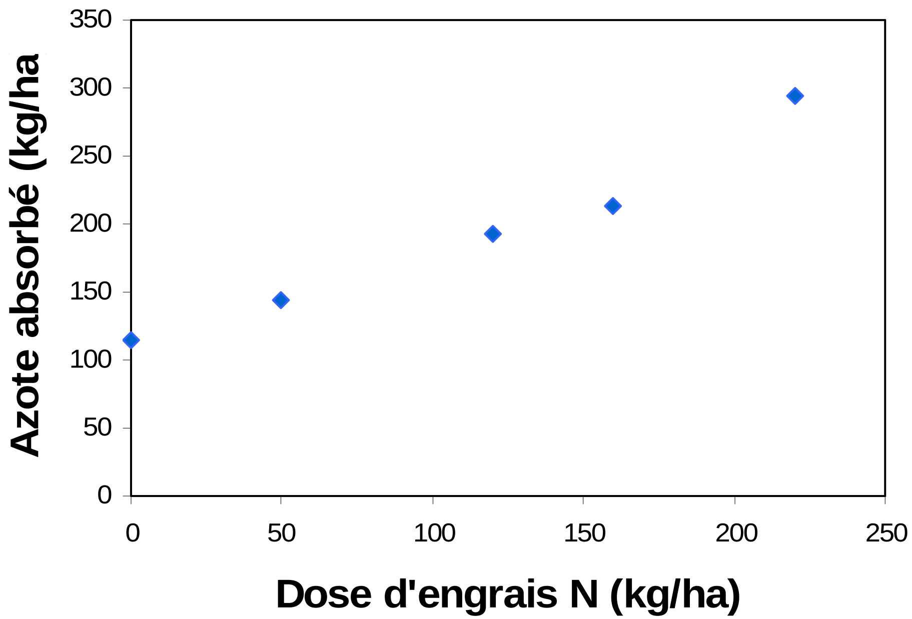
Le modèle simule l'azote absorbé en fonction de la dose d' engrais.

Quels paramètres doit-on estimer ?

Les deux paramètres du modèle: θ_1 et θ_2

Quelle information utiliser ?

Un ***échantillon*** de cinq mesures « d'azote absorbé » obtenues sur cinq parcelles de colza de la ***population*** d'intérêt (une région)



Quelle méthode d'estimation utiliser ?

La méthode des ***moindres carrés ordinaires***

Les estimateurs des paramètres sont les valeurs de θ_1 *et* θ_2 qui minimisent

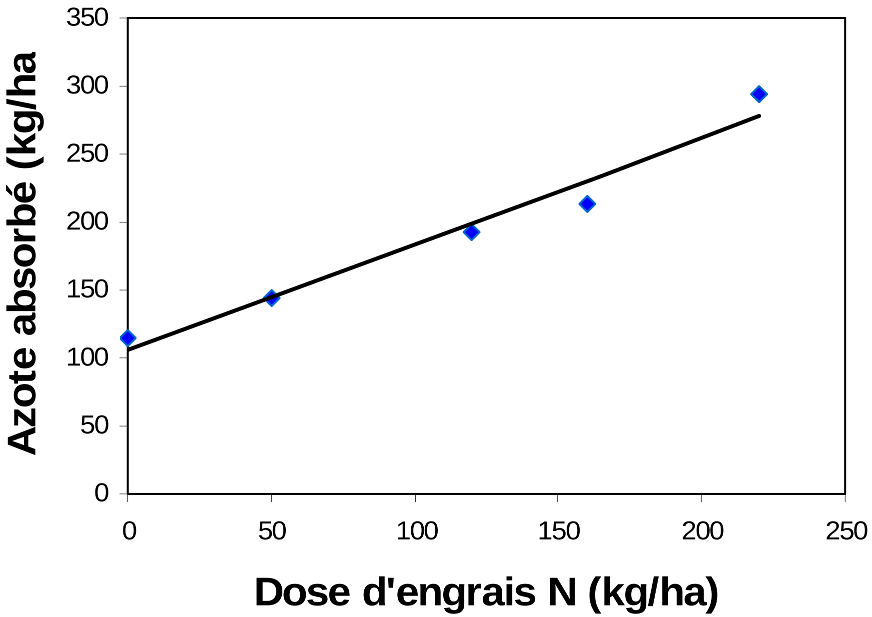
$$\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\theta_1-\theta_2 x_i\right)^2$$

C'est à dire

$$\hat{\theta}_2=\frac{\sum_{i=1}^{N}\left(y_i-\bar{Y}.\right)\left(x_i-\bar{X}.\right)}{\sum_{i=1}^{N}\left(x_i-\bar{X}.\right)^2} \qquad \hat{\theta}_1=\bar{Y}.-\hat{\theta}_2\,\bar{X}.$$

Estimation des paramètres des modèles

Ici, avec nos 5 mesures, on obtient $\hat{\theta}_1 = 106.01\ \mathrm{kg.ha^{-1}}$ **et** $\hat{\theta}_2 = 0.78\ \mathrm{kg.kg^{-1}}$



Ces estimateurs sont-ils précis ?

$$E\left[\left(\hat{\theta}-\theta\right)^2\right]=\left[E\left(\hat{\theta}\right)-\theta\right]^2+\mathrm{var}\left(\hat{\theta}\right)$$

Erreur quadratique moyenne **Biais²** **Variance**

Ces estimateurs sont-ils précis ?

a. Aspect théorique

« Sous certaines conditions, nos estimateurs sont ***sans biais*** et de ***variances minimales*** parmi les estimateurs sans biais ».

Il faut notamment :

- ***indépendance*** des résidus,
- ***homogénéité*** des variances des résidus.

Ces estimateurs sont-ils précis ?

b. Variances des estimateurs

On peut estimer $\text{var}\left(\hat{\theta}\right)$ à partir des données.

$$\sqrt{\text{var}\left(\hat{\theta}_1\right)} = 11.99 \ \ \text{kg.ha}^{-1}$$

$$\sqrt{\text{var}\left(\hat{\theta}_2\right)} = 0.09 \ \ \text{kg.kg}^{-1}$$

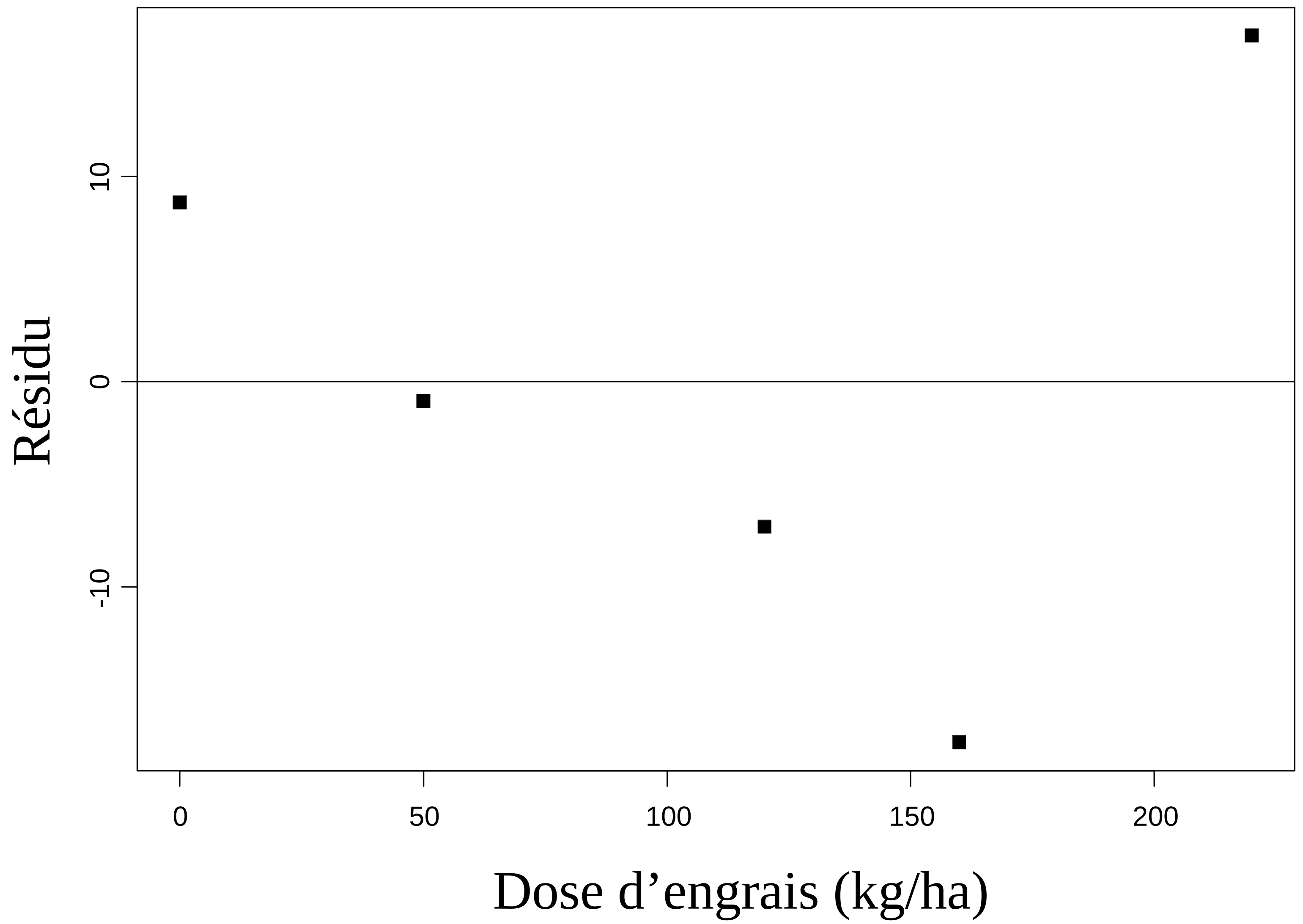
Ces estimateurs sont-ils précis ?

c. Analyse des résidus

$$r_i = y_i - \left(\hat{\theta}_1 + \hat{\theta}_2 x_i\right), \quad i = 1, \ldots, 5$$

Utile pour vérifier l'indépendance des résidus et l'homogénéité de leurs variances.

Estimation des paramètres des modèles



Programme S+

```
DOSE<-c(0,50,120,160,220)
NABS<-c(114.75,144.0,192.38,213,294.16)
DATA<-data.frame(DOSE,NABS)

Fit<-lm(NABS~DOSE,data=DATA)

print(summary(Fit))
plot(DOSE,Fit$residuals,ylab="Residu",ylab="Dose",pch=15)
abline(0,0)
```

Commentaires sur les problèmes 1 et 2

On procède en plusieurs étapes

1. **Quels paramètres estimer ?**
2. **Quelle information disponible ?**
3. **Quelle méthode d'estimation ?**
4. **Quelle est la précision des estimateurs ?**

Commentaires sur les problèmes 1 et 2

C'est facile car

- Modèles linéaires: $\theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_p x_p$

  → Relation analytique entre estimateurs et données connue.

- Nombre de données > Nombre de paramètres

- Un seul type de mesure

- Pas de prise en compte d'information *a priori*.

- On a des logiciels pour faire tout ça (SAS, S+, MatLab, ModelMaker…).

En pratique, c'est souvent plus compliqué

- Modèles non linéaires: $\neq \theta_0 + \theta_1 x_1 + \theta_2 x_2 + \ldots + \theta_p x_p$

  → Relation analytique entre estimateurs et données **inconnue**.

- Peu de données par rapport au nombre de paramètres

- Structure des données complexes

  → plusieurs types de mesures, mesures corrélées

- Information *a priori* parfois disponible.
- Utilisation des logiciels statistiques plus délicate.

Un problème beaucoup plus complexe

→ Modèle non linéaire.

→ Beaucoup de paramètres.

→ Information *a priori*.

→ Différents types de mesures obtenues sur plusieurs parcelles.

Problème 3

Estimer les paramètres du module « fonctionnement potentiel » du modèle AZODYN (Jeuffroy et Recous, 1999)

Variables simulées entre sortie hiver et floraison (pas de temps = jour):

- Matière sèche des parties aériennes du blé (kg/ha),
- azote absorbé (kg/ha),
- LAI.

Variables d'entrée:

- Rayonnement global journalier,
- température moyenne journalière de l'air,
- MS et azote absorbé sortie hiver

Problème 3

Quelques équations

$$MS_j = MS_{j-1} + \left(E_{b\max} \times ft_{j-1} \times Ei_{j-1} \times C \times RG_{j-1}\right)$$

$$Ei_{j-1} = E_{i\max}\left[1 - \exp\left(-K \times LAI_{j-1}\right)\right]$$

$$LAI_{j-1} = D \times QNc_{j-1}$$

$$MS_j = MS_{j-1} + \left\{E_{b\max} \times C \times E_{i\max}\left[1 - \exp\left(-K \times D \times QNc_{j-1}\right)\right] \times ft_{j-1} \times RG_{j-1}\right\}$$

18 paramètres

Paramètre	Signification	Valeur initiale	Gamme
Ebmax	Efficience de conversion du rayonnement	3.3 g/MJ	1.8-4
K	Coefficient d’extinction du rayonnement	0.72	0.6-0.8
D	Rapport LAI / N absorbé critique	0.028	0.02-0.045
Vmax	Vitesse maximale d’absorption d’N	0.5 kg/ha/dj	0.2-0.7
C	PAR/RG	0.48	
Tmin	Température minimale pour photosynthèse	0 °C	
Topt	Température optimale pour photosynthèse	15 °C	
Tmax	Température maximale pour photosynthèse	40 °C	
Eimax	Efficience d’interception du rayonnement	0.96	
Tep-flo	Durée entre épiaison et floraison	150 dj	
E	Paramètre de la courbe critique	1.55 t/ha	
F	Paramètre de la courbe critique	4.4 %	
G	Paramètre de la courbe critique	5.35 %	
H	Paramètre de la courbe critique	-0.442	
L	Paramètre de la courbe max	2 t/ha	
M	Paramètre de la courbe max	6 %	
N	Paramètre de la courbe max	8.3 %	
P	Paramètre de la courbe max	-0.44	

Les deux formes d'un modèle dynamique

Forme 1: Système dynamique

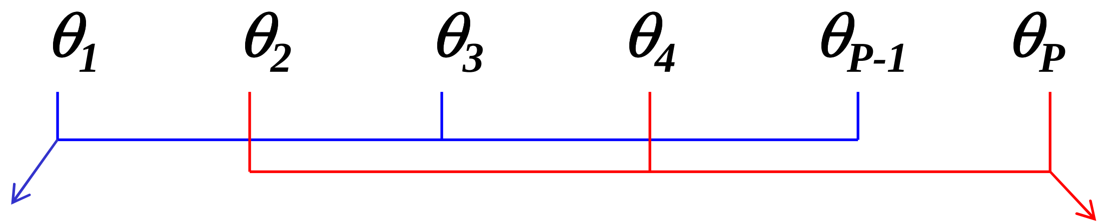
$$MS_t = MS_{t-1} + g\left(X_{t-1};\theta\right)$$

Forme 2 : Modèle de réponse

$$MS_t = f\left(t, X;\theta\right)$$

Quels paramètres estimer ?

Il est nécessaire de sélectionner les paramètres à estimer



Fixés aux valeurs de la littérature.

Estimés avec les données.

- **Problèmes numériques si on estime tous les paramètres.**

- **Même si on pouvait estimer tous les paramètres …**
  … il ne faudrait pas le faire.

Estimer beaucoup de paramètre → variances élevées des estimateurs.

→ augmentation des erreurs de prédictions.

Nouveau problème: Comment sélectionner les paramètres ?

i. **Utilisation de la littérature.**

ii. **Analyse des équations du modèle.**

iii. **Analyse de sensibilité.**

iv. **Sélection à l'aide de données.**

i. Utilisation de la littérature

« Identifier les paramètres dont les valeurs sont mal connues à partir de la littérature ».

Inconvénients :

- Approche assez subjective.

- Pas toujours de concordance entre les situations considérées dans les articles et celles qui intéressent l'utilisateur.

ii. Analyse des équations

« Identifier les paramètres qui ne peuvent pas être estimés simultanément ».

$$MS_j = MS_{j-1} + \left(E_{b\max} \times ft_{j-1} \times Ei_{j-1} \times C \times RG_{j-1} \right)$$

$$Ei_{j-1} = E_{i\max} \left[1 - \exp\left(-K \times LAI_{j-1} \right) \right]$$

$$LAI_{j-1} = D \times QNc_{j-1}$$

$$MS_j = MS_{j-1} + \left\{ E_{b\max} \times C \times E_{i\max} \left[1 - \exp\left(-K \times D \times QNc_{j-1} \right) \right] \times ft_{j-1} \times RG_{j-1} \right\}$$

Quels paramètres si on a uniquement des mesures de MS ?

Quels paramètres si on a uniquement des mesures de MS et de LAI ?

$$MS_j = MS_{j-1} + \left(E_{b\max} \times ft_{j-1} \times Ei_{j-1} \times C \times RG_{j-1}\right)$$

$$Ei_{j-1} = E_{i\max}\left[1 - \exp\left(-K \times LAI_{j-1}\right)\right]$$

$$LAI_{j-1} = D \times QNc_{j-1}$$

$$MS_j = MS_{j-1} + \left\{E_{b\max} \times C \times E_{i\max}\left[1 - \exp\left(-K \times D \times QNc_{j-1}\right)\right] \times ft_{j-1} \times RG_{j-1}\right\}$$

Uniquement des mesures de MS :

Impossible d'estimer simultanément

- les 3 paramètres $E_{b\max}, C, E_{i\max}$
- les 2 paramètres K, D

Mesures de MS et de LAI :

Impossible d'estimer simultanément les 3 paramètres $E_{b\max}, C, E_{i\max}$

iii. Analyse de sensibilité

« Sélectionner les paramètres qui ont une forte influence sur les variables simulées par le modèle ».

Inconvénients :

Il faut définir un seuil de sensibilité.

Ne permet pas de diagnostiquer les problèmes d'identifiabilité.

iv. Utilisation des données

« Sélectionner les paramètres qu'il faut estimer pour optimiser la qualité prédictive du modèle (Wallach et al., 2001) ».

Nb de paramètres estimés avec des données	MSEP*vc*
1	$MSEP_1$
2	$MSEP_2$
3	$MSEP_3$
…	…
P	$MSEP_P$

Sélection des paramètres qu'il faut estimer pour minimiser le MSEP

Quels paramètres estimer ?

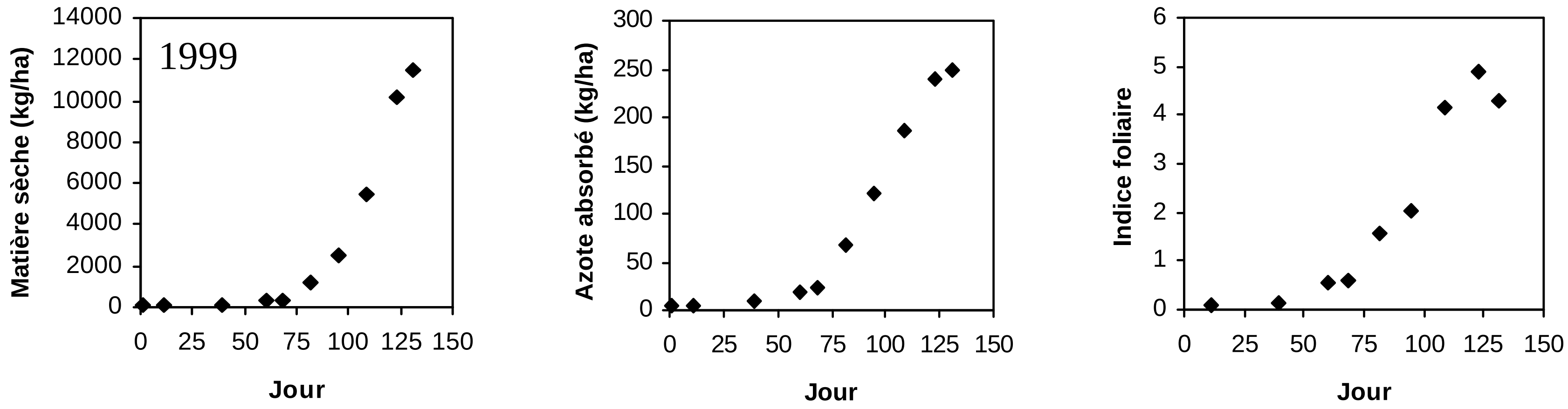
- **13 paramètres** sont fixés aux valeurs fournies par la littérature.
- **Un paramètre** est fixé après analyse des équations.
- **Quatre paramètres** sont estimés à partir des données : E_{BMAX}, D, K et V_{MAX}

Quelle information disponible ?

• Mesures de **matière sèches** des parties aériennes du blé, de **LAI** et **d'azote absorbé** obtenues à Grignon pour 6 années.

• Dix dates de mesure chaque année entre sortie-hiver et floraison.

• Trois répétitions à chaque date. On utilise les moyennes.



Quelle méthode d'estimation utiliser ?

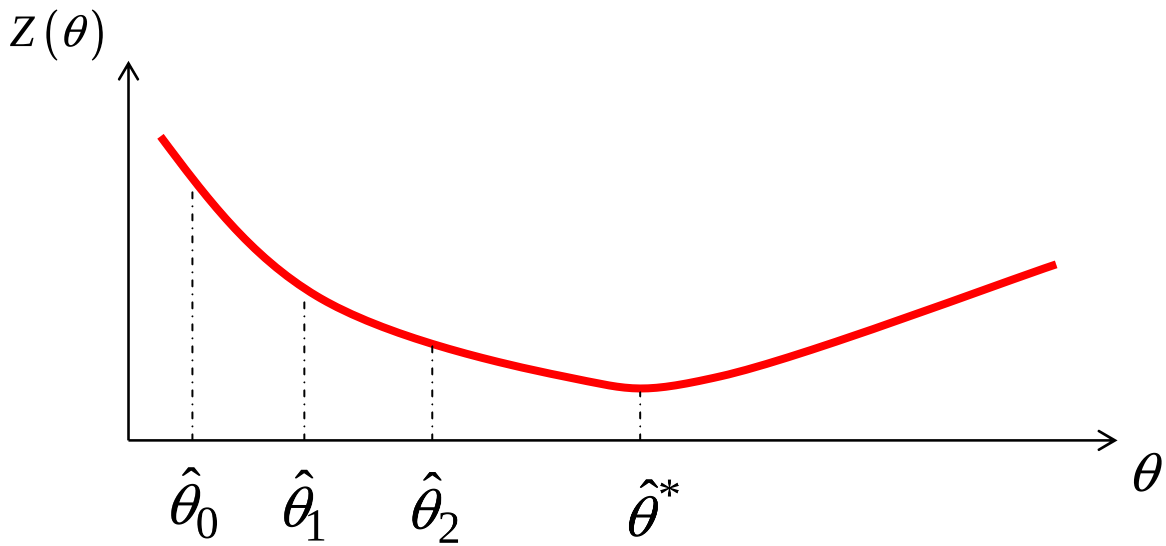
1er possibilité : La méthode des moindres carrés ordinaires

Trouver la valeur de θ qui minimise : $Z(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - f(t_i, x_i; \theta) \right]^2$

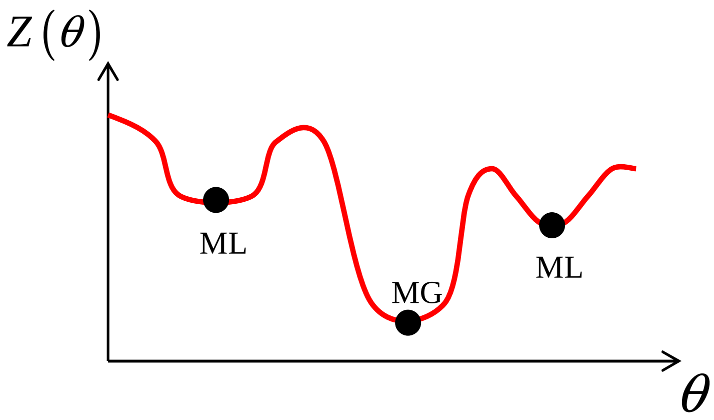
Problème :

- le modèle est non linéaire,
- on ne peut pas trouver l'expression analytique des estimateurs.

Appliquer la méthode des MCO avec un algorithme itératif



Minimum locaux et minimum globaux



→ **Essayez plusieurs valeurs initiales !**

Aspect pratique

• On peut utiliser un logiciel statistique (SAS, S+, MatLab, bibliothèques Fortran ou C++…)

• On donne :

- des données,
- un modèle,
- des valeurs initiales des paramètres.

• Le logiciel fournit en sortie les valeurs estimées des paramètres.

Quelle méthode d'estimation utiliser ?

1er possibilité : La méthode des moindres carrés ordinaires

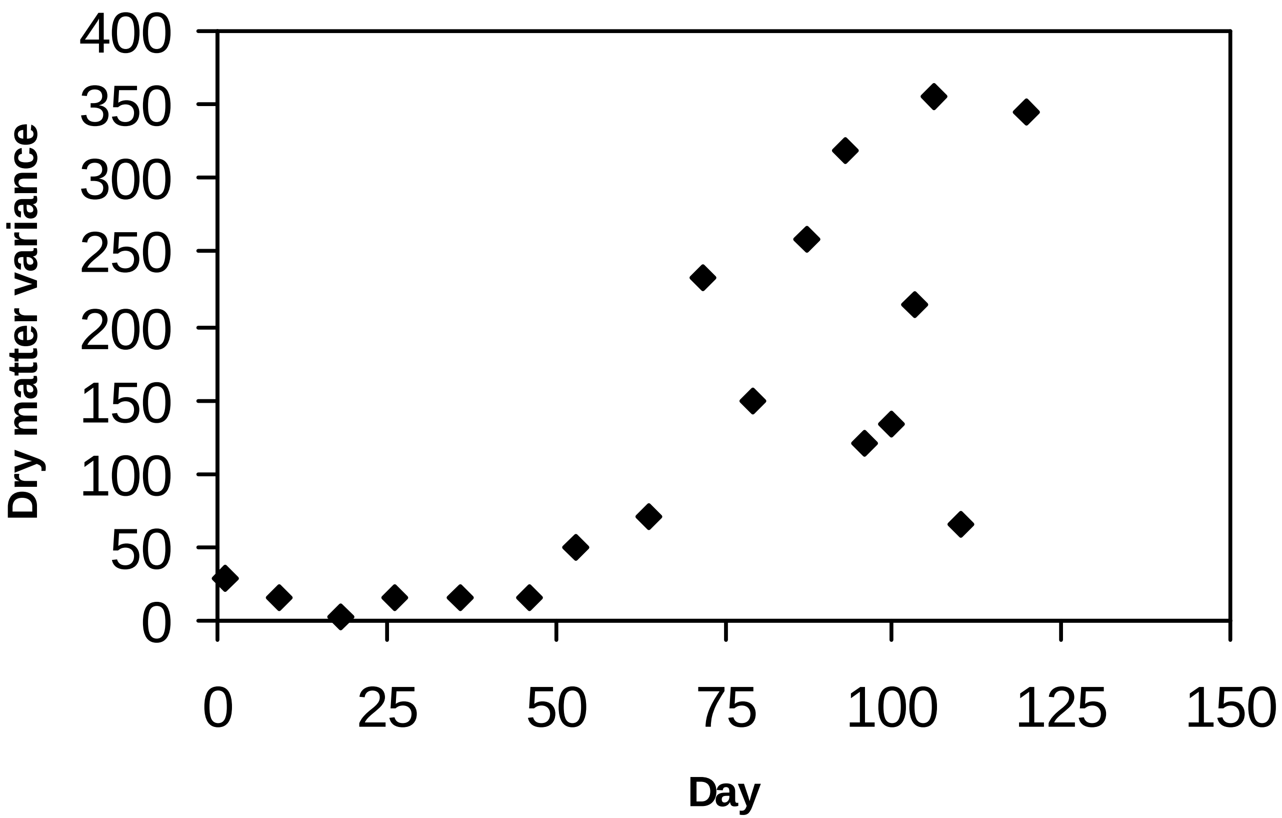
Trouver la valeur de θ qui minimise : $Z(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \left[y_i - f(t_i, x_i; \theta) \right]^2$

Inconvénient :

- Les estimateurs ne sont pas de variances minimales si les résidus ont des variances hétérogènes.

- Or, ici, il y a plusieurs types de mesures et la variance des mesures dépend de la date d'observation.

Les variances des mesures sont hétérogènes



Quelle méthode d'estimation utiliser ?

La méthode des moindres carrés pondérés

Trouver la valeur de θ qui minimise :

$$Z(\theta) = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left[y_i - f(t_i, x_i; \theta)\right]^2}{\sigma_i^2}$$

avec $\hat{\sigma}_i^2 = \dfrac{1}{K(K-1)} \sum_{k=1}^{K} (y_{ik} - y_i)^2$

Quelle méthode d'estimation utiliser ?

La méthode des moindres carrés pondérés

On minimise

$$Z_{MCP}(\theta) = \sum_{i=1}^{6}\sum_{j=1}^{10} \frac{\left[y_{ij}^{MS} - f^{MS}\left(t_j, x_i; \theta\right)\right]^2}{\hat{\sigma}_{MS.ij}^2} + \sum_{i=1}^{6}\sum_{j=1}^{10} \frac{\left[y_{ij}^{N} - f^{N}\left(t_j, x_i; \theta\right)\right]^2}{\hat{\sigma}_{N.ij}^2} + \sum_{i=1}^{6}\sum_{j=1}^{10} \frac{\left[y_{ij}^{L} - f^{L}\left(t_j, x_i; \theta\right)\right]^2}{\hat{\sigma}_{L.ij}^2}$$

$$\hat{\sigma}_{MS.ij}^2 = \frac{1}{K\left(K-1\right)} \sum_{k=1}^{K} \left[y_{ijk}^{MS} - y_{ij}^{MS} \right]^2$$

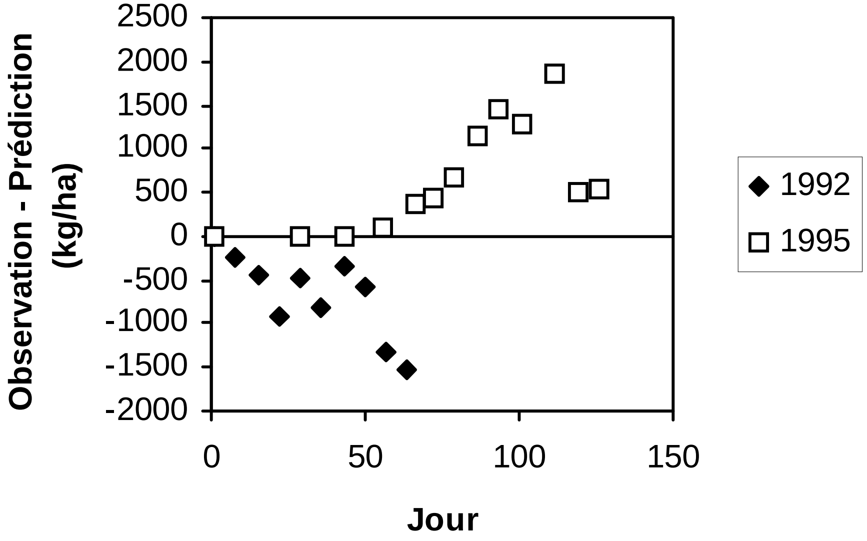
Application des moindres carrés pondérés pour estimer les 4 paramètres

Paramètre	Valeur initiale	Valeur estimée MCP
E_{BMAX} (g/MJ)	3.3	3.29 (0.11)
D	0.028	0.037 (0.06)
K	0.72	0.74 (0.001)
V_{MAX} (kg/ha/dj)	0.5	0.38 (0.02)

Ces estimateurs sont-ils précis ?

Analyse des résidus obtenus avec la méthodes des moindres carrés pondérés

Les résidus ne sont pas indépendants



Méthodes pour prendre en compte les corrélations

- Moindres carrés généralisés.
- Modèles mixtes.

Un dernier problème

Comment prendre en compte l'information *a priori* ?

• Jusqu'à présent, nos quatre paramètres sont estimés à partir des données, sans utiliser l'information a priori.

• Les ***méthodes Bayésiennes*** sont utiles pour estimer les paramètres à la fois à partir des données et de l'information a priori.

Conclusion

On procède en plusieurs étapes

1. Quels paramètres estimer ?

→ Dans les cas simples, on peut tout estimer.

→ Dans les cas complexes, il faut faire une sélection.

2. Quelle information disponible ?

→ Les données

→ Information a priori

3. Quelle méthode d'estimation ?

→ Moindres carrés ordinaires,

→ Moindres carrés pondérés/généralisés,

→ Méthodes Bayésiennes…

4. Quelle est la précision des estimateurs ?

→ Aspects théoriques, variances, résidus.