

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

1

Dans ce deuxième exposé, je vais me concentrer sur un problème particulier qui se pose souvent lorsqu'on cherche à estimer des paramètres qui ont une signification biologique ou physique.

On dispose en effet de deux types d'information pour estimer de tels paramètres:

- (i) une base de données incluant une série de mesures d'une ou plusieurs variables simulées par le modèle,
- (ii) des informations directement sur les valeurs des paramètres, information venant d'articles scientifiques ou d'expertise.

On appellera ce deuxième type d'information, information a priori par la suite.

La question qui nous intéresse ici est Comment combiner ces deux types d'information.

Je vais aborder ce problème complexe et encore assez ouvert à travers un modèle particulier.

Estimation des paramètres des modèles

Les différents 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.

2

Estimation des paramètres des modèles

**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.**

3

Pourquoi est il intéressant ce combiner ces deux types d'information ?

En conclusion c'est souvent utile pour les modèles complexes mais aussi pour les modèles simples lorsque le ratio ...

Estimation des paramètres des modèles

Trois approches

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

4

Je vais successivement vous présenter trois approches pour combiner observations et info a priori... La dernière approche peut être vue comme une généralisation des deux premières.

Estimation des paramètres des modèles

Cas d'étude: Le modèle

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

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

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

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

5

Pour illustrer ces trois approches, je vais considérer un modèle de culture dynamique qui s'appelle MiniSTICS et qui simule... Ce modèle peut s'écrire soit sous la forme d'un système dynamique, soit sous la forme d'un modèle de réponse.

On considère dans la suite la forme Modèle de réponse.

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 the 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, 216.8

Le modèle inclut 14 paramètres.

On dispose pour chaque paramètre d'une valeur centrale et d'une gamme de variation définie à dire d'expert.

Ces valeurs constituent notre information *a priori* sur les valeurs des paramètres.

Estimation des paramètres des modèles

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

7

Voici le deuxième type d'information disponible pour estimer les paramètres.

Il s'agit de 14 mesures de LAI obtenues à une date donnée (jour 20) sur 14 parcelles différentes au sein d'une région.

Estimation des paramètres des modèles

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.

8

Je vais maintenant vous présenter trois méthodes qui ont été successivement appliquées pour estimer les paramètres de MiniSTICS à partir des deux types d'information disponibles.

La première méthode consiste à fixer les valeurs de certains paramètres et à estimer les autres à l'aide des données.

...

Estimation des paramètres des modèles

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.

9

On a vu dans mon première exposé une série de méthodes pour sélectionner les paramètres à estimer.

On utilise ici une de ces méthodes. Il s'agit de la sélection ascendante des paramètres pour minimiser les erreurs de prédiction.

Une fois la sélection réalisée, les paramètres non sélectionnés sont fixés aux valeurs centrales fournies par les experts. Cf tableau.

Les paramètres sélectionnés sont estimés par les MC.

Estimation des paramètres des modèles

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

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

10

Voici maintenant quelques détails sur la mise en œuvre de la méthode.

L'étape 1 est réalisée de la façon suivante.

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



11

...

A la fin de cette étape, on sait que si on veut estimer un seul paramètre, c'est TCMIN qu'il faut choisir.

Par contre, on ne sait pas si on a intérêt à estimer un autre paramètre que celui ci. Doit on estimer TCMIN et TCOPT ? TCMIN et ADENS ?

On n'en sait rien.

Pour répondre à cette question, réalise une deuxième série de calculs.

Estimation des paramètres des modèles

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.

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

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

12

Estimation des paramètres des modèles

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

13

A ce stade, on sait que, si on veut estimer deux paramètres, il est préférable d'estimer TCMIN et ADENS.

On sait également grâce à la première série de calcul que, si on veut estimer un seul paramètre c'est TCMIN qu'il faut choisir.

Par contre, on ne sait pas si on a intérêt à estimer TCMIN seul ou TCMIN et ADENS, ou s'il faut estimer plus de deux paramètres.

On répète donc la procédure avec 3, 4, 5 ...paramètres.

Je ne détaille pas ces calculs qui sont similaires.

Voici les résultats...

Estimation des paramètres des modèles

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

14

La dernière étape consiste à savoir combien de paramètres doivent être sélectionnés.

On connaît déjà le meilleur modèle à 1 paramètre estimé avec les données, à 2 paramètres, ... Lequel choisir ?

MSEP

Estimation des paramètres des modèles

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 $< 0^{\circ}\text{C}$

15

Estimation des paramètres des modèles

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.



16

...

Cette méthode ressemble à la méthode A. La différence est qu'ici les paramètres sélectionnés sont estimés à partir des données mais sous contrainte. Leurs valeurs ne peuvent pas sortir des bornes définies par l'utilisateur. Dans la méthode A, il n'y avait pas de bornes.

Estimation des paramètres des modèles

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

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

avec comme contraintes $4.26 \leq TCMIN \leq 9.94$

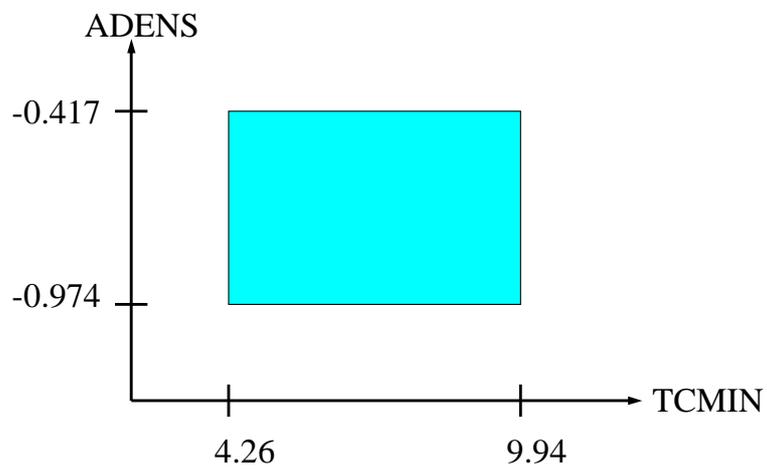
$$-0.974 \leq ADENS \leq -0.417$$

17

Les paramètres choisis sont ceux sélectionnés lorsqu'on a appliqué la méthode A.

Estimation des paramètres des modèles

Méthode B: Exemple



18

On cherche dans le rectangle bleu des valeurs de ADENS et de TCMIN qui minimisent SCE.

Estimation des paramètres des modèles

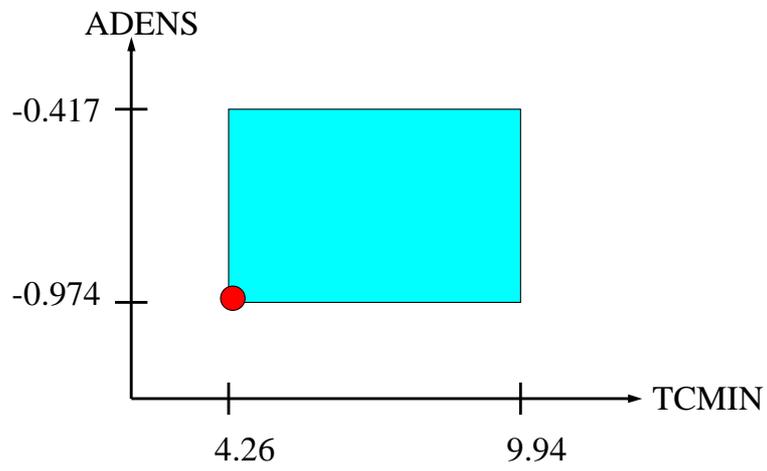
Méthode B: Exemple

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

19

Estimation des paramètres des modèles

Méthode B: Exemple



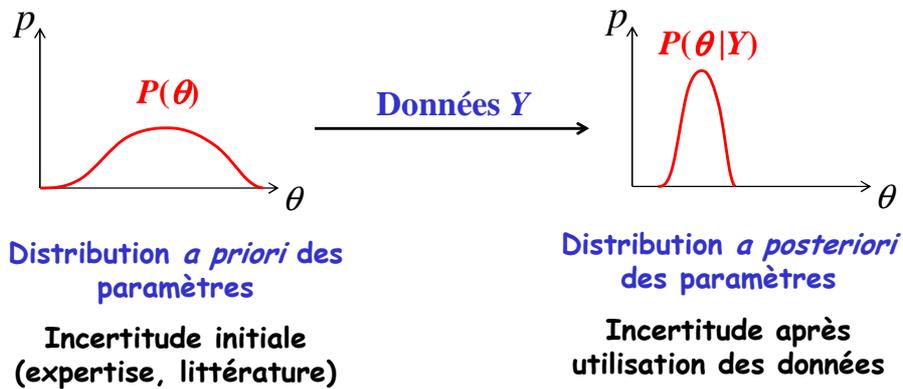
20

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



22

Jusqu'à présent, on considérait que les paramètres avaient une valeur fixe et on cherchait à estimer cette valeur.

Dans l'approche Bayésienne, on considère que les paramètres sont des variables aléatoires.

On définit une distribution a priori qui décrit notre niveau de connaissance initiale sur les paramètres. Cette distribution reflète un niveau d'incertitude initial.

Puis on utilise des données Y pour modifier cette distribution et on calcule une distribution a posteriori. Cette distribution reflète un niveau d'incertitude après utilisation des données.

L'objectif des méthodes Bayésiennes est de déterminer les caractéristiques de la distribution a posteriori.

Estimation des paramètres des modèles

Principe des méthodes Bayésiennes

Le théorème de Bayes

Distribution *a posteriori* Vraisemblance Distribution *a priori*

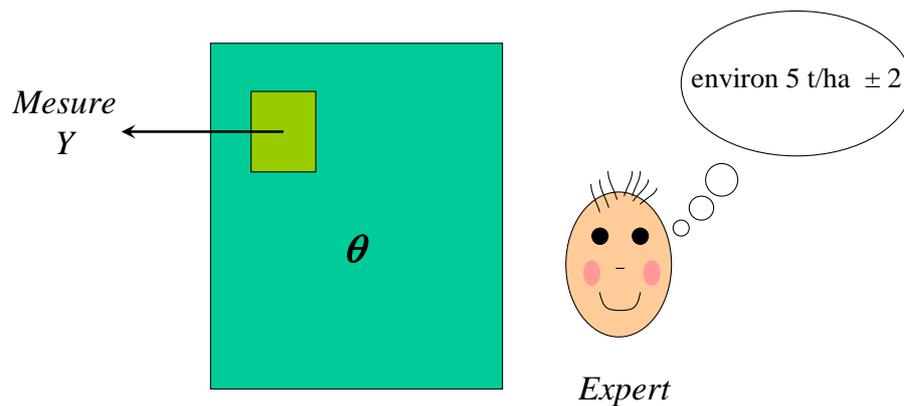
$$P(\theta|Y) = \frac{P(Y|\theta)P(\theta)}{P(Y)}$$

23

Estimation des paramètres des modèles

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



24

Je vais illustrer l'approche Bayésienne avec un exemple simple avant de l'appliquer au modèle MiniStics.

L'objectif est d'estimer un seul paramètre le rendement d'une parcelle en t/ha.

On dispose de deux informations pour cela: Une mesure réalisée sur une placette et l'avis d'un expert.

Un exemple simple

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

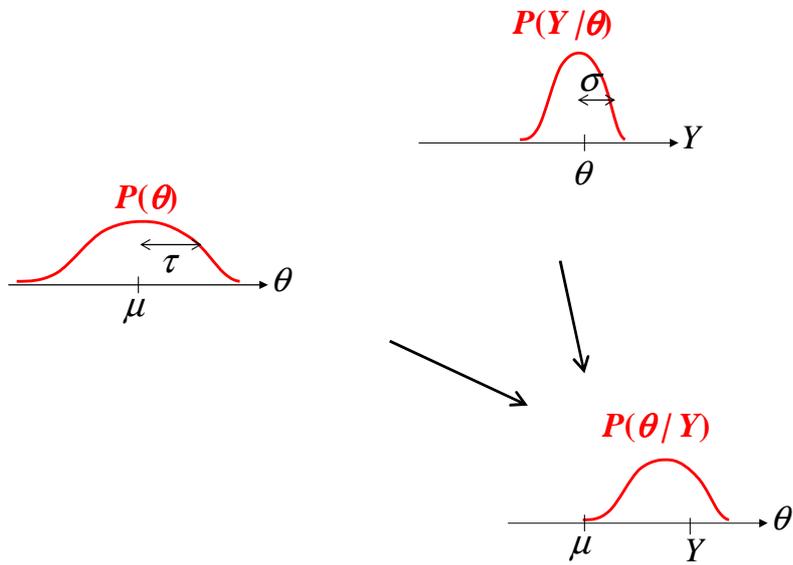
$$P(\theta) = N(\mu, \tau^2)$$

- **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*

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

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

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

Estimation des paramètres des modèles

Un exemple simple, application numérique

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

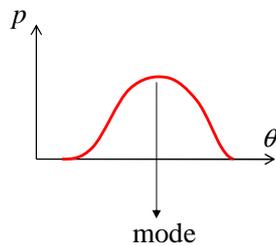
28

Estimation des paramètres des modèles

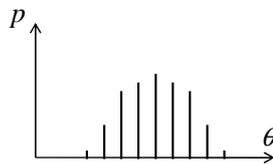
L'estimation des paramètres des modèles non linéaires avec une méthode Bayésienne est plus délicate

- 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*.

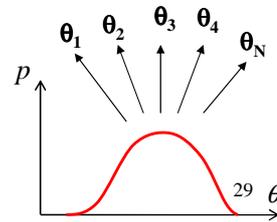
1. Calcul du mode



2. Discrétisation

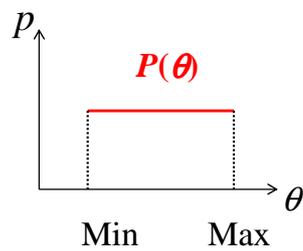


3. Génération de valeurs de paramètres



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

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

31

Deux parties:

- Une partie qui correspond au critère des moindres carrés.
- Une partie qui mesure la distance entre les paramètres et les valeurs moyennes fournies par l'expert.

Cette méthode pénalise les valeurs des paramètres qui s'éloignent trop des valeurs moyennes fournies par l'expert.

Cette méthode aura tendance à fournir des estimations qui seront plus proches des valeurs moyennes fournies par l'expert que les estimations des méthodes de type moindre carrés.

Un intérêt est qu'avec cette méthode, on va pouvoir limiter les risques d'obtenir des valeurs de paramètres peu réalistes.

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

32

Une application de cette dernière méthode a été réalisée avec MiniSTICS.

On a estimé les 14 paramètres du modèle et les valeurs sont assez réalistes. On n'obtient pas de valeur négative pour TCMIN

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).