Évaluation de modèles déterministes complexes

François Husson

husson@agrocampus-ouest.fr

UP de mathématiques appliquées
Institut Agro - Rennes

Plan

- Introduction sur les modèles
- Présentation d'un modèle de croissance de colza et de la problématique associée
- Évaluation du modèle avec des données indépendantes des données utilisées pour la construction du modèle
  - Choix des données permettant l'évaluation
  - Présentation des méthodes permettant l'évaluation
- Évaluation du modèle avec les mêmes données que celles utilisées pour la construction du modèle
- Discussion

Introduction

Modèles de simulation :

- représentation simplifiée de phénomènes réels
- outils de réflexion et de synthèse pluridisciplinaire
- critères de prévision, et plus récemment, comme outils de test

Quelle que soit l'utilisation du modèle, nécessité de vérifier sa qualité : **étape d'évaluation**
Décisions prises à partir d'un modèle non validé $\Longleftrightarrow$ décisions prises sans modèle

All models are false, some are useful (George E. P. Box)

Introduction

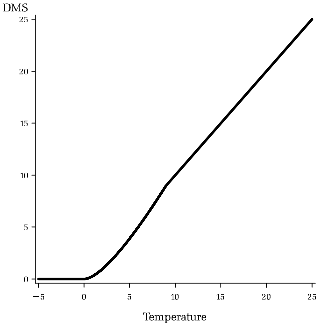
Production de colza (1996) = 2 800 000 tonnes sur 850 000 ha
(2009) = 5 300 000 tonnes sur 1 500 000 ha

Culture gourmande en azote $\Rightarrow$ risque de pollution par les nitrates
$\Longrightarrow$ Doses d'azote doivent optimiser le rendement et minimiser les lessivages des nitrates

Description du modèle CECOL

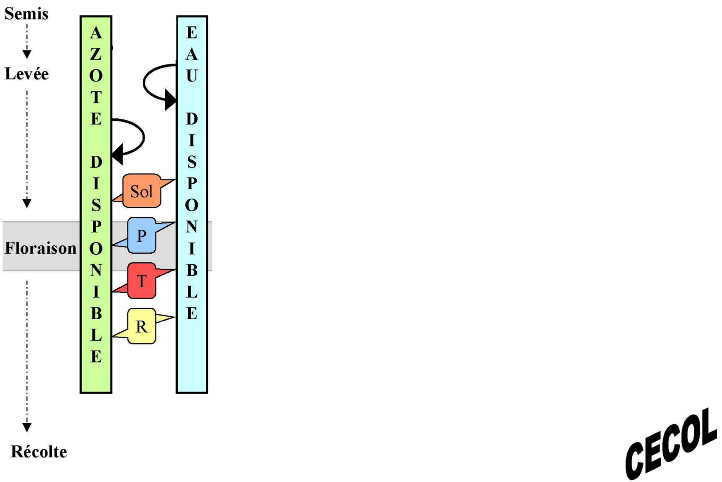
CECOL : modèle de croissance du colza d'hiver

- Modèle complexe
- Construit comme beaucoup de modèles agronomiques
- Modèle sol (CERES-N Maize) + un modèle plante (Colibri)
- 2000 lignes de Fortran, 69 paramètres « plante »
- Équations non linéaires

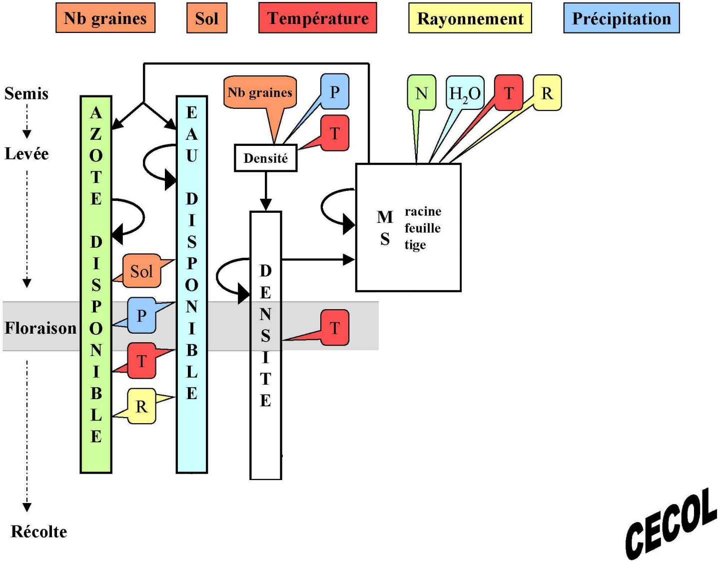


Description du modèle CECOL

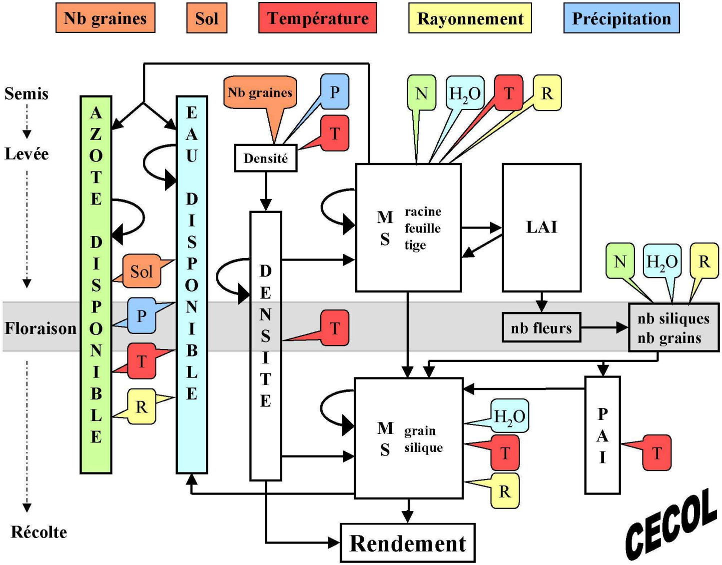
Nb graines | Sol | Température | Rayonnement | Précipitation



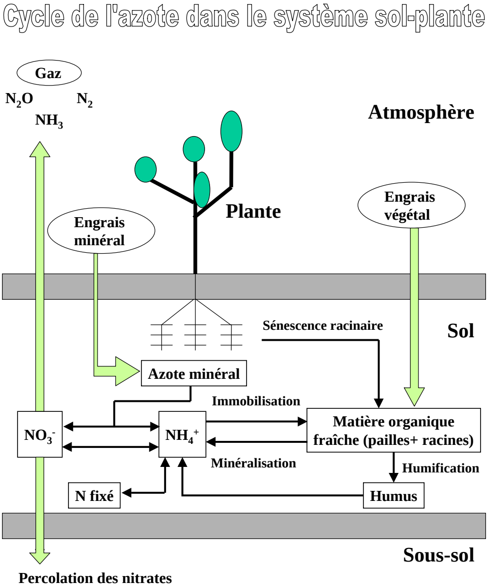
Description du modèle CECOL



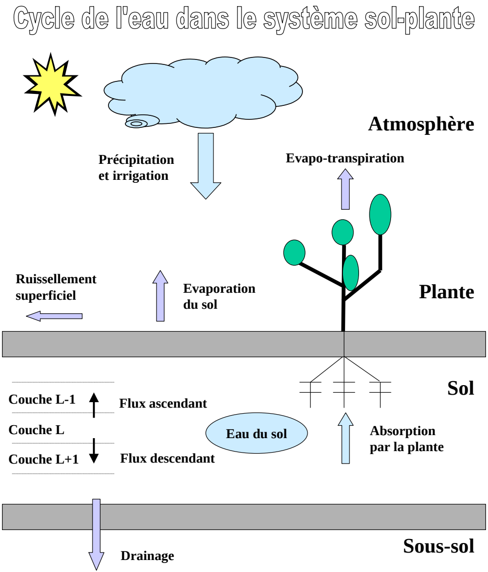
Description du modèle CECOL



Description du modèle CECOL



Description du modèle CECOL



Évaluation

L'évaluation d'un modèle est :

- toujours **indispensable** avant d'utiliser un modèle
- parfois laissée de côté, souvent très succincte
- dépend des applications et de l'utilisation du modèle
- pourtant : bonne évaluation donne des pistes pour améliorer le modèle

$\Longrightarrow$ **But** : proposer une démarche (*i.e.* plusieurs techniques complémentaires) permettant de valider des modèles complexes linéaires, non linéaires, dynamiques, statiques, mécanistes

But n'est pas l'acceptation ou le rejet du modèle, mais l'évaluation des qualités du modèle

Définition du modèle

y : résultat d'un phénomène complexe, dépend de paramètres (notés β) et de variables explicatives (noté x)

Exemple : y rendement de maïs, un des β est le coefficient de conversion de la lumière et des x sont les données météo

y est prédite par une fonction de β et de x notée $f(\beta, x)$
f : une seule équation ou résultat de nombreuses équations

Hypothèses :

- tous les paramètres ont été estimés par des expériences antérieures $\Longrightarrow \hat{\beta}$ est un vecteur aléatoire
- les variables explicatives sont connues

$$y = f(\hat{\beta}, x) + \hat{e}$$

Rappels sur la régression multiple

Définition du modèle : $y_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + ... + \beta_p x_{ip} + \varepsilon_i$

avec $\mathcal{L}(\varepsilon_i) = \mathcal{N}(0, \sigma)$ et $cov(\varepsilon_i, \varepsilon i') = 0 \ \ \forall i' \neq i$

Estimation des paramètres : $\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'Y$

Critère : $R^2 = \frac{\sum_i (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i (y_i - \bar{y})^2}$

Pb : $R^2 \nearrow$ quand nb de variables explicatives $\nearrow$
$\Longrightarrow$ utilisation du test de significativité du R^2 :

$$\frac{R^2}{1-R^2} \frac{n-p-1}{p} \sim F^p_{n-p-1} \text{ sous l'hypothèse } R^2 = 0$$

Quelles données choisir pour l'évaluation ?

- Déterminer le **domaine d'évaluation** du modèle
  Sur ce domaine, tests et évaluation ; en dehors, extrapolations
- Données représentatives de tout le domaine, sinon extrapolations
- Données dépendent de l'utilisation du modèle : pour gestion de l'azote, données précisément enregistrées et suffisamment différentes pour cette variable
- Données de validation indépendantes des données ayant servi à estimer les paramètres, sinon :
  - si données nombreuses, les séparer en 2 groupes indépendants : 1 pour l'estimation, l'autre pour l'évaluation
  - si données peu nombreuses : validation croisée ou Jackknife
- Données sur des variables intermédiaires permettent de tester certaines équations ou parties du modèle
- Données nombreuses $\Longrightarrow$ évaluation + précise

Description des données

- 321 traitements dont 9 ayant des répétitions
- 2 variétés : Bienvenu, Darmor
- Essais sains : ni maladie, ni ravageurs
- 12 sites-années (10 à 72 traitements par site-année)

Lieu	année	nb d'essais
Cher	84-85	57
	85-86	10
Haute Garonne	85-86	23
	86-87	19
	87-88	19
Indre	84-85	72
	86-87	15
Meurthe et Moselle	84-85	2
	85-86	55
	86-87	40
	87-88	54

Description des données

Variable modèle	Valeur mini	Valeur maxi
Date semis	20 août	15 octobre
Dose semis	47	80
Dose azote automne	0	115
Dose azote printemps	0	220
Dose azote tardif	0	80
Dose azote total	50	395
Profondeur de sol	30	150
Jour floraison	5 avril	14 mai
Poids 1000 grains	3.20	6.00
Rendement observé	1.999	5.132

Gammes de variations importantes sauf pour les doses de semis

Analyse de la variance

Utiliser les répétitions pour estimer la qualité des données
Les traitements donnent-ils des rendements significativement différents ?

$$y_{ik} = \mu + \alpha_i + \varepsilon_{ik}$$

μ effet moyen, α_i effet du traitement i, ε_{ik} la résiduelle

On teste l'hypothèse nulle : $H_0 : \forall i \;\; \alpha_i = 0 \;\; contre \;\; H_1 : \exists i \;\; \alpha_i \neq 0$

$$\text{Statistique de test : } \; F_{obs} = \frac{SCM/(I-1)}{SCR/(N-I)} = 2.19$$

Si H_0 vraie, $\mathcal{L}(F_{obs}) = F_{N-I}^{I-1}$
Accepter H_0 signifie que les traitements donnent des rendements similaires ($\Longrightarrow$ évaluation sur un domaine très restreint)
$F_{obs} > F_{45}^{8}(0.95)$ donc rejet de H_0. Les traitements ont un effet significatif sur les rendements observés

Description du modèle

Modèle statistique utilisé est hiérarchique :

$$y_{ijkl} = f(\hat{\beta}, x_{ij}) + \hat{e}_{ijkl}$$

y_{ijkl} : observation
$f(\hat{\beta}, x_{ij})$: prédiction par CECOL
$\hat{e}_{ijkl}$: erreur de prédiction du modèle

- i : numéro de la variable explicative prépondérante (le site-année)
- j : numéro de la combinaison des niveaux des variables explicatives utilisées par le modèle (variété, date de semis, 3 apports d'azote, irrigation)
- k : numéro de la combinaison des niveaux des variables explicatives non utilisées par le modèle (fongicide, régulateur de croissance, insecticide, soufre)
- l : numéro de la répétition

Utilisation de l'analyse de sensibilité

AS = étude de sensibilité du modèle aux valeurs de ses paramètres
Buts :

- Comprendre le comportement du modèle
- Déterminer les paramètres influents du modèle
- N'évalue pas directement la qualité du modèle
- Utile pour extension ou mise à jour du modèle

  On calcule $\kappa = f(\hat{\beta}, x) - f(\hat{\beta} + \eta, x)$ avec $\eta << \hat{\beta}$

κ grand $\Longrightarrow$ paramètre(s) sensible(s) à estimer précisément
η a p composantes non nulles si on évalue la sensibilité à p paramètres simultanément
Résultats de l'AS dépendent des $x \Longrightarrow$ explorer tout le domaine d'évaluation. Ex : paramètre de stress hydrique sans effet dans climat pluvieux et déterminant dans climat sec

Simulations en conditions tranchées

Buts :

- Étudier le comportement du modèle dans conditions particulières
- Évaluation qualitative : pas de comparaison aux observations mais aux connaissances générales sur le phénomène étudié
- Simulations en conditions tranchées et AS se ressemblent : ici, variables explicatives varient et non paramètres

Comparaison des prédictions en conditions « normales » et extrêmes : souvent difficile mais la tendance suffit (à dire d'experts)

Simulations en conditions tranchées

Climat	Prof sol (cm)	Date semis	Dens semis	Qté d'N $u.ha^{-1}$	Date floraison	MS flo $t.ha^{-1}$	Rdt $t.ha^{-1}$
Sans stress	70	15 sep	60	200	07 avr	11.10	4.20
Sans stress	18	15 sep	60	200	07 avr	7.62	3.21
Sans stress	70	31 oct	60	200	12 mai	8.62	3.34
Sans stress	70	2 août	60	200	24 mar	10.39	3.59
Sans stress	70	15 sep	5	200	07 avr	10.91	4.15
Sans stress	70	15 sep	60	0	07 avr	5.88	3.67
Sans stress	18	15 sep	60	0	07 avr	3.22	2.72
Sec	18	15 sep	60	200	13 avr	6.62	2.12
Froid	70	15 sep	60	200	13 mai	3.77	2.92

Construction de courbes prédit/observé

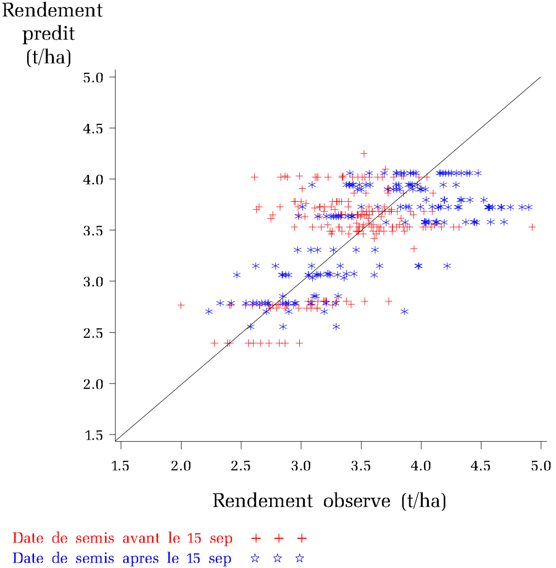
Buts :

- repérer données aberrantes
- avoir une idée de la réponse du modèle
- Déterminer si l'effet d'une variable particulière est bien pris en compte par le modèle

Avantages :

- Simples à établir
- Possibilité de construction en fonction de variables influentes (date de semis ou doses d'apport d'azote)

Construction de courbes prédit/observé



Construction de courbes prédit/observé

Hypothèse H_0 : « *dans la régression des valeurs observées par les valeurs prédites, la pente est de 1 et l'ordonnée à l'origine de 0* »

$$y_{ik} = \beta_0 \times f(\hat{\beta}, x_i) + \beta_1 + \varepsilon_{ik}$$

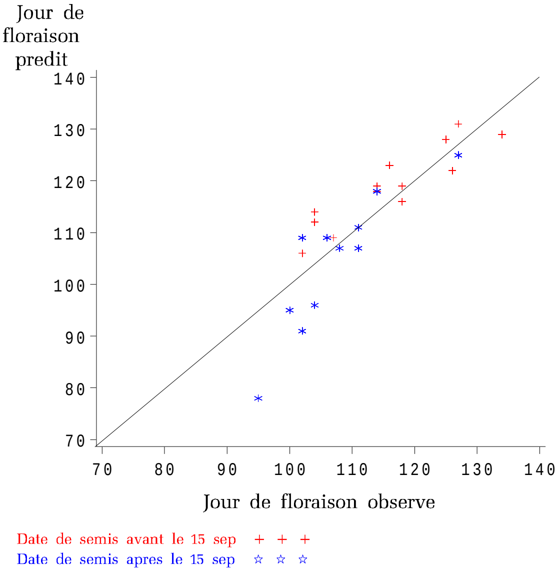
$$SCR = \sum_{ik} \left(y_{ik} - \hat{\beta}_0 \times f(\hat{\beta}, x_i) + \hat{\beta}_1 \right)^2 = \sum_{ik} \hat{\varepsilon}_{ik}^2$$

$$\text{Sous } H_0, \beta_0 = 1 \text{ et } \beta_1 = 0 \text{ donc } SCM = \sum_{ik} \left(y_{ik} - f(\hat{\beta}, x_i) \right)^2$$

$$\text{Statistique de test :} U = \frac{(SCM - SCR)/2}{SCR/(n-2)}$$

Sous H_0, U suit une loi de Fisher $F_{2,n-2}$. On accepte l'hypothèse *la pente est de 1 et l'ordonnée à l'origine de 0* si $U < F^2_{n-2}(0.95)$

Construction de courbes prédit/observé



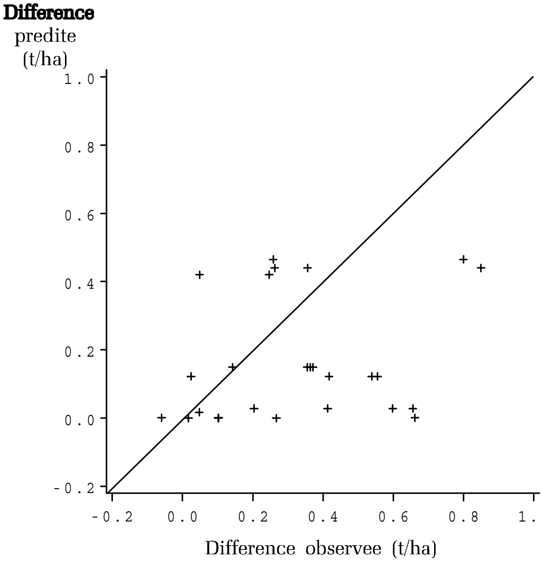
Construction de courbes

But : déterminer si l'effet d'une variable particulière est bien pris en compte par le modèle :

- on ne s'intéresse pas à la justesse des prévisions
- étape importante si utilisation du modèle pour rechercher une conduite optimale

On trace le graphe :
$y_{ijt} - y_{ijs}$ en fonction de $f(\hat{\beta}, x_{ijt}) - f(\hat{\beta}, x_{ijs})$
avec s et t les deux modalités de la variable particulière

Construction de courbes prédit/observé



Critères d'évaluation

Définition	Notation	Equation
Coefficient de détermination	R^2	
Modelling Efficiency	EF	$1 - \frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2}$
Moyenne de la valeur absolue de l'erreur	MAE	$\frac{\sum \lvert y_i - \hat{y}_i \rvert}{n}$
% moyen de la valeur absolue de l'erreur	MA%E	$\frac{100}{n} \sum \left(\frac{\lvert y_i - \hat{y}_i \rvert}{\lvert y_i \rvert} \right)$
Racine de la moyenne du carré des erreurs	RMSE	$\sqrt{\frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}}$
Erreur quadratique moyen relatif	RRMSE	$\frac{100}{\bar{y}} \sqrt{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}$
Erreur quadratique moyenne de prédiction	MSEP	$\frac{\sum(y_i - \hat{y}_i)^2}{n}$

R^2 et EF proche de 1 $\iff$ modèle très bon

MAE plus robuste que *RMSE* aux valeurs extrêmes des résidus

Évaluation des qualités prédictives du modèle $\Longrightarrow$ MSEP

MSEP

Avantages de la MSEP :

- répond à l'objectif d'évaluation du modèle en tant que prédicteur (MSEP mesure la qualité de prédiction et non la qualité d'ajustement aux données du passé)
- signification précise :
  - $MSEP = 0 \iff$ prédiction parfaite
  - $MSEP >> 0 \implies$ modèle très mauvais prédicteur
- peut servir de critère de comparaison entre modèles
- se décompose en différentes contributions spécifiques de l'erreur
- se calcule simplement si les données d'évaluation sont indépendantes des données d'estimation

$$MSEP = \frac{\sum (y_i - \hat{y}_i)^2}{n} = 0.2241\ (t\ ha^{-1})^2$$

Hypothèse : $\hat{\beta}$ estimé par données indépendantes

MSEP du modèle « Moyen »

But : comparer qualités prédictives CECOL et modèle simple
Idée : variance des rendements faible $\Longrightarrow$ rendement moyen est une bonne estimation du rendement (pb d'extrapolation)

$$y_{ijkl} = \mu + \delta_{ijkl}$$

$$MSEP_M = E\left((y^* - \hat{\mu})^2\right) = E\left((\mu + \delta_{i'j'k'l'} - \hat{\mu})^2\right)$$

$$\hat{\mu} = \frac{1}{n}\sum_{i,j,k,l} y_{ijkl} \Rightarrow E(\widehat{\mu}) = \mu \quad , \quad Var(\hat{\mu}) = \frac{1}{n^2} n \, \sigma_\delta^2 = \frac{1}{n} \, \sigma_\delta^2$$

$$MSEP_M = Var(\hat{\mu}) + \sigma_\delta^2 = \frac{n+1}{n}\sigma_\delta^2$$

$$\widehat{MSEP}_M = 0.3325 \; (t \;\; ha^{-1})^2$$

$$\widehat{MSEP}_{Cecol} = 67\% \;\; \widehat{MSEP}_M$$

Décomposition de la MSEP

But : Déterminer d'où provient l'essentiel de l'erreur

$$MSEP(\hat{\beta}) = \Lambda + \Delta(\hat{\beta}) + \Gamma(\hat{\beta})$$

Λ : MSEP minimum qui peut être atteinte avec les variables explicatives utilisées
$\Delta(\hat{\beta})$: contribution à la MSEP du biais du modèle
$\Gamma(\hat{\beta})$: contribution à la MSEP des erreurs de mesure dans données d'entrée

Estimation de Λ

$$\widehat{\Lambda} = \frac{\sum_{i,j} \sum_{k,l} (y_{ijkl} - \bar{y}_{ij..})^2}{\sum_{i,j} (n_{ij} - 1)} = 9.84\ 10^{-2}\ (t.ha^{-1})^2$$

avec n_{ij} le nombre de traitements du groupe i ayant les variables explicatives j

Λ = variabilité intra-individu + variabilité due aux variables non utilisées par le modèle
2^{e} terme est important $\Longrightarrow$ certaines variables non utilisées par le modèle ont des effets significatifs sur les observations et devraient être incorporées dans le modèle

Estimation de Γ

Données initiales (% MO, % NH_4, T^o, ...) + ou - précises :

$$\hat{x} = x + \varepsilon_x$$

x : vraie valeur, ε_x : erreur de mesure i.i.d., $\varepsilon_x \sim \mathcal{N}(0, \sigma_x)$
Γ estime, par techniques de Monte Carlo, l'effet de ces approximations sur les prédictions :

- Définir les distributions des mesures initiales (σ_x)
- Par traitement, calculer la prédiction du modèle pour V ensembles de données initiales $\hat{x}$ provenant de simulations
- Par traitement, estimer la variance des V prédictions
- Calculer la moyenne des variances

Variabilité des variables d'entrée

Table – Coefficient de variation des erreurs de mesure des variables explicatives

Variables d'entrés	Coefficient de variation ($\frac{\sigma}{\mu}$)
Profondeur du sol	0.3
Concentration de matière organique dans le sol	0.2
Capacité au champ	0.2
Point de flétrissement	0.2
Point de saturation	0.2
Quantité de nitrate initiale	0.4
Quantité d'ammonium initiale	0.4
Quantité d'eau initiale dans le sol	0.4
Quantité d'azote apportée	0.02
Température	0.00
Rayonnement	0.00
Pluviométrie	0.00

Estimation de Γ

$$\widehat{\Gamma}(\hat{\beta}) = \frac{1}{J}\sum_{i,j}^{J}\frac{1}{V-1}\sum_{v=1}^{V}\left(f(\hat{\beta},x_{ijv}) - \overline{f(\hat{\beta},x_{ijv})}\right)^2 = 2.23\,10^{-2}\,(t.ha^{-1})^2$$

J nb de traitements, $f(\hat{\beta},x_{ijv})$ prédiction pour le traitement ij et le v^{e} ensemble de valeurs de $\hat{x}$ et $\overline{f(\hat{\beta},x_{ijv})}$ moyenne des V prédictions $f(\hat{\beta},x_{ijv})$

Rq : $\Gamma(\hat{\beta})$ peut être estimé sans observation et est estimable pour toutes les variables de sortie du modèle

Estimation de Δ

La contribution du biais sur la MSEP est estimée par différence :

$$\widehat{\Delta}(\hat{\beta}) = \widehat{MSEP(\hat{\beta})} - \widehat{\Lambda} - \widehat{\Gamma}(\hat{\beta}) = 10.34\ 10^{-2}\ (t.ha^{-1})^2$$

Décomposition de la MSEP

L'essentiel de l'erreur provient :

- si Λ important $\Longrightarrow$ du choix des variables explicatives
- si $\Gamma(\hat{\beta})$ important $\Longrightarrow$ d'erreurs de mesure dans variables d'entrée
- si $\Delta(\hat{\beta})$ important $\Longrightarrow$ provient de la forme du modèle

La MSEP se décompose en 4 termes :

- variabilité dans les mesures des variables observées : indépendant du modèle
- contribution des variables explicatives du modèle : identique pour tout modèle utilisant les mêmes variables d'entrée
- contribution des erreurs de mesure des variables d'entrée : peut diminuer si les variables d'entrée sont plus précises
- biais du modèle

Récapitulatif évaluation de CECOL

Source de variation	Espérance $(t\ ha^{-1})^2$	Variance $(t\ ha^{-1})^4$
Variance totale	0.2886	$5.21\ 10^{-4}$
Biais moyen de CECOL (en $t\ ha^{-1}$)	$-7.94\ 10^{-3}$	
Effet erreurs de mesure sur variables d'entrée	$2.23\ 10^{-2}$	$2.13\ 10^{-8}$
Biais du modèle	0.1034	
Effet des variables explicatives	$9.84\ 10^{-2}$	$4.31\ 10^{-4}$
MSEP de CECOL	0.2241	$9.25\ 10^{-4}$
MSEP du modèle «Moyen»	0.3325	

Démarche si les données de validation ont servi à la construction du modèle

- Analyse de sensibilité
- Simulations en conditions tranchées
- Construction de graphes
  Attention : donnent une idée optimiste de la qualité du modèle surtout si le nombre de paramètres estimés est important
- Calcul de la MSEP par validation croisée :

$$\widehat{MSEP} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \left(y_i - f(\widehat{\beta}_{-i}, x) \right)^2$$

  Inconvénient : temps de calcul très longs
- Comparaison de modèles par MSEP
- Décomposition de $MSEP(\hat{\beta})$

$$MSEP(\hat{\beta}) = \Lambda + \Delta(\hat{\beta}) + \Gamma(\hat{\beta})$$

  Λ, $\Gamma(\hat{\beta})$ et $\Delta(\hat{\beta})$ sont estimés comme précédemment

Discussion

Démarche proposée permet d'évaluer :

- modèle simple ou complexe
- modèle linéaire, non linéaire, statique ou dynamique

Hypothèse : les données doivent être indépendantes

Démarche inadaptée aux prédictions de valeurs successives dans le temps (par exemple mesure de MS) : dans ce cas, observations non indépendantes

Méthodes d'évaluation présentées sont complémentaires $\Longrightarrow$ **les utiliser toutes**

Discussion

CECOL : meilleur prédicteur que la simple moyenne des observations du passé pour prédire les rendements futurs, mais avantage seulement modéré

Valeur de Λ faible : le jeu de variables explicatives utilisé par CECOL semble bon
Valeur de Δ important : biais du modèle important $\Longrightarrow$ modèle peut être amélioré en modifiant ses équations ou en réestimant certains paramètres

Améliorations du modèle possibles :

- date de floraison mal prédite : trop précoce pour semis précoces et trop tardive pour semis tardifs $\Longrightarrow$ identifier la cause exacte de ce comportement
- Effets de l'irrigation mal pris en compte