Tutoriel Ecomeristem

Florian Larue & Grégory Beurier

2023-06-20

Installation du package recomeristem

Le modèle Ecomeristem existe sous deux formes, une application (QT) permettant l'introspection d'une simulation (à l'échelle de l'organe) et un package R utilisé pour l'analyse plus globale de simulations (à l'échelle de la plante/du peuplement).

Dans les faits, c'est essentiellement le package R qui est utilisé, notamment pour l'estimation de paramètres, l'idéotypage, etc.

Tout d'abord, installez le package recomeristem, disponible sur github à l'adresse suivante :

https://github.com/GBeurier/Ecomeristem_tutorial

Vérifiez bien la version de R installé sur votre machine afin de récupérer la bonne version du package recomeristem.

Copiez ensuite le dossier téléchargé et collez le dans le sous-dossier "library" de votre installation R (généralement : C:/Program Files/R/R-X.X.X/library)

Si tout s'est bien déroulé, le package recomeristem peut être chargé de la façon suivante :

```
library(recomeristem)
```

Fonctions de base du package

Le package recomeristem est un interfaçage entre le langage de programmation R et le modèle Ecomeristem à travers des fonctions de base permettant de communiquer avec le modèle (et des simulations).

1. Données d'entrée

La première étape consiste à importer les données d'entrée du modèle. Trois fonctions de recomeristem permettent de récupérer chaque type de donnée (météo, paramètres, observations) :

```
PATH_TO_FOLDER <- "../data/"
PATH_TO_FILE <- "../data/vobs.txt"

weather <- recomeristem::getMeteo_from_files(PATH_TO_FOLDER)
param <- recomeristem::getParameters_from_files(PATH_TO_FOLDER)
obs <- recomeristem::get_clean_obs(PATH_TO_FILE)
```

```r
# Les données météo
head(weather)
```

```
##   Temperature   Par Etp Irrigation P
## 1        15.3 12.67   0          0 0
## 2        15.1 12.52   0          0 0
## 3        15.5  8.49   0          0 0
## 4        16.8  9.38   0          0 0
## 5        18.6 12.44   0          0 0
## 6        18.3  8.24   0          0 0
```

```r
# Les paramètres
head(param)
```

```
##        Name       Values
## 1   Assim_A 1.429200e+00
## 2   Assim_B 1.369200e+00
## 3 BeginDate 2.457532e+06
## 4    ETPmax 8.000000e+03
## 5   EndDate 2.457642e+06
## 6     Epsib 7.038570e+00
```

```r
# (Optionnel) Les observations
head(obs)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem day lig    pht tillernb_1
## 1   8      NaN       NaN            NaN  21   5    NaN          2
## 2  11   118.10       NaN            NaN  28   8    NaN          3
## 3  14      NaN       NaN            NaN  35  10  40.00        NaN
## 4  15   308.83       NaN            NaN  42  11  75.06          2
## 5 NaN      NaN     29.01       8.233333  45 NaN    NaN        NaN
## 6  16      NaN       NaN            NaN  49  12 111.50        NaN
```

Alternativement, il est aussi possible d'importer vous-même les données, le modèle du package R attend en entrée des dataframes :

- Un dataframe pour la météo avec en colonnes les 5 variables attendues (PAR, T, irrig, P, ETP) et une ligne par jour (attention la première ligne doit correspondre au premier jour de simulation, qui correspond généralement à l'apparition de la première feuille). Seul le rayonnement (PAR) et la température (T) sont obligatoires pour lancer une simulation, les autres variables peuvent rester à zéro (désactivant les modules concernés)
- Un dataframe pour les paramètres avec en colonnes le nom des paramètres et leur valeur et une ligne par paramètre
- (Optionnel) Un dataframe pour les observations avec en colonnes les traits phénotypiques mesurés (dont le nom doit correspondre à une sortie du modèle Ecomeristem), une colonne "day" avec le jour de la mesure exprimé en jour depuis émergence et une ligne par date d'observation. Ces observations sont uniquement obligatoires pour l'estimation de paramètres

On verra dans l'étape 3 de cette partie du tutoriel comment lancer une simulation uniquement à l'aide de ces dataframes.

2. Initiation d'une simulation

La seconde étape consiste à initialiser une simulation. Cette opération va créer un objet simulation qu'il sera ensuite possible de lancer pour récupérer les résultats, ou de le modifier (par exemple pour tester d'autres valeurs de paramètres). L'initialisation dans recomeristem se fait de la façon suivante :

```
recomeristem::init_simu(param, weather, obs, "simu1")
```

La fonction d'initialisation prend donc en argument les données d'entrées précédemment importées (paramètres, météos et observations) ainsi qu'un nom permettant d'identifier une simulation (plusieurs simulations peuvent être initiées en même temps). Cette étape est généralement utile pendant l'estimation de paramètres car elle accélère le temps d'exécution (il n'est plus nécessaire d'instancier les objets déjà créés et les informations utiles à la simulation sont modifiées à la volée).

3. Lancer une simulation

Lorsque la simulation a été initiée, elle peut être lancée à l'aide de la fonction suivante :

```
res <- recomeristem::launch_simu("simu1")
head(res)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem day lig      pht tillernb_1
## 1   6      NaN       NaN            NaN  21   4      NaN          3
## 2   8  59.4534       NaN            NaN  28   5      NaN          5
## 3  10      NaN       NaN            NaN  35   7 11.70694        NaN
## 4  13 254.0573       NaN            NaN  42  10 28.60080          8
## 5 NaN      NaN  29.32977       5.801408  45 NaN      NaN        NaN
## 6  15      NaN       NaN            NaN  49  11 58.82283        NaN
```

La fonction launch_simu renvoie un dataframe avec les résultats de simulations. La particularité de ce dataframe est qu'il ne contient que les valeurs simulées aux dates où il y a une observation (et pour les traits phénotypiques observés).

L'avantage d'initier une simulation est donc de pouvoir la modifier sans avoir besoin de charger à nouveau toutes les données en mémoire (météo, paramètres, objets). Pour modifier les paramètres d'une simulation initiée, on passe également par la fonction launch_simu :

```
# on lance une simulation en modifiant le paramètre phyllo_init à la valeur 35
res <- recomeristem::launch_simu("simu1", c("phyllo_init"), c(35))
head(res)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem day lig      pht tillernb_1
## 1   6      NaN       NaN            NaN  21   4      NaN          3
## 2   8  59.4534       NaN            NaN  28   5      NaN          5
## 3  10      NaN       NaN            NaN  35   7 11.70694        NaN
## 4  13 254.0573       NaN            NaN  42  10 28.60080          8
## 5 NaN      NaN  29.32415       5.806803  45 NaN      NaN        NaN
## 6  15      NaN       NaN            NaN  49  11 58.84011        NaN
```

De façon similaire on peut également relancer une simulation initiée en changeant la météo avec la fonction launch_simu_meteo :

```
weather2 <- weather
weather2$Temperature <- weather2$Temperature + 3
res <- recomeristem::launch_simu_meteo("simu1", weather2)
head(res)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem day lig       pht tillernb_1
## 1   8      NaN       NaN            NaN  21   5       NaN          3
## 2  10 121.0447       NaN            NaN  28   7       NaN          4
## 3  13      NaN       NaN            NaN  35  10  31.08975        NaN
## 4  15 369.8162       NaN            NaN  42  12  68.12941          4
## 5 NaN      NaN  41.99656       14.38925  45 NaN       NaN        NaN
## 6  18      NaN       NaN            NaN  49  14 115.67154        NaN
```

Alternativement, une simulation peut être lancée sans être initiée à partir de dataframes (voir point 1. pour exemple) de la façon suivante :

```
res <- recomeristem::rcpp_run_from_dataframe(param, weather)
head(res[,1:5]) # head des 5 premières colonnes
```

```
##   app appstage arealfel        assim     biomaero
## 1   1        1        0 7.328911e-05 9.143039e-05
## 2   1        1        0 2.763594e-04 3.489091e-04
## 3   1        1        0 4.403839e-04 8.228735e-04
## 4   1        1        0 1.022354e-03 1.729167e-03
## 5   1        1        0 2.685102e-03 3.421845e-03
## 6   1        1        0 2.889575e-03 5.588454e-03
```

Dans ce cas, le dataframe retourné par la fonction rcpp_run_from_dataframe() est l'ensemble de la simulation (toutes les variables simulées pour l'ensemble des dates du premier jour de simulation au dernier jour).

Il est alors possible de réduire les résultats pour n'afficher que les résultats correspondants aux dates et traits du dataframe d'observations (similaire à ce qui est retourné par la fonction launch_simu) :

```
res <- recomeristem::rcpp_reduceResults(res, obs)
head(res)
```

```
##   app arealfel  biomaero2 biominmainstem lig       pht tillernb_1
## 1   6  19.5291  0.5110095       0.000000   3  4.702313          2
## 2   7  59.4534  2.1389935       0.000000   5  8.204627          5
## 3  10 121.0447  8.9604054       0.000000   7 11.706940          8
## 4  12 204.3030 21.0963449       2.990588   9 24.570243          8
## 5  13 254.0573 27.6512394       4.843028  10 34.984092          8
## 6  15 309.2284 34.4706876       8.135002  11 54.325518          8
```

A noter que si le fichier observations contient des colonnes (et/ou dates) qui ne sont pas présentes dans le dataframe de résultats de simulation, il est aussi possible de les retirer automatiquement à l'aide de la fonction suivante :

```
obs$test <- 1234 # ajout d'une variable absente de res
head(obs)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem day lig    pht tillernb_1 test
## 1   8      NaN       NaN            NaN  21   5    NaN          2 1234
## 2  11   118.10       NaN            NaN  28   8    NaN          3 1234
## 3  14      NaN       NaN            NaN  35  10  40.00        NaN 1234
## 4  15   308.83       NaN            NaN  42  11  75.06          2 1234
## 5 NaN      NaN     29.01       8.233333  45 NaN    NaN        NaN 1234
## 6  16      NaN       NaN            NaN  49  12 111.50        NaN 1234
```

```
res <- recomeristem::rcpp_run_from_dataframe(param, weather)
obs <- recomeristem::rcpp_reduceVobs(obs, res)
head(obs)
```

```
##   app arealfel biomaero2 biominmainstem lig    pht tillernb_1
## 1   8      NaN       NaN            NaN   5    NaN          2
## 2  11   118.10       NaN            NaN   8    NaN          3
## 3  14      NaN       NaN            NaN  10  40.00        NaN
## 4  15   308.83       NaN            NaN  11  75.06          2
## 5 NaN      NaN     29.01       8.233333 NaN    NaN        NaN
## 6  16      NaN       NaN            NaN  12 111.50        NaN
```

Exemple d'utilisation : estimation de paramètres

Dans ce tutoriel on va utiliser le package recomeristem pour l'estimation de paramètres. Avant de commencer, chargement des packages et lecture des données :

```
# au besoin installez DEoptim (algorithme d'optimisation)
# install.packages("DEoptim")

# chargez les packages recomeristem et DEoptim
library(recomeristem)
library(DEoptim)

# lire les données
weather <- recomeristem::getMeteo_from_files(PATH_TO_FOLDER)
param <- recomeristem::getParameters_from_files(PATH_TO_FOLDER)
obs <- recomeristem::get_clean_obs(PATH_TO_FILE)

# lire les données d'estimation
estimParam <- read.csv(paste0(PATH_TO_FOLDER,"estimparam.csv"), sep=";")
bounds <- as.data.frame(estimParam[,c(2,3)]) # récupérer les bornes inf et sup
paramNames <- as.vector(estimParam[,1]) # récupérer les noms des paramètres

head(estimParam)
```

```
##                       Param Lower Upper
## 1                       Ict   0.5   2.5
## 2                  MGR_init   6.0  14.0
## 3               phyllo_init  30.0  40.0
## 4 leaf_length_to_IN_length   0.1   0.2
```

L'estimation de paramètres consiste à trouver les valeurs de quelques paramètres génotypiques qui minimisent les écarts entre les simulations et les observations. L'algorithme d'optimisation (ici DEoptim) fournit à chaque

itération un set de paramètres à tester (valeurs entre les bornes définies dans “bounds”, pour les paramètres définis dans “paramNames”)

1. Mise en place de l’optimisation

La première étape consiste donc à mettre en place l’optimisation :

```
# Définir une fonction qui calcule l'écart entre simulation et observations
error_fn <- function(obs, sim) {
  nmse <- ((obs - sim)/obs)^2
  nrmse <- sum((colSums(nmse, na.rm=T))/(colSums(!is.na(nmse))),na.rm=T)
  return(nrmse)
}

# Définir la fonction de coût qui reçoit des valeurs de paramètres en entrée
# et retourne l'erreur associé
isInit <- FALSE # permet de vérifier si une simulation est déjà initiée
fitness_fn <- function(p) {
  if(!isInit) { # si la simulation n'est pas encore initiée, l'initier
    recomeristem::init_simu(param, weather, obs, "sim1")
    isInit <- TRUE
  }

  # lancer la simu en modifiant les valeurs de paramètres
  sim <- recomeristem::launch_simu("sim1", paramNames, p)
  # calculer l'erreur
  error <- error_fn(obs, sim)
  # retourner l'erreur
  return(error)
}
```

2. Lancer l’optimisation

A partir de là, l’étape suivante est de lancer l’optimisation à l’aide de la fonction DEoptim :

```
res <- DEoptim(fn = fitness_fn, lower = bounds[,1], upper = bounds[,2],
               control = DEoptim.control(itermax = 20))
```

```
## Iteration: 1 bestvalit: 6.016716 bestmemit:    2.426618   13.467384   33.223413    0.189572
## Iteration: 2 bestvalit: 6.016716 bestmemit:    2.426618   13.467384   33.223413    0.189572
## Iteration: 3 bestvalit: 5.197125 bestmemit:    2.496627   12.069732   30.288484    0.152192
## Iteration: 4 bestvalit: 4.198357 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.158334
## Iteration: 5 bestvalit: 4.149620 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.146635
## Iteration: 6 bestvalit: 4.149620 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.146635
## Iteration: 7 bestvalit: 4.149620 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.146635
## Iteration: 8 bestvalit: 4.149620 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.146635
## Iteration: 9 bestvalit: 4.149620 bestmemit:    2.431381   13.549722   35.453220    0.146635
## Iteration: 10 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 11 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 12 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 13 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 14 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
```

```
## Iteration: 15 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 16 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 17 bestvalit: 4.028185 bestmemit:    2.412480   13.658029   32.176139    0.183355
## Iteration: 18 bestvalit: 3.981196 bestmemit:    2.420910   13.464877   31.774362    0.181343
## Iteration: 19 bestvalit: 3.981196 bestmemit:    2.420910   13.464877   31.774362    0.181343
## Iteration: 20 bestvalit: 3.052681 bestmemit:    2.425517   12.121925   30.801098    0.191607
```

Ici pour l'exemple on ne lance que 20 itérations (itermax = 20), en réalité il faut un nombre bien plus important d'itérations pour trouver un optimum (dans les travaux récents avec Ecomeristem, plutôt autour de 2500-5000 itérations).

DEoptim renvoie une liste avec plusieurs éléments. D'abord l'élément "optim" qui résume la valeur de chaque paramètre trouvé, la plus petite erreur trouvée, le nombre d'évaluations (à chaque itération plusieurs évaluations ont lieu) et le nombre d'itérations avant l'arrêt de l'algorithme. A noter que d'autres critères d'arrêts sont disponibles et que le nombre d'itération peut donc être plus faible que le paramètre itermax.

```
head(res$optim)
```

```
## $bestmem
##       par1       par2       par3       par4
##  2.4255168 12.1219252 30.8010976  0.1916067
##
## $bestval
## [1] 3.052681
##
## $nfeval
## [1] 42
##
## $iter
## [1] 20
```

Ensuite l'élément "member" qui résume dans le sous-élément bestmemit le meilleur candidat à chaque itération et dans le sous-élément pop les valeurs de paramètres pour chaque évaluation.

```
head(res$member$bestmemit)
```

```
##       par1     par2     par3      par4
## 1 1.995566 13.82603 31.11719 0.1886102
## 2 2.426618 13.46738 33.22341 0.1895717
## 3 2.426618 13.46738 33.22341 0.1895717
## 4 2.496627 12.06973 30.28848 0.1521922
## 5 2.431381 13.54972 35.45322 0.1583343
## 6 2.431381 13.54972 35.45322 0.1466348
```

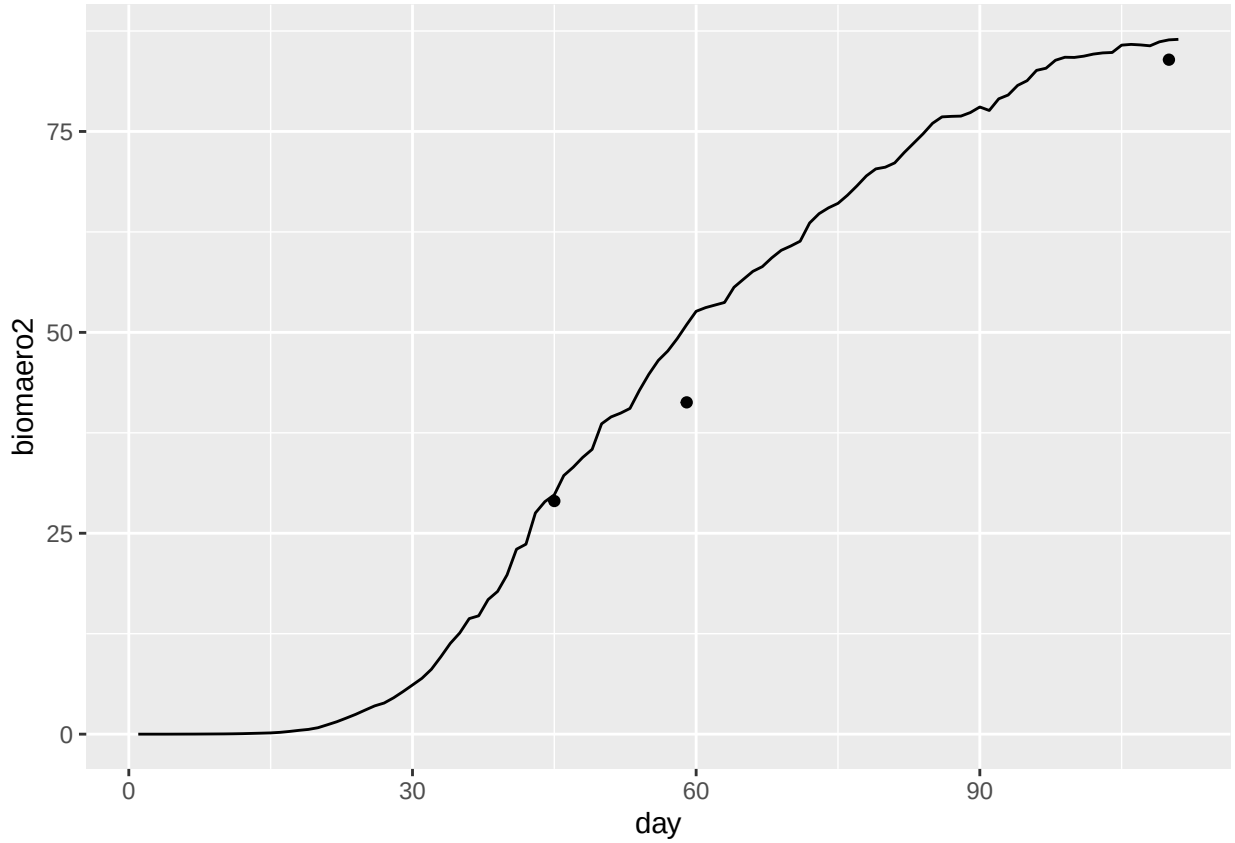
3. Récuperer les résultats de l'estimation

Les résultats de l'estimation sont donc stockés dans la variable res, il suffit alors de remplacer les nouvelles valeurs de paramètres dans le dataframe d'origine et de relancer la simulation pour obtenir les résultats de simulation de l'optimum trouvé par l'algorithme.

```r
# au besoin installer le package ggplot2
# install.packages(ggplot2)

library(ggplot2)

finalParam <- data.frame(Param = paramNames, Values = res$optim$bestmem,
                         Lower = bounds[,1], Upper = bounds[,2])
head(finalParam)
```

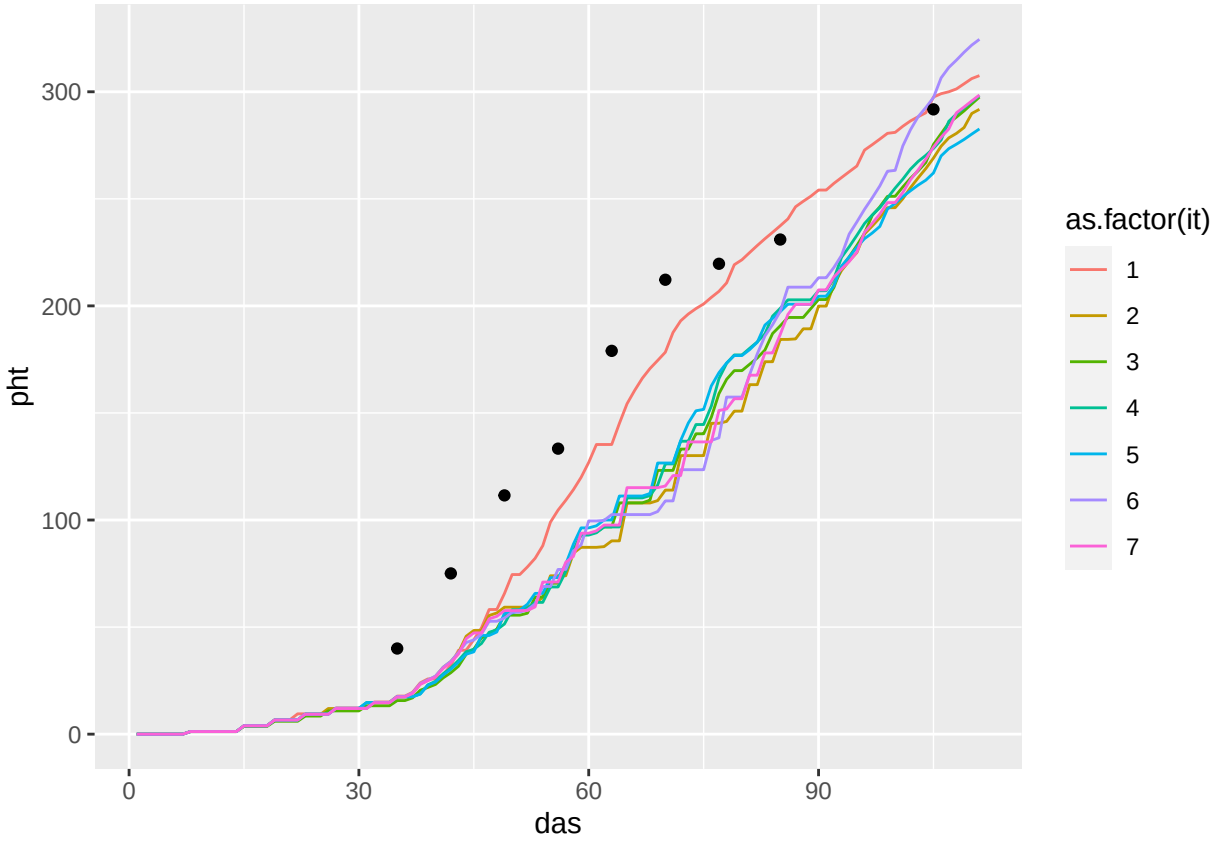
```
##                         Param     Values Lower Upper
## par1                      Ict  2.4255168   0.5   2.5
## par2                 MGR_init 12.1219252   6.0  14.0
## par3              phyllo_init 30.8010976  30.0  40.0
## par4 leaf_length_to_IN_length  0.1916067   0.1   0.2
```

```r
# remplacer dans le dataframe param original les nouvelles valeurs de paramètres
param[match(paramNames, param$Name),"Values"] <- res$optim$bestmem

# relancer la simulation avec les nouvelles valeurs de paramètres
finalSim <- recomeristem::rcpp_run_from_dataframe(param, weather)
finalSim$day <- as.numeric(row.names(finalSim))

# tracer un graphe avec la simulation d'un trait (ici la biomasse aérienne)
# et ajouter les points d'observations
plt <- ggplot(finalSim, aes(x = day, y=biomaero2)) + geom_line() +
  geom_point(data = obs, aes(x = day, y=biomaero2))
print(plt)
```



De façon similaire, on peut également regarder l'évolution de l'estimation en traçant le graphe du meilleur candidat à chaque itération, pour l'exemple on regarde ici un autre trait simulé/mesuré (pht = la hauteur de la plante) :

```
# récuperer les meilleurs candidats (uniques) sur l'ensemble des itérations
bestmems <- unique(res$member$bestmemit)

# construire un dataframe de résultats pour l'ensemble de ces candidats
bestRes <- data.frame()
for(i in 1:nrow(bestmems)) {
  param[match(paramNames, param$Name),"Values"] <- bestmems[i,]
  bestSim <- recomeristem::rcpp_run_from_dataframe(param, weather)
  bestRes <- rbind(bestRes, data.frame(das = as.numeric(row.names(bestSim)),
                                       pht = bestSim$pht, it = i))
}

# tracer le graphe
plt2 <- ggplot(bestRes, aes(x=das, y=pht, col=as.factor(it))) +
  geom_line() + geom_point(data = obs, aes(x = day, y=pht), inherit.aes = F)
print(plt2)
```



La dernière itération n'est pas spécialement le meilleur candidat pour le trait qu'on regarde ici (pht). Ce qui amène à un point important de l'estimation de paramètres présenté dans ce tutoriel : l'erreur est calculée sur un ensemble de traits phénotypiques (une RMSE normalisée, sur toutes les dates de mesures et tous les traits dans le fichier vobs.txt). De fait, si un candidat a une erreur globale plus faible, il sera sélectionné même si cela implique d'augmenter l'erreur sur un trait donné. Une solution envisageable est de faire de l'optimisation multi-critère. Cela dépasse le cadre de ce tutoriel mais pour les personnes intéressées, voir par exemple :

Tamaki, H., Kita, H., & Kobayashi, S. (1996, May). Multi-objective optimization by genetic algorithms: A review. In Proceedings of IEEE international conference on evolutionary computation (pp. 517-522). IEEE

Konak, A., Coit, D. W., & Smith, A. E. (2006). Multi-objective optimization using genetic algorithms: A tutorial. Reliability engineering & system safety, 91(9), 992-1007.

D'autres pistes d'améliorations peuvent être explorées avant de passer à l'optimisation multi-critère : en modifiant la fonction de calcul de l'erreur pour mettre du poids sur l'un ou l'autre trait prioritaire par exemple.

Lorsque les paramètres pour un génotype donné ont été estimés, il est alors possible d'utiliser le modèle Ecomeristem pour d'autres analyses tels que présentés pendant le séminaire.