Notice d'utilisation du modèle SUNFLO

${\bf Contents}$

Paramétrage	3
Variété	3
Pédoclimat	3
Conduite	4
Initialisation	5
Planification	6
Exemple	6
Simulation	7
Utilisation locale via une interface graphique (1-10)	7
Utilisation distance via une interface web (10-500)	7
Utilisation locale via un langage de script (10-1E6)	7
Variables de sorties et indicateurs	8
Analyse	10
Assemblage et traitements post-simulation	10
Méthodes d'analyse	10
References	11

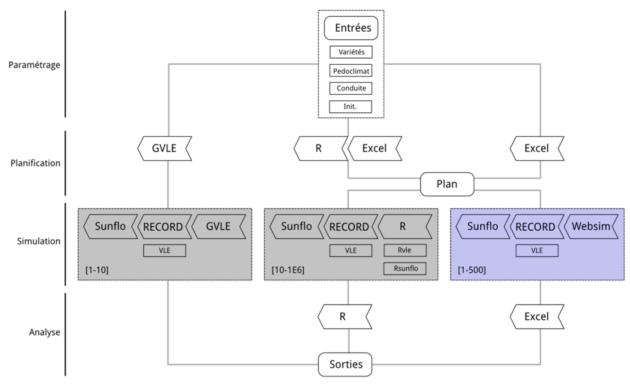
Cette notice présente les principales étapes nécessaires pour réaliser une expérimentation numérique avec le modèle SUNFLO. Selon les questions abordées (démonstration, simulation de réseaux d'essais multilocaux, exploration, ...) le type de plan d'expérience conçu et les outils logiciels utilisés varient considérablement.

Différentes procédures sont proposées selon le volume de simulation :

- utilisation locale via une interface graphique (1-10 simulations : GVLE)
- utilisation distance via une interface web (10-500 simulations : websim)
- utilisation locale via un langage de script (10-1M simulations: rsunflo)

Pour chacune des ces procédures, 4 étapes successives sont nécessaires :

- 1. Paramétrage : rassembler les données d'entrées et de paramétrage
- 2. Planification : concevoir le plan de l'expérimentation numérique
- 3. Simulation : réaliser les simulations
- 4. Analyse : organiser les sorties et analyser les données



Procédures d'utilisation: Les traits gris représentent les différentes procédures d'utilisation des outils logiciels. Les cadres gris nécessitent une installation locale des logiciels mentionnés, le cadre bleu permet une utilisation distante, via une interface web. Les chevrons représentent des logiciels et les rectangles, des packages. Les formes arrondies représentent des jeux de données.

Paramétrage

L'utilisation par défaut de sunflo nécessite 42 paramètres et 5 variables d'entrées répartis en 4 volets : variétes, pédoclimat, conduite de culture et initialisation. Si une partie de ces informations n'est pas renseignée, la simulation échoue.

Les outils de multi-simulation (rsunflo, websim) fonctionnent avec un ensemble {données d'entrée, version du modèle, type de sorties} fixé.

L'interface websim (accessible ici) permet de créer différentes version d'un même modèle informatique utilisant VLE+RECORD. A chaque usage correspond donc une version $ad\ hoc$, nommée $profils\ d'utilisation\ dans\ websim$. Bien que ces profils peuvent être créés par les utilisateurs dans l'interface, trois profils sont accessibles pour SUNFLO:

modèle	profil	usage	paramètres	VLE
SUNFLO	web	version par défaut, evaluation variétale	42	sunflo_web.vpz
SUNFLO	gem	version simplifiée, experimentation numérique	21	$sunflo_GEM.vpz$
SUNFLO	genotype	paramétrage variétal uniquement	12	$sunflo_simple.vpz$

Ce mode d'emploi se base sur le profil web. Le fichier parameterization.xlsx détaille le contenu des profils de simulation, le détail du paramétrage et propose des valeurs par défaut.

Variété

nom	label	unité	référence
TDE1	Durée de la phase levée (A2) - initiation florale (E1	$^{\circ}\mathrm{Cd}$	(Lecoeur et al., 20
TDF1	Durée de la phase levée (A2) - floraison (F1)	$^{\circ}\mathrm{Cd}$	(Lecoeur et al., 20
TDM0	Durée de la phase levée (A2) - debut maturité (M0)	$^{\circ}\mathrm{Cd}$	(Lecoeur et al., 20
TDM3	Durée de la phase levée (A2) - maturité (M3)	$^{\circ}\mathrm{Cd}$	(Lecoeur et al., 20
TLN	Nombre de feuille potentiel	feuilles	(Lecoeur et al., 20
LLH	Rang (depuis le sol) de la plus grande feuille du profil foliaire à la floraison	feuilles	(Lecoeur et al., 20
LLS	Surface de la plus grande feuille du profil foliaire à la floraison	cm2	(Lecoeur et al., 20
K	Coefficient d'extinction du rayonnement lors de la phase végétative (E1-F1)	-	(Lecoeur et al., 20
LE	Seuil de réponse de l'expansion foliaire à une contrainte hydrique	-	(Casadebaig et al
TR	Seuil de réponse de la conductance stomatique à une contrainte hydrique	-	(Casadebaig et al
HI	Indice de récolte potentiel	-	(Casadebaig et al
OC	Teneur en huile dans l'akène en conditions potentielles	%,0%humidité	(Casadebaig et al

table des paramètres : variétés

Pédoclimat

nom	label	unité
file	Nom du fichier climatique	-
${\bf root_depth}$	Profondeur d'enracinement maximale	mm
${\it field_capacity_1}$	Humidité massique à la capacité au champ dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)	%
$wilting_point_1$	Humidité massique au point de flétrissement dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)	%
${\it field_capacity}_2$	Humidité massique à la capacité au champ dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur)	%
$wilting_point_2$	Humidité massique au point de flétrissement dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur)	%
${\rm soil_density_1}$	Densité apparente du sol dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)	g.cm-3
${\rm soil_density_2}$	Densité apparente du sol dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur)	g.cm-3
$stone_content$	Taux de cailloux	[0; 1]
mineralization	Vitesse potentielle de minéralisation	kg/ha/jour

table des paramètres : pédoclimat

Données climatiques

Sunflo utilise des données climatiques disponibles dans des fichiers texte. Chaque fichier représente une année avec l'enregistrement de 5 variables (colonnes) au pas de temps journalier (lignes).

La fonction rsunflo::climate permet de créer ces fichiers depuis les principaux formats (meteo-france, INRA climatik). Sinon, un exemple de fichier climatique formaté pour sunflo est disponible sur websim. Les fichiers créés doivent être accessible par le simulateur. Pour rsunflo vérifier que ces fichiers soient dans un sous repertoire du paquet sunflo, sur le système de fichier local. Pour Websim, ces fichiers peuvent être envoyés via l'interface utilisateur, sur la page Fichiers | Déposer.

nom	label	unité
$\overline{\mathrm{TN}}$	Température minimale	$^{\circ}\mathrm{C}$
TX	Température maximale	$^{\circ}\mathrm{C}$
GR	Rayonnement global incident	$\mathrm{MJ/m2}$
ETP	Evapotranspiration de référence	mm
RR	Précipitations	mm

table des variables climatique d'entrée

Conduite

nom	label	unité
crop_sowing	Date de semis	jj/mm
$crop_harvest$	Date de récolte	$\rm jj/mm$
$crop_density$	Densité du peuplement à la levée	plantes/m2
nitrogen_date_1	Fertilisation (date)	$\rm jj/mm$

nom	label	unité
nitrogen_dose_1	Fertilisation (dose)	kg/ha eq. azote minéral
$nitrogen_date_2$	Fertilisation (date)	$\rm jj/mm$
$nitrogen_dose_2$	Fertilisation (dose)	kg/ha eq. azote minéral
$water_date_1$	Irrigation (date)	$\rm jj/mm$
$water_dose_1$	Irrigation (dose)	mm
$water_date_2$	Irrigation (date)	$\rm jj/mm$
$water_dose_2$	Irrigation (dose)	mm
$water_date_3$	Irrigation (date)	$\rm jj/mm$
water_dose_3	Irrigation (dose)	mm

 $table \ des \ paramètres: conduite$

Initialisation

label	unité
Date de début de la simulation	jj/mm/aaaa
Durée de la simulation	jour
Date de levée (forçage)	$\rm jj/mm$
Reliquats azotés dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)	kg/ha eq. azote minéral
Reliquats azotés dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur)	kg/ha eq. azote minéral
Humidité massique initiale dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)	%
Humidité massique initiale dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur)	%
	Date de début de la simulation Durée de la simulation Date de levée (forçage) Reliquats azotés dans l'horizon de surface (0 - 30 cm) Reliquats azotés dans l'horizon inférieur (30 cm - profondeur) Humidité massique initiale dans l'horizon de surface (0 - 30 cm)

 $table \ des \ paramètres: initialisation$

Planification

Cette étape consiste à concevoir une plan d'expérience numérique et à en préparer une représentation informatique (fichier ou objet) en vue de la simulation. Ce plan se présente comme une matrice, chaque simulation (ligne) est représentée par un vecteur de paramètres (colonnes). La longueur de ce vecteur est déterminée par le profil de simulation utilisé (par défaut, 42).

Ce plan peut être créé manuellement (séquentiellement, ligne après ligne) ou bien automatiquement, en combinant de manière définie les niveaux de différents facteurs étudiés.

La première solution correspond souvent à la simulation d'expérimentations réelles (MET). Dans ce cas, l'utilisation d'un tableur pour créer un fichier est préférable. Les entêtes des colonnes du fichier sont les noms des paramètres présentés dans les tableaux précédents.

La deuxième solution est utilisée plutôt pour l'exploration du modèle, les plans créés peuvent être des combinaisons factorielles de paramètres (s'ils sont peu nombreux) ou des plans issus de méthodes d'échantillonnage.

Dans tout les cas, les plans créés peuvent être utilisés soit avec le simulateur local (rsunflo) ou distant (websim). Si ce dernier est utilisé, le format du fichier du plan est crucial (type et format des colonnes). La fonction rsunflo::design permet de convertir le fichier créé vers le format de websim (cf. aide de websim).

Exemple

Le plan (fichier design.xlsx) a été initialement créé avec un tableur en utilisant en entête les noms des paramètres et variables d'entrée présenté dans les tables précédentes. Le fichier du plan est simplement lu, assemblé, et ré-écrit dans le format utilisé par websim. Le nom d'utilisateur utilisé dans websim doit être passé en argument à la fonction rsunflo::design. Les fichiers et données pour reproduire cet exemple sont fournis avec le paquet.

```
# Import des données
## Essais (n=2)
d <- readWorksheetFromFile(file="inst/doc/files/design.xlsx", sheet="essais")
## Genotypes (n=3)
g <- readWorksheetFromFile(file="inst/doc/files/design.xlsx", sheet="genotype")

# Plan factoriel complet
p <- expand.grid(carol=d$carol, genotype=g$genotype)
p <- p %>% join(d) %>% join(g)

# Ecriture au format websim
design(p, file="inst/doc/files/design_websim.xls", format="websim", user="casadebaig")
```

Simulation

Une fois le plan conçu et créé au format adapté au simulateur utilisé, les simulations sont effectuées en série. Les variables de sorties sont celles définies dans le profil de simulation. Selon la vue utilisée lors de la simulation, les sorties sont disponibles à chaque pas de temps (vue dynamique) ou bien seulement à la fin de la simulation (vue statique). Les deux tables suivantes résument le contenu de ces vues.

Utilisation locale via une interface graphique (1-10)

Cette utilisation ne fonctionne pas avec un plan d'expérience défini. Elle est donc adaptée à un faible nombre de simulation, car il faut changer chaque paramètre séquentiellement dans l'interface graphique GVLE. Cette solution permet par contre de facilement changer les variables de sorties observées lors de la simulation. L'utilisation de l'interface GVLE n'est pas documentée pour sunflo (cf. notices de l'équipe RECORD).

Utilisation distance via une interface web (10-500)

L'interface web *websim* permet, outre la création manuelle de simulations, d'automatiser le processus de simulation quand un fichier de plan d'expérience est disponible.

- 1. Profils de simulation | Utiliser : choix du patron de simulation (lien direct)
- 2. Simulations | Créer via des tableaux : lecture du fichier de plan et création des simulations correspondantes
- 3. Plan d'expérience | Gerer : assemblage et simulation du contenu du plan
- 4. Plan d'expérience | Télécharger les résultats : export des résultas (format excel, un fichier par simulation).

Utilisation locale via un langage de script (10-1E6)

L'utilisation de sunflo via R est plus abstraite que l'utilisation d'interfaces utilisateurs, mais constitue à la fois une procédure parfaitement reproductible et plus rapide (facteur ~10) pour réaliser des expérimentations numériques.

La fonction rsunflo::play permet de simuler une ligne d'une matrice qui représente le plan d'expérience créé via un tableur. La fonction rsunflo::shape met en forme et renomme les variables de sorties. La fonction rsunflo::display représente chaque variable de sortie en fonction du temps. Le package plyr est utilisé pour itérer les simulations sur l'ensemble des lignes du plan. Ce calcul peut facilement être distribué sur plusieurs coeurs ou processeurs à l'aide du package doMC (cf aide de plyr). A cette étape, le résultat de chaque simulation est stocké dans un élément de liste. Les simulations qui échouent retournent un élément vide, les fonctions Filter et compact permettent de filtrer les simulations réussies. Pour l'instant, les causes de l'erreur ne sont pas remontées dans R (voir les logs de VLE).

Exemple

```
# Modèle et plan
sunflo <- new("Rvle", file = "sunflo_web.vpz", pkg = "sunflo")
design <- as.list(p)

# Paramétrisation par défaut
sunflo %>% run() %>% results() %>% shape(view="timed")
```

```
# Paramétrisation issue du plan d'expérience (1 unité de simulation)
sunflo %>% play(design, unit=1) %>% shape(view="timed")

# Sortie graphique
sunflo %>% play(design, unit=1) %>% shape(view="timed") %>% display()

# Multi-simulation du plan d'expérience (parallélisation possible : require(doMC), ?mlply)
model <- function(x){sunflo %>% play(design, unit=x) %>% shape(view="timed")}
output <- mlply(design$id, failwith(NULL, model))

# Agregation (1 unité -> une matrice)
output_timed <- output %>% compact() %>% ldply()

# Calcul d'indicateurs (1 unité -> un vecteur)
output_indicators <- output %>% compact() %>% ldply(indicate)
```

Variables de sorties et indicateurs

nom	label	unité
$\overline{ ext{TN}}$	Température minimale	$^{\circ}\mathrm{C}$
TX	Température maximale	$^{\circ}\mathrm{C}$
TM	Température moyenne	$^{\circ}\mathrm{C}$
GR	Rayonnement global incident	$\mathrm{MJ/m2}$
ETP	Evapotranspiration de référence	mm
RR	Précipitations	mm
TTA2	Temps thermique cumulé depuis la levée	$^{\circ}\mathrm{C.j}$
PhenoStage	Index de phénologie	-
FTSW	Facteur de contrainte hydrique	-
FHTR	Facteur de réponse de la transpiration à la contrainte hydrique	-
FHRUE	Facteur de réponse de la photosynthèse à la contrainte hydrique	-
ETRETM	Ratio ETR/ETM	-
FTRUE	Facteur de réponse de la photosynthèse à la contrainte thermique	-
NAB	Azote absorbé	kg/ha/j
NNI	Indice de nutrition azoté	-
FNRUE	Facteur de réponse de la photosynthèse à la contrainte azote	-
LAI	Indice foliaire	-
RIE	Efficience d'interception de la lumière	-
RUE	Efficience d'utilisation de la lumière	-
TDM	Biomasse aérienne	g/m2
GY	Rendement en grain	q/ha
OC	Teneur en huile	%, grain à $0%$ humidite

table des variables de sorties dynamiques

nom	label	unité
JSE	Nombre de jours de stress hydrique (ETR/ETM < 0.6) pour la période initiation florale - début floraison	jours
$_{ m JSF}$	Nombre de jours de stress hydrique (ETR/ETM < 0.6) pour la période début floraison - début maturité	jours
JSM	Nombre de jours de stress hydrique (ETR/ETM < 0.6) pour la période début maturité - fin maturité	jours
GY	Rendement en grain	q/ha
OC	Teneur en huile	%, grain

table des variables de sortie statique

Analyse

Assemblage et traitements post-simulation

Le package plyr permet également d'appliquer un même traitement sur un ensemble d'éléments, qu'il s'agisse simplement d'un assemblage (exemple ci-dessus) ou d'une opération statistique (description, régression...). C'est cette possibilité qui est utilisée pour calculer un panel pré-défini d'indicateurs depuis des sorties dynamiques brutes (cf. fonction rsunflo::indicate).

nom	position	label	calcul	unité
SGR	cycle	Rayonnement incident (PAR)	sum(0.48*GR)	MJ/m2
SRR	cycle	Précipitations	sum(RR)	mm
SETP	cycle	Evapotranspiration	sum(ETP)	mm
SCWD	cycle	Déficit hydrique climatique	sum(P-ETP)	mm
SFTSW	cycle	Déficit hydrique édaphique (quantitatif)	sum(1-FTSW)	-
NETR	cycle	Déficit hydrique édaphique (qualitatif)	sum(ETR/ETM < 0.6)	jours
SFHTR	cycle	Effet de la contrainte hydrique sur la transpiration	sum(1-FHTR)	-
SFHRUE	cycle	Effet de la contrainte hydrique sur la photosynthèse	sum(1-FHRUE)	-
SNNI	cycle	Déficit azoté	sum(1-NNI)	-
SNAB	cycle	Azote absorbé	$\operatorname{diff}(\operatorname{range}(\operatorname{NAB}))$	kg/ha
SFNRUE	cycle	Effet de la contrainte azote sur la photosynthèse	sum(1-FNRUE)	-
SFTRUE	cycle	Effet de la contrainte thermique sur la photosynthèse	sum(1-FTRUE)	-
LAI	cycle	LAI maximum	$\max(\text{LAI})$	-
DSF	cycle	Durée de surface foliaire	$\operatorname{sum}(\operatorname{LAI})$	-
SIR	cycle	Rayonnement intercepté (PAR)	$\operatorname{sum}(\operatorname{RIE} GR0.48)$	MJ/m2
MRUE	cycle	Photosynthèse	mean(RUE)	g/MJ/m2
STDM	cycle	Biomasse	$\max(TDM)$	g/m2
TT	cycle	Temps thermique (base 4.8°C)	$\max(\text{TTA2})$	$^{\circ}\mathrm{C.j}$
GY	cycle	Rendement en grain	$\max(GY)$	q/ha
OC	cycle	Teneur en huile	$\max(OC)$	%

table des indicateurs calculés depuis des variables dynamiques

Méthodes d'analyse

L'import des données dans R permet de profiter de ses outils statistiques. Pour une question plus orientée vers le développement, l'analyse des données peut s'envisager dans l'outil web de simulation. Le framework de websim peut ainsi être installé pour servir de support à la construction d'un outil d'aide à la décision.

References

Casadebaig, P., Debaeke, P., Lecoeur, J., 2008. Thresholds for leaf expansion and transpiration response to soil water deficit in a range of sunflower genotypes. European Journal of Agronomy 28, 646–654.

Casadebaig, P., Guilioni, L., Lecoeur, J., Christophe, A., Champolivier, L., Debaeke, P., 2011. SUNFLO, a model to simulate genotype-specific performance of the sunflower crop in contrasting environments. Agricultural and Forest Meteorology 151, 163–178.

Lecoeur, J., Poiré-Lassus, R., Christophe, A., Pallas, B., Casadebaig, P., Debaeke, P., Vear, F., Guilioni, L., 2011. Quantifying physiological determinants of genetic variation for yield potential in sunflower. SUNFLO: a model-based analysis. Functional Plant Biology 38, 246–259.

Valé, M., Mary, B., Justes, E., 2007. Irrigation practices may affect denitrification more than nitrogen mineralization in warm climatic conditions. Biology and Fertility of Soils 43, 641–651.