



Leibniz-Zentrum für
Agrarlandschaftsforschung
(ZALF) e.V.

Parameteroptimierung des Agrar-Ökosystemmodells MONICA

Xenia Specka, Ralf Wieland

zalf Motivation und Hintergründe

MONICA: Model for Nitrogen and Carbon in Agro-ecosystems

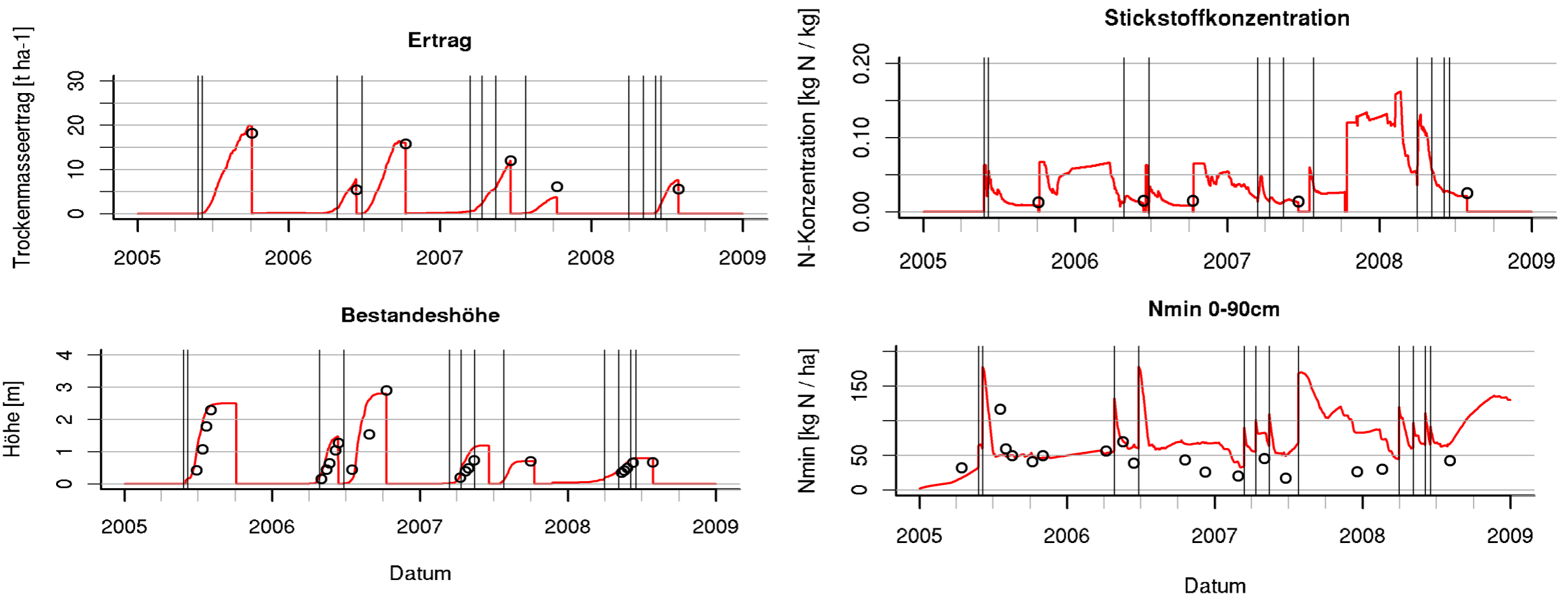
- Anwendung von MONICA im EVA2-Verbundprojekt → Bewertung der abiotischen Folgewirkungen des Energiepflanzenanbaus
- Auswertung verschiedener Fruchtfolgeexperimente an verschiedenen Standorten Deutschlands



Simulationsbeispiele aus dem EVA – Projekt

Ascha, Fruchtfolge 3

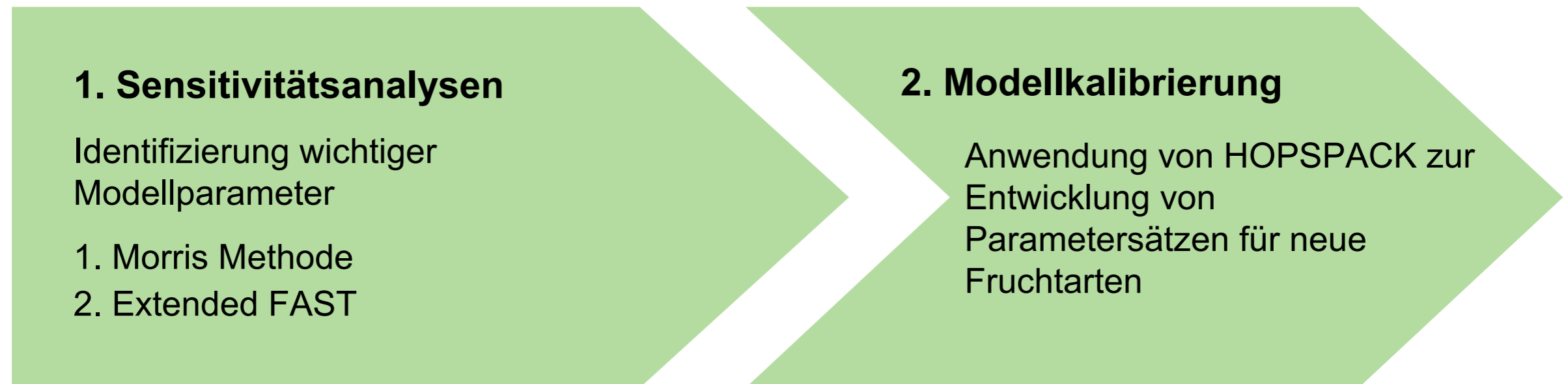
(Mais → Grünschnittroggen → Sudangras → Wintertriticale → Einj. Weidelgras → Winterweizen)



Herausforderung

- Kalibrierung und Validierung des Modells für neue Fruchtarten
- Verwendung der Daten des EVA-Projekts für die Kalibrierung
- Projekt nicht für Modellkalibrierung vorgesehen → Fehlende Daten bzw. unzureichende Auflösung der erforderlichen Messungen

Herangehensweise



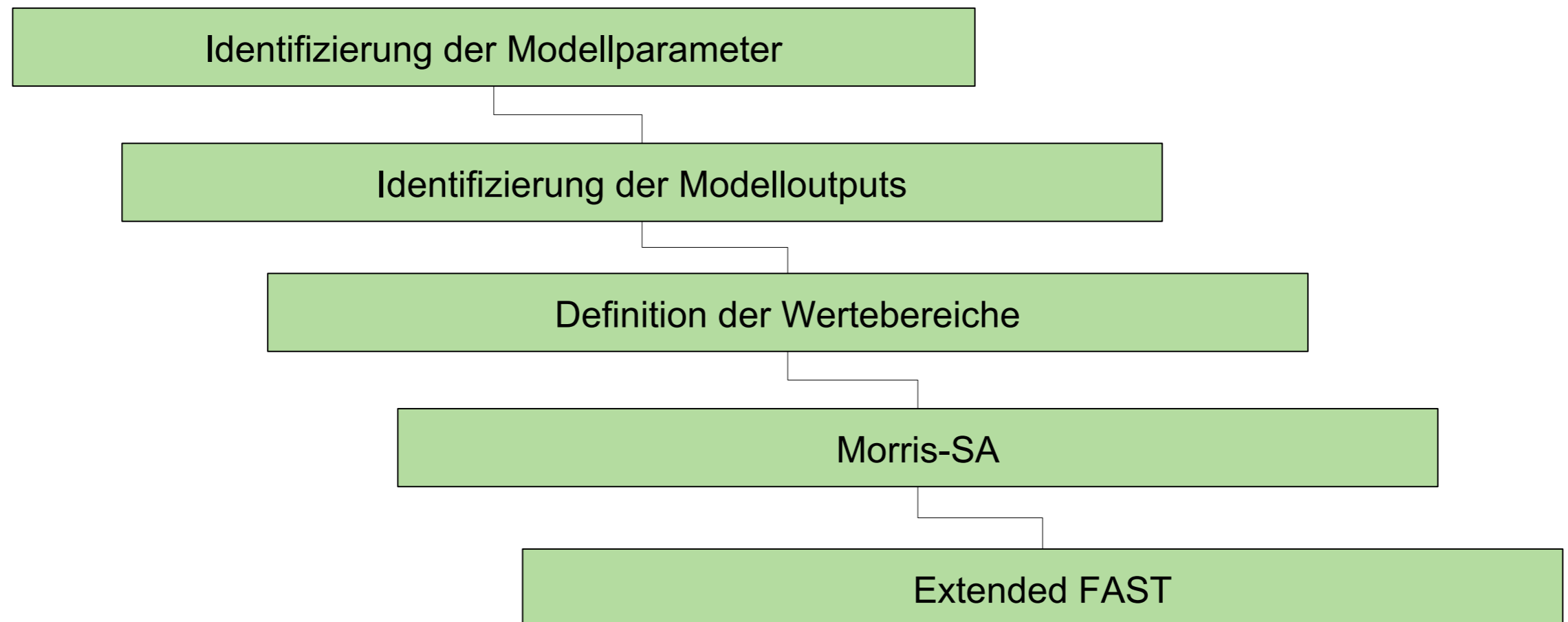
Ziel der Sensitivitätsanalysen (SA):

1. Identifizierung der Modellparameter mit dem größten Einfluss auf Modelloutputs

→ Identifizierung der Parameter für die Modellkalibrierung

→ Quantifizierung der Sensitivität der Modellparameter

Vorgehensweise

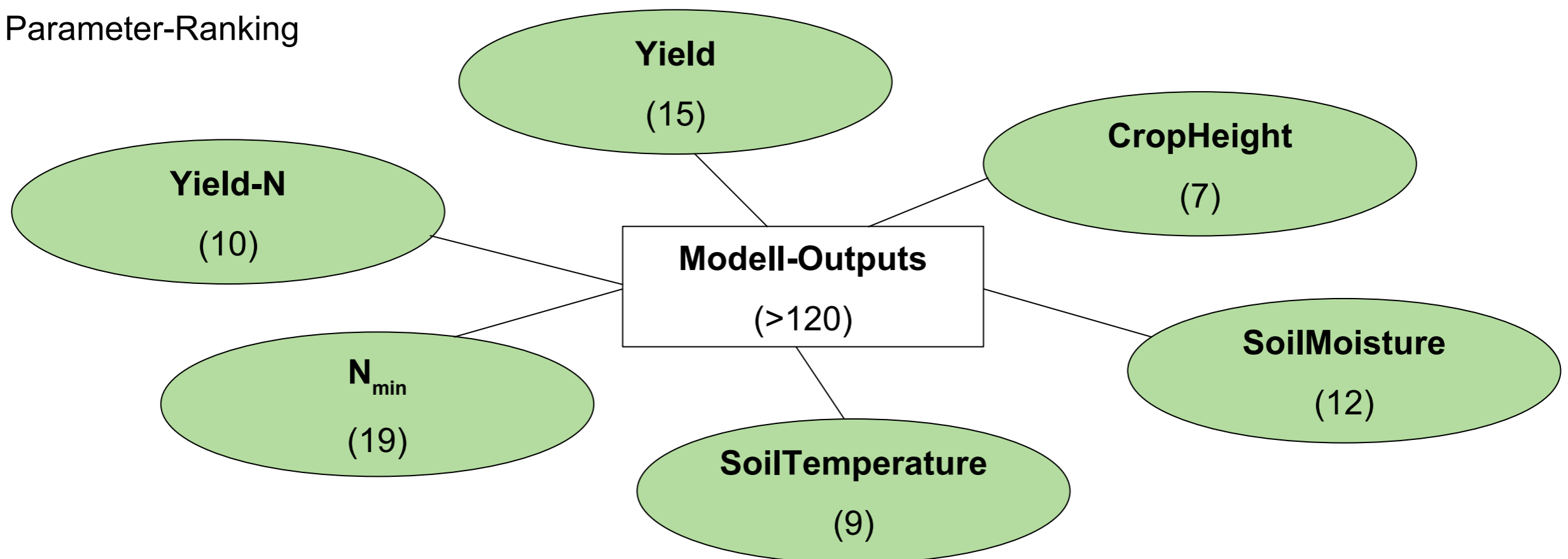


Die Morris-Methode – Ein Überblick

- Globale Screening Methode
- OAT – Design (One factor at a time)
- Berechnung von Elementaren Effekten
- Vorteil: Wenige Modellevaluierungen erforderlich

Ergebnisse:

Parameter-Ranking



- Varianz-basierte Methode
- Sampling des Parameter-Raums mit Transformations-Funktionen

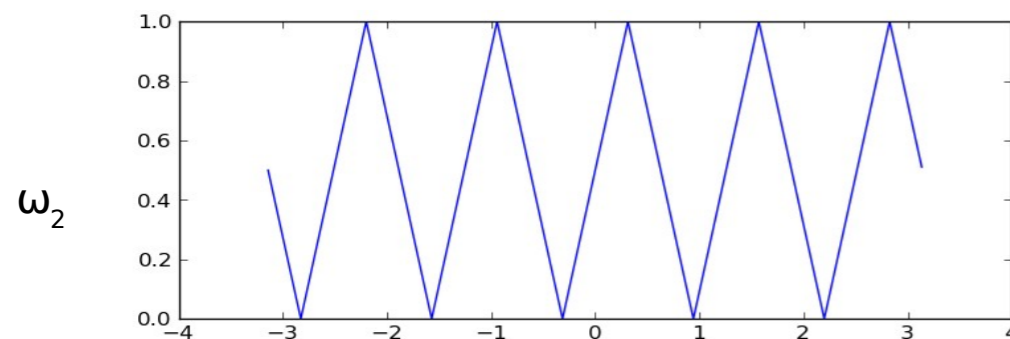
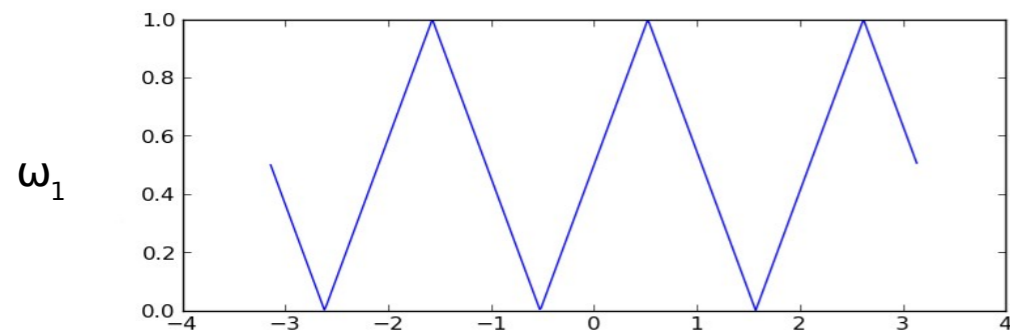
$$x_i = 0.5 + \frac{1}{\pi} \arcsin[\sin(\omega_i s + \varphi_i)]$$

x_i : Modell-Parameter

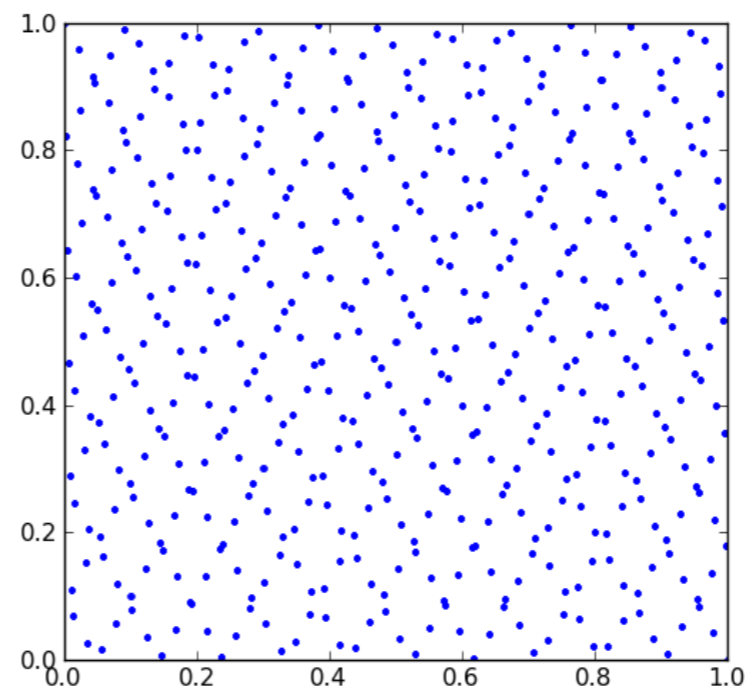
s : $[-\pi, \pi]$

φ_i : Phasenverschiebung $[0, 2\pi]$

ω_i : Individuelle Integer-Frequenz



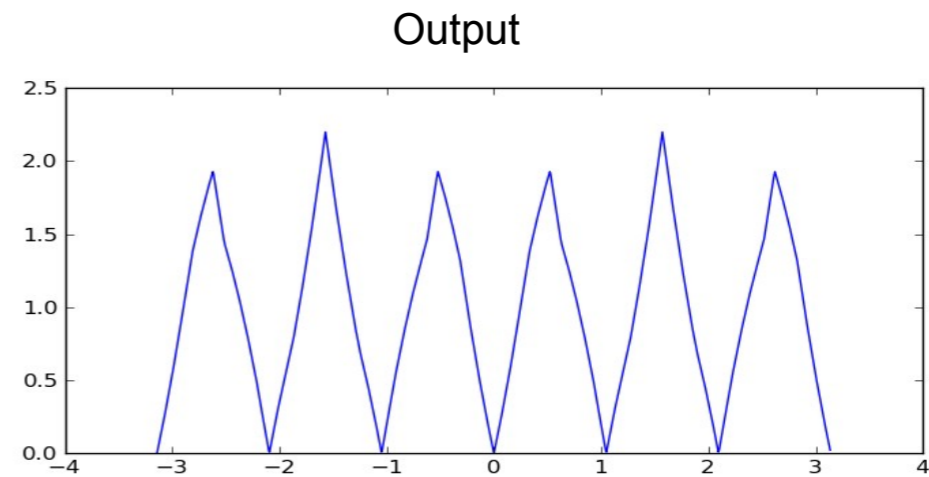
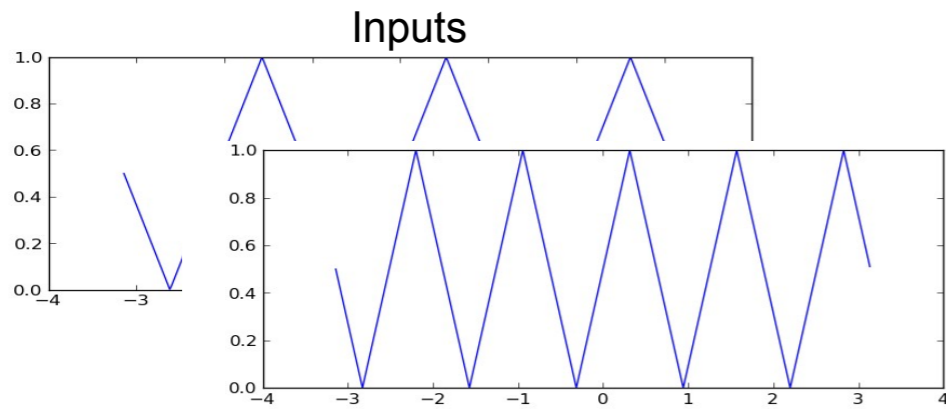
$\omega_1 \neq \omega_2$



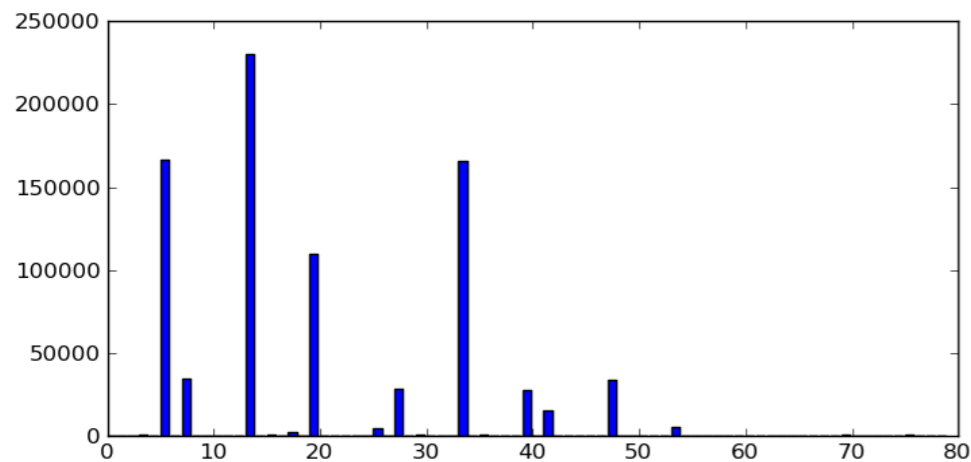
← Scatterplot der Samples für zwei Faktoren

← Gute Abdeckung des Input-Parameter-Raums mit der Transformations-funktion

zalf Extended FAST - Auswertung



Fourier-Transformation



Gesamt-Varianz:

$$D = 2 \sum_{k=1}^{\infty} A_k^2 + B_k^2$$

x_i : Modell-Parameter

A_k, B_k : Fourier-Koeffizienten

M: Max. Anzahl der Harmonischen

$k\omega_i$: Harmonische der Frequenz ω_i

k: [1, 2, ..., M]

Varianz x_i :

$$D_i = 2 \sum_{k=1}^M (A_{k\omega_i}^2 + B_{k\omega_i}^2)$$

Berechnung der Fourier-Koeffizienten
A und B für ω_i und ihrer Harmonischen

First order sensitivity index (S_i) → Einfluss des Parameters x_i

Total order sensitivity index (T_{si}) → Einfluss des Parameters x_i sowie Berücksichtigung von Interaktionen mit anderen Parametern

$$S_i = \frac{D_i}{D}$$

$$T_{S_i} = \frac{D - \bar{D}_i}{D}$$

1. Sensitivitätsanalysen

Identifizierung wichtiger
Modellparameter

1. Morris Methode
2. Extended FAST

2. Modellkalibrierung

Anwendung von HOPSPACK zur
Entwicklung von
Parametersätzen für neue
Fruchtarten

Ergebnisse der SA

→ Identifizierung der Modellparameter mit größten Einfluss auf bestimmte Outputs

Eigenschaften der Optimierung

→ Anpassen der Modellparameter durch Optimierungstool HOPSPACK

→ Entwicklung optimierter Parametersätze für neue Fruchtarten

→ Verwendung von Messdaten des EVA2-Projektes für die Kalibrierung

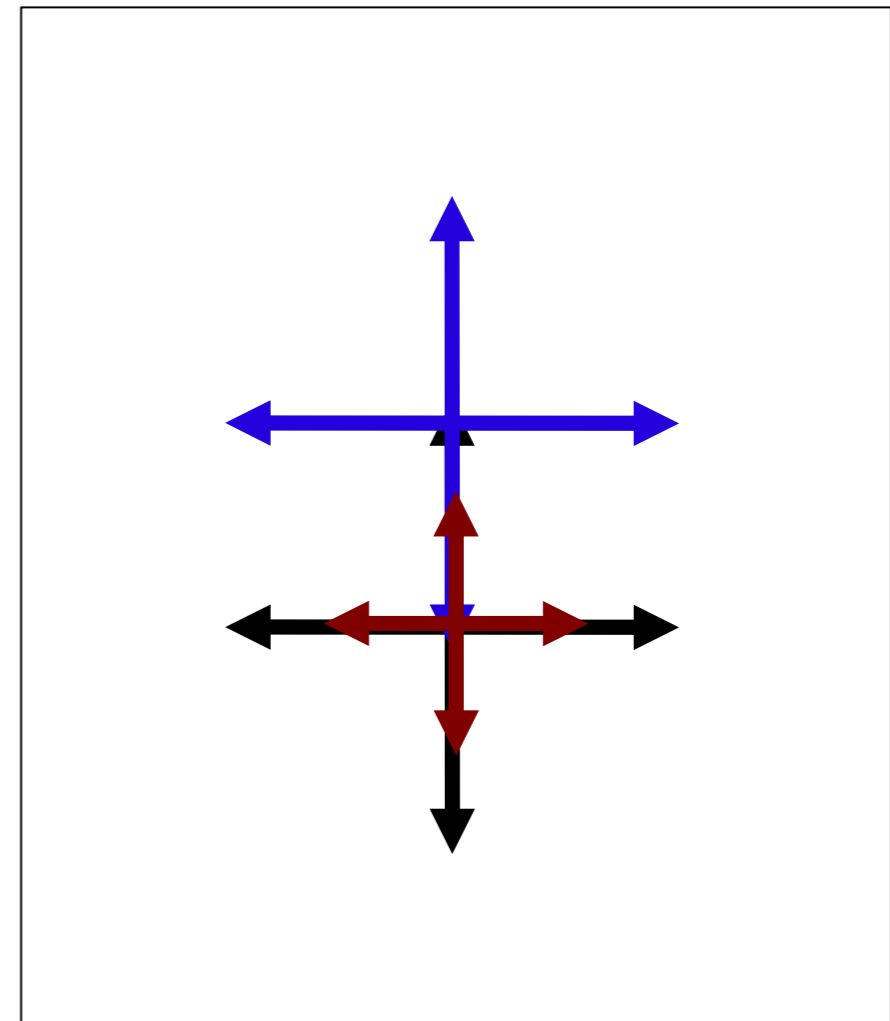
- HOPSPACK (Hybrid Optimization Parallel Search PACKage)
- Asynchrone Implementierung des Generating Set Search (GSS) Algorithmus
- Parallele Operationen durch MPI → Verwendung von mehreren Computerkernen
- Einfache Kopplung mit Anwendungen für unterschiedliche Betriebssysteme

GSS – Generating Set Search

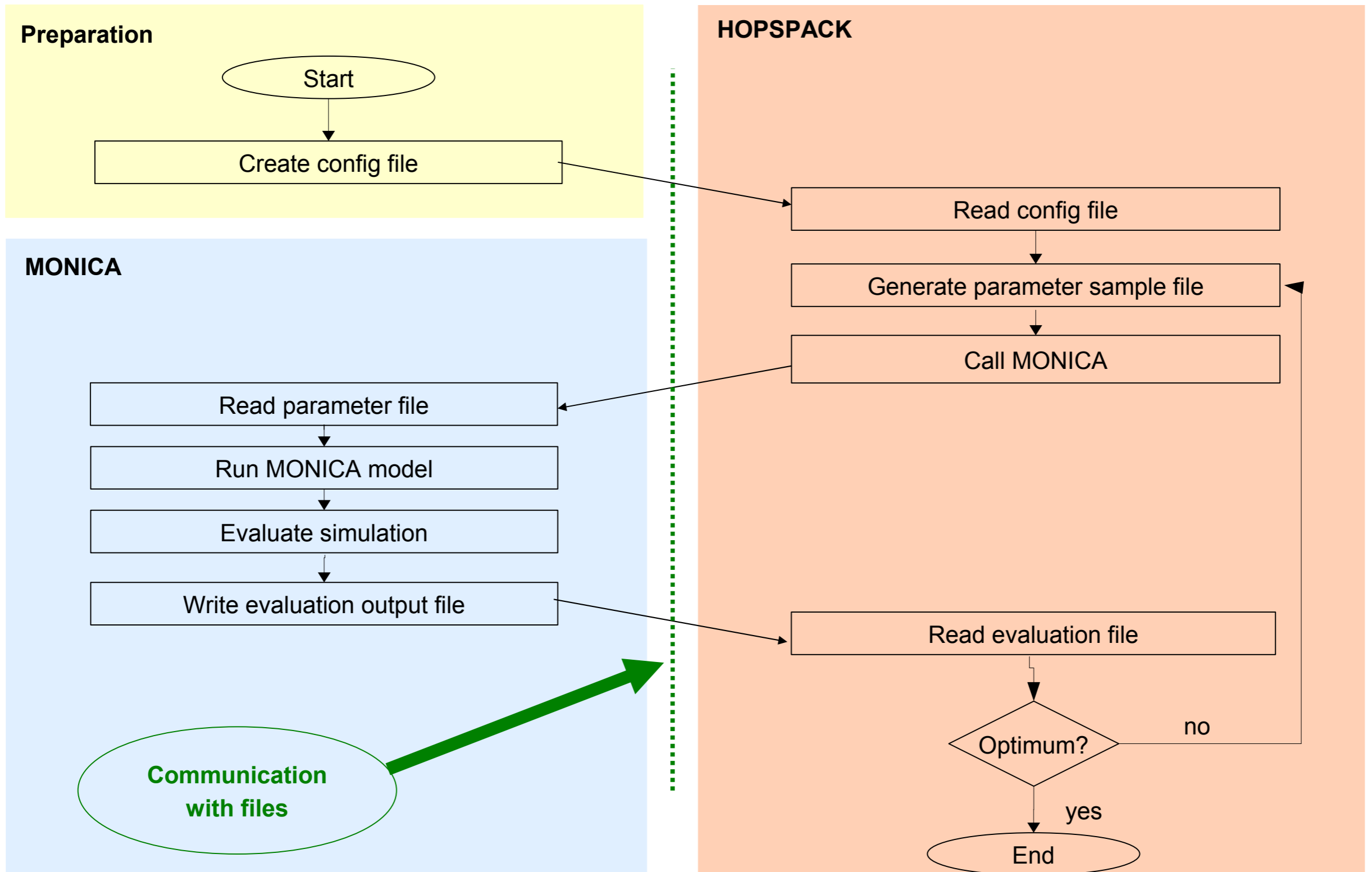
- “Direct Optimization Method”
- Ableitungsfrei

Prinzipielle Arbeitsweise

1. Erzeugung eines Test-Punktes
2. Evaluierung der Zielfunktion für jeden Test-Punkt
3. Ist einer der Testpunkte besser als der Mittelpunkt?
 1. Wenn ja, so ist die Iteration erfolgreich. Bewege das Suchmuster zum neuen Punkt
 2. Wenn nein, ist die Iteration nicht erfolgreich. Reduziere die Größe des Suchmusters.
4. Wiederhole das Vorgehen solange, bis das Suchmuster klein wird (eine gewisse Grenze unterschreitet).



zalf HOPSPACK – Ablauf der Optimierung

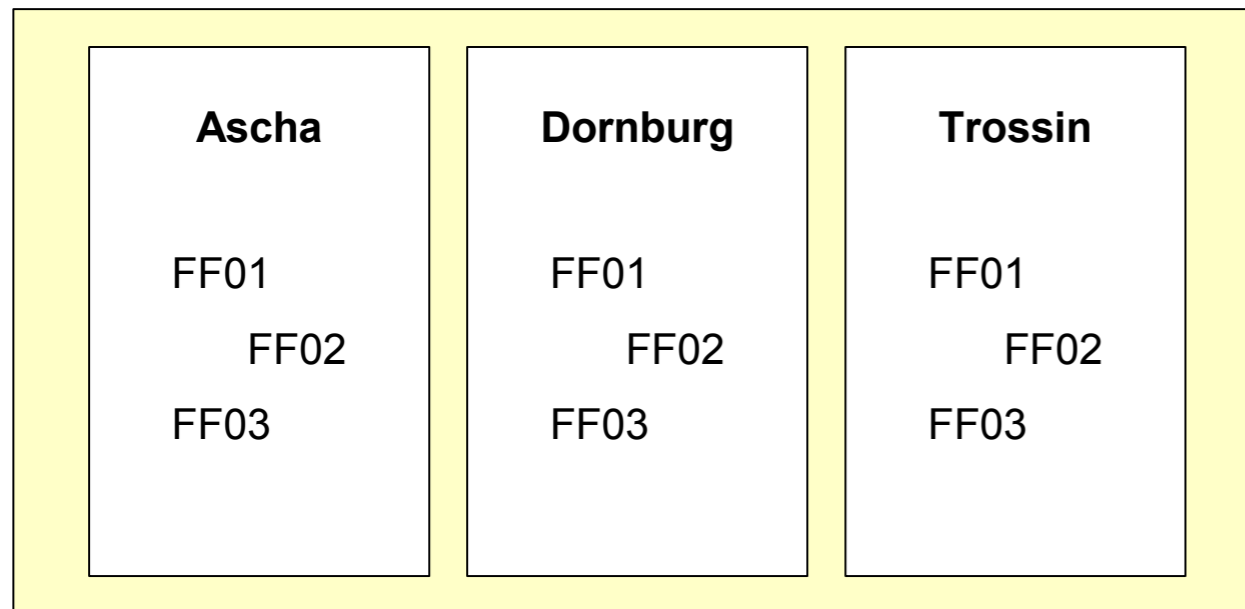


zalf Parameteroptimierung von MONICA

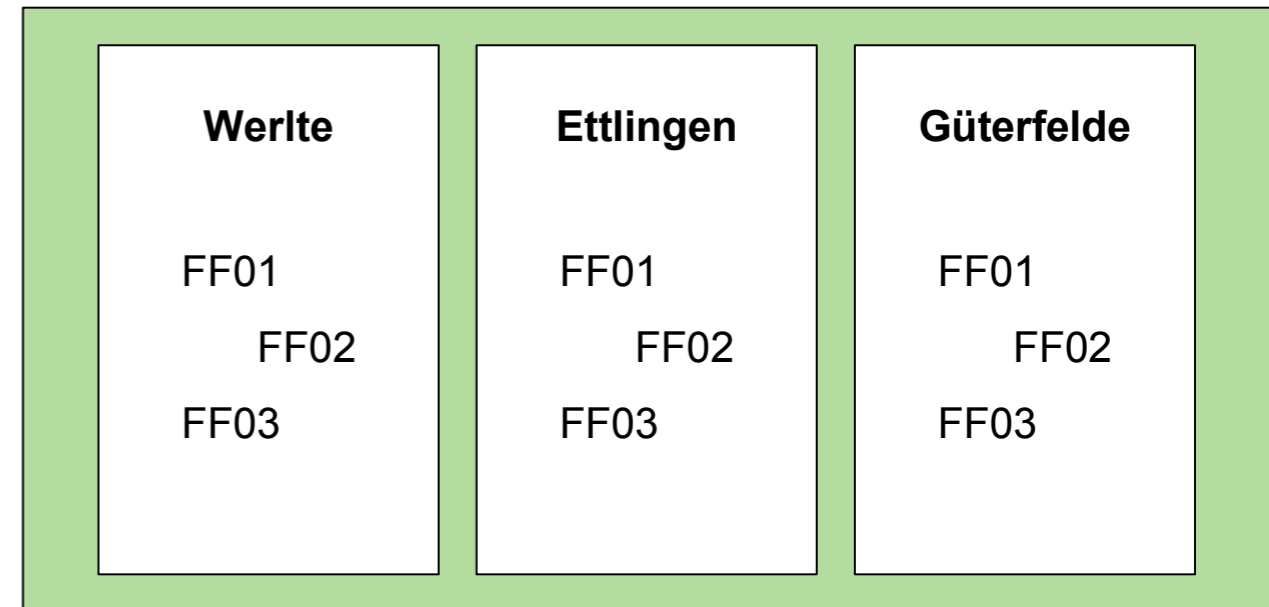
Fruchtart: Mais

- Test der Optimierung zunächst an bereits bekannter Fruchtart
- nMAE → Vergleich zwischen Modellsimulation und Messwerten aus dem EVA-Projekt

Datensätze der Optimierung (Kalibrierung)



Datensätze der Validierung



Wiederholung der Versuche
im Folgejahr

$$n_{\text{Sim}} = 3 * 3 * 2 = 18$$

(Anzahl Simulationen je Optimierungsschritt)

Aggregation aller Simulationsergebnisse
zu einem scharfen Optimierungskriterium?

$$\sum_{n_{\text{Sim}}} \text{nMAE} \longrightarrow \text{Minimierungsproblem}$$

Separate Datensätze für Kalibrierung und Validierung

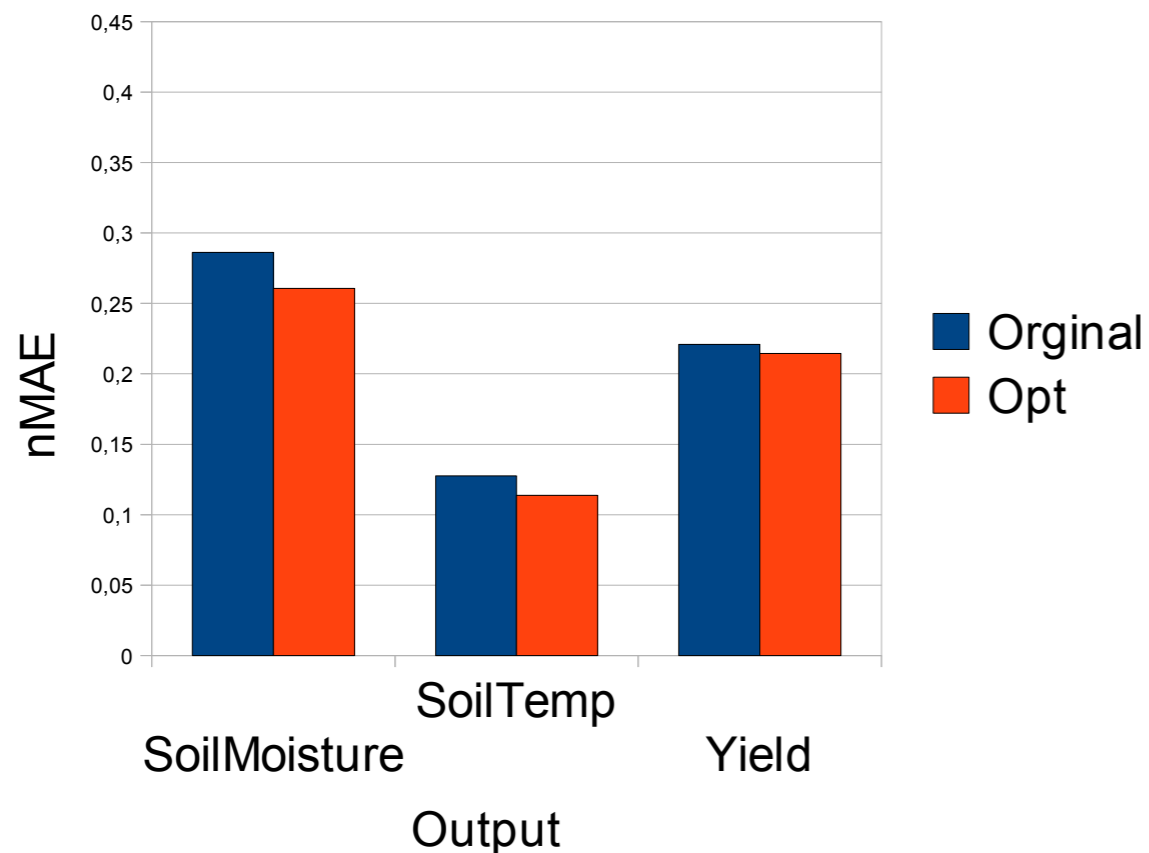
Kalibrierungsstandorte

Ascha, Dornburg, Trossin

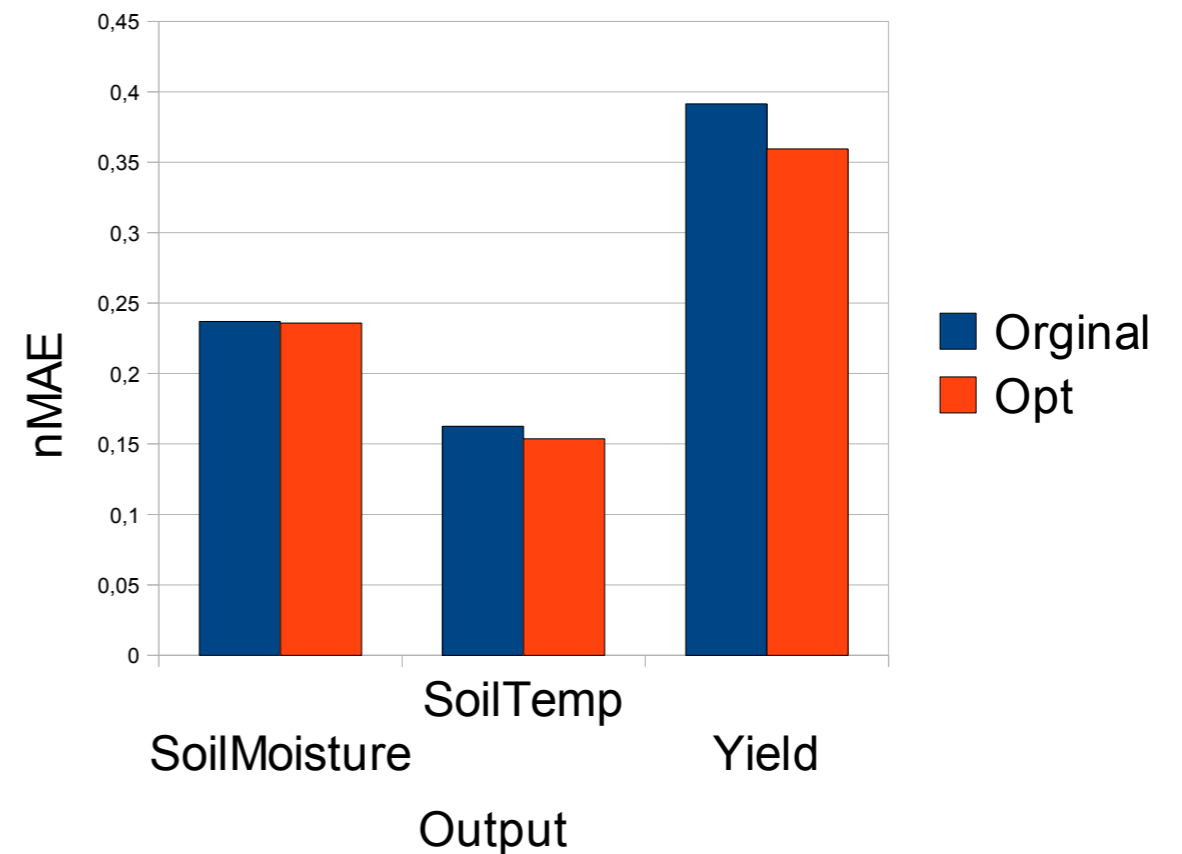
Validierungsstandorte

Ettlingen, Güterfelde, Werlte

Optimierungsergebnis
(Kalibrierungsstandorte)



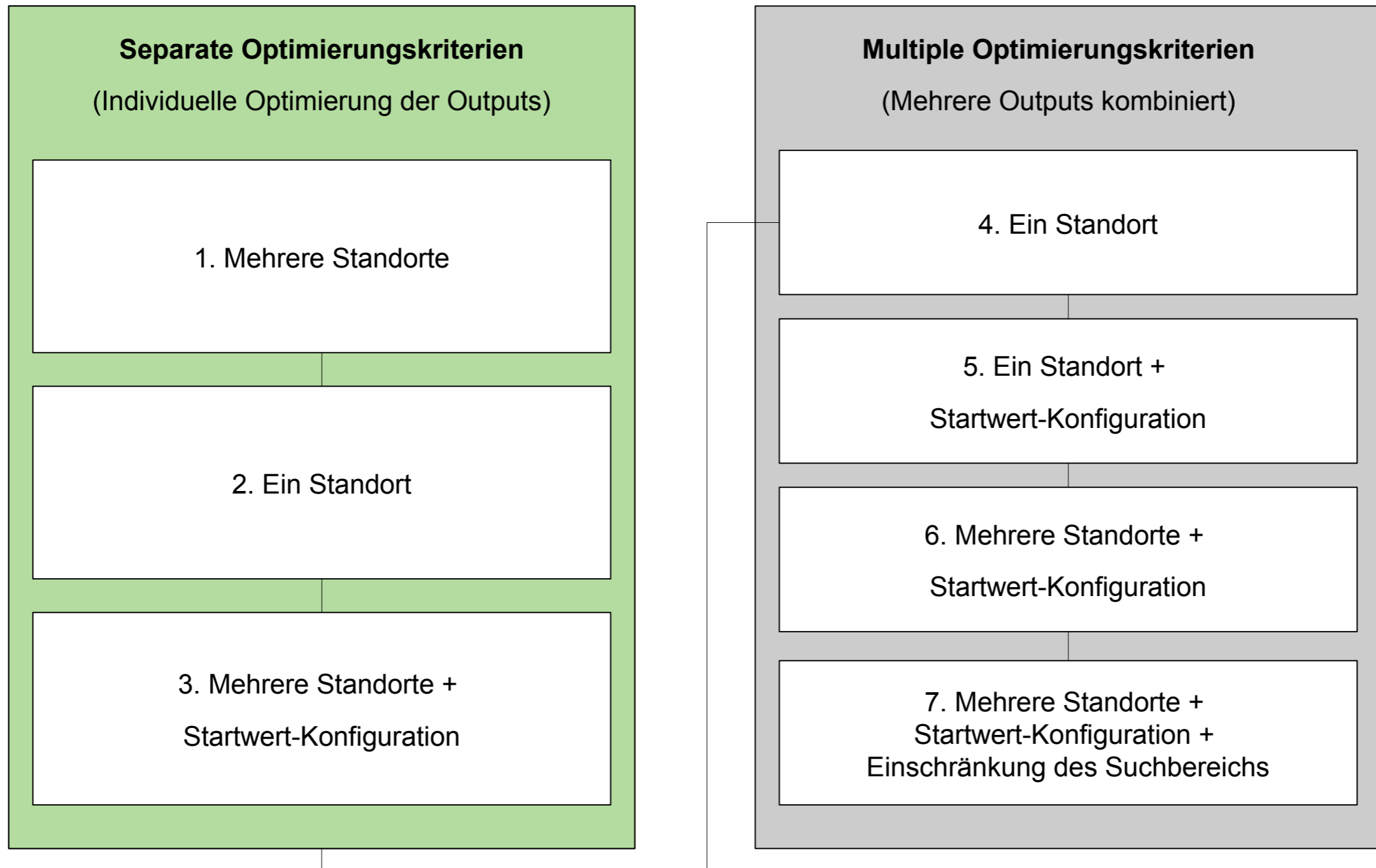
Optimierungsergebnis
(Validierungsstandorte)



➔ Folgende Auswertungen enthalten nur Ergebnisse der Validierung

zalf Überblick über verschiedene Experimente

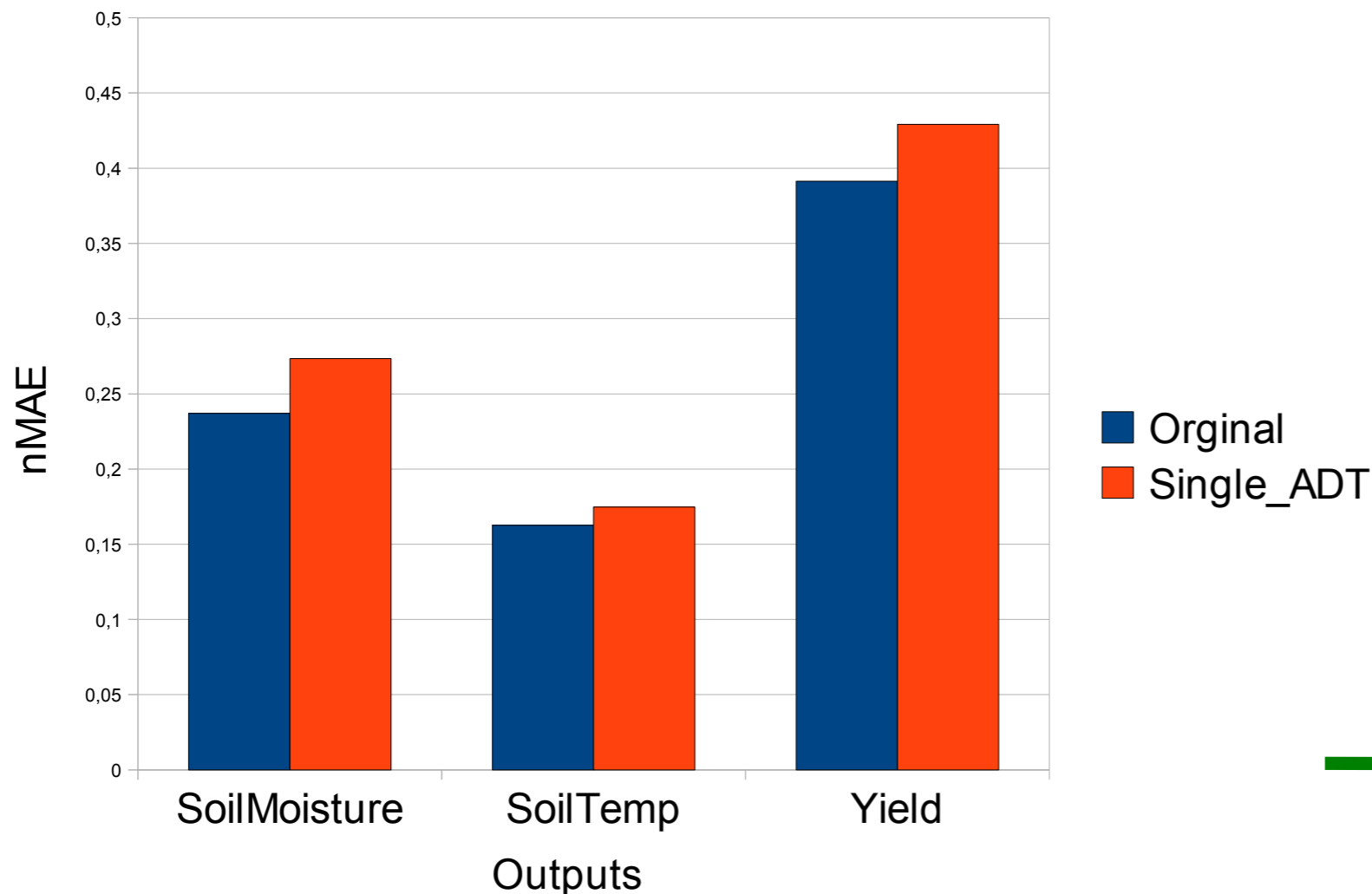
Ziel: Identifikation der besten Optimierungskonfiguration



zalf 1. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha, Dornburg, Trossin – Separate Output-Optimierung

Output	Parameteranzahl
primYield	25
soilMoisture	28
soilTemp	18



Ergebnis

- Optimierung schlechter als bestehender Parametersatz
- Parameter stellenweise aus pflanzenbaulicher Sicht nicht plausibel
 - Problem: Kc-Faktoren jeweils an unterer Grenze des Wertebereichs

Mögliche Ursache

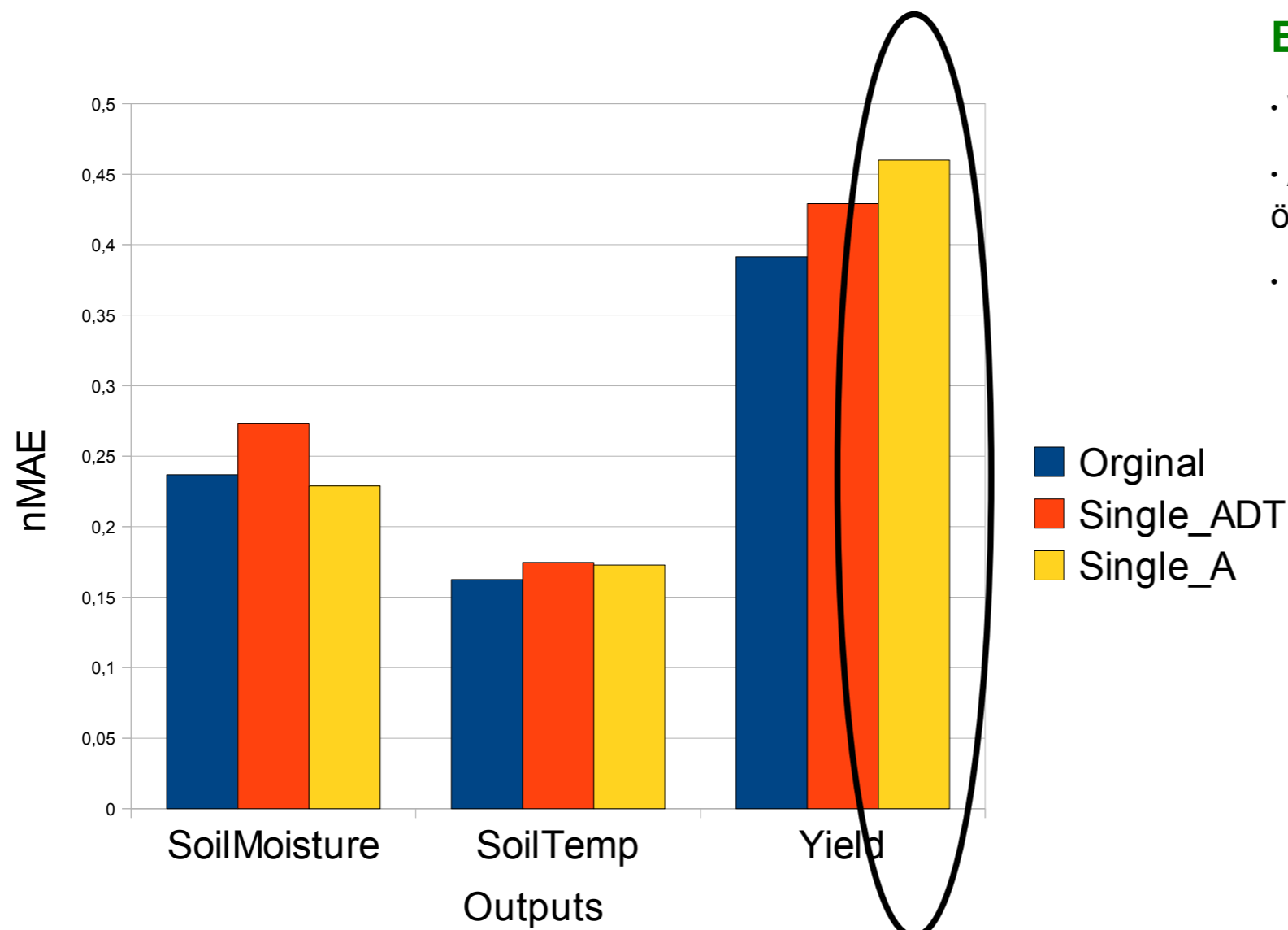
- Optimierung von "Schlechten" Simulationen hat stärkeren Einfluss auf das gesamte Optimierungskriterium
- Kein Startwert vorgegeben

Nächster Schritt:

Reduzierung der Komplexität der Optimierungs-Konfiguration

zalf 2. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha – Separate Output-Optimierung



Ergebnis

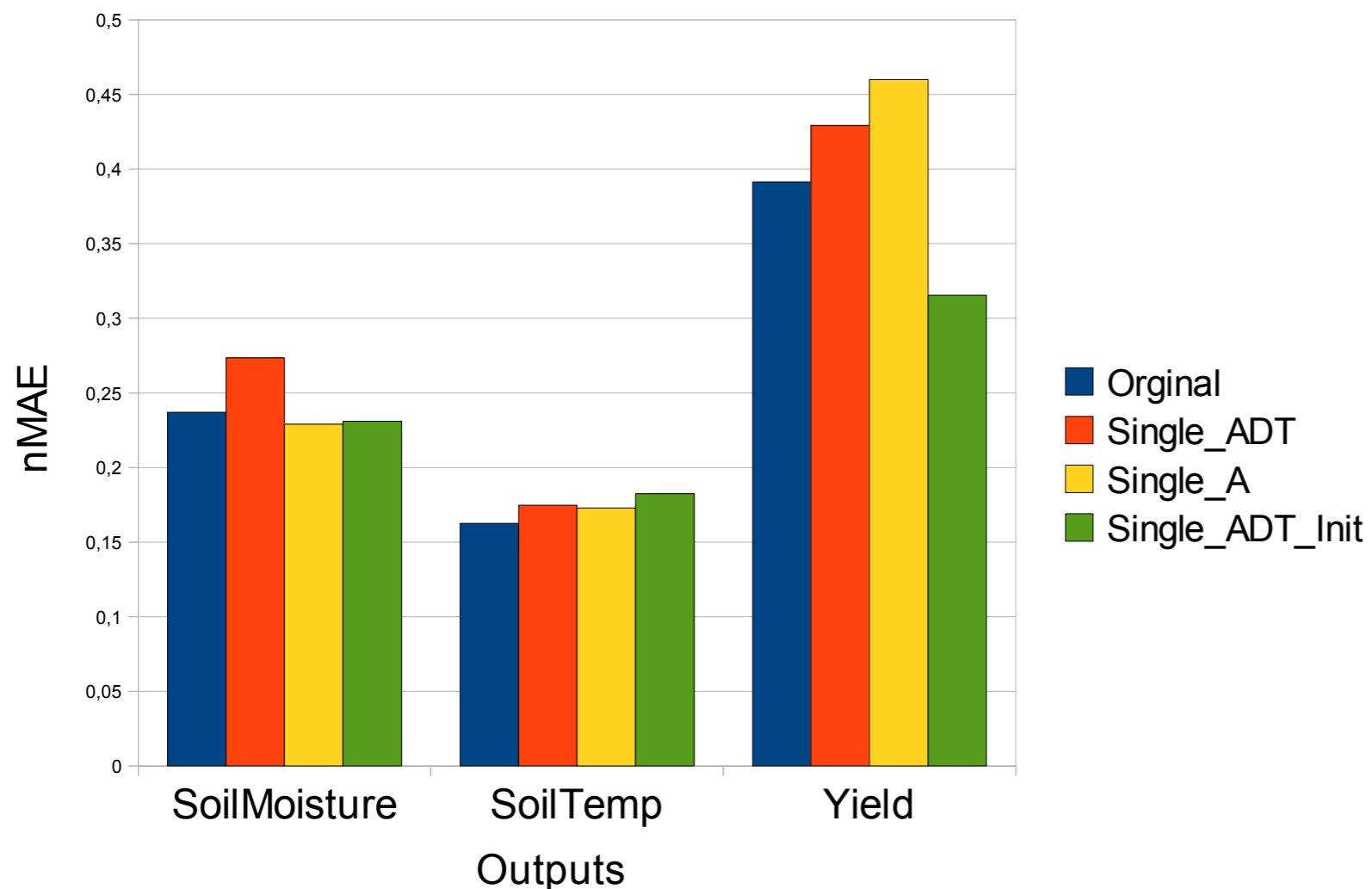
- Wassergehalt besser als zuvor
- Aber: Kc-Faktoren erneut nicht im ökologisch sinnvollen Bereich
- Ertrag schlechter als zuvor

➔ **Nächster Schritt:**
Vorgabe von Startwerten

Single = Separate Output-Optimierung
ADT = Ascha, Dornburg, Trossin

zalf 3. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha, Dornburg, Trossin - Separate Output-Optimierung -
Konfiguration mit Startwert



Ergebnis

- Für Parameter von *Yield* wurden größtenteils definierte Startwerte als optimal identifiziert
- Opt. Parameter von *SoilMoisture* bewegten sich erneut an minimaler Grenze

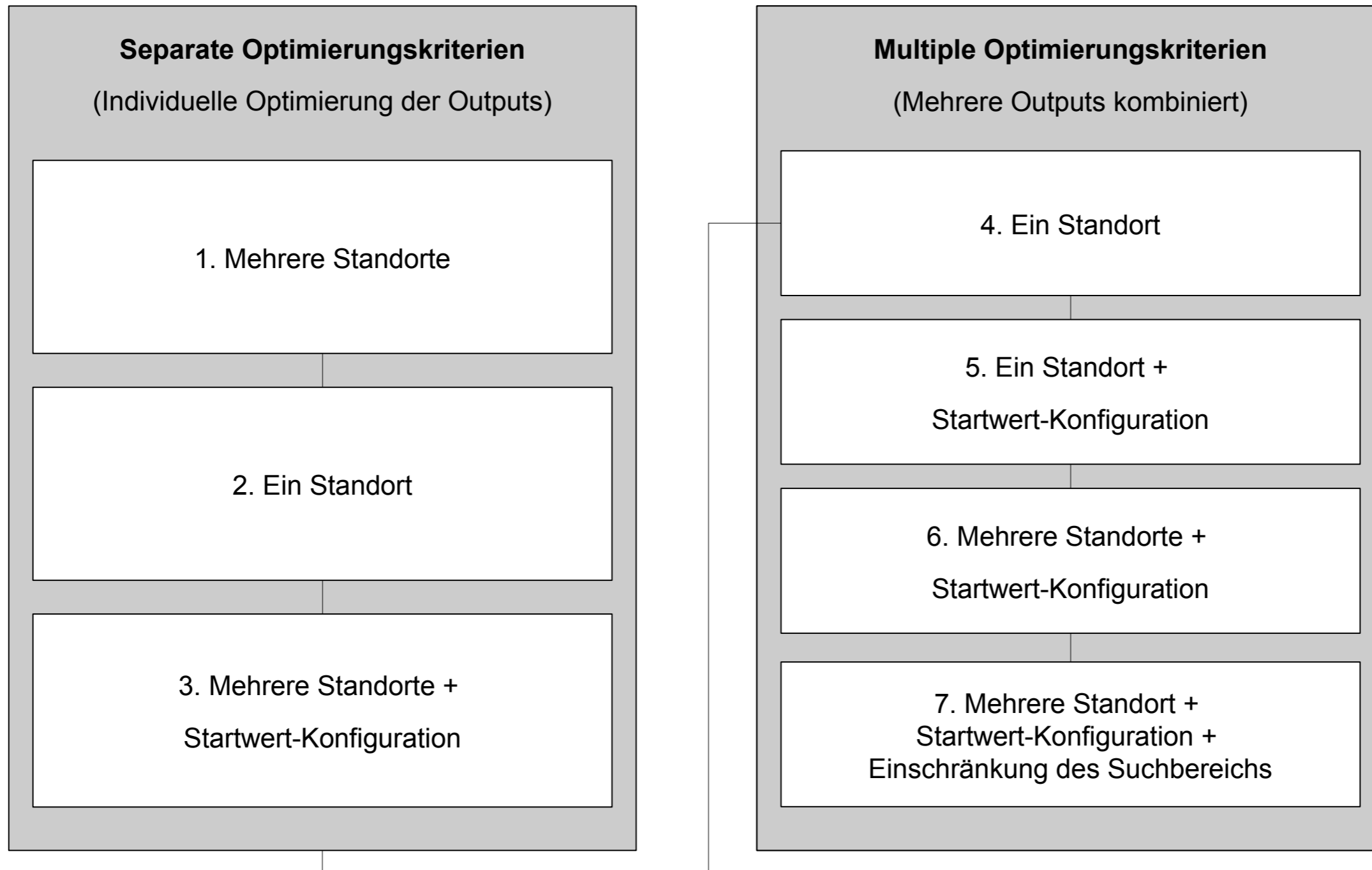
Neuer Ansatz:

Gemeinsame Optimierung für verschiedene Outputs

Problematik:

Höhere Komplexität der Optimierung → Längere Laufzeit

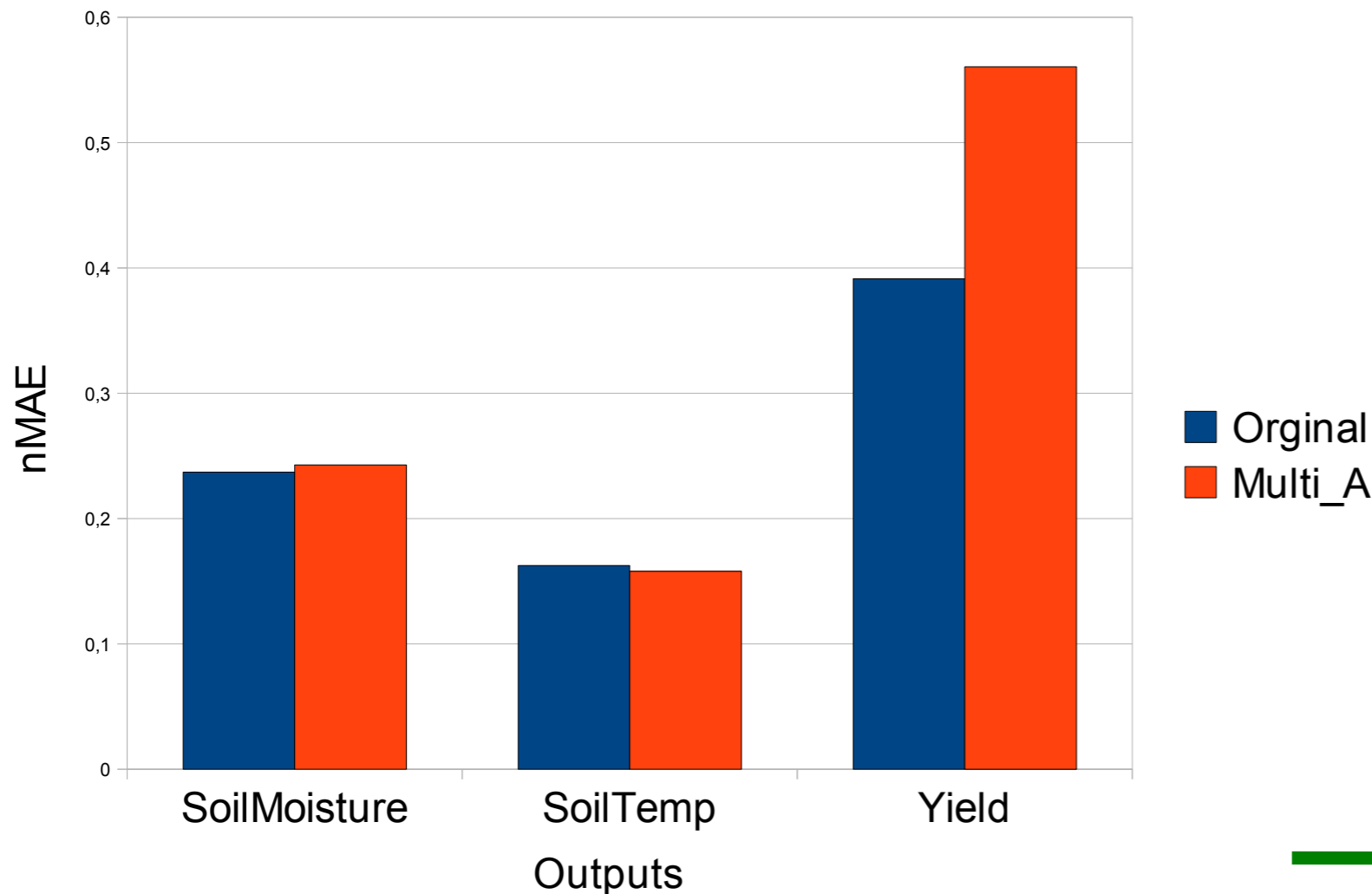
Single = Separate Output-Optimierung
ADT = Ascha, Dornburg, Trossin
Init = Startwerte-Konfiguration



zalf 4. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha – Multikriterielle Optimierung: Yield, SoilMoisture und SoilTemp

Anzahl zu optimierender Parameter: >40



Ergebnis

- Keine Verbesserung für *SoilMoisture* identifiziert
 - Kc-Faktoren innerhalb ökologisch sinnvoller Grenzen
- Verschlechterung von *Yield*

→ Analyse: Verbesserung nur für Kalibrierungsstandort, Verschlechterungen für alle Validierungsstandorte (s. Grafik)

Nächster Schritt:

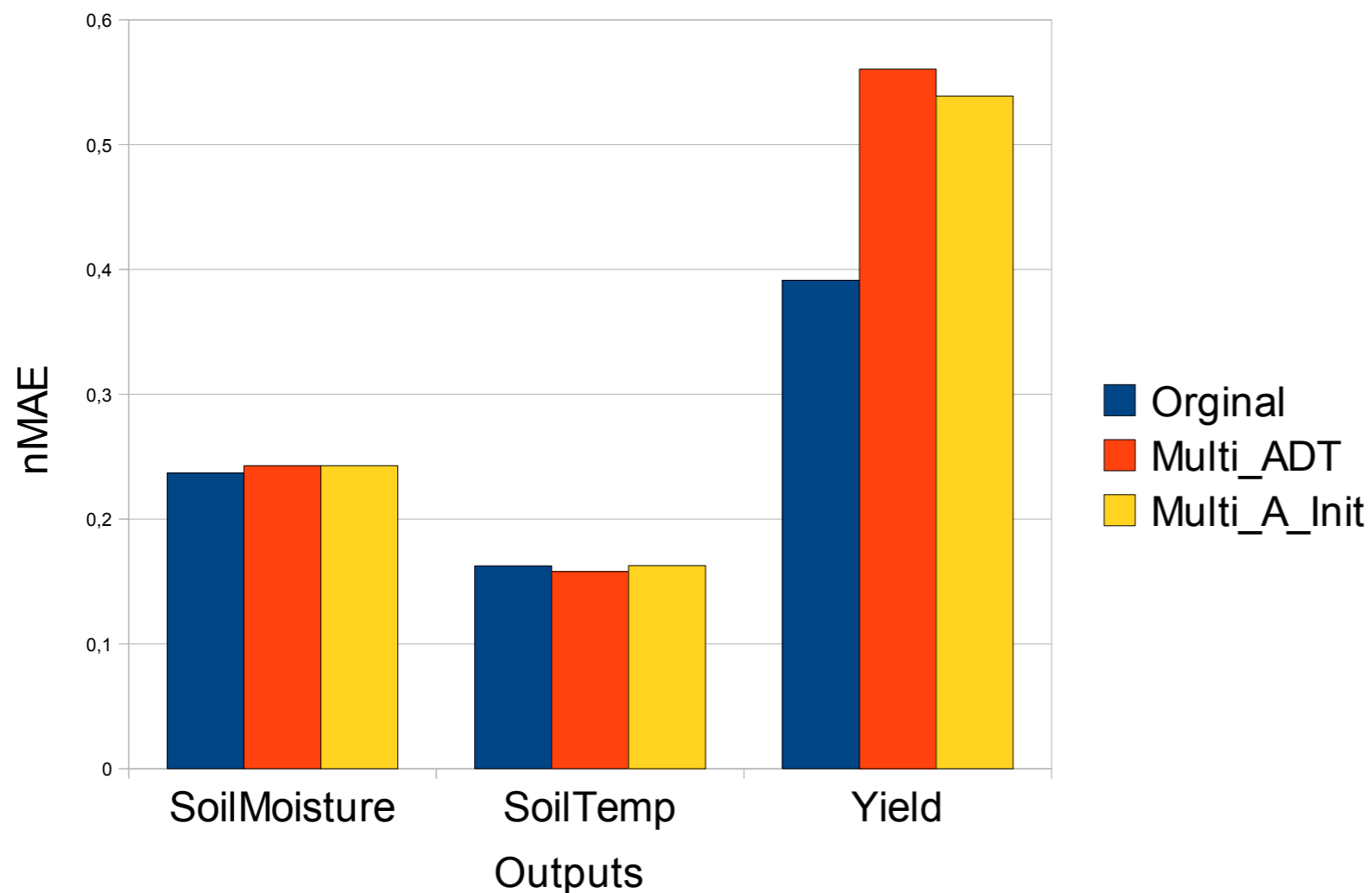
Definition von Startwerten

Multi = Multikriterielle Output-Optimierung
A = Ascha

zalf 5. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha - Multikriterielle Optimierung: Yield, SoilMoisture und SoilTemp

Startwertdefinition



Ergebnis

- Verbesserung für *Yield*
- *SoilMoisture* unverändert → gleiche Parameterwerte
- Minimale Verschlechterung für *SoilTemp*

- Teilweise Initialwerte = Optimale Parameter
- Achtung: Spezialisierung auf den Kalibrierungsstandort

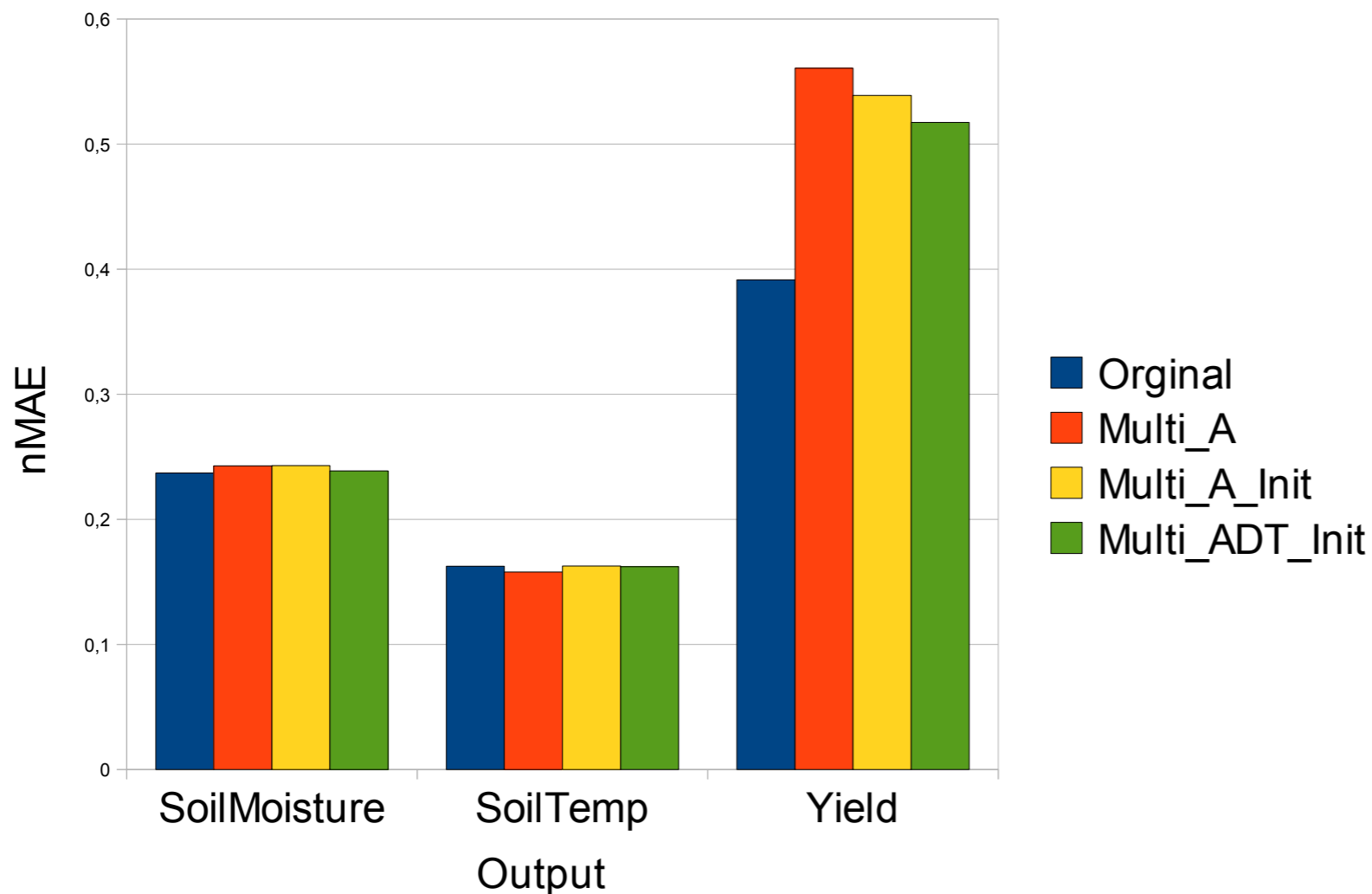
Nächster Schritt:

Erweiterung der Optimierungskonfiguration auf mehrere Standorte

Multi = Multikriterielle Output-Optimierung
ADT = Ascha, Dornburg, Trossin
Init = Startwerte-Konfiguration

zalf 6. Optimierungsexperiment

Experiment: Ascha, Dornburg, Trossin –
Multikriterielle Optimierung: Yield, SoilMoisture und SoilTemp
Startwerte-Konfiguration



Ergebnis

- Optimierung an mehreren Standorten führte zu verbesserten Simulationsergebnissen
- Aber: Immer noch schlechter als Original-Parametersatz



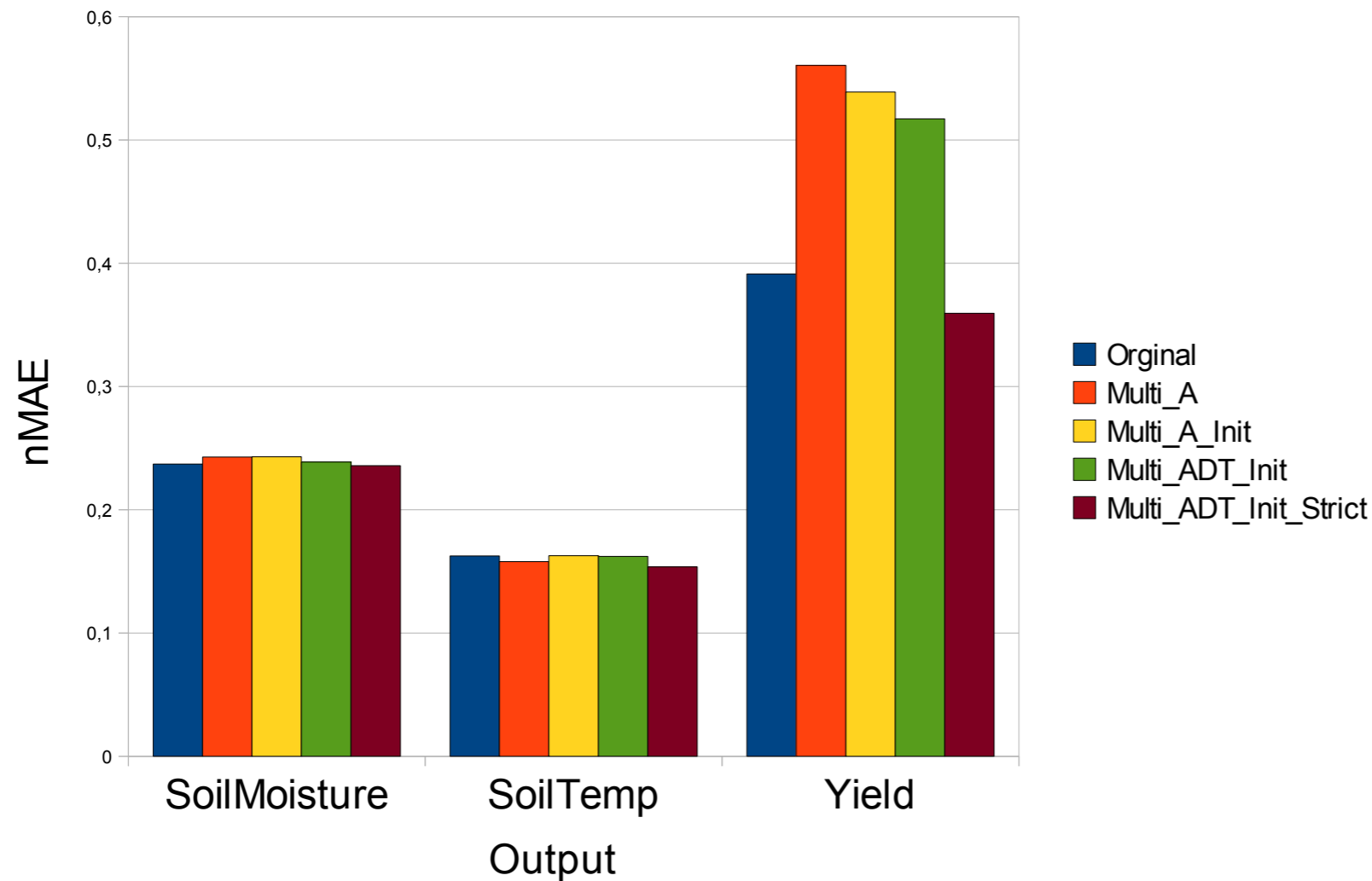
Nächster Schritt:

Einschränkung des Suchraumes

Multi = Multikriterielle Output-Optimierung
A = Ascha
ADT = Ascha, Dornburg, Trossin
Init = Startwerte-Konfiguration

zalf 7. Experiment

Experiment: Ascha, Dornburg, Trossin –
Multikriterielle Optimierung: primYield, soilMoisture und soilTemp
Startwerte-Konfiguration + Eingrenzung des Suchbereichs



Ergebnis

- Eingrenzung des Suchbereiches erfolgreich
- Bestes Gesamtergebnis aller Optimierungsexperimente

Multi = Gemeinsame Output-Optimierung
ADT = Ascha, Dornburg, Trossin
Init = Startwerte-Konfiguration
Strict = Eingrenzung des Wertebereichs

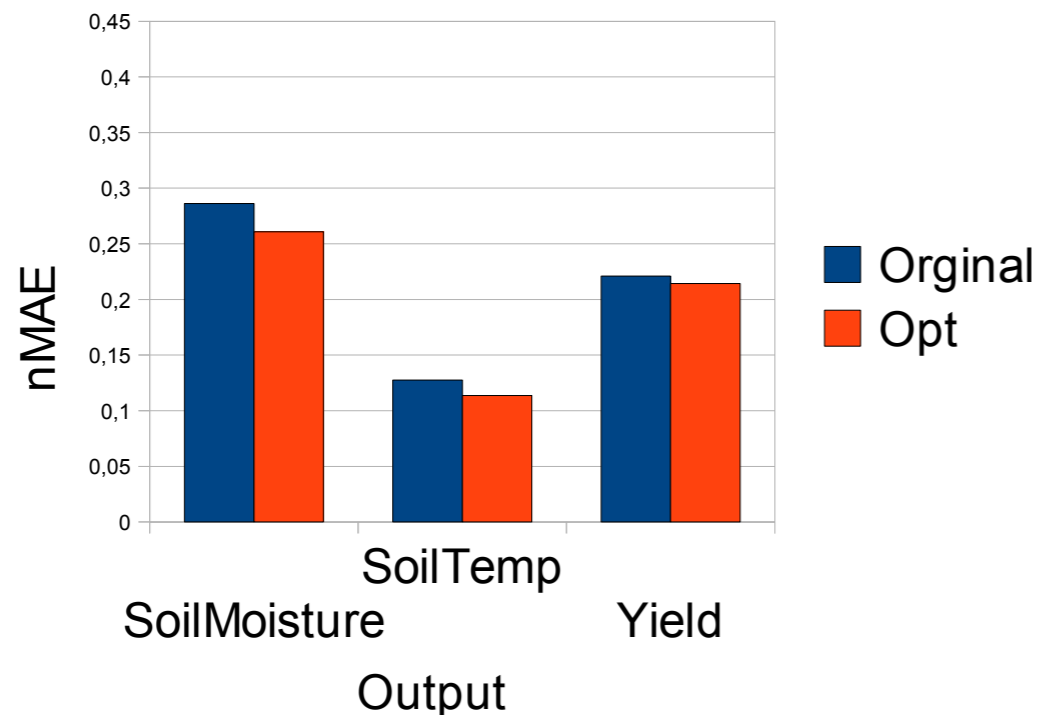
Separate Optimierung für Outputs

- + Experiment mit Vorgabe von Startwerten erzielte gute Ergebnisse
- + Je mehr Standorte, desto besser das Gesamtergebnis
- Ertrag schlechter als vorhandene Konfiguration
- Parameterwerte aus ökologischer Sicht teilweise unsinnig

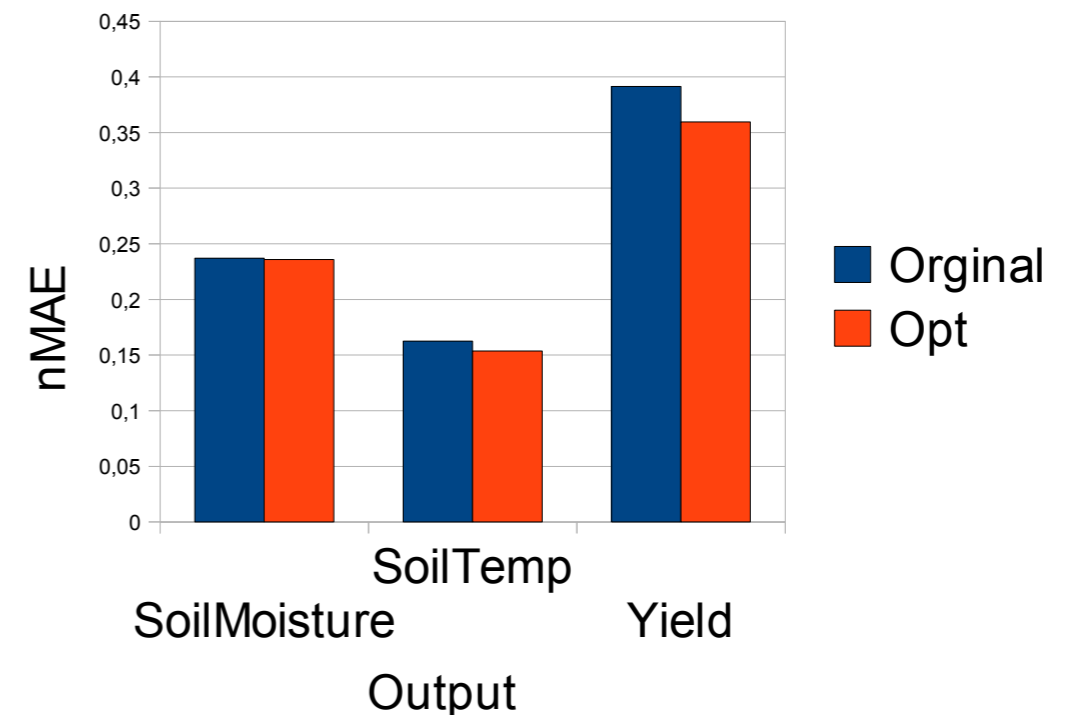
Multikriterielle Optimierung

- + Konfiguration von Startwerten führte zu einem besseren Optimierungsergebnis
- + Einschränkung des Suchbereichs sinnvoll, wenn Wissen über mögliche Parameterwerte vorhanden ist
- + Parameter mit sinnvollen Belegungen
- + Verwendung von mehreren Standorten für die Kalibrierung verhindert Spezialisierung auf einen bestimmten Standort und führt zu besseren Validierungsergebnissen

Optimierungsergebnis
(Kalibrierungsstandorte)



Optimierungsergebnis
(Validierungsstandorte)



- Sensitivitätsanalysen identifizierten wichtigste Parameter der Modells
 - Reduzierung des Komplexität des Optimierungsproblem durch Sensitivitätsanalysen
 - Optimierung für verschiedene Outputs gleichzeitig erzielte beste Ergebnisse (Berücksichtigung der Parameterinteraktionen)
 - Vorgabe von Startwerten notwendig
 - Einschränkung des Suchbereichs reduziert Gefahr eines lokalen Optimums und stellt sinnvolle Parameterbelegung sicher
-
- Verwendung eines anderen Optimierungskriterium
 - Test eines weiteren Optimierungsverfahren (Evolutionäre Algorithmen)
 - Optimierung weiterer Fruchtarten



Gefördert durch:



aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages