

基于 SCE - UA 算法的小麦穗分化期模拟模型参数优化

刘峻明^{1,2} 潘佩珠^{1,2} 王鹏新^{1,2} 崔珍珍^{1,2} 胡新³

(1. 中国农业大学信息与电气工程学院, 北京 100083; 2. 农业部农业灾害遥感重点实验室, 北京 100083;
3. 商丘市农林科学院小麦研究所, 商丘 476000)

摘要: 以河南省商丘市为研究区, 首先采用 OAT (One-at-a-time) 方法对 WheatGrow 模型的输入品种参数进行敏感性分析, 在此基础上以抽穗期的开始日期作为约束条件构建代价函数, 引入 SCE - UA (Shuffled complex evolution method developed at the University of Arizona) 算法求解得到最优作物品种参数组合, 并利用 2015—2016 年度和 2016—2017 年度田间实验资料对 SCE - UA 算法的有效性进行验证。结果表明, 基本早熟性参数对穗分化期的模拟结果影响最显著, 温度敏感性参数比光周期敏感性参数和生理春化时间参数具有更高的敏感度, 生理春化时间的敏感度最低。基于优化后的参数得到的穗分化期模拟值与观测值之间的平均绝对误差 (Mean absolute error, MAE) 和均方根误差 (Root mean square error, RMSE) 均小于 3 d, 表明 SCE - UA 算法可以有效地获取 WheatGrow 模型最优品种参数组合。本研究可为 WheatGrow 模型品种参数的调整优化和模型的推广应用提供依据。

关键词: 冬小麦; 模型参数优化; SCE - UA 算法; WheatGrow 模型; 穗分化期

中图分类号: S126 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-1298(2018)04-0232-09

Parameters Optimization of Wheat Spike Differentiation Stages Model Based on SCE - UA Algorithm

LIU Junming^{1,2} PAN Peizhu^{1,2} WANG Pengxin^{1,2} CUI Zhenzhen^{1,2} HU Xin³

(1. College of Information and Electrical Engineering, China Agricultural University, Beijing 100083, China

2. Key Laboratory of Remote Sensing for Agri-Hazards, Ministry of Agriculture, Beijing 100083, China

3. Wheat Research Institute, Shangqiu Academy of Agriculture and Forestry Sciences, Shangqiu 476000, China)

Abstract: WheatGrow model is a mechanism model for the simulation of growth and development process of wheat spike differentiation, but the crop varietal parameters to drive the model are more difficult to obtain, which greatly limits its application. Shangqiu, which is in Henan Province was taken as the studying area and the sensitivity of varietal parameters of WheatGrow model was analyzed with the method of one-at-a-time (OAT). On this basis, the cost function was constructed with start date of heading as the constraint condition, and shuffled complex evolution method developed at the University of Arizona (SCE - UA) was applied to search for optimal varietal parameters. At last, a series of experiments on spike differentiation stages were carried out in two years (from 2015 to 2016 and from 2016 to 2017) to verify optimized results and the model. The results showed that intrinsic earliness (IE) had the most significant effect on the simulation results of spike differentiation stages, temperature sensitivity (TS) had higher sensitivity than photoperiod sensitivity (PS) and physiological vernalization time (PVT), and the sensitivity of physiological vernalization time (PVT) was the lowest of all varietal parameters. The mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE) between the simulated and the observed values of the spike differentiation stages based on the optimized parameters were both less than three days, indicating that the SCE - UA algorithm can effectively obtain the optimal parameters of WheatGrow model. Therefore, the SCE - UA algorithm was a feasible optimization method for WheatGrow calibration and validation.

Key words: winter wheat; parameters optimization; SCE - UA algorithm; WheatGrow model; spike differentiation stages

0 引言

小麦穗分化期识别是物候监测的重要内容,准确预测小麦穗分化期对于正确制定栽培措施以实现小麦稳产高产具有重要意义^[1]。当前,基于作物生长发育内在机理的作物模型是研究作物物候期的有效工具,在作物栽培、气候变化对农业生产的影响、产量预测等方面有重要的作用^[2-3]。国际上已经建立和发展了 CERES - Wheat、APSIM - Wheat 和 WOFOST 等数十种成熟的小麦生长模型,这些模型通过数学模型定量描述小麦生长发育、光合生产、器官建成及产量形成的过程,依据麦株器官的外部性状与内部性状的对应关系混合定义生育时期或者完全根据麦株外部器官的形成划分生育时期,侧重于小麦营养生长过程的研究,而对以小麦穗分化进程为主线的生殖生长过程的研究少有报道。SPIKEGRO^[4]模型和 WheatGrow^[5-6]模型以预测小麦茎顶端发育为主线预测小麦穗分化期。其中, SPIKEGRO 模型通过叶热间隔来模拟小麦茎顶端发育进程,但小麦内部穗分化进程与植株外部叶片的出生并不是稳定对应的关系,因而该模型在小麦穗分化期模拟方面存在较大误差。CAO 等^[5-6]建立的 WheatGrow 模型是进行小麦穗分化进程模拟的机理性模型,其根据生理发育时间定量预测小麦穗分化期,具有较强的预测性。但 WheatGrow 模型同其他建立在作物发育、光合、呼吸、干物质增长及分配等动态过程基础上的机理性作物模型一样,存在许多参数。其中,驱动模型运行的作物品种参数受作物品种自身特性以及地域分布差异因素的影响往往时空变异性强,存在较大的不确定性且无法通过实验测定获得,很大程度限制了其推广应用^[7-9]。因此,如何快速准确地估算 WheatGrow 模型参数对于小麦穗分化期的模拟和模型的推广应用具有重要的意义。

目前,作物模型的参数大多数通过传统的人工试错法获得,该方法通过比较模拟值与实测值的误差寻找最优参数,不仅耗时费力,而且受研究者农学知识及主观因素的影响,很难获得可靠、最优的模型参数^[10]。近年来,随着计算机科学技术的发展,逐渐发展了一些参数自动率定方法,通过参数自动寻优可以实现作物模型参数的快速准确估算,提高了参数估算的效率和准确度。比较典型的参数自动优化方法包括复合形混合演化(Shuffled complex evolution method developed at the University of Arizona, SCE - UA)算法^[11-12]、PEST(Parameter estimation)法^[13]和模拟退火(Simulated annealing,

SA)算法^[14]等。其中 SCE - UA 算法是 DUAN 等^[11-12,15]于 1993 年提出的一种全局优化算法,是目前为止对于非线性复杂模型采用随机搜索寻找最优值最有效的方法之一。该算法在水文模型参数优化方面已有广泛的应用^[16-17]。由于 SCE - UA 算法灵活且针对非线性问题优化效果良好,逐渐被引用到作物模型的参数优化中,利用该算法同化遥感数据可以实现作物模型参数的快速有效估算^[18-19]。

本研究以冬小麦为研究对象,在对 WheatGrow 模型输入品种参数敏感性分析的基础上,引入 SCE - UA 全局优化算法求解最优作物品种参数组合,并利用田间实验资料对参数优化后的 WheatGrow 模型模拟结果进行检验。

1 研究区与数据

1.1 研究区概况

河南省商丘市位于河南省东部,地处黄淮平原腹地,是黄淮麦区的主产区和高产区之一^[20]。该区处于东经 114°49' ~ 116°39'、北纬 33°43' ~ 34°52' 之间,属暖温带半湿润大陆性季风气候,年均温 14℃ 左右,年平均日照时数约为 2 205 ~ 2 427 h,年均降水量 623 mm,无霜期平均为 211 d,冬小麦种植以半冬性品种为主。冬小麦常年播期一般在 10 月上旬至中旬,次年 2 月下旬返青,3 月中下旬进入拔节期,4 月中下旬抽穗,5 月底至 6 月初成熟。研究区示意图如图 1 所示。

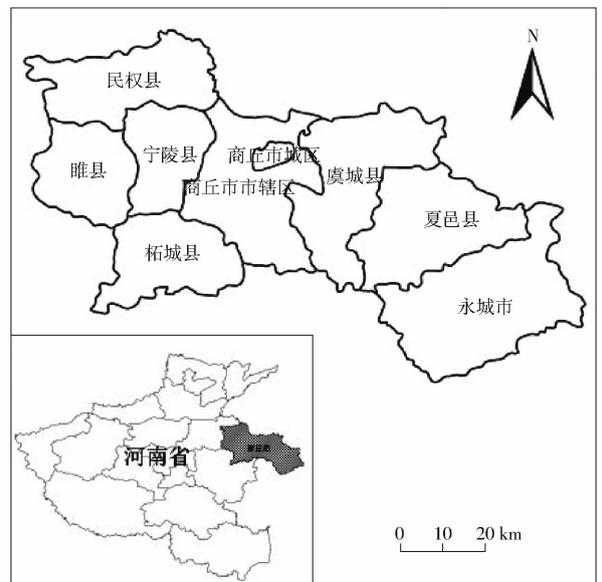


图 1 研究区示意图

Fig. 1 Map of study area

1.2 研究数据

1.2.1 气象数据

气象数据主要包括商丘基准站(34°27'N, 115°40'E, 海拔 50.1 m)2005—2006 年至 2016—2017 年

各年度冬小麦生育期内逐日最高气温和最低气温时间序列数据。其次还包括2005—2006年至2014—2015年各年度冬小麦物候期资料,主要为冬小麦播种、出苗、拔节和抽穗的开始日期,其中抽穗期开始日期资料将作为调参实测数据进行WheatGrow模型参数优化。以上数据均来源于中国气象数据网(<http://data.cma.cn/>)。

1.2.2 实测数据

冬小麦穗分化期田间观测实验于2016年和2017年3—5月在河南省商丘市农林科学研究所实验示范中心双八实验基地(34°31'55"N, 115°42'37"E, 海拔50.1 m)进行,选择当地常见半冬性品种温麦6号作为实验品种。播种日期分别为2015年10月15日和2016年10月12日,次年4月中旬普遍进入抽穗期。实验田块内部均匀,地势平坦,水肥供应充足。

田间实验观测时间段内,每隔3 d取实验田中长势均匀、有代表性的小麦植株进行穗分化期观察实验。每次取5株小麦植株进行观测,以各样本植株的主茎为观察对象,解剖后置于双目解剖镜下观察穗分化进程并拍照记录,以崔金梅等^[21]小麦穗分化期划分说明及插图作为穗分化期观测的具体参考资料,观测记录返青后冬小麦穗分化各个阶段出现的具体日期,主要包括小花分化期、雌雄蕊分化期、药隔分化期、四分体分化期的起止日期。同时,观察记录实验田中冬小麦抽穗期的开始日期。田间实验获取的数据主要用来验证模型。

2 研究方法

2.1 WheatGrow 模型

WheatGrow是基于过程的机理性小麦生长发育模型。该模型通过生理发育时间(Physiological development times, PDT)定量模拟小麦茎顶端的穗分化过程,当PDT值累积达到特定的数值时,穗分化期即进入下一个阶段。WheatGrow模型中设定冬小麦返青后穗分化进入小花分化期、雌雄蕊分化期、药隔分化期、四分体分化期以及抽穗期所对应的PDT阈值分别为14.5、16.1、17.9、21.4和26.8^[6]。

在该模型中,PDT值由小麦每日生理效应(Daily physiological effectiveness, DPE)逐日累积得到,DPE则是每日热效应(Daily thermal effectiveness, DTE)、每日热敏感性(Daily thermal sensitivity, DTS)和基本早熟性(Intrinsic earliness, IE)三者共同作用的结果

$$P_{DT} = \sum D_{PE} \quad (1)$$

$$\text{其中} \quad D_{PE} = D_{TE} D_{TS} I_E \quad (2)$$

DTE用来表达温度对小麦发育进程的影响,相对热效应值(Relative thermal effectiveness, RTE)是小麦发育三基点温度和品种温度敏感性的函数,每日的DTE由一天等时间间距确定的8个时刻的RTE平均得到

$$D_{TE} = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 R_{TE}(i) \quad (3)$$

其中

$$R_{TE}(i) = \begin{cases} \left[\sin \left(\frac{T_i - T_b}{T_o - T_b} \frac{\pi}{2} \right) \right]^{T_s} & (T_b \leq T_i \leq T_o) \\ \left[\sin \left(\frac{T_m - T_i}{T_m - T_o} \frac{\pi}{2} \right) \right]^{\frac{T_m - T_o}{T_o - T_b} T_s} & (T_o \leq T_i \leq T_m) \end{cases} \quad (4)$$

式中 $R_{TE}(i)$ ——第*i*时刻的相对热效应

T_i ——第*i*时刻的气温,℃

T_b ——小麦生长发育的基点气温,℃

T_o ——小麦生长发育的最适气温,℃

T_m ——小麦生长发育的最高气温,℃

T_s ——品种温度敏感性

DTS用来表达小麦每天对热效应的敏感程度。在冬小麦不同的发育阶段,每日热敏感性的影响因素不同。小麦在完成春化作用之前,DTS受春化作用、脱春化作用和相对光周期效应(Relative photoperiod effectiveness, RPE)共同影响。春化作用完成后,RPE成为主导因素。DTS计算参照文献^[6]。

IE是用于表达品种熟性的参数,体现不同小麦品种到达开花所需最短生理时间的遗传特性,其取值范围为0.6~1之间,越早熟的品种,IE取值越大。

2.2 参数敏感性分析方法

模型参数的敏感性分析对于提高模型运行效率以及精准度具有重要意义。本文采用OAT(One-at-a-time)方法^[22]对模型中冬小麦品种参数进行敏感性分析,即每次运行模型时只对其中一个参数值增加或者减少,如果增减溢出参数取值范围,则适当调整。本文用相对敏感度表示敏感性^[23],即

$$R_s = \left| \frac{\frac{y(x + \Delta x) - y(x)}{y(x)}}{\frac{\Delta x}{x}} \right| \quad (5)$$

式中 R_s ——相对敏感度

x ——WheatGrow模型参数中某一参数值

Δx ——参数*x*的改变量

$y(x)$ ——参数改变前冬小麦穗分化期模拟值

$y(x + \Delta x)$ ——参数改变后的冬小麦穗分化期模拟值

R_s 值越大表示该参数越敏感,反之则越不敏感。

2.3 SCE-UA 算法

2.3.1 SCE-UA 算法介绍

SCE-UA 算法是一种全局优化算法,该算法综合了确定性搜索、随机搜索和竞争演化等算法的优点,在多参数组合的全局搜索性能和效率方面表现突出。另外,该优化算法具有对优化参数初始值不敏感的特点,增加了模型在更大范围内应用的可能性。其关键部分为竞争的复合型进化算法(Competitive complex evolution method, CCE)。SCE-UA 算法的主要步骤描述如下^[11-12]:

(1) 算法初始化:假定待优化问题是 n 维问题,参与演化的复合形个数为 p ($p \geq 1$) 和每个复合形包含的点数量为 m ($m \geq n + 1$),则样本点数目为 $s = pm$ 。

(2) 生成样本点:在可行域内随机产生 s 个样本点 x_1, x_2, \dots, x_s , 然后计算每一点 x_i 的函数值 $f_i = f(x_i)$ ($i = 1, 2, \dots, s$)。

(3) 样本点排序:把 s 个样本点函数值 (x_i, f_i) 按升序排列,排序后仍记为 (x_i, f_i) ($i = 1, 2, \dots, s$), 其中 $f_1 \leq f_2 \leq \dots \leq f_s$, $D = \{(x_i, f_i) \mid (i = 1, 2, \dots, s)\}$ 。

(4) 划分复合形群体:将 D 划分为 p 个复合形 A_1, A_2, \dots, A_p , 每个复合形含有 m 个点, 其中: $A^k = \{(x_j^k, f_j^k) \mid x_j^k = x_{k+m(k-1)}, f_j^k = f_{j+m(k-1)}\}$ ($j = 1, 2, \dots, m; k = 1, 2, \dots, p$)。

(5) 复合形演化:通过 CCE 方法,对每个复合形分别演化。CCE 算法的具体计算步骤参照文献[12]。

(6) 复合形混合:把演化后的每个复合形的所有点组合,生成新的点集,再次按函数值 f_i 升序排列。

(7) 收敛判断:如果满足收敛条件则停止,否则返回步骤(4)。

2.3.2 参数优化过程

利用 SCE-UA 算法求解最优品种参数具体包含以下步骤:

(1) 确定 WheatGrow 模型输入参数的上下边界。由于研究区以种植半冬性冬小麦品种为主,因此本文在 WheatGrow 模型中推荐的品种参数取值范围的基础上结合现有研究成果^[24-25]确定半冬性冬小麦品种参数优化范围(表 1)。

(2) 确定 SCE-UA 算法参数值。根据文献[16-17],SCE-UA 算法中 $m = 2n + 1, q = n + 1, \alpha = 1, \beta = 2n + 1$, 由于本文待优化参数数量为 4 个,因而 n

表 1 优化参数的上下边界

Tab. 1 Upper and lower boundaries for parameter optimization

参数	下边界	上边界
温度敏感性 T_s	1.0	2.0
生理春化时间 P_{VT}/d	20	30
光周期敏感性 P_S	0.003	0.005
基本早熟性 I_E	0.70	0.90

的取值为 4。由此可计算得到 m, q 和 β 的取值分别为 9、5 和 9。复合型个数 p 是唯一需要确定的参数,本文中取 $p = 2$ 。

(3) 构建代价函数。以 2005—2006 年至 2014—2015 年共 10 a 的冬小麦抽穗期的开始日期模拟值与实测值的误差作为约束条件构建代价函数,总代价函数 F_{obj} 由 F_{obj1} 、 F_{obj2} 和 F_{obj3} 共 3 个子函数构成。其中 F_{obj1} 、 F_{obj2} 和 F_{obj3} 分别计算的是平均误差、平均绝对误差和均方根误差,由于平均误差可能出现负值,因此取绝对值。具体计算公式为

$$F_{obj} = F_{obj1} + F_{obj2} + F_{obj3} \quad (6)$$

$$\text{其中 } F_{obj1} = \left| \frac{\sum_{i=1}^N (H_{sim}(i) - H_{obs}(i))}{N} \right| \quad (7)$$

$$F_{obj2} = \frac{\sum_{i=1}^N |H_{sim}(i) - H_{obs}(i)|}{N} \quad (8)$$

$$F_{obj3} = \frac{\sum_{i=1}^N (H_{sim}(i) - H_{obs}(i))^2}{N} \quad (9)$$

式中 H_{sim} ——抽穗期开始日期模拟值

H_{obs} ——抽穗期开始日期实测值

N ——样本个数

抽穗期开始日期均以出苗后天数表示。显然,当 F_{obj1} 、 F_{obj2} 和 F_{obj3} 均达到最小时, F_{obj} 越小,模型拟合效果越好。

(4) 确定迭代终止条件。为了防止陷入死循环,设置以下 3 个条件作为迭代终止条件:①连续 10 次循环后待优化参数值已收缩到指定的值域范围。②目标函数值在 10 次循环后无法提高 0.01%。③代价函数的计算次数超过 10 000 次。

2.4 模拟效果评价

选择平均绝对误差(Mean absolute error, MAE)和均方根误差(Root mean square error, RMSE)来评价穗分化期模拟值与观测值的吻合程度。具体计算公式为

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^N |S_i - O_i|}{N} \quad (10)$$

$$R_{MSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (S_i - O_i)^2}{N}} \quad (11)$$

式中 S_i ——穗分化期模拟值

O_i ——穗分化期观测值

MAE 用来反映模型的总体预测精度, RMSE 则用来衡量样本的离散程度。模拟值与观测值的 MAE 和 RMSE 越小, 表明模型的预测精度越高, 模拟的效果越好。

3 结果与分析

3.1 参数敏感性分析结果

本文取待优化参数范围的中间值作为初始参数

组合, 即取 $T_s = 1.5$, $P_{VT} = 25$ d, $P_s = 0.004$ 和 $I_E = 0.80$, 结合商丘基准站 2005—2006 年至 2014—2015 年各年度冬小麦生育期内逐日最高气温和最低气温数据, 利用 OAT 方法进行参数敏感性分析。以初始参数的 10% 作为改变量, 即每次仅对其中一个参数增加 10% 为例来说明参数变化对模型模拟结果的影响, 结果如表 2 所示。表中 D_1 、 D_2 、 D_3 和 D_4 分别表示仅对 T_s 或 P_{VT} 或 P_s 或 I_E 增加 10% 后计算的穗分化期开始日期与根据初始参数计算的穗分化期开始日期的差值。 M_{BD} 、 M_{AD} 和 R_{MSD} 分别表示参数改变前后穗分化期开始日期的平均偏差、平均绝对偏差和均方根偏差。

由表 2 可以看出, 参数改变对小花分化期至抽

表 2 参数改变对穗分化期开始日期的影响

Tab. 2 Effect of parameter change on start date of spike differentiation stages

年份	小花分化期				雌雄蕊分化期				药隔分化期				四分体分化期				抽穗期			
	D_1	D_2	D_3	D_4	D_1	D_2	D_3	D_4	D_1	D_2	D_3	D_4	D_1	D_2	D_3	D_4	D_1	D_2	D_3	D_4
2005—2006	2	1	1	-3	2	1	1	-3	2	1	1	-3	2	1	1	-3	4	1	1	-3
2006—2007	5	2	3	-7	3	2	2	-4	2	1	1	-3	4	1	2	-3	3	1	2	-4
2007—2008	2	0	1	-2	2	1	1	-2	3	1	2	-3	3	1	2	-4	2	0	1	-4
2008—2009	4	2	2	-6	1	0	1	-4	2	1	1	-2	6	3	4	-5	2	1	1	-3
2009—2010	4	1	2	-3	3	1	2	-5	3	0	1	-4	3	0	1	-4	4	1	2	-4
2010—2011	1	1	1	-5	1	1	1	-4	3	2	2	-5	3	2	2	-5	2	1	1	-4
2011—2012	1	0	0	-2	1	0	0	-2	2	1	1	-3	2	1	1	-2	2	1	1	-3
2012—2013	3	1	2	-3	3	2	2	-3	4	1	2	-5	3	1	2	-3	2	1	1	-3
2013—2014	3	1	2	-4	1	0	0	-3	2	1	1	-4	2	1	1	-3	3	1	2	-4
2014—2015	4	1	1	-3	3	1	1	-4	3	1	1	-4	5	1	2	-4	4	1	1	-4
M_{BD}	2.9	1.0	1.5	-3.8	2.0	0.9	1.1	-3.4	2.6	1.0	1.3	-3.6	3.3	1.2	1.8	-3.6	2.8	0.9	1.3	-3.6
M_{AD}	2.9	1.0	1.5	3.8	2.0	0.9	1.1	3.4	2.6	1.0	1.3	3.6	3.3	1.2	1.8	3.6	2.8	0.9	1.3	3.6
R_{MSD}	3.2	1.2	1.7	4.1	2.2	1.1	1.3	3.5	2.7	1.1	1.4	3.7	3.5	1.4	2.0	3.7	2.9	0.9	1.4	3.6

穗期各个穗分化期开始日期的影响不同且年际间略有差异。其中, 只有 T_s 增加 10% 引起的小花分化期开始日期与根据初始参数组合计算的开始日期的偏差天数介于 1~5 d; 雌雄蕊分化期偏差介于 1~3 d, M_{BD} 为 2 d; 药隔分化期偏差绝大多数年份为 2~3 d, 最大偏差为 4 d, 出现于 2012—2013 年; 四分体分化期的偏差介于 2~6 d, 抽穗期的平均偏差为 2.8 d。当仅 P_{VT} 增加 10% 时, 计算得到的小花分化期至抽穗期各穗分化期开始日期与根据初始参数计算的穗分化期开始日期的差值处于 0~3 d 之间, 大多数偏差仅 1 d, 偏差较小。相比于仅 P_{VT} 增加 10%, 仅 P_s 增加 10% 引起的穗分化期开始日期的偏差略大, 最大偏差为 4 d, 出现在 2008—2009 年四分体分化期阶段, 其余各年份各穗分化期开始日期的偏差均在 1~2 d。4 个参数中, I_E 改变引起的偏差最大, 由表 2 可以看出, 当仅 I_E 增加 10% 时, 小花分化期至抽穗期开始日期均不同程度提前于根据初始参数计算的

各个穗分化期开始日期, 其中小花分化期偏差范围为 3~7 d, M_{AD} 为 3.8 d, R_{MSD} 为 4.1 d; 雌雄蕊分化期的偏差相对较小, M_{BD} 和 M_{AD} 均为 3.4 d, R_{MSD} 为 3.5 d; 药隔分化期和四分体分化期的平均偏差程度相同, M_{BD} 、 M_{AD} 和 R_{MSD} 均一致, 分别为 -3.6、3.6、3.7 d; 而只 I_E 增加 10% 引起抽穗期的开始日期普遍提前 3~4 d, M_{AD} 和 R_{MSD} 均为 3.6 d。

综合以上分析可以发现, T_s 、 P_{VT} 、 P_s 和 I_E 4 个参数的改变对 WheatGrow 模型穗分化期模拟结果的影响程度不同, 表现为 I_E 变化对穗分化期模拟结果的影响最显著, 而 T_s 是较 P_s 和 I_E 具有更高敏感度的参数, P_{VT} 变化对模型模拟结果的影响最小。

进一步通过计算相对敏感度来分析参数改变对穗分化期模拟结果的影响。图 2 中给出了 2005—2006 至 2014—2015 年各品种参数在小花分化期至抽穗期各个穗分化期的平均相对敏感度以及小花分化期至抽穗期的平均相对敏感度。可以看出, 各个

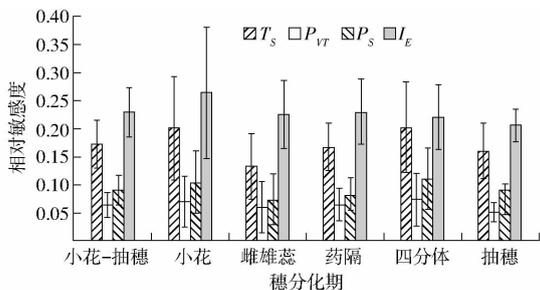


图 2 品种参数相对敏感度对比

Fig. 2 Comparison of relative sensitivity of varietal parameters

品种参数在不同穗分化期的敏感程度不同。以 10 a 的平均状态来看, 4 个品种参数的相对敏感度的排序由大到小依次为 I_E 、 T_S 、 P_S 、 P_{VT} , 平均相对敏感度分别为 0.23、0.17、0.09 和 0.06。品种参数 I_E 在各穗分化期的平均相对敏感度介于 0.21 ~ 0.26, 其中相对敏感度在 小花分化期为 0.26, 雌雄蕊分化期和药隔分化期均为 0.23, 四分体分化期为 0.22, 抽穗期为 0.21, 表现出高敏感性。 T_S 是较 P_S 和 P_{VT} 具有更高敏感性的参数, 其平均相对敏感度介于 0.13 ~ 0.20 之间, 在 小花分化期、雌雄蕊分化期、药隔分化期、四分体分化期和抽穗期的相对敏感度分别为 0.20、0.13、0.17、0.20 和 0.16。4 个参数中 P_{VT} 的相对敏感度最低, 其在 小花分化期至抽穗期各个穗分化期的平均相对敏感度介于 0.05 ~ 0.07 之间, 其变化对穗分化期模拟结果的影响最弱, 因此, 参数优化时优先率定参数 P_{VT} 。

3.2 参数优化结果与验证

根据参数敏感性分析结果, 研究中 P_{VT} 取其优

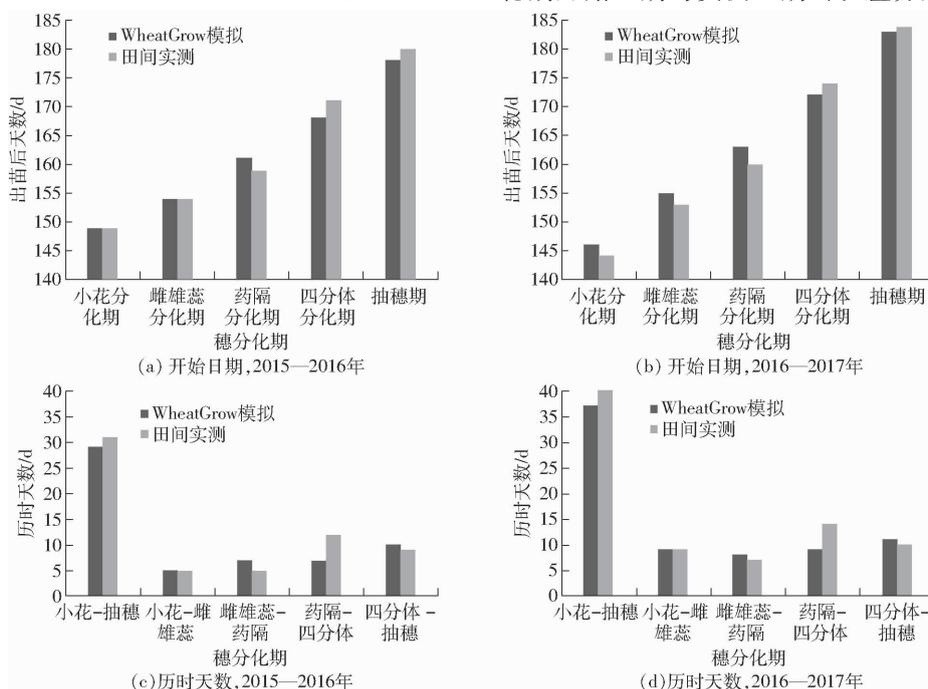


图 3 穗分化期开始日期和历时天数模拟结果与田间实测对比

Fig. 3 Comparison of start date and continued days of spike differentiation stages between simulation and observation

化参数范围中间值即 $P_{VT} = 25$ d, 在此基础上利用 SCE-UA 算法结合商丘基准站 2005—2006 年至 2014—2015 年各年度逐日最高气温、最低气温数据以及各年度冬小麦物候期资料对 WheatGrow 模型中相对敏感度较高的 I_E 、 T_S 和 P_S 3 个参数进行优化, 最终得到 T_S 、 P_{VT} 、 P_S 和 I_E 4 个品种参数的取值分别为 1.47、25 d、0.0049 和 0.76, 优化后的 4 个参数均在模型参数范围内。

将优化后的品种参数和 2015—2016 年和 2016—2017 年冬小麦生育期内逐日最高气温、最低气温数据输入 WheatGrow 模型中得到 2015—2016 年和 2016—2017 年 2 个年度冬小麦返青后穗分化进入 小花分化期、雌雄蕊分化期、药隔分化期、四分体分化期和抽穗期的开始日期, 根据开始日期即可计算得到各个穗分化阶段的历时天数。各穗分期开始日期和历时天数与田间实测的对比如图 3、表 3 和表 4 所示。

由图 3 可以看出, WheatGrow 模型模拟的冬小麦穗分化期开始日期和历时天数的总体变化趋势均与田间实测基本一致, 2015—2016 年和 2016—2017 年表现相同。

穗分化期开始日期方面, 由表 3 可以看出, 2015—2016 年度 小花分化期至抽穗期各个穗分化期开始日期与田间实测日期的误差控制在 3 d 以内, 其中 小花分化期和雌雄蕊分化期的模拟日期与实测日期为同一天, 药隔分化期、四分体分化期和抽穗期开始日期与实测日期的误差分别为 2、3、2 d; 而

表3 穗分化期开始日期模拟与实测对比

Tab.3 Comparison of start date of spike differentiation stages between simulation and observation

年份	小花分化期			雌雄蕊分化期			药隔分化期			四分体分化期			抽穗期			M_{AE}/d	R_{MSE}/d
	$S_{im.}$	$O_{bs.}$	$\Delta D/d$														
2015—2016年	03-18	03-18	0	03-23	03-23	0	03-30	03-28	2	04-06	04-09	-3	04-16	04-18	-2	1.7	2.0
2016—2017年	03-13	03-11	2	03-22	03-20	2	03-30	03-27	3	04-08	04-10	-2	04-19	04-20	-1		

注: $S_{im.}$ 和 $O_{bs.}$ 分别表示模拟值和实测值, ΔD 表示模拟与实测在穗分化期开始日期的差值,下同。

表4 穗分化期历时天数模拟与实测对比

Tab.4 Comparison of continued days of spike differentiation stages between simulation and observation

年份	小花-雌雄蕊			雌雄蕊-药隔			药隔-四分体			四分体-抽穗			小花-抽穗			M_{AE}	R_{MSE}
	$S_{im.}$	$O_{bs.}$	Δd														
2015—2016年	5	5	0	7	5	2	7	12	-5	10	9	1	29	31	-2	1.9	2.7
2016—2017年	9	9	0	8	7	1	9	14	-5	11	10	1	37	40	-3		

注: Δd 表示模拟与实测在穗分化期开始日期的差值。其中,小花-抽穗历时天数不参与 M_{AE} 和 R_{MSE} 的计算。

2016—2017年度各穗分化期开始日期与田间实测日期的误差介于1~3 d,相较于2015—2016年度误差较大,其中小花分化期、雌雄蕊分化期和四分体分化期的误差均为2 d,药隔分化期的误差为3 d,抽穗期的误差最小,其开始日期的模拟值与实测值的误差均仅1 d。综合两年穗分化期开始日期模拟结果,可以看出WheatGrow模型模拟的小花分化期、雌雄蕊分化期、药隔分化期的开始日期均不同程度地晚于田间实测的相应的穗分化期开始日期,而四分体分化期和抽穗期的开始日期略早于田间实测日期,但总体上WheatGrow模型模拟的穗分化期开始日期与田间实测穗分化期开始日期误差较小, M_{AE} 为1.7 d, R_{MSE} 为2.0 d,表明WheatGrow模型在冬小麦穗分化期开始日期的模拟效果较好。

穗分化期历时天数方面,由表4可以看出,WheatGrow模型模拟冬小麦穗分化期各阶段历时天数整体误差介于0~5 d。其中,小花-雌雄蕊阶段误差最小,其模拟历时天数与实测历时天数相吻合;雌雄蕊-药隔阶段误差为1~2 d;药隔-四分体阶段历时天数与田间实测历时天数偏差最大,2015—2016年和2016—2017年误差均为5 d;四分体-抽穗阶段误差也较小,2015—2016年和2016—2017年2个年度WheatGrow模型模拟的历时天数均与田间实测历时天数误差均为1 d。从小花-抽穗阶段历时天数来看,WheatGrow模型模拟历时天数与田间实测历时天数较为接近,2015—2016年和2016—2017年2个年度的误差分别为2 d和3 d。穗分化期历时天数模拟与实测的 M_{AE} 和 R_{MSE} 分别为1.9 d和2.7 d,表明WheatGrow模型模拟的冬小麦穗分化期历时天数验证效果较好。

4 讨论

本研究运用OAT方法对WheatGrow模型中 T_S 、

P_{VT} 、 P_S 以及 I_E 4个品种参数进行了敏感性分析。从参数敏感性分析方法来说,OAT方法属于局部敏感性分析方法,即每次只改变单个参数的取值而固定其余参数的取值来分析单个参数的改变对模型模拟结果的影响,其优点在于原理简单,计算量小,可操作性强,可以快速有效确定高敏感度的参数,参数敏感性分析效率较高,但该方法忽略了参数相互作用对模型模拟结果的影响。以扩展傅里叶幅度检验法(Extended fourier amplitude sensitivity test, EFAST)^[2,26-28]为代表的全局敏感性分析方法则兼顾单参数参数变化及参数间相互作用对模型模拟结果的影响,适用于高维非线性模型的敏感性分析^[28],相比于局部敏感性分析方法,分析更具客观性,缺点在于通常该类方法的原理相对复杂,计算成本也相对较高。本研究中WheatGrow模型以 T_S 、 P_{VT} 、 P_S 和 I_E 4个参数表达不同小麦品种在温度、春化作用、光照和早熟性方面的差异,参数间相关性较弱,相比于EFAST敏感性分析方法,OAT方法在本研究参数敏感性分析中更具有优势。

常用的参数优化方法包括试错法、PEST法、模拟退火算法、遗传算法和SCE-UA算法等。基于试错法的模型参数优化根据以往的经验或者参数文献参考值,通过在各参数范围内分别设置步长值的方式不断重复和随机地选择参数,使模拟值与观测值的拟合指标如均方根误差、相关系数、决定系数 R^2 等达到预期来确定最优参数组合^[27],这一过程主观性强且耗时费力,而且很容易陷入局部最优解,致使无法获得模型参数的全局最优解。PEST法优化速度快,但对初始参数的依赖程度较高^[10,29];模拟退火算法的原理简单,具有较好的“健壮性”且对参数的初始解无特殊要求,缺点在于较慢的退火过程致使收敛速度慢^[30-31];遗传算法具有极强的全局搜索

能力,但该算法计算量大,收敛速度慢^[31]。本研究采用对先验知识无过分依赖的 SCE-UA 全局自动优化算法进行参数优化,成功搜索到最优品种参数组合,收敛速度快,优化效率高,同时结合平均误差、平均绝对误差和均方根误差 3 个指标构建代价函数,避免了参数“异参同效”的出现。考虑到冬小麦穗分化是一个连续的变化过程,从穗分化开始至抽穗需经过较长的时间,本文仅以抽穗期的开始日期为约束条件构建单一代价函数有一定的局限性,可考虑加入返青期开始日期作为另一约束条件构建多目标代价函数进行进一步研究。

此外,小麦穗分化进程受到温度、光照、水分、土壤以及品种特性在内的诸多因素的影响,WheatGrow 模型在穗分化期模拟时仅考虑了温度、光照和品种特性的作用,未将水分、土壤等因素考虑在内,有一定的局限性。为了进一步提高模型的模拟精度,应通过进一步试验研究分析水分和土壤因素对穗分化

期的影响机制,对模型进行相应的改进。

5 结论

(1)WheatGrow 模型品种参数中基本早熟性参数的变化对穗分化期的模拟结果影响最显著,温度敏感性参数比光周期敏感性参数和生理春化时间参数具有更高的敏感度,生理春化时间对模型模拟结果的影响最弱。

(2)利用 SCE-UA 算法进行 WheatGrow 模型参数优化的结果表明,SCE-UA 算法可以获取较准确的品种参数。模型验证结果显示,基于优化后的参数得到的穗分化期模拟值与实测值的 M_{AE} 和 R_{MSE} 均小于 3 d,其中穗分化期开始日期和历时天数的 M_{AE} 分别为 1.7 d 和 1.9 d, R_{MSE} 分别为 2.0 d 和 2.7 d,误差较小。研究表明 SCE-UA 算法是进行作物模型参数自动优化的可靠工具,可以有效地获取 WheatGrow 模型最优品种参数组合。

参 考 文 献

- 1 崔金梅,王化岑,刘万代,等.冬小麦籽粒形成与幼穗发育的关系研究[J].麦类作物学报,2007,27(4):682-686.
CUI Jinmei,WANG Huacen,LIU Wandai,et al. Relationship between grain formation and young spike development of winter wheat [J]. Journal of Triticeae Crops,2007,27(4):682-686. (in Chinese)
- 2 宋明丹,冯浩,李正鹏,等.基于 Morris 和 EFAST 的 CERES-Wheat 模型敏感性分析[J/OL].农业机械学报,2014,45(10):124-131. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=20141020&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2014.10.020.
SONG Mingdan, FENG Hao, LI Zhengpeng, et al. Global sensitivity analyses of DSSAT-CERES-Wheat model using Morris and EFAST methods[J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2014,45(10):124-131. (in Chinese)
- 3 SOLER C M T,SENTELHAS P C,HOOGENBOOM G. Application of the CSM-CERES-Maize model for planting date evaluation and yield forecasting for maize grown off-season in a subtropical environment[J]. European Journal of Agronomy,2007,27(2-4):165-177.
- 4 MCMASTER G S,MORGAN J A,WILHELM W W. Simulating winter wheat spike development and growth[J]. Agricultural & Forest Meteorology,1992,60(3-4):193-220.
- 5 CAO W,MOSS D N. Modelling phasic development in wheat: a conceptual integration of physiological components[J]. Journal of Agricultural Science,1997,129(2):163-172.
- 6 严美春,曹卫星,罗卫红,等.小麦发育过程及生育期机理模型的研究 I.建模的基本设想与模型描述[J].应用生态学报,2000,11(3):355-359.
YAN Meichun,CAO Weixing,LUO Weihong,et al. A mechanistic model of phasic and phenological development of wheat I. Assumption and description of the model [J]. Chinese Journal of Applied Ecology,2000,11(3):355-359. (in Chinese)
- 7 STELLA T,FRASSO N,NEGRINI G,et al. Model simplification and development via reuse,sensitivity analysis and composition: a case study in crop modeling[J]. Environmental Modelling & Software,2014,59:44-58.
- 8 梁浩,胡克林,李保国.基于 PEST 的土壤-作物系统模型参数优化及灵敏度分析[J].农业工程学报,2016,32(3):78-85.
LIANG Hao,HU Kelin,LI Baoguo. Parameter optimization and sensitivity analysis of soil-crop system model using PEST[J]. Transactions of the CSAE,2016,32(3):78-85. (in Chinese)
- 9 RASHAD R,SANDEEP K,LUO Y Q,et al. An algorithmic calibration approach to identify globally optimal parameters for constraining the DayCent model[J]. Ecological Modelling,2015,297:196-200.
- 10 孙美,张晓琳,冯绍元,等.基于 PEST 的 RZWQM2 模型参数优化与验证[J/OL].农业机械学报,2014,45(11):146-153. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=20141123&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2014.11.023.
SUN Mei,ZHANG Xiaolin,FENG Shaoyuan,et al. Parameter optimization and validation for RZWQM2 model using PEST method [J/OL]. Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery,2014,45(11):146-153. (in Chinese)
- 11 DUAN Q Y,SOROOSHIAN S,GUPTA V. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models[J]. Water Resources Research,1992,28(4):1015-1031.
- 12 DUAN Q,SOROOSHIAN S,GUPTA V K. Optimal use of the SCE-UA global optimization method for calibrating watershed models[J]. Journal of Hydrology,1994,158(3-4):265-284.

- 13 FANG Q X, GREEN T R, MA L, et al. Optimizing soil hydraulic parameters in RZWQM2 under fallow conditions [J]. *Soil Science Society of America Journal*, 2010, 74(6): 1897 - 1913.
- 14 KIRKPATRICK S, GELATT C D J, VECCHI M P. Optimization by simulated annealing [J]. *Science*, 1983, 220(4598): 671 - 680.
- 15 任建强, 陈仲新, 唐华俊, 等. 遥感信息与作物生长模型的区域作物单产模拟 [J]. *农业工程学报*, 2011, 27(8): 257 - 264.
REN Jianqiang, CHEN Zhongxin, TANG Huajun, et al. Regional crop yield simulation based on crop growth model and remote sensing data [J]. *Transactions of the CSAE*, 2011, 27(8): 257 - 264. (in Chinese)
- 16 宋星原, 舒全英, 王海波, 等. SCE - UA 遗传算法和单纯形优化算法的应用 [J]. *武汉大学学报: 工学版*, 2009, 42(1): 6 - 9.
SONG Xingyuan, SHU Quanying, WANG Haibo, et al. Comparison and application of SCE - UA, genetic algorithm and simplex method [J]. *Engineering Journal of Wuhan University*, 2009, 42(1): 6 - 9. (in Chinese)
- 17 马海波, 董增川, 张文明, 等. SCE - UA 算法在 TOPMODEL 参数优化中的应用 [J]. *河海大学学报: 自然科学版*, 2006, 34(4): 361 - 365.
MA Haibo, DONG Zengchuan, ZHANG Wenming, et al. Application of SCE - UA algorithm to optimization of TOPMODEL parameters [J]. *Journal of Hohai University: Natural Sciences Edition*, 2006, 34(4): 361 - 365. (in Chinese)
- 18 闫岩, 柳钦火, 刘强, 等. 基于遥感数据与作物生长模型同化的冬小麦长势监测与估产方法研究 [J]. *遥感学报*, 2006, 10(5): 804 - 811.
YAN Yan, LIU Qinhuo, LIU Qiang, et al. Methodology of winter wheat yield prediction based on assimilation of remote sensing data with crop growth model [J]. *Journal of Remote Sensing*, 2006, 10(5): 804 - 811. (in Chinese)
- 19 靳华安, 王锦地, 柏延臣, 等. 基于作物生长模型和遥感数据同化的区域玉米产量估算 [J]. *农业工程学报*, 2012, 28(6): 162 - 173.
JIN Hua'an, WANG Jindi, BO Yanchen, et al. Estimation on regional maize yield based on assimilation of remote sensing data and crop growth model [J]. *Transactions of the CSAE*, 2012, 28(6): 162 - 173. (in Chinese)
- 20 刘峻明, 汪念, 王鹏新, 等. SHAW 模型在冬小麦晚霜冻害监测中的适用性研究 [J/OL]. *农业机械学报*, 2016, 47(6): 265 - 274. http://www.j-csam.org/jcsam/ch/reader/view_abstract.aspx?flag=1&file_no=20160635&journal_id=jcsam. DOI:10.6041/j.issn.1000-1298.2016.06.035.
LIU Junming, WANG Nian, WANG Pengxin, et al. Applicability of simultaneous heat and water model for monitoring late frost injury of winter wheat [J/OL]. *Transactions of the Chinese Society for Agricultural Machinery*, 2016, 47(6): 265 - 274. (in Chinese)
- 21 崔金梅, 郭天财. 小麦的穗 [M]. 北京: 中国农业出版社, 2006.
- 22 HAMBY D M. A review of techniques for parameter sensitivity analysis of environmental models [J]. *Environmental Monitoring & Assessment*, 1994, 32(2): 135 - 154.
- 23 刘刚, 谢云, 高晓飞, 等. ALMANAC 作物模型参数的敏感性分析 [J]. *中国农业气象*, 2008, 29(3): 259 - 263.
LIU Gang, XIE Yun, GAO Xiaofei, et al. Sensitivity analysis on parameters of ALMANAC crop model [J]. *Chinese Journal of Agrometeorology*, 2008, 29(3): 259 - 263. (in Chinese)
- 24 严美春, 曹卫星, 李存东, 等. 小麦发育过程及生育期机理模型的检验和评价 [J]. *中国农业科学*, 2000, 33(2): 43 - 50.
YAN Meichun, CAO Weixing, LI Cundong, et al. Validation and evaluation of a mechanistic model of phasic and phenological development of wheat [J]. *Scientia Agricultura Sinica*, 2000, 33(2): 43 - 50. (in Chinese)
- 25 尹钧. 小麦温光发育研究进展 I. 春化和光周期发育规律 [J]. *麦类作物学报*, 2016, 36(6): 681 - 688.
YIN Jun. Review of thermo-photoperiod development of wheat I. The vernalization and photoperiod response of wheat varieties [J]. *Journal of Triticeae Crops*, 2016, 36(6): 681 - 688. (in Chinese)
- 26 WANG J, LI X, FANG F, et al. Parameter sensitivity analysis of crop growth models based on the extended fourier amplitude sensitivity test method [J]. *Environmental Modelling & Software*, 2013, 48(5): 171 - 182.
- 27 何亮, 侯英雨, 赵刚, 等. 基于全局敏感性分析和贝叶斯方法的 WOFOST 作物模型参数优化 [J]. *农业工程学报*, 2016, 32(2): 169 - 179.
HE Liang, HOU Yingyu, ZHAO Gang, et al. Parameters optimization of WOFOST model by integration of global sensitivity analysis and Bayesian calibration method [J]. *Transactions of the CSAE*, 2016, 32(2): 169 - 179. (in Chinese)
- 28 何维, 杨华. 模型参数全局敏感性分析的 EFAST 方法 [J]. *遥感技术与应用*, 2013, 28(5): 836 - 843.
HE Wei, YANG Hua. EFAST method for global sensitivity analysis of remote sensing model's parameters [J]. *Remote Sensing Technology and Application*, 2013, 28(5): 836 - 843. (in Chinese)
- 29 ISKRA I, DROSTE R. Application of non-linear automatic optimization techniques for calibration of HSPF [J]. *Water Environment Research*, 2007, 79(6): 647 - 659.
- 30 刘峰, 李存军, 董莹莹, 等. 基于遥感数据与作物生长模型同化的作物长势监测 [J]. *农业工程学报*, 2011, 27(10): 101 - 106.
LIU Feng, LI Cunjun, DONG Yingying, et al. Monitoring crop growth based on assimilation of remote sensing data and crop simulation model [J]. *Transactions of the CSAE*, 2011, 27(10): 101 - 106. (in Chinese)
- 31 解晨, 韦雄奕. 模拟退火算法和遗传算法的比较与思考 [J]. *电脑知识与技术*, 2013(7): 4418 - 4419.
XIE Chen, WEI Xiongyi. Simulated annealing and genetic algorithms comparison and reflection [J]. *Computer Knowledge and Technology*, 2013(7): 4418 - 4419. (in Chinese)