

REKENTECHNISCHE PROBLEMEN BIJ TOEPASSING VAN SIMULATIE IN DE ECOLOGIE

door ir. J. Goudriaan

Keywords:
simulation, ecology,
stiff equations
Code: 000.019.400
000.100.130

H

Toepassing van simulatie in de ecologie moet zich beperken tot kwantificeerbare problemen zoals die met name in de produktie-ecologie voorkomen. Enkele voorbeelden hiervan waaraan gewerkt wordt door de afdeling Theoretische Teeltkunde van de LH in Wageningen, worden gegeven. Deze zijn grotendeels gecentreerd rond de simulatie van groei van te velde staande gewassen. Bij de opbouw van de hiertoe benodigde grote simulatiemodellen met in de orde van 1000 variabelen doen zich specifieke problemen voor die voortvloeien uit het samenvoegen van de verschillende niveau's van de processen. Deze processen kunnen worden verdeeld in enigszins begrensde gebieden met soms sterk verschillende tijdsconstanten. Soms kunnen de submodellen voor deze deelprocessen worden vervangen door een eenvoudig beschrijvend model of een zgn. afgeleid model, teneinde de omvang van het model op hiërarchisch hoger niveau te beperken. Indien het gewenst is de processen met sterk verschillende tijdsconstante toch simultaan op te lossen (integratie van stiff equations), kan door een betrekkelijk eenvoudige programmeertechniek worden voorkomen dat de rekentijd excessief lang wordt. Het bovenstaande wordt met enkele voorbeelden geïllustreerd.

Inleiding

Het is onmogelijk om in een bijdrage als deze een enigszins volledig overzicht te geven van het gebruik van simulatiemethodes in de ecologie. Het is veeleer de bedoeling een indruk te geven van het werk dat op dit gebied aan de vakgroep Theoretische Teeltkunde en aan de Landbouwhogeschool te Wageningen plaatsvindt. Het karakter van de simulatietechniek brengt met zich mee dat de probleemgebieden die ermee kunnen worden benaderd moeten voldoen aan de voorwaarde van kwantificeerbaarheid. Mede hierom beperkt de toepassing zich meestal tot de z.g. produktie-ecologie, die levensgemeenschappen bekijkt vanuit het oogpunt van energie- en massabalansen. De vraag naar de soortensamenstelling van een levensgemeenschap vereist zoveel gedetailleerde kennis over de fysiologie van de soorten afzonderlijk en van hun wederzijdse invloeden dat onder veldomstandigheden deze vraag voorlopig nog niet met simulatiemethodes kan worden opgelost, ervan afgezien of het wel ooit zinvol zal zijn om het op deze manier te proberen.

Ook bij beperking tot de produktie-ecologie zijn de ontwikkelde simulatiemodellen vaak nog zo gecompliceerd dat de omvang van de modellen specifieke problemen met zich meebrengt. Dat komt omdat de processen op individu- of orgaanniveau moeten worden geïntegreerd om verschijnselen op populatieniveau te verklaren. Dit kan betekenen dat de simulatieprogramma's omvangrijk worden, maar ook dat er processen van heel verschillende tijdschaal in één model worden samengebracht. Aangezien de tijdstap wordt bepaald door het snelste proces dat in het model voorkomt, wordt de rekentijd van deze modellen zonder tegenmaatregelen exorbitant.

Doelinden van de simulatie

Er zijn drie groepen van redenen waarom simulatie wordt toegepast. Zij kunnen worden gerangschikt naar het stadium waarin het model zich bevindt.

a Voorspellen

In het verst ontwikkelde stadium is het model zo goed dat het kan worden gebruikt bij voorspellen en dus ook als hulpmiddel bij bestuur en management. In de ecologie is het slechts zelden het geval dat de onderliggende processen zo goed bekend zijn dat een model tot dit stadium kan worden gebracht. Een voorbeeld is het werk van Van Keulen (1975), die bewees dat onder semi-aride omstandigheden, waar de zaken vereenvoudigd zijn door de overheersende invloed van de faktor water, de simulatietechniek met succes kan worden toegepast om opbrengsten van natuurlijk grasland te voorspellen.

b Inzicht in het mechanisme vergroten

Dit kan ten dele worden geïllustreerd door de poging van Forrester (1972) om een wereld simulatiemodel te maken. Dit model was niet in de eerste plaats bedoeld om te voorspellen, maar om fundamentele gedragslijnen van enkele belangrijk geachte variabelen bloot te leggen. Afgezien van de realiteitswaarde van dit model, zou het gegeven de vergelijkingen bepaald moeilijk zijn om het verloop van de hoofdvariabelen in enig detail te voorspellen zonder gebruik van de computer. Forrester sprak zelfs over de 'counter-intuitive behaviour' van complexe systemen, maar ervaring met dit soort modellen zal de intuïtie ongetwijfeld aanzienlijk verbeteren. Voor iemand die voor het eerst op de schaatsen staat heeft ijs ook nogal moeilijk te beredeneren eigenschappen.

Het inzicht dat gewenst is, is in de eerste plaats kwalitatief: hoe zien de curves eruit. Later komt de kwantitatieve belangstelling: wat is de orde van grootte van de variabelen, wat is het effect van een verandering. Onderzoek van de laatste vraag wordt een gevoeligheids-analyse genoemd. Zelfs als het model niet geschikt is voor een betrouwbare voorspelling is het vaak wel goed genoeg voor een nuttige gevoeligheids-analyse. De bedoeling van zo'n gevoeligheids-analyse is om aan te geven op welke punten het model gevoelig is en waar dus eventueel verder onderzoek moet plaatsvinden.

c *Onderzoek van de beschikbare kennis op volledigheid en consistentie*

Een model kan worden opgebouwd met behulp van kennis die in de literatuur beschikbaar is en waarover eigenlijk geen meningsverschil bestaat. Na samenvoegen van dergelijke brokken kennis blijkt soms een model te ontstaan dat volslagen onzin produceert. Afgezien van programmeerfouten waaraan natuurlijk in de eerste plaats gedacht moet worden, moet de oorzaak soms in de beschrijving van deelprocessen worden gezocht die kennelijk een meer beperkte geldigheid hebben dan aanvankelijk werd gedacht, of zelfs in het geheel niet houdbaar zijn. Zo blijkt combinatie van de bestaande kennis op het gebied van de nachtelijke uitstraling en de opbouw van stabiliteit in de atmosfeer te leiden tot ernstige nachtvorst, ook in de zomer. Soms lijkt het geschreven programma gereed, maar wordt door de sorteerroutine van de simulatietaal ontdekt dat er een cirkelredenering in het programma zit.

Aan de fase waarin het model werkelijk op de computer kan worden gedraaid gaat de constructiefase vooraf, waarin soms in de beschikbare kennis gaten blijken te bestaan. In dit stadium kan modelbouw ook zonder computergebruik nut hebben.

Ontwikkeling van een simulatiemodel betekent in het algemeen dat de aandacht van c via b naar a verschuift hoewel teruggrijpen op een vroeger stadium soms kan optreden.

Overzicht van het werk aan de Landbouwhogeschool*

Weinig verwonderlijk is dit werk bijna steeds min of meer gerelateerd aan gewasgroei (primaire produktie) en veeteelt (secundaire produktie). In figuur 1 zijn een aantal trefwoorden van het onderzoek weergegeven, verbonden door een streepje met het meest gerelateerde vakgebied.

De transportprocessen in de grond kunnen wiskundig beschreven worden door partiële differentiaal-vergelijkingen. In het simulatieprogramma wordt de grond in boven elkaar liggende lagen verdeeld, zodat een stelsel gewone differentiaal-vergelijkingen in de tijd ontstaat. De toestand van elke laag, zoals temperatuur, watergehalte, stikstofgehalte etc. wordt bijgehouden in een integraal naar de tijd. Binnen een laag worden ruimtelijke variaties in deze grootheden verwaarloosd. De transportsnelheden tussen de lagen

worden bepaald door de gradiënten en de geleidbaarheden voor de betreffende componenten, waarbij voor water de zwaartekracht er nog als extra drijvende kracht bijkomt. Bovendien kunnen binnen zo'n bodemlaag water en voedingsstoffen worden onttrokken door de aanwezige plantenwortels. Om dit laatste goed te kunnen beschrijven moet een stuk plantenfysiologie worden binnengehaald.

Essentieel is echter dat alle transportsnelheden afhangen van de toestand van grond en plant en dat snelheden elkaar niet rechtstreeks maar slechts indirect via verandering van toestandsvariabelen beïnvloeden. Dit wordt ook wel de 'state variable approach' genoemd. Aangezien geen wederzijdse afhankelijkheden optreden komen slechts expliciete vergelijkingen voor. De toestandsvariabelen van de plant die mede de opnamesnelheden bepalen zijn watergehalte, stikstofgehalte, omvang van het wortelstelsel, bovengronds plantgewicht en bladoppervlakte, reservegehalte, etc. De voedselreserves zijn een tussenstation tussen de produktie door fotosynthese enerzijds en verbruik door groei en ademhaling anderzijds. Een soortgelijke bufferwerking neemt het watergehalte van de plant in t.o.v. wateropname en verdamping. Op lange termijn moeten fotosynthese en ademhaling plus groei wel gelijk zijn, maar binnen de dagelijkse cyclus kan een faseverschuiving van vele uren optreden. De grootte van deze faseverschuiving wordt bepaald door de sterkte van de terugkoppeling van reserve-niveau op groei en ademhaling, ev. op fotosynthese, en van watergehalte op wateropname en verdamping. In het eerste geval resulteert de terugkoppeling in een tijdconstante van zo'n 10 uur, in het tweede geval is de terugkoppeling sterker en leidt tot een tijdconstante van ongeveer een half uur. Bij veel waterverlies sluit de plant de huidmondjes, daarmee zowel verdamping als fotosynthese onmogelijk makend. Aangezien dit verschijnsel vaak in droge klimaten optreedt is daar sprake van een zekere evenredigheid tussen verdamping en drogestof produktie, en daarmee tussen regenval en opbrengst. Als zo vaak wordt dit principieel gegeven vertoebeld door vele andere factoren als stikstofgebrek, directe bodemverdamping etc., maar in het hierboven aangehaalde werk van Van Keulen zijn deze processen op een fysisch zo goed mogelijke wijze geïncorporeerd en bleken goede voorspellingen mogelijk.

In de landbouw kunnen aanzienlijke oogstverliezen optreden door ziekten en plagen. Simulatie van deze verschijnselen valt eigenlijk onder de populatie-dynamica. Hiertoe worden de geboorte- en sterftesnelheden van de organismen als functie van leeftijd en temperatuur in het model gezet. Soms moet ook rekening worden gehouden met concurrentie en met predatie door rovers, die dan ook weer afzonderlijk moeten worden gesimuleerd. Het is gebleken dat de vermenigvuldiging van schimmelziektes zoals gele roest sterk wordt beïnvloed door de vochtigheid van de lucht en vooral door de tijdsduur dat het blad nat is. Deze gegevens kunnen worden verkregen uit een mikrometeorologisch simulatieprogramma. In zo'n model wordt de luchtlaag tussen grond en bovenkant van het gewas in een aantal lagen verdeeld en wordt

* Momenteel wordt dit onderzoek gerapporteerd in de serie Simulation Monographs, uitgegeven door PUDOC, Wageningen.

in principe dezelfde methode toegepast als in het bodemsimulatieprogramma. De toestandsvariabelen zijn luchttemperatuur, luchtvochtigheid en bladtemperatuur. Tussen de lagen onderling en tussen bladeren en lucht vindt uitwisseling plaats die sterk afhangt van de windsnelheid. De verdeling van de ingestraalde zonne-energie tussen verdamping en verwarming hangt weer af van de huidmondjes-weerstand, die door de plant wordt geregeld. Hoe dit laatste precies gebeurt is weer een vraagstuk apart waarbij blijkt dat lichtintensiteit, koolzuurgehalte van de lucht, watervoorziening van de plant en de temperatuur alle invloed hebben. Voor het huidmondjesgedrag is dan ook een apart submodel gemaakt.

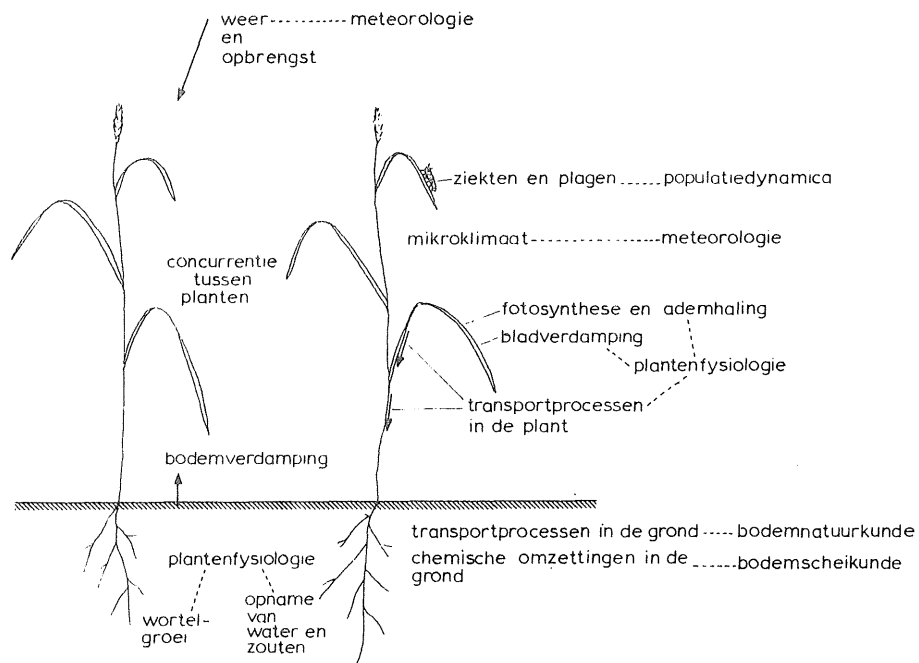
In dit beknopte overzicht zijn we van proces naar proces en van model naar model gegaan. Eigenlijk zou het allemaal in één gigantisch model moeten worden gezet om een goede beschrijving van de werkelijkheid te krijgen. De natuur zou dan echter aanzienlijk sneller integreren dan wij met de beste computer zouden kunnen, zodat dit plan weinig realistisch is. We zijn genoodzaakt delen af te splitsen en afzonderlijk te beschrijven.

Verdeling in submodellen

Het maakt een groot verschil of we te maken hebben met naast elkaar liggende gebieden, zoals bodem en plant, of met in elkaar liggende gebieden, zoals groei en ademhaling. In het eerste geval zijn wel verbanden maar staat het één niet op een causaal hoger niveau dan het andere. In het laatste geval is groei een van de bepalende factoren voor de ademhaling. Als we nog preciezer gaan kijken kunnen we ons afvragen welke eiwitten nu eigenlijk worden afgebroken en ge-

recombineerd in het groeiproces. Er is geen einde aan dit proces van afdalen naar causaal steeds dieper liggende niveaus. Daarom moet er een grens worden getrokken en worden besloten wat kan worden beschouwd als invoervariabelen, wat moet worden berekend en wat de uitvoervariabelen zijn. De uitvoervariabele van het ene niveau wordt een invoervariabele voor het volgende niveau. Het komt er nu op aan om bij een simulatie van het hoger liggende niveau het model van het lagere niveau zodanig te vereenvoudigen dat het zonder al te veel problemen in dat van het hogere niveau kan worden opgenomen. Deze benadering wordt wel de *hierarchische benadering* genoemd en het eenvoudige beschrijvende model kan een afgeleid model van het oorspronkelijke ingewikkelde verklarende model worden genoemd. De grootte van de groeiademhaling kan b.v. worden afgeleid uit de talloze biochemische omzettingen die moeten worden doorlopen om een bepaald eindproduct te bereiken (Penning de Vries, 1973). Er blijkt echter een zodanige vereenvoudiging mogelijk dat de groeiademhaling alleen nog maar afhangt van de chemische samenstelling van het groeiende plantmateriaal en de groeisnelheid, maar niet van de biochemische wegen of van de temperatuur. Bij een nog verdere vereenvoudiging is de groeiademhaling 25% van de bruto fotosynthese. Hoe ingewikkelder een model, des te belangrijker is het om zijn resultaten in een afgeleid model samen te vatten. De structuur van het afgeleide model kan in structuur lijken op het originele model, maar het kan ook een simpele regressieformule zijn. Gebruik van afgeleide modellen maakt het mogelijk om ook bij sterk samenhangende probleemgebieden de modellen handelbaar te houden.

Fig. 1 Schema van de onderzoekgebieden waarin simulatie wordt toegepast. De verbinding met de betreffende vakgebieden is door een onderbroken lijn aangegeven.



in principe dezelfde methode toegepast als in het bodemsimulatieprogramma. De toestandsvariabelen zijn luchttemperatuur, luchtvochtigheid en bladtemperatuur. Tussen de lagen onderling en tussen bladeren en lucht vindt uitwisseling plaats die sterk afhangt van de windsnelheid. De verdeling van de ingestraalde zonne-energie tussen verdamping en verwarming hangt weer af van de huidmondjes-weerstand, die door de plant wordt geregeld. Hoe dit laatste precies gebeurt is weer een vraagstuk apart waarbij blijkt dat lichtintensiteit, koolzuurgehalte van de lucht, watervoorziening van de plant en de temperatuur alle invloed hebben. Voor het huidmondjesgedrag is dan ook een apart submodel gemaakt.

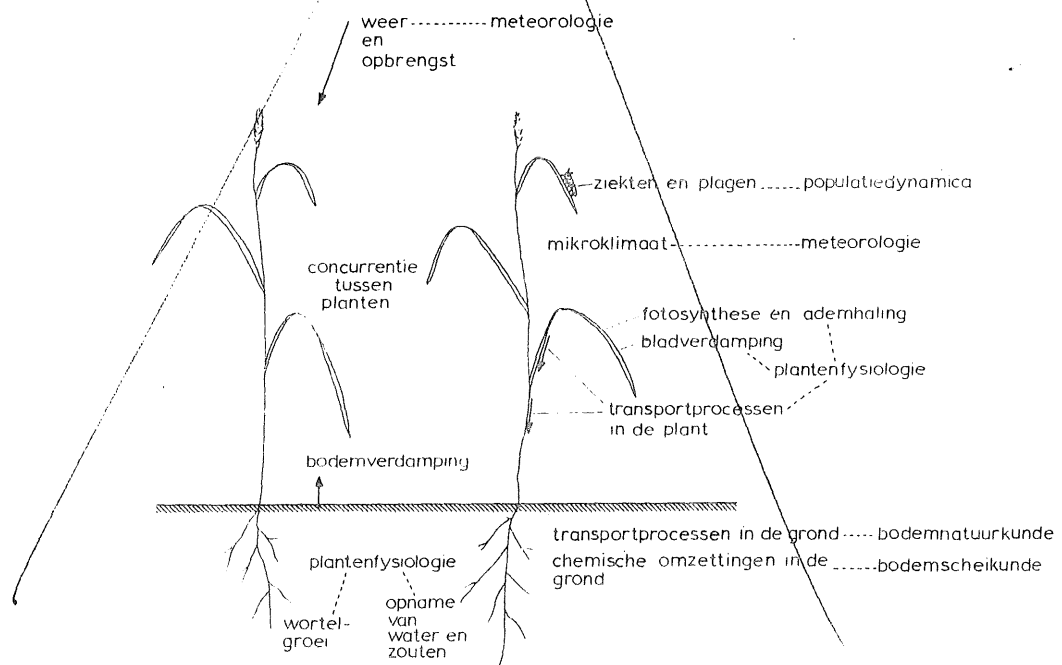
In dit beknopte overzicht zijn we van proces naar proces en van model naar model gegaan. Eigenlijk zou het allemaal in één gigantisch model moeten worden gezet om een goede beschrijving van de werkelijkheid te krijgen. De natuur zou dan echter aanzienlijk sneller integreren dan wij met de beste computer zouden kunnen, zodat dit plan weinig realistisch is. We zijn genooddaakt delen af te splitsen en afzonderlijk te beschrijven.

Verdeling in submodellen

Het maakt een groot verschil of we te maken hebben met naast elkaar liggende gebieden, zoals bodem en plant, of met in elkaar liggende gebieden, zoals groei en ademhaling. In het eerste geval zijn wel verbanden maar staat het één niet op een causaal hoger niveau dan het andere. In het laatste geval is groei een van de bepalende factoren voor de ademhaling. Als we nog preciezer gaan kijken kunnen we ons afvragen welke eiwitten nu eigenlijk worden afgebroken en ge-

recombineerd in het groeiproces. Er is geen einde aan dit proces van afdalen naar causaal steeds dieper liggende niveaus. Daarom moet er een grens worden getrokken en worden besloten wat kan worden beschouwd als invoervariabelen, wat moet worden berekend en wat de uitvoervariabelen zijn. De uitvoervariabele van het ene niveau wordt een invoervariabele voor het volgende niveau. Het komt er nu op aan om bij een simulatie van het hoger liggende niveau het model van het lagere niveau zodanig te vereenvoudigen dat het zonder al te veel problemen in dat van het hogere niveau kan worden opgenomen. Deze benadering wordt wel de *hierarchische benadering* genoemd en het eenvoudige beschrijvende model kan een afgeleid model van het oorspronkelijke ingewikkelde verklarende model worden genoemd. De grootte van de groeiademhaling kan b.v. worden afgeleid uit de talloze biochemische omzettingen die moeten worden doorlopen om een bepaald eindproduct te bereiken (Penning de Vries, 1973). Er blijkt echter een zodanige vereenvoudiging mogelijk dat de groeiademhaling alleen nog maar afhangt van de chemische samenstelling van het groeiende plantmateriaal en de groeisnelheid, maar niet van de biochemische wegen of van de temperatuur. Bij een nog verdere vereenvoudiging is de groeiademhaling 25% van de bruto fotosynthese. Hoe ingewikkelder een model, des te belangrijker is het om zijn resultaten in een afgeleid model samen te vatten. De structuur van het afgeleide model kan in structuur lijken op het originele model, maar het kan ook een simpele regressieformule zijn. Gebruik van afgeleide modellen maakt het mogelijk om ook bij sterk samenhangende probleemgebieden de modellen handelbaar te houden.

Fig. 1 Schema van de onderzoekgebieden waarin simulatie wordt toegepast. De verbinding met de betreffende vakgebieden is door een onderbroken lijn aangegeven.



vaak worden uitgevoerd dan die voor het snelle proces. Met de tweede maatregel (b) worden de snelheden van het snelle proces op nul gesteld zodra voldoende evenwicht is bereikt. Beide maatregelen vereisen een groepering van de vergelijkingen voor de snelle en de langzame processen, om de omleidingsroutes door het programma niet al te ingewikkeld te laten worden. In CSMP wordt de groepering het meest overzichtelijk gemaakt in de vorm van zg. PROCEDURES. Binnen een PROCEDURE kan gewoon FORTRAN worden gebruikt en moet op volgorde worden geprogrammeerd, de PROCEDURES zelf worden door de simulatietaal gesorteerd aan de hand van de invoer- en uitvoervariabelen van de PROCEDURE.

In zijn meest elementaire vorm is het schema dat gebruikt kan worden gegeven in figuur 2.

Op punt a moet de beslissing worden genomen of de langzame processen moeten worden herberekend, of dat nog kan worden volstaan met de oude waarden. Op deze manier kan de frequentie van berekening van de langzame processen aanzienlijk worden verlaagd. Het relatieve aandeel van dit gedeelte in het simulatieprogramma bepaalt de winst in rekestijd. Op punt b wordt besloten of het snelle proces wordt herberekend. Als er nog voldoende evenwicht is, kunnen de snelheden identiek nul worden gesteld.

Het hangt af van de fluctuatie van externe variabelen welke winst hiermee wordt bereikt. Het criterium wat hierbij wordt gebruikt zal meestal een balans in de één of andere vorm zijn. In het mikrometeorologische voorbeeld wordt de energiebalans van het gewas als geheel als criterium genomen.

Toepassing van maatregel b kan moeilijkheden opleveren in verband met de gekozen integratiemethode. De overgang van en naar de snelheden identiek nul geeft een diskontinuiteit die kan ressorteren in een verkleining van de tijdstap bij een zelf-aanpassende integratiemethode. Het bereikte effect is dan tegengesteld aan de bedoeling. Daarom is het het beste in dit geval alleen te werken met de simpele rechthoekige integratiemethode, waarbij de tijdstap gelijk wordt genomen aan de kleinste in het systeem voorkomende tijdconstante. Bij vaste tijdstap heeft het gebruik van hogere orde integratiemethodes weinig zin. Als de grootte van de kleinste tijdconstante niet analytisch kan worden bepaald, kan deze worden gevonden door het programma eerst te laten rekenen met de zelfaanpassende Runge-Kutta methode.

Voorbeeld

In een gefingeerd technisch voorbeeld wordt de omleidingsmethode geïllustreerd. De temperatuur van een waterbad wordt geregeld op 50°C. De thermometer die in het bad hangt bestuurt een verwarmingsclement met een vermogen dat overeenkomt met een verwarmingssnelheid van 100°C hr⁻¹. De thermometer heeft een tijdconstante van 10⁻⁶ hr en het bad t.o.v. de omgeving, die op 20°C ligt, een tijdconstante van 1 hr. De vergelijkingen kunnen als volgt in CSMP worden gegeven:

```
TM=INTGRL(0.,DTM)
TW=INTGRL(0.,DTW)
DTM=(TW-TM)/TAU2
```

```
DTW=(20-TW)/TAU1+INSW(50.-TM,0.,100.)
PARAM TAU1=1.,TAU2=1.E-6
TIMER FINTIM=1.,PRDEL=0.1
PRINT TW,TM
```

TAU is tijdconstante, TM is temperatuur van thermometer, TW van water.

Het verwarmingsproces wordt gevolgd vanaf 0°C gedurende één uur. Het is duidelijk dat in de praktijk de kortsluitingsmethode hier de aangewezen weg is en dat TM dus gelijk kan worden gesteld aan TW. De analytische oplossing luidt dan

$$TW = \min(120(1-e^{-t}), 50)$$

Het blijkt dat het niveau van 50°C na 0.539 hr wordt bereikt.

Het is hier echter de bedoeling de omleidingsmethode te illustreren en daarom wordt het bovenstaande programma eerst uitgevoerd met de zelfaanpassende Runge-Kutta-Simpson methode, waarbij men zich niet het hoofd hoeft te breken over de grootte van de tijdstap. Het blijkt dan dat in totaal het programma 2.437.600 maal wordt doorgerekend om het volle uur goed door te komen. De orde van grootte van dit aantal is dus de totale simulatieduur gedeeld door de kleinste tijdconstante.

Bij toepassing van de omleidingsmethode wordt geteerd met de rechthoekige integratie en een tijdstap van 10⁻⁶ hr. (fig. 3) De genoemde maatregel a wordt zo uitgewerkt dat de berekening van DTW alleen wordt uitgevoerd als TW meer dan een waarde DEV verschilt van de waarde van TW ten tijde van de laatste uitgevoerde berekening. De keuze van dit criterium is een netelige zaak. In dit geval zou een gevolg zijn dat DTW nooit meer wordt herberekend als de waarde ervan eenmaal op nul is gekomen. Daarom is het verstandig bovendien te testen op veranderingen van externe variabelen en in elk geval te laten rekenen op vaste intervallen, zoals éénmaal per tijdconstante van het langzame proces. Maatregel b is hier zo uitgevoerd dat DTM zonder meer op nul wordt gesteld zodra TW en TW minder dan het reeds gebruikte criterium DEV van elkaar verschillen. Samen resulteert dit erin dat de gesimuleerde TW tweemaal de waarde van DEV van de regeltemperatuur kan gaan afwijken. In de volgende tabel zijn de resultaten van een aantal combinaties van integratiemethode, kleinste tijdconstante en foutenkriterium gegeven.

Methode	TAU2 hr	DEV o	aantal berekeningen	grootste afwijking TW, TM °C
RKS	10 ⁻⁶	—	243760	0.0001
RECT	10 ⁻⁶	0.001	66515	0.01
RECT	10 ⁻⁶	0.01	6914	0.02
RECT	10 ⁻⁶	0.1	695	0.2
RECT	10 ⁻⁶	1.	71	2.
RKS	10 ⁻³	—	52983	0.001
RECT	10 ⁻³	0.001	1000	0.02
RECT	10 ⁻³	0.01	1000	0.2
RECT	10 ⁻³	0.1	511	0.2
RECT	10 ⁻³	1.	69	2.