arXiv:2301.07548v1 [cs.NE] 16 Jan 2023

MultiCalib4DEB：一种利用多模态优化进行动态能量预算参数校准的工具箱

Juan Francisco Robles[1] | Manuel Chica[1] | Ramón Filgueira[2,4] | AntonioAgüera[2] | Sergio Damas[3]

[1]格拉纳达大学计算机科学与人工智能系、安达卢西亚数据科学与计算智能研究所（DaSCI），西班牙格拉纳达，18071

[2]挪威海洋研究所底栖资源系，挪威卑尔根，NO-5817

[3]格拉纳达大学，西班牙格拉纳达 18071，安达卢西亚数据科学与计算智能研究所（DaSCI）软件工程系

[4]加拿大新斯科舍省哈利法克斯 Oxford Street 1459 号，B3H 4R2，达尔豪斯大学生命科学中心海洋事务项目

通信作者
Juan Francisco Robles，格拉纳达大学，西班牙格拉纳达 18071，安达卢西亚数据科学与计算智能研究所（DaSCI）计算机科学与人工智能系。电子邮箱：jfrobles@ugr.es

资助信息
本研究得到西班牙科学、创新与大学部、安达卢西亚政府、格拉纳达大学、西班牙国家研究署（AEI）以及欧洲区域发展基金（ERDF）的资助，资助项目包括 AIMAR（A-TIC-284-UGR18）和 SIMARK（PY18-4475）。

1. 校准是验证计算模型的重要步骤，也是一项颇具挑战性的工作。

2. 动态能量预算（DEB）理论相关已发表论文的数量呈指数级增长，这在很大程度上得益于 DEBtool 工具箱。多模态进化优化可为 DEBtool 带来新功能，尤其有助于提供同样最优且多样化的解。

3. 本文介绍了 MultiCalib4DEB，这是一款直接集成到现有 DEBtool 工具箱中的 MATLAB 工具箱，利用多模态进化优化算法，为 DEB 模型寻找多个全局和局部最优且各不相同的校准解。

4. MultiCalib4DEB 为 DEBtool 工具箱增添了强大的校准机制、统计分析和可视化方法，并提供范围广泛的输出结果、多种校准方案及专用工具，以增强 DEBtool 校准模块的功能，并帮助 DEBtool 用户评估校准结果的性能。

关键词
多模态优化，动态能量预算，参数校准，DEBtool 工具箱

1 | 引言

动态能量预算（DEB）理论[1;2]已成为一种常用方法，可用于恰当地描述个体在整个生命周期中的生物能量学。DEB理论已被广泛用于表征不同物种的代谢[3;4]。然而，需要同时使用多个数据集来校准大量参数，这妨碍了DEB模型的应用，也是建模中最具挑战性的方面之一。此外，数千种物种的参数都需要校准，因此DEB参数校准已成为一项核心任务[5]。

Add-my-Pet 项目[1]的创建以及 DEBtool 工具箱[6;7]的推出，提供了便捷且易于使用的校准框架，以及丰富的函数和示例库，可用于参数校准和 DEB 模型应用。DEBtool 不断更新以改善建模体验[8;5;9;10]，因此它也是 DEB 理论得以成功的原因之一。出于这一原因，多位作者以该工具箱为基础，对其研究的物种进行参数校准[3]，，提出了多种方法来改进 DEBtool 的校准结果[11]及其验证[12]，，并为 Add-my-Pet 项目作出贡献。截至2021年7月，该项目数据库中已有约 3,000 个物种[2]。

DEBtool 现有的校准模块使用 Nelder-Mead（NM）单纯形法[13]校准参数。尽管有些作者提出了更高效地执行校准过程的方法[11]，但这类方法的主要问题在于，它们无法应对 DEB 参数校准中多峰搜索空间带来的挑战，例如存在多组校准后的参数值，而这些参数值往往会产生相似的拟合质量[14]。因此，传统校准方法返回的结果仅限于单个解。这限制了对多峰搜索空间的探索，也限制了生物学建模者可获得的备选方案和知识。运筹学和人工智能领域还有一些更先进的优化方法，能够更好地处理这类多模态优化问题。

校准问题的多模态特性，以及待校准参数集合之间存在非线性相关性，通常使近似优化算法（如进化算法）[15],成为解决各类多模态优化问题的最佳方法[14;16;17]。具体而言，多模态进化算法（MMEA）已被公认为一种强有力的方法，能够在大型复杂问题中获得多样且高质量的解，同时在合理的时间内改进结果的验证。MMEA 能够返回不同的最优参数配置，这些配置的拟合效果相近，彼此同样可取，并能为敏感性分析和模型稳健性提供更多见解[14]。得益于近期对 DEB 模型参数空间边界的发现[5]以及筛选器的应用，现在可以利用 MMEA 改进 DEB 模型的校准。这些边界界定了校准参数可变动的范围，从而避免不可行的结果。

本文介绍了一款基于多目标进化算法[18], 的校准工具箱，名为 MultiCalib4DEB。它与现有的 DEBtool 及其校准框架[3]直接集成。MultiCalib4DEB v.1.0 已在 GitHub[4] 上以 GNU许可证 发布。该工具箱为 DEBtool 添加了基于成功历史的自适应差分进化算法（SHADE）[19]及其扩展 L-SHADE[20]。SHADE 和 L-SHADE 是差分进化算法（DE）[21], 的扩展；差分进化是多模态优化领域中用途最广泛、最稳健的种群搜索算法之一[22]。SHADE 和 L-SHADE 均已成功应用于经济学[23]，、能源[24;25;26]、数学[27], 和药学[28]等领域。MultiCalib4DEB 提供更丰富的输出、更灵活的校准解方案，以及用于评估参数不确定性和验证的专用工具。MultiCalib4DEB 可直接用于正在进行的研究或现有的物种 DEB 库，在一次算法运行中校准模型参数、评估其稳健性并开展可视化敏感性分析。除了改进模型拟合效果之外，MultiCalib4DEB 的主要优势之一，是能够返回一组最优且多样的、同样理想的校准解或

[3]https://github.com/add-my-pet/DEBtool_M/tree/master/lib/MultiC
[4]https://github.com/JuanfranRobles/MultiCalib4DEB

[1]http://www.bio.vu.nl/thb/deb/deblab/add_my_pet/[2]http://www.bio.vu.nl/thb/deb/deblab/add_my_pet/speciesList.html

点估计值，建模者可据此对结果进行更深入的敏感性分析，或启动新的校准，以更精确地探索特定解。多目标进化算法在生态和生物模型校准中的应用并不局限于DEB理论，因此，本研究的结果和所介绍的工具箱也可用于类似的建模技术。

我们首先介绍进化计算、利基保持技术和多目标进化算法的主要概念。接着，在第2节中，我们将描述MultiCalib4DEB 的主要功能、参数校准过程，以及数据分析和可视化过程。最后，在第4节中，我们将总结使用 MultiCalib4DEB 校准 DEB 模型参数所得的见解。补充信息部分提供了有关 MultiCalib4DEB 的一些示例，例如代码片段、图表以及工具箱中校准选项的说明。在该部分中，读者还可以看到一个完整章节，其中评估了MultiCalib4DEB 的校准性能。

2 | 工具箱说明

2.1 | 主要功能与 DEBtool 集成

MultiCalib4DEB 旨在高效校准 DEB模型的参数，并通过使用多目标进化算法[29;30]返回一组多样化的最优解。得益于其种群方法，MultiCalib4DEB 能够在一次运行中找到 DEB 模型的局部和全局最优解，同时保留多个解。

该工具箱已集成到 DEBtool 中，既能提升其在校准参数数量较多的模型时的性能，也能帮助建模人员分析校准输出。为此，MultiCalib4DEB 纳入了一系列统计和可视化功能。

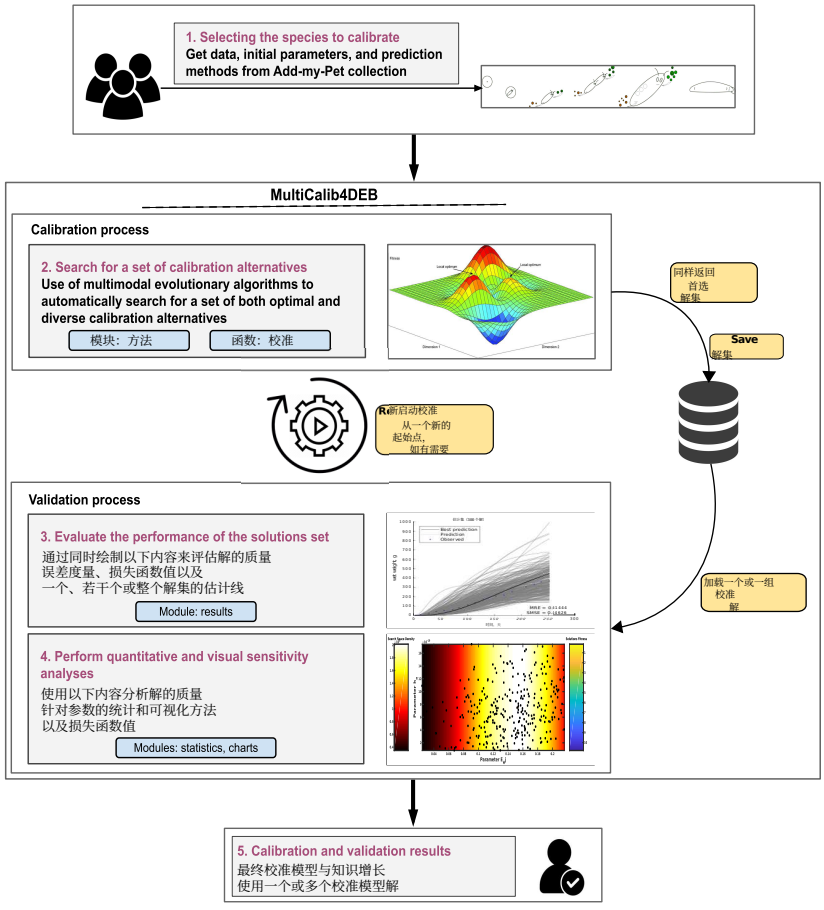
MultiCalib4DEB 遵循与 DEBtool 相同的架构，便于使用、运行、保存、可视化 DEB 模型的校准结果，并对其进行操作。因此，熟悉 DEBtool 校准模块的用户可以轻松上手 MultiCalib4DEB。MultiCalib4DEB 已全面集成到 DEBtool 中，用户只需在 DEBtool 的估计选项中将选项设为 ‘mmea’，即可使用：estim_options(‘method’,‘mmea’);。集成了 MultiCalib4DEB 的模块列表见表 1。

该工具箱也具有灵活性。用户可以编辑校准设置，范围从总校准时间到待校准参数的来源及其范围。MultiCalib4DEB 提供多种输出和不同的校准解备选方案，并提供用于评估参数不确定性和验证的专用工具，使用户能够在校准过程中以及校准完成后与校准过程进行交互。MultiCalib4DEB 使用 MATLAB（v.9.2（R2017a））编写。

2.2 | 参数校准过程

MultiCalib4DEB 的设计旨在模拟 DEBtool 的参数校准过程，以方便 DEBtool 用户使用。因此，用户可以通过选择待校准物种、加载该物种的数据以及 DEBtool 筛选器和损失函数方法，并配置一些校准选项，来启动校准过程。校准完成后，用户可以进行统计和视觉敏感性分析，从校准结果中获取见解。MultiCalib4DEB 会返回多个彼此同样可取的解。这些解可以保存到文件中，以供进一步分析，或用于启动新的校准过程，从而探索问题搜索空间中更具体的区域。从这个意义上说，MultiCalib4DEB 并不执行封闭式校准过程，而是鼓励采用迭代校准过程：工具箱返回的任何解都可以再次用于启动新的校准过程（例如，用户可以固定某些参数值，或修改其最小值和最大值范围）。图 1 展示了使用 MultiCalib4DEB 工具箱校准 DEB 模型的过程示意图。

虽然可以使用默认配置启动校准过程，但用户可以通过补充信息部分表 S（1）中的选项自定义此配置。用户可以从两种校准停止准则中进行选择：1）最大评估次数（使用 max_fun_evals 参数）和 2）



图（1）示意图：展示 MultiCalib4DEB 工具箱的运行方式及其在 DEB 模型校准过程中的各个步骤。

最大时间（使用 max_calibration_time 参数）。默认情况下，达到最大评估次数时校准即停止。max_fun_evals 参数建议的最小值为 10,000。确定 max_fun_evals 数值的一种参考方法是，每个校准参数设置 1,000 次评估。因此，如果某个物种有 15 个待校准参数，则最大评估次数至少应设为 15,000。另一方面，建议的最短校准时间为 1 小时，而确定校准时间的一种合适标准是每个校准参数设置 10 分钟。默认情况下，校准过程会在其中一个达到上述标准之一即可，即使尚未收敛。关于 max_fun_evals、max_calibration_time 及其他校准选项的详细说明，请参阅 MultiCalib4DEB 用户手册[5]。补充信息部分的示例 1 和 2 提供了两个代码示例，展示了如何使用不同的 MultiCalib4DEB 校准选项，为革胡子鲶等物种启动不同的校准过程。

[5]https://github.com/JuanfranRobles/MultiCalib4DEB

2.3 | 多模态进化算法

2.3.1 | 进化计算与利基保持技术的主要概念

求解优化问题需要找到一个优于其他解的解。所有可行解构成的空间（即从中寻找所需解的解的集合）称为搜索空间。搜索空间中的每个点都代表一个可能的解，而每个可能的解都根据其适应度值进行评估。

进化计算[15] 提供用于搜索和优化的计算模型，其起源于进化理论和达尔文自然选择。

一般而言，进化算法采用以下方案运行：

1. 针对问题调整候选解种群。**2.** 根据生成解的质量（依据适应度函数测得）应用随机选择过程。**3.** 使用交叉和/或变异算子改变选出的解。**4.** 使用新生成的解替换当前种群中的解

另一方面，利基保持技术是一种划分机制，可根据个体的相似性[31]生成不同的子种群，以便探索搜索空间中的不同区域（生态位）。

多目标进化算法兼具进化算法探索和开发解空间的能力，以及利基保持技术维持解之间必要多样性的能力。因此，多目标进化算法能够广泛搜索问题搜索空间中不同的潜在区域，避免停滞于次优解，并在单次运行中获得质量各异的解。

MMEA 所要求的解的多样性（参数值各不相同）与适应度之间的平衡，是其与标准进化算法的主要区别；在标准进化算法中，重要的只是找到适应度最高的最优解。

自 Goldberg 和 Richardson 提出开创性方案以来[31]，，多模态进化算法家族不断发展壮大[32;33;19;20]，并广泛应用于大量优化问题[22]。

2.3.2 | 基于全局种群的算法

MultiCalib4DEB校准工具箱提供两种多目标进化算法：基于成功历史的自适应差分进化（SHADE）[19] 及其扩展算法 L-SHADE[20]。SHADE 和 L-SHADE 都是著名差分进化算法[21]的多模态扩展。

除出色的优化性能外，SHADE 和 L-SHADE 还是自适应多目标进化算法，因此无需调整任何参数，也无需预训练即可使用这些算法。SHADE 和 L-SHADE 算法可简要描述如下：

• **SHADE**：这是 DE 的一种基于历史的变体。如果使用交叉率概率（CR）和变异率（F）生成的解优于前一个个体，那么这些成功的 值就会存入历史记忆。

• **L-SHADE**：这是 SHADE 的扩展版本，加入了一种简单的确定性种群调整方法，称为线性种群规模缩减。该调整方法会持续缩减种群规模，使其符合线性函数：第一代的种群规模为N_{init}，运行结束时的种群规模为 N_{min}。

SHADE 和 L-SHADE 都是 DE 的扩展。DE 是一种进化算法，它通过将现有个体与供体向量、变异率（F）和交叉率概率（CR）相结合来生成新的解，从而决定新解的取值是来自供体向量 还是个体的原始值。按照 Tanabe 等人的建议[19;20]，MultiCalib4DEB 中固定了 SHADE 和 L-SHADE 运行所需的少数几个参数。交叉率设为 CR =0.9，变异率则设为 $F = 0.5$。对于 SHADE 和 L-SHADE，我们都将历史记忆的最小大小（P）设为 100。该参数的最大大小由用户定义（有关

num_结果参数的更多信息，请参阅补充信息部分的表 S (1)。L-SHADE 方法的 N_{init} 和 N_{min} 分别设为 P 和 5。尽管 L-SHADE 在运行过程中会减少解的数量，我们仍将最终结果集的大小设为P。因此， P 是 MultiCalib4DEB 中唯一未固定的参数，用户可对其进行设置，以控制工具箱在校准过程结束后返回的校准结果数量。

2.3.3 | 校准解的局部细化

为更充分地探索问题搜索空间，MultiCalib4DEB 校准会对 P 中包含的最佳解、所有解或随机选取的一组解进行细化。用户可以选择是否在使用 MMEAs 完成校准后进行细化，以及如何进行细化。为此，需使用表 S (1) 中所示的参数 refine_best 和 refine_prob。参数 refine_best 用于启用对校准过程结束后找到的最优解进行细化；参数 refine_prob 则控制要进行细化的解的数量。默认情况下，refine_best 参数处于启用状态，细化过程会针对最优解（即损失函数值较低的解）进行。是否进行细化取决于对问题搜索空间所需的探索程度。我们认为，进行细化有助于在最终解集合中搜索全局最优解。此外，由于细化受用户设定的最大评估次数或总校准时间限制，因此这一选项不会显著影响 MultiCalib4DEB 的执行时间。

与 Filgueira 等人提出的方法相比，采用细化过程是一项创新[16]，因为除了探索解空间以寻找不同的最优解之外，搜索过程中还会利用这些最优解的邻域。细化过程采用 NM 单纯形法探索局部最优解的邻域，以最小化其损失函数值。NM 方法可以采用不同的停止准则，例如单纯形容差（用于控制每次单纯形迭代时解的精度）或收敛准则（当未达到最低收敛阈值时停止优化过程）。按照 DEBtool 的方法，设定固定次数的函数评估以搜索收敛解。随后，该方法最多运行 500 步；若达到收敛，则通过数值延拓重新启动优化过程。

2.4 | 数据分析与可视化

校准过程完成后，结果会存储在名为 solutions_set 的 MATLAB 对象中。用户可以从该对象中提取一个或一组解，并在需要时使用不同的校准选项迭代地重新启动校准过程。solutions_set 的字段如表 2 所述。

根据表 2 的输出信息，用户还可以使用统计模块和图表模块中的函数进行统计和可视化分析。MultiCalib4DEB 中提供的完整统计方法和可视化方法列表如下：

- **损失函数值的统计函数**：基数、平均值、最小值、最大值、标准差，以及损失函数集的平均距离。

- **参数值的统计函数**：平均值、标准差、离散度、最小值、最大值、峰度、偏度、双峰系数，以及最终参数值与其最小值和最大值范围之间的平均距离。

- **可视化图表**：密度热图（可辅以包含损失函数值的散点图）、散点图（简单散点图、按损失函数值加权的散点图，或显示搜索空间中各解密度的散点图），以及误差图（校准值及其对应的损失函数调整值）。

MultiCalib4DEB 还支持通过图表模块对校准结果进行可视化和分析。该模块包含两种方法：

1. plot_chart：用于为校准参数对生成不同图表（例如散点图和热图）的方法。

2. plot_results：用于可视化校准结果的真实值和预测值图表的方法。该方法既可以绘制单个校准解的独立预测结果，也可以生成完整报告，其中包含整个校准结果集的预测值。

表 3 列出了 plot_chart 和 plot_results 方法的可用选项。使用 plot_chart 方法，用户可以探索搜索空间中一对校准参数之间的关系。该方法提供的不同图表有助于更好地了解参数之间的关系以及它们所探索的搜索空间。图 2 展示了使用 plot_chart 方法可以生成的图表，而图 3 展示了使用 plot_results 方法可以生成的图表。plot_results 方法中的选项可用于呈现损失函数值或误差。图 2 展示了使用此方法所得输出的一个示例。

补充信息部分的示例 3 和 4 展示了两个示例，其中包含对表 3 中某些方法的函数调用代码。示例 3 和 4 得到的结果如补充信息部分的图 S (1) 所示。

3 | 校准性能评估

MultiCalib4DEB 在校准过程中会返回不同的结果。因此，随着时间推移，校准引擎找到的解的质量和多样性都会提高。图 3 展示了两个校准过程的校准结果示例：分别运行 10 分钟（左图）和 1 小时（右图），用于校准 abj DEB 模型中革胡子鲶 物种的基础模型。图 3 分别比较了湿重（以克为单位，用于衡量物种的质量）与时间（以天为单位）。可以看出，与运行 10 分钟的校准过程相比，运行 1 小时的校准过程所得解的质量更高，误差度量也显著更优，因为在前一种情况下，算法没有足够的时间探索问题搜索空间并收敛，而在后一种情况下则有足够的时间。在运行 1 小时的校准过程所得的最终解集合中，有一个解的损失函数值最低（最佳）。其余解的损失函数值都高于最优解，但预测准确，同样值得考虑。NM 等数值方法只能提供单个解，而多目标进化算法能够生成一组解，让用户探索 DEB 的参数及其行为。

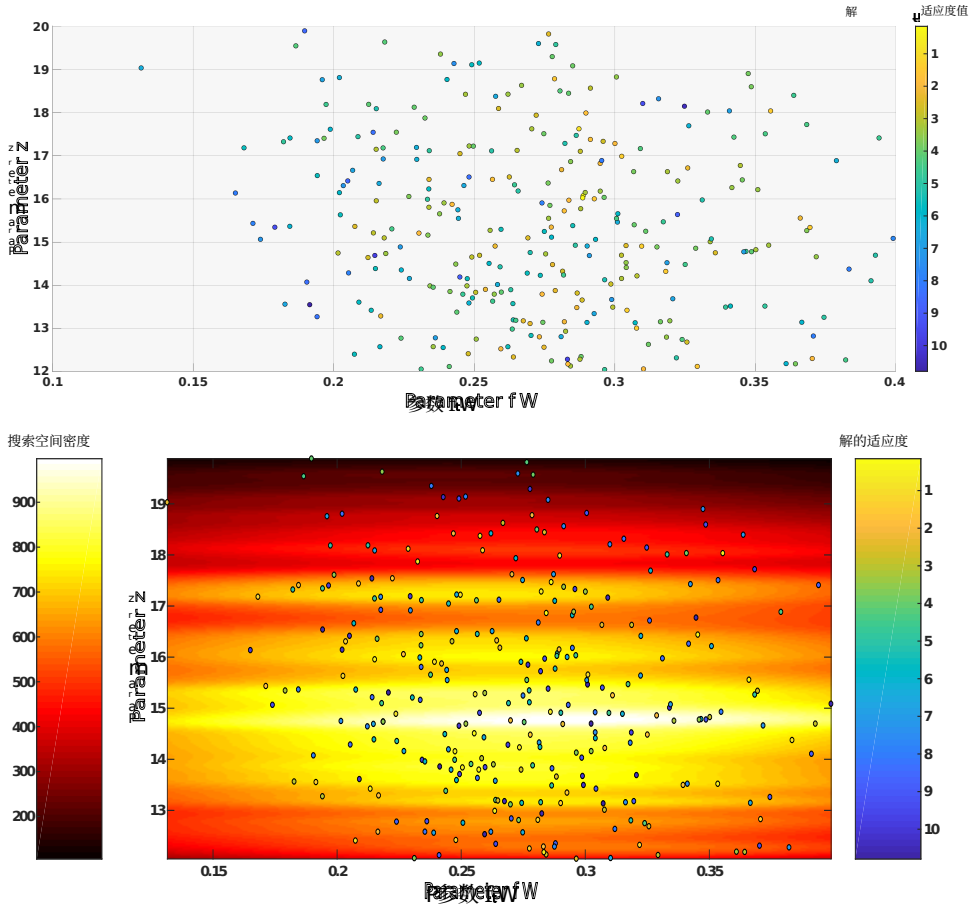
我们还进行了一次数值实验，通过校准 DEB 实验室物种库[6]中的 13 种不同物种，比较 NM 和 SHADE 与细化校准算法的性能。我们使用损失函数值、加权平均绝对百分比误差（MAPE；在 DEB 文献中称为平均相对误差（MRE））以及对称均方误差（SMSE）[10]来衡量数据与预测值之间的拟合优度。MRE 以加法方式评估数据与预测值之间的差异，而 SMSE 则以乘法方式进行评估。MRE 和 SMSE 的计算公式如下：

$$MRE = \frac{1}{n'} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{w_{ij}}{w_i} \frac{|p_{ij} - d_{ij}|}{|d_i|}, \quad \text{where } w_i = \sum_{j=1}^{n_i} w_{ij} > 0 \text{ and } d_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} d_{ij} \tag{1}$$

$$SMSE = \frac{1}{n'} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n_i} \frac{w_{ij}}{w_i} \frac{(p_{ij} - d_{ij})^2}{(p_i^2 + d_i^2)}, \quad \text{where } w_i = \sum_{j=1}^{n_i} w_{ij} > 0 \text{ and } p_i = \frac{1}{n_i} \sum_{j=1}^{n_i} p_{ij} \tag{2}$$

其中， i指物种数据集， j 指 i中的给定数据点。 d_{ij} 表示数据， p_{ij} 表示模型预测， w_{ij} 表示相应的权重系数。 n' 是包含 $w_i > 0$的数据集数量。权重系数用于量化用户对数据集以及特定数据点的信任程度。在用户覆盖这些系数之前，它们会自动设为 $w_{ij} = \frac{1}{n_i}$。MRE的取值范围为0至无穷大，

[6]http://www.bio.vu.nl/thb/deb/deblab/add_my_pet/物种_list

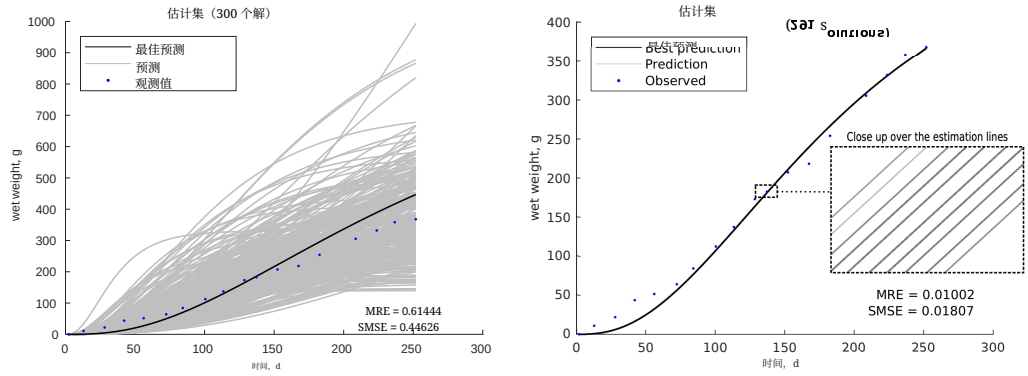


图（2）图表模块中可用图表的示例。上方的图显示散点方法的输出，下方的图显示密度_hm_散点方法的输出。图表中比较的参数对为缩放因子（z）和 f_tW。 z 定义为生物体的最大体积长度（单位为厘米），而 f_tW 是某物种性成熟时湿重对应的缩放功能反应。

而SMSE的取值范围为0至1。在这两种情况下，0均表示预测值与数据完全一致。

为公平比较两种校准算法，实验设计将损失函数的 20,000 次评估次数设为停止准则（ SHADE 为 15,000 次，而使用 NM 进行细化过程时最多运行 500 步）。SHADE 完成对搜索空间的搜索后，将对找到的最优解进行细化。细化过程会持续进行，直至达到最大评估次数或损失函数不再改善。单独的 NM 方法遵循相同的停止准则与 SHADE 所采用的相同（即 20,000 次评估）。按照估计过程的建议，NM 方法会迭代启动，每次最多运行 500 步（即评估损失函数 500 次）[7]。因此，当该方法达到 500 步时，搜索会从先前获得的（最佳）结果继续进行。达到 20,000 次评估或不再有改进时，该方法便会停止。DEBtool 和 MultiCalib4DEB 校准引擎默认设置校准选项。随后，在校准过程中需要保留的解的数量

[7]http://www.debtheory.org/wiki/index.php?title=AmP_estimation_pr



图（3）革胡子鲶物种在两种校准过程（通常为数分钟，左图；一小时，右图）中的示例。X 轴表示以天为单位的时间，Y 轴表示湿重值（克）。该图概述了两种校准过程的解集：蓝色圆点表示实际观测值，灰线表示最终解集中每个解对应的预测值，黑线则表示损失函数值最低（最佳）的结果。在一小时的校准过程中，所有解的估计值相互重叠，如图中放大面板所示。

使用 SHADE 进行校准时（P），该数量设为 200。因此，校准过程结束后，每个经过校准的物种都会返回一个由 200 个最优解组成的集合。SHADE 和 NM 均以 Add-my-Pet 项目数据库中定义的初始物种参数开始校准。

如表4所示，初始损失函数值通常接近算法返回的最小损失函数值，因为校准有时会从最优解附近开始。NM 与 SHADE 之间的改进幅度，按 SHADE 的最小（最佳）损失函数值相较于 NM 的损失函数值的百分比降幅计算。数值为零表示 SHADE 未改善 NM 的结果，而数值大于零则表示 SHADE 优于 Nelde Mead（例如，数值为 0.05 表示 SHADE 相较于 NM 改进了 5%）。我们所选物种的完整列表见表4，其中包括其典型模型、待校准参数的数量以及损失函数的初始值。

表4显示，SHADE 能够成功校准复杂度各异的物种。在13个物种中，有9个物种的最终损失函数值优于 NM；另外4个物种中，NM 达到了与 SHADE 相同的最佳最终损失函数值。对于已校准物种，SHADE 算法能够将损失函数值降低 1%（例如 *Dipodomys her-*

rmanni、*D.merriami*和雪兔 物种）至 4%（例如 *Dipodomys deserti* 和长牡蛎 物种），与 NM 的结果相比。此外，SHADE 算法为每个物种返回 200 个最优且多样化的解，而 NM 仅返回一个解。此外，每个物种的200解集合的损失函数平均值接近损失函数最小值，这表明最终解中的任意一个解都是最优的，可视为可行的校准解。SHADE 在7个物种中也取得了最佳 SMSE 和 MRE 值。此外，在最终损失函数值、SMSE 和 MRE 方面，SHADE 通过处理参数数量最多、最复杂的物种（长牡蛎，需要校准18个参数），优于 NM。

4 | 结论与后续研究

MultiCalib4DEB 旨在帮助研究人员更好地校准 DEB 模型的参数。该工具箱使用强大的多目标进化算法来校准 DEB 模型。使用这些算法有两方面的优势。一方面，它们已在广泛的应用领域中展现出卓越的性能。另一方面，它们特别

适用于解决包含一组最优解的问题。多目标进化算法专为在单次运行中返回这组最优解而设计。我们对 13 种复杂度各异的物种进行校准，以比较 SHADE 与 NM。实验结果表明，SHADE 的性能比 NM 算法高出 1% 至 4%，同时为每个物种返回 200 个最优且多样化的解，而非单个解。用户可以从这组解中选择要可视化、分析或用于另一校准过程的解。这进一步凸显了使用多目标进化算法校准 DEB 模型的优势。

MultiCalib4DEB 工具箱还能够执行统计分析并生成可视化图表。这些工具有助于探索和分析校准参数之间的关系。统计模块和可视化模块均可用于验证参数校准结果。MultiCalib4DEB 尤其适合希望根据不同校准结果进行敏感性分析的 DEBtool 用户。

MultiCalib4DEB 特别有助于高效地独立校准不同物种，不受校准参数数量的限制，并可在单次运行中返回多种参数配置。该工具箱也可灵活调整以满足用户需求。它旨在增强 DEBtool 中 DEB 模型的校准功能，但其用途并不限于 DEB 模型的校准。

参考文献

1. Kooijman SA、Sousa T、Pecquerie L、Meer V. dJ、Jager T. 从食物依赖型统计量到代谢参数：使用动态能量预算理论的实用指南。《生物学评论》2008年；83(4)：533–552。2. Kooijman SA. 用于代谢组织的动态能量预算理论。剑桥大学出版社。2010年。3. Sarà G、Palmeri V、Montalto V、Rinaldi A、Widdows J. 双壳类功能性状的参数化：用于机制性生态生理动态能量预算（DEB）模型。《海洋生态学进展丛刊》2013年；480：99–117。4. Smallegange IM、Caswell H、Toorians ME、Roos dAM. 将动态能量预算理论纳入积分投影模型，以机制性描述种群动态。模型。《生态学与进化方法》2017年；8(2)：146–154。

5. Lika K、Augustine S、Pecquerie L、Kooijman S A. 标准 DEB 模型下从数据到参数空间的双射量化了供需谱。《理论生物学杂志》2014; 354: 35–47.

6. Kooijman SA. Add-my-Pet 项目。https://add-my-pet.github.io/DEBtool_M/docs/；2021年。[在线；访问日期为2021]年6月10日。

7. Martin BT、Zimmer EI、Grimm V、Jager T。《动态能量预算理论与个体基础建模相遇：一种通用且易于使用的实现》。《生态学与进化方法》2012年；3(2)：445–449。

8. Lika K、Kearney MR、Freitas V 等。《用于估算标准动态能量预算模型参数的“协变法” I：理念与方法》。海洋研究杂志 2011年；66(4)：270–277。9. Marques GM、Augustine S、Lika K、Pecquerie L、Domingos T、Kooijman SA。AmP 项目：基于动态能量预算参数比较物种。*PLoS* 计算生物学 2018年；14(5)：e1006100。10. Marques GM、Lika K、Augustine S、Pecquerie L、Kooijman SA。将多个模型拟合到多个数据集。海洋研究杂志 2019年；143：48–56。11. Morais J、Custódio A、Marques GM。使用直接搜索方法校准动态能量预算模型中的参数。数学生物学杂志 2019年；78(5)：1439–1458。12. Accolla C、Vaugeois M、Rueda-Cediel P 等。DEB-tox 与数据缺口：对个体层面输出的影响。生态建模 2020年；431：109107。doi：https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2020.109107 13. Nelder JA、Mead R。用于函数最小化的单纯形法。计算机杂志 1965年；7(4)：308–313。14. Chica M、Barranquero J、Kajdanowicz T、Cordón O、Damas S。多模态优化：一种有效的模型校准框架。信息科学 2017年；375：79–97。15. Back T。《理论与实践中的进化算法：进化策略、进化编程、遗传算法》。牛津大学出版社。1996年。16. Filgueira R、Chica M、Palacios JJ 等。采用多模态优化来提升动态能量预算参数化。生态建模 2020年；431：109139。

17. Robles JF、Bermejo E、ChicaM、Cordón O。用于简化基于智能体模型校准复杂性的多模态进化算法。人工社会与社会仿真期刊 2021年。doi：10.18564/jasss.4606

18. Das S, Maity S, Qu BY, Suganthan P. 实数参数进化多模态优化——最先进方法综述。群体与进化计算2011年；1(2)：71-88。doi：https://doi.org/10.1016/j.swevo.2011.05.005

19. Tanabe R, Fukunaga A. 差分进化的成功历史参数自适应。*2013*年*IEEE*进化计算大会2013：71–78。doi：10.1109/CEC.2013.6557555

20. Tanabe R, Fukunaga AS. 利用线性种群规模缩减提升SHADE的搜索性能。*2014*年*IEEE*进化计算大会 *(CEC)*2014：1658–1665。doi：10.1109/CEC.2014.6900380

21. Storn R, Price K. 差分进化——一种简单高效的启发式算法，用于连续空间中的全局优化。全局优化期刊 1997年；11(4)：341–359。22. Das S, Mullick SS, Suganthan PN. 差分进化的最新进展——一篇更新综述。群体与进化计算2016年；27：1–30。23. Jana R, Ghosh I, Das D. 一种基于差分进化的回归框架，用于预测比特币价格。运筹学年鉴2021年：1–26。24. Biswas PP, Suganthan PN, Amaratunga GA. 使用L-SHADE算法优化风电场中风力涡轮机的布局。*2017*年*IEEE*进化计算大会（*CEC*）2017年：83–88。25. Gao S, Wang K, Tao S, Jin T, Dai H, Cheng J. 一种先进的差分进化算法，用于太阳能光伏模型的参数估计。能源转换与管理 2021年；230：113784。doi：https://doi.org/10.1016/j.enconman.2020.113784 26. Tran VP, Phan GT, Hoang VK, Phan H, Hoang ND, Tran HN. 基于成功历史的自适应差分进化方法，用于优化VVER-1000反应堆的燃料装载模式。核工程与设计2021年；377：111125。doi：https://doi.org/10.1016/j.nucengdes.2021.111125 27. Cantún-Avila K, González-Sánchez D, Díaz-Infante S, Peñuñuri F. 使用差分进化优化泛函。人工智能工程应用 2021年；97：104086。doi：https://doi.org/10.1016/j.engappai.2020.104086

28. Kaur M, Singh D, Kumar V. 使用基于动态变异的差分进化进行药物协同预测。当代药物设计 2020年。29. Preuss M. 通过进化算法进行多模态优化。Springer。2015年。30. Wong KC. 进化多模态优化：简要综述。*arXiv*预印本 *arXiv:1508.00457* 2015年。31. Goldberg DE, Richardson J, others. 使用共享机制进行多模态函数优化的遗传算法。遗传算法及其应用：第二届国际遗传算法会议论文集 1987年：41–49。32. Kennedy J, Eberhart R. 粒子群优化。*ICNN'95*国际神经网络会议论文集 1995年；4：1942–1948。33. Dorigo M, Birattari M, Stutzle T. 蚁群优化。*IEEE*计算智能杂志 2006年；1(4)：28–39。

表（1）MultiCalib4DEB 模块说明

模块名称	说明
图表	用于验证 MultiCalib4DEB 校准结果的多种绘图选项，例如热图和散点图
配置	控制校准选项的文件
示例	使用 MultiCalib4DEB 校准算法对不同物种进行校准的示例和选项。还包含可视化模块和统计报告模块的示例
函数	校准算法、图表和统计所需的辅助函数
方法	用于在 MultiCalib4DEB 中进行校准的 SHADE、L-SHADE 和局部搜索算法的代码
结果	根据校准结果生成图表的函数。
统计	根据校准结果生成统计报告的函数
实用工具	用于保存和生成解报告的实用工具

Table (2) MultiCalib4DEB 输出：校准过程结束后提供的信息说明。

字段名称	描述
集合_大小	校准过程后返回的解的数量
解_集合	校准过程后返回的解集合。它包含集合_大小个解，每个解使用不同的校准参数集合
fun_值	解中每个解对应的损失函数值 _set
par_名称	所选用于校准的参数列表。这是一个在执行统计时使用的信息字段
统计	, 结果和图表模块。
结果	包含有关其参数已
	校准的物种的一般信息，以及有关 $solutions_set$中每个解的具体信息的 MATLAB 结构体字段。所有校准解
	都作为子字段列在此字段中，子字段名称为“solution_ +solution_number”，其中包含
	采用 DEBtool 格式的物种参数“par”和“metaPar”文件。然后，一般信息
	存储在解列表下方，并包含“数据” ，“辅助数据” “txtPar”，“元数据” ，“文本数据”;
	以及“权重”，也采用 DEBtool 格式。此字段中的信息便于处理一个或
	校准过程后的一组结果。此外，textttresults 字段中的解可以
	之后使用 MultiCalib4DEB 的 textttresults 模块生成报告

表（3）MultiCalib4DEB 输出的结果和图表绘制选项。

方法	选项	说明
图表_图表	密度_hm	绘制热力图，显示 MultiCalib4DEB 结果在二维搜索空间中的损失函数值分布。最终热力图针对一对校准参数绘制
	密度_hm_散点图	绘制热力图，并叠加散点图，其中选定参数对的值以图形形式表示
	散点图	绘制散点图，显示校准结果中一对参数的值 MultiCalib4DEB 返回的结果
	加权_散点图	绘制散点图，其中参数值使用其进行加权损失函数值
	密度_散点图	绘制散点图，其中每个点的颜色表示邻近点的空间密度。该函数使用核平滑函数计算每个点的密度值
	预测	绘制预测图，即 DEBtool 工具箱在校准过程
绘图_结果	基本	绘制预测结果
	`Best`	根据最优解的参数绘制校准结果
	`Set`	绘制整个结果集的分组校准图，并显示平均值 MRE 和 SMSE
	完整	绘制基本、最佳和集合选项

表（4） 不同物种的 NM 与 SHADE 校准结果比较。该表包含每个物种待校准的参数数量及其初始损失函数。表中还列出了 NM 和 SHADE 算法的最小（最佳）损失函数值、SMSE 值和 MRE 值。SHADE 返回的 200个解的平均损失函数值显示在最佳损失函数值的右侧。损失函数、SMSE 和 MRE 的最佳值以粗体显示。

			NM（1 个解）			SHADE（200个解的集合）			
物种（典型模型）	参数 to 校准	初始损失函数	最佳最终 loss 函数	SMSE	MRE	最佳最终损失函数（改进）	平均损失函数的集合	SMSE	MRE
Cyclops vicinus（abp）	9	6.3819	0.4848	0.1714	0.198	0.4848（0.0）	0.485	**0.1713**	**0.1974**
Lobatus gigas（abj）	9	0.0623	0.0623	0.0381	0.0365	0.0623（0.0）	0.0623	**0.0378**	**0.0364**
Dipodomys deserti (stx)	10	0.2326	0.2326	0.021	0.0189	**0.2234 (0.04)**	0.2266	**0.0185**	**0.0169**
Dipodomys herrmanni (stx)	10	0.3289	0.3289	**0.042**	0.024	**0.3237 (0.016)**	0.3241	0.0439	**0.0228**
梅里亚姆袋鼠 (stx)	10	0.3167	0.3135	0.018	0.017	**0.3102 (0.011)**	0.3113	**0.0165**	**0.0154**
雪兔 (stx)	10	0.3068	0.3066	0.013	0.013	**0.3028 (0.0124)**	0.303	**0.0075**	**0.0073**
革胡子鲶 (abj)	11	0.1531	0.15293	0.019	0.013	**0.1516 (0.009)**	0.1525	**0.0181**	**0.011**
长丝异胡鲶 (abj)	11	0.12205	0.1183	0.0161	0.0131	0.1183 (0.0)	0.1404	0.0161	0.0131
粗糙鼠妇 (标准差)	12	0.1887	0.0988	0.0472	0.0522	0.0988 (0.0)	0.1294	0.0472	0.0522
贝氏栉水母(偏差)	12	1.3614	1.3503	0.24	**0.182**	**1.3174 (0.0244)**	1.3182	**0.2364**	0.1838
智人(标准误)	12	0.28	0.28	0.057	0.051	**0.2794 (0.0022)**	0.2794	**0.0547**	**0.0495**
普通海星(abj)	15	0.98	0.8443	0.1431	0.1432	**0.8442 (0.0002)**	0.8442	**0.143**	**0.1431**
长牡蛎(asj)	18	16.7519	15.527	0.463	0.405	**14.8837 (0.0414)**	15.0611	**0.4553**	**0.3965**

arXiv:2301.07548v1 [cs.NE] 16 Jan 2023

补充信息

附录1：MULTICALIB4DEB 校准选项

表 S (1) 参数校准选项说明

Name	说明	值
`method`	设置用于校准的 MMEA	mm1：SHADE mm2：L-SHADE
`num_results`[1]	定义 SHADE 和 L-SHADE 中个体的数量 这些种群将在校准过程结束后作为 校准结果	$[50, 500]$
`gen_factor`[2]	这是一个百分比值，用于构建范围，以便从中 生成第一组解	(0.0, 1.0)
`bounds_from_ind`	这是一个参数，用于控制初始 个体种群的参数取自何处	0：来自伪数据值 1：来自初始数据值
`add_initial`	控制是否将物种参数（现有物种参 数，来自 Add-my-Pet 项目）输入到首个种 群的 MMEA 中	0：否 1：是
`refine_best`	控制是否使用局部搜索程序对最优解进行改进 校准过程之后的步骤	0：否 1：是
`refine_prob`	这是一个概率值，用于控制对哪些解应用 使用多目标进化算法校准后的细化过程[4]	$[0.0, 1.0]$
`max_fun_evals`	定义校准过程中函数评估次数的最大值 过程	$[10,000, 100,000]$
`max_calibration_time`	定义校准的最大时间（分钟） 过程	$[60, 10{,}080$ （一周）$]$
`num_runs`	定义通过该过程执行的独立运行次数 校准过程。每次运行都有独立的随机种子	$[1, 15]$
`verbose`	控制是否打印校准过程中找到的最佳参数信息 在校准过程中	0：否 1：是
`verbose_options`[4]	定义要打印的校准解数量。此参 该参数仅在启用 `verbose` 选项时使用。	$[10, num_results]$
`ranges`	允许为所有或部分待校准参数定义一组范围 。此参数接收参数范围 或参数-百分比对，用于定义参数的最小值和最大值 参数的值	$[min_{param}, max_{param}]$[5] 或 % 值[6]
`results_output`	可选择在参数校准 处理	基本：不会在 屏幕上显示结果，而是以文本模式显示最佳 结果摘要 最佳：绘制最佳预测结果 使用 DEBtool 样式的结果 集合：绘制整个结果集的预测 使用 DEBtool 样式
`results_filename`	定义结果文件的名称	如果为空或未定义，则 默认生成结果文件的名称。 否则，结果文件将命名为 此字段中设置的名称。

[1] 此参数的值越大，校准过程越慢。[2] 值为 0.9 表示，当初始参数值为 1.0 时，生成范围为 $[(1-0.9)\cdot 1.0, 1.0\cdot(1+0.9)]$。因此，生成的值将从范围 $[0.1, 1.9]$ 中随机选取。[4] 值为 0 表示不进行细化，而值为 1 表示对所有解进行细化。如果此参数的值为 0.05，则会对 5% 的解进行细化。[4] 建议为此参数设置较低的值，以便更好地显示校准算法在校准过程中找到的最佳参数。[5] 当为参数定义范围 [最小值、最大值] 时，通过校准过程生成的值不能低于或高于该范围内设定的最小值和最大值。当校准值低于最小值时，其值将变为范围中设定的最小值。当该值高于最大值时，则会变为参数范围中定义的最大值。[6] 当为参数定义百分比时，这些参数的最小值和最大值范围按 $[min. = parameter_value \cdot (1.0 - \%value)\ \ max. = parameter_value \cdot (1.0 + \%value)]$ 计算，其中 $\%value$ 是应用于原始参数值的因子，用于生成初始化第一代个体群体时所用的参数范围。

附录 2：校准示例和输出

- 示例 1：使用 SHADE 为革胡子鲶物种校准参数，初始参数值取自广义生物体，并将初始参数添加到算法初始化中；算法仅运行一次，不为待校准的自由参数设置范围，并将 10,000 次评估作为停止准则。未启用详细输出。

```
close all;
global pets

pets = {'Clarias_gariepinus'}; % The species to calibrate
check_my_pet(pets); % Check species consistence

% Default DEBtool_M options (filters, loss function, ...)
estim_options('default');

calibration_options('default'); % Setting default calibration options
calibration_options('method', 'mm1'); % Calibrate with SHADE
calibration_options('max_fun_evals', 10000); % Stop in 10,000 evaluations
% Take the parameters from pseudo datacalibration_options('bounds_from_ind', 1);
% Add the initial values into SHADE initialization
calibration_options('add_initial', 1);
calibration_options('verbose', 0); % Deactivate verbose
[best, info, out, best_fvalues] = calibrate; % Calibrate!
```

- 示例 2：使用物种参数初始化文件中的初始参数值，通过 L-SHADE 校准参数[1]。然后，通过在参数基准值的基础上应用 20% 的生成因子来根据物种值生成种群，不要将初始参数值添加到算法的初始化中，并运行五次不同的算法运行。通过细化最优解来完成校准过程。停止校准的标准是达到 30 分钟。已启用详细输出选项，并在屏幕上打印十个最佳函数值。

```
close all;
global pets

pets = {'Clarias_gariepinus'}; % The species to calibrate
check_my_pet(pets); % Check species consistence

% Default DEBtool_M options (filters, loss function, ...)
estim_options('default');

calibration_options('default'); % Setting default calibration options
calibration_options('method', 'mm2'); % Calibrate with L-SHADE
% Stop in after 30 minutes of calibration
calibration_options('max_calibration_time', 30);
% Take the parameters from species data
calibration_options('bounds_from_ind', 0);
% Set value for parameter generation ranges
calibration_options('gen_factor', 0.2);
% Do not add the initial values into SHADE initialization
calibration_options('add_initial', 0);
% Run the calibration five times (with different random seeds)
calibration_options('num_runs', 5);
calibration_options('refine_best', 1); % Refine the best solution
calibration_options('verbose', 1); % Deactivate verbose
% Print the best ten function values on screen
calibration_options('verbose_options', 10);
[best, info, out, best_fvalues] = calibrate;  % Calibrate!
```

[1] http://www.bio.vu.nl/thb/deb/deblab/add_my_pet/entries_web/Clarias_gariepinus/Clarias_gariepinus_res.html

- 示例 3：在 MultiCalib4DEB 中启动绘图图表：

```
global pets

% The species to calibrate
pets = {'Clarias_gariepinus'};
% Check pet consistence
check_my_pet(pets);

[data, auxData, metaData, txtData, weights] = mydata_pets; % Get species data

% Load the solution set (example for Clarias Gariepinus).
load('solutionSet_Clarias_gariepinus_20-Apr-2021_20:42:00.mat');

% Plot the chart!
plot_chart(solutions_set, 'density_hm', {'kap'; 'E_G'}, true, 20);
```

- 示例 4：在 MultiCalib4DEB 中生成结果图：

```
global pets

pets = {'Clarias_gariepinus'}; % The species to calibrate
check_my_pet(pets); % Check species consistence

% Get species data
[data, auxData, metaData, txtData, weights] = mydata_pets;
https://www.overleaf.com/project/60620c957d40a9dd3909e2fa
% Load the solution set (example for Clarias Gariepinus).
load('solutionSet_Clarias_gariepinus_20-Apr-2021_20:42:00.mat')

% Plot the solutions!
plot_results(solutions_set, solutions_set.results.txtPar, ...,
solutions_set.results.data, ...,solutions_set.results.auxData,
 metaData, ...,solutions_set.results.txtData, weights, 'Set');
```

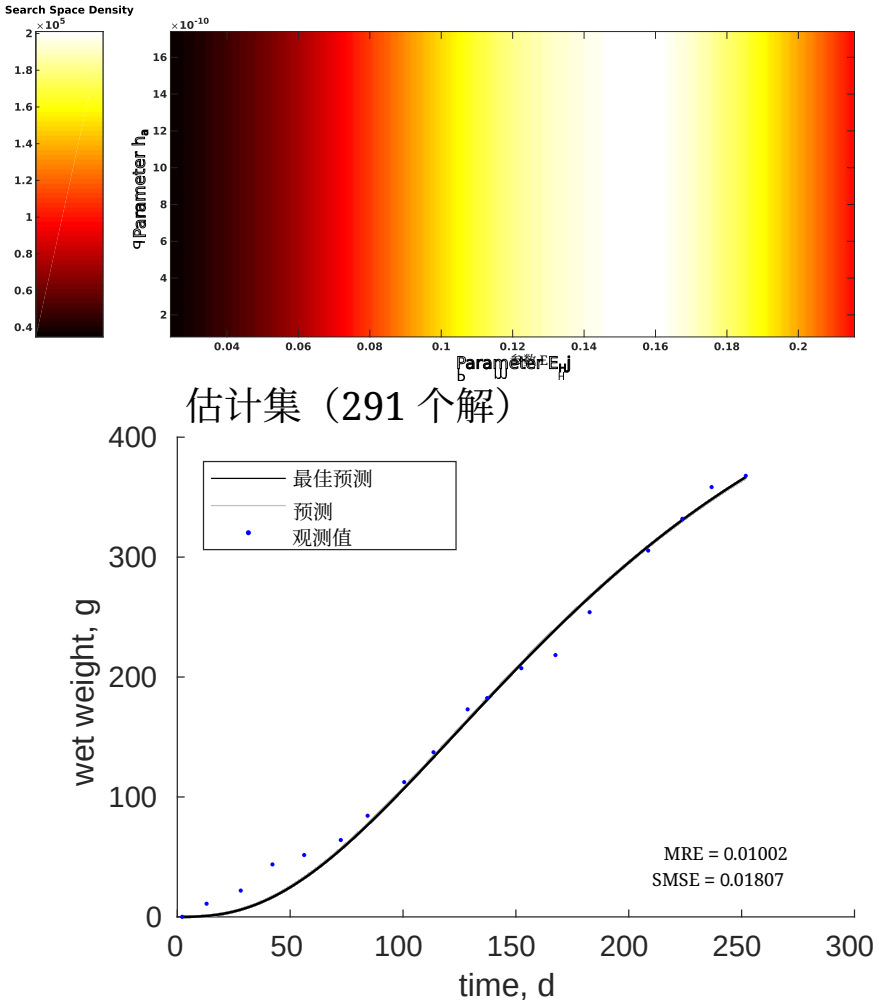


图 S (1) MultiCalib4DEB 提供的图表和绘图模块输出示例。上方图表显示示例 3 的输出，下方图表显示示例 4 的输出。