

系统理论水文模型结构与参数多目标优化

郭俊¹, 周建中², 王浩^{2,3}, 邹强⁴

(1. 国网湖南省电力公司电力科学研究院, 长沙 410007; 2. 华中科技大学水电与数字化工程学院, 武汉 430074; 3. 中国水利水电科学研究院水资源研究所, 北京 100044; 4. 长江水利委员会勘测规划设计院, 武汉 430000)

摘要: 本文提出了一种水文模型结构和模型参数同时优化的方法, 克服了经验确定模型结构方法未考虑模型结构与模型参数的交互影响且难以得到最优模型结构的缺陷; 同时, 针对传统基于单一目标优化率定模型参数不能全面反映水文情势多方面特性的不足, 引入了多目标优化思想, 将模型结构和模型参数优化置于多目标优化框架下, 有效解决了单目标优化导致的模型预报误差均化效应。通过流域日径流预报的实验验证, 结果表明本研究方法可以获得较优的模型结构和模型参数, 为水文模型参数和结构优化提供了一种新的途径和方法。

关键词: 水文学; 径流预报; 多目标优化; 模型结构与参数优化; 支持向量机

中图分类号: TV121 文献标识码: A

Structure optimization and parameter calibration of empirical hydrological model under multi-objective framework

GUO Jun¹, ZHOU Jianzhong², WANG Hao^{2,3}, ZOU Qiang⁴

(1. State Grid Hunan Electric Power Corporation Research Institute, Changsha 410007; 2. Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074; 3. Water Resources Department China Institute of Water Resources and Hydropower Research, Beijing, 100044; 4. Changjiang Water Resources Commission Changjiang Institute of Survey, Planning, Design and Research, Wuhan 430000)

Abstract: A novel method is presented to optimize the structure and parameters of hydrological model in a single run. This method can overcome the shortcoming of traditional method in determining the model structure, i.e. being unable to consider the interaction of structure parameters for an optimal structure. The use of single objective function for parameters calibration by traditional method is not suitable for hydrological system, showing another shortcoming. The new method adopts a multi-objective for the optimization and it was verified through daily runoff forecasting by a hydrological model based on support vector machine. The results show that the new method is superior in its structure and model parameters and it would provide a new approach to optimization and calibration of hydrological model.

Key words: hydrology; runoff forecasting; multi-objective optimization; model structure and model parameter optimization; support vector machine

0 引言

水文模型结构优选与参数率定一直是水文领域的重要研究内容。水文模型通常可以分为三大类: 系统理论模型、概念性模型和物理模型。针对系统理论模型, 模型的结构一般是根据人工经验法或试错法确定。人工经验法往往无法考虑水文情势的变化特性, 模型的精度不能得到有效保证, 而试错法则计算量庞大、计算耗时多, 且很难获得最佳的模型结构。另外, 传统的模型参数一般基于单一目标优化^[1,2], 无法考虑水文情势多方面的变化特性, 需要引入多目标优化的思想, 以克服单目标优化的局限, 国内外的学者在这方面已开展了大量的研究, Vrugt 等^[3]提出了一种水文模型参数多目标优化率定算法, 张洪刚等^[4]比较了概念

收稿日期: 2013-03-13

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金(20100142110012); 水利部公益性行业科研专项(201001080)

作者简介: 郭俊(1988-), 男, 博士. Email: guojun012004@126.com

性水文模型参数多目标优化率定与传统单目标优化率定的性能, de Vos 等^[5]将多目标算法应用于神经网络径流预报模型参数优化, 王宇晖等^[6]将多目标算法 MOSCEM-UA 应用于一种简单的概念性水文模型参数优化率定。但是, 这类研究仅局限于模型参数的优化, 未进行模型结构的寻优, 且不能考虑模型参数与模型结构的交互影响。为此, 本研究以一种基于支持向量回归^[7]原理的系统理论模型为研究对象, 将模型结构和模型参数均纳入优化的范畴, 结合经典的多目标优化算法 NSGA-II^[8], 同时优化模型的结构与模型参数, 建立支持向量回归日径流预报模型, 并将多目标优化结果与传统的单目标优化结果进行对比, 实验结果表明, 本研究的方法能有效处理模型参数与模型结构的交互影响, 可以为预报人员提供可靠、全面的决策依据, 具有良好的工程应用前景。

1 支持向量回归

支持向量回归的主要思想是将原空间的非线性函数关系映射到高维空间, 使得在高维空间中这种非线性关系呈现线性或近似线性关系, 然后在这种高维空间中采用线性回归方法进行计算, 进而提高回归精度。

支持向量回归的基本原理简述如下:

设样本数据为 (X_i, y_i) , 其中 $i=1, 2, \dots, L$, $X_i \in R^D, y_i \in R$, X_i 为输入, y_i 为相应的输出, 首先采用非线性映射函数 ϕ 将样本映射到高维空间 $\phi(X)$, 然后在高维空间中进行线性回归计算, 得到回归函数为:

$$y = w\phi(X) + b \quad (1)$$

然后, 利用结构化风险最小原则, 求解 w 和 b 的值可以归结为如下优化问题:

$$\min \left[\frac{1}{2} \|w\|^2 + C \sum_{i=1}^L (\xi^+ + \xi^-) \right] \quad (2)$$

式中: C 为惩罚因子; ξ^+ 和 ξ^- 为松弛变量。

求解上述二次 4F18 化问题, 并引入核函数计算高维空间的向量点积, 避免高维空间的“维数灾”问题, 最后得到的拟合函数为:

$$y = \sum_{i=1}^L (\alpha^+ - \alpha^-) K(X_i, X) + b \quad (3)$$

式中: $K(X_i, X)$ 为核函数运算, α^+ 和 α^- 为拉格朗日乘子。

常用的核函数主要有: 线性核函数、多项式核函数、径向基核函数和 sigmoid 核函数。核函数自身的参数过多不利于参数的优选, Hsu 等^[9]对常用的几种核函数作了比较分析研究, 并指出径向基核函数是比较通用的核函数, 因此, 本文选取径向基核函数。

2 优化算法

2.1 单目标优化算法—SCE-UA

SCE-UA^[10]由 Duan 等于 1992 年提出, 该算法结合了单纯形法、种群竞争进化以及混和分区等方法的优点, 可以一致、有效、快速地收敛到水文模型参数全局最优, 在水文模型参数优化率定中得到广泛验证。种群分区与周期性混合使得算法能够更全面搜索可行域, 减小了算法陷入局部最优的概率; 种群竞争进化和单纯形法提高了算法的收敛精度。SCE-UA 算法具体细节可参见文献[10]。

2.2 多目标优化算法—NSGA-II

NSGA-II 是 Deb 等针对 NSGA 在非劣解集构造、非劣解集分布性中存在的不足提出的改进算法, 并在水文预报领域得到广泛应用和验证, 算法具体细节可参见文献[8]。NSGA-II 的计算流程如图 1 所示。

3 模型结构与模型参数多目标优化

本文以支持向量回归理论为基础, 根据流域降雨和径流观测资料, 建立支持向量回归日径流预报模型, 并将支持向量机模型结构和模型参数一并纳入优化的范畴, 能有效处理模型结构与模型参数间的交互影响, 同时, 针对传统单目标优化不能充分全面反映水文多种动态变化特性的缺陷, 本文将模型结构和模型参数

的优化计算置于多目标优化的框架，获得能考虑多个优化目标的非劣预报方案集，并与传统的单目标优化结果进行对比分析。

3.1 模型结构与参数优化设计思想

支持向量机模型结构和模型参数优化设计如下：

①支持向量机模型参数有 3 个：惩罚因子 C ，不敏感系数 ε 和径向基核函数参数 σ 。

②支持向量机模型的结构优化主要是指模型输入结构的优化，本文将模型输入结构进行参数化，设模型的输入为 N 维向量 $\mathbf{G} = [g_1, g_2, \dots, g_N]$ ， $g_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 为事先通过统计分析确定，然后用 N 个参数 $p_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 分别代表输入向量的 N 维， p_i 的取值范围为 $[0, 1]$ 且 p_i 的值不能同时都小于 0.5，当 p_i 大于等于 0.5 时，表示支持向量机模型包含第 i 维输入，反之，当 p_i 小于 0.5 时，则表示第 i 为输入不包含在输入向量中。

根据以上设计，将模型结构优化参数化之后，优化的参数总共包含 $3+N$ 个，进而可以采用智能优化算法进行优化计算。本文中单目标优化选用 SCE-UA 算法，多目标优化选用 NSGA-II 算法。

3.2 优化目标函数选取

在单目标优化中，目标函数选取实测流量和预报流量的均方误差 RMSE，其定义如式 (4) 所示：

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (Q_i - \hat{Q}_i)^2} \quad (4)$$

对于多目标优化，目标函数选取 MSLE^[11] 和 M4E^[5]，其定义分别如式 (5) 和 (6) 所示：

$$MSLE = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (\ln Q_i - \ln \hat{Q}_i)^2 \quad (5)$$

$$M4E = \frac{1}{M \times 10^{10}} \sum_{i=1}^M (Q_i - \hat{Q}_i)^4 \quad (6)$$

式中： M 为样本数量； Q_i 为径流观测值； \hat{Q}_i 为模型径流预测值。

在支持向量机回归模型参数多目标和单目标优化率定阶段，为防止模型的过学习，提高模型的泛化能力，本文采用 10 折交叉验证，目标函数均基于交叉验证预报流量和实测流量计算得到。MSLE 由于对数运算的作用，使得小流量的拟合误差更为敏感，因而其更侧重于小径流值的拟合；M4E 由于 4 次幂的作用，目标函数 M4E 对大流量的拟合误差更为敏感，因而其更侧重于大流量的拟合。若目标函数 MSLE 和 M4E 之间具有典型的非劣关系，则说明当大流量拟合较好时会降低小流量的拟合精度，而小流量拟合精度较高时，大流量拟合精度较差。在实际预报作业中，预报人员根据不同的径流特性选择相应精度较高的预报方案，从而可以避免采用 RMSE 单一目标优化时会对大流量和小流量预报精度的均化效应，有效提高整体预报的综合精度。

3.3 径流预报评价指标选取

为评价模型参数优化结果的预报性能，文中选取水文预报中常用的三种评价指标：均方误差 RMSE、确定性系数 R^2 和合格率 Q_r 。 R^2 的定义如式 (7) 所示：

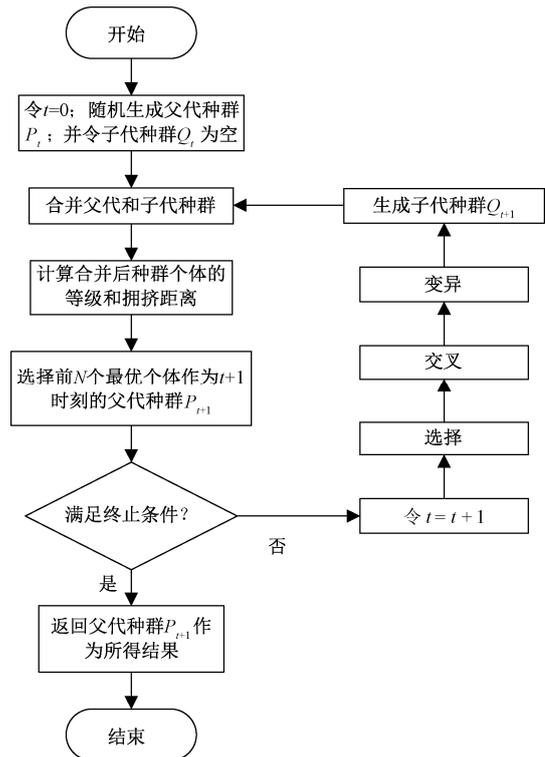


图 1 NSGA-II 流程图
Fig.1 Flowchart of NSGA-II algorithm

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^M (Q_i - \hat{Q}_i)^2}{\sum_{i=1}^M (Q_i - \bar{Q})^2} \quad (7)$$

式中： \bar{Q} 为径流观测值的平均值。

3.4 算法参数设置

SCE-UA 算法的参数设置参考文献[10]，具体为：决策变量维数 $3 + N$ ，复形个数 4，每个复形中的个体数为 $2 \times (3 + N) + 1$ ，子复形的个体数为 $(3 + N) + 1$ ，复形混合前的进化代数 $2 \times (3 + N) + 1$ ，种群规模为 $4 \times [2 \times (3 + N) + 1]$ ，最大迭代次数 30000。

NSGA-II 算法的参数设置参考文献[12]，具体为：种群空间规模 100，决策变量维数 $3 + N$ ，目标函数维数 2，交叉概率 1.0，变异概率 $1 / (3 + N)$ ，算法最大进化代数 1000。

4 实例研究

4.1 研究选用的数据

以长江三峡流域为研究对象，选取该流域宜昌站 2001 年 1 月 1 日—2006 年 12 月 31 日的日径流和流域区间日降雨数据，日降雨和日径流数据如图 2 所示，为保证模型训练样本中包含所有的极端流量过程，其中 2003 年—2005 年的数据用于模型训练，其余三年数据分为三个模型校验期。从图 2 可以看出，三个校验期时段的径流特征有明显的差异，校验期 1 的径流峰值较大但峰值流量持续时间较长，校验期 2 的径流峰值很大且洪水较为集中，校验期 3 的径流洪水较小且洪水历时较长。

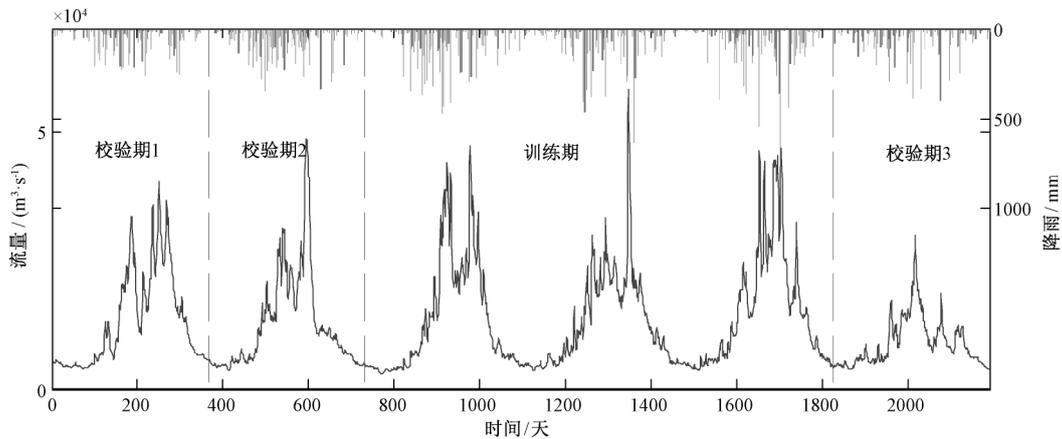


图 2 三峡流域降雨径流图
Fig.2 Plot of rainfall and streamflow in the Three Gorges region

4.2 降雨径流相关性分析

绘制径流自相关图和降雨径流相关性图分布如图 3 所示。

根据上述相关系数图，首先可以确定模型输入大致包括： $Q(t-1)$ 、 $Q(t-2)$ 、 $Q(t-3)$ 、 $Q(t-4)$ 、 $Q(t-5)$ 和 $P(t-1)$ 、 $P(t-2)$ 、 $P(t-3)$ 、 $P(t-4)$ ，其中 $Q(t-i)$ 表示预报前 i 时刻的流量值， $P(t-i)$ 表示预报前 i 时刻的降雨量。进而，可以确定与模型结构相关的参数个数 N 的值为 9。

4.3 结果比较与分析

以 MSLE 和 M4E 为横纵坐标，多目标算法 NSGA-II 优化的非劣前沿如图 4 所示。由图可知，目标函数 MSLE 和 M4E 间存在典型的此消彼长的对立关系，这也与 3.2 节的分析一致。

为比较与验证多目标优化的性能，与经典单目标优化算法 SCE-UA 优化结果进行比较。对于单目标优化，本文构造了 4 种模型结构：①所有 9 种输入一定全部包括；②所有 9 种输入不一定全部包含；③选取与流量相关性最好的 $Q(t-1)$ 、 $Q(t-2)$ 、 $Q(t-3)$ 、 $P(t-3)$ 、 $P(t-4)$ 、 $Q(t-5)$ 作为输入；④选取与流量相关性最好的 $Q(t-1)$ 、 $Q(t-2)$ 、 $Q(t-3)$ 、 $Q(t-4)$ 作为输入。

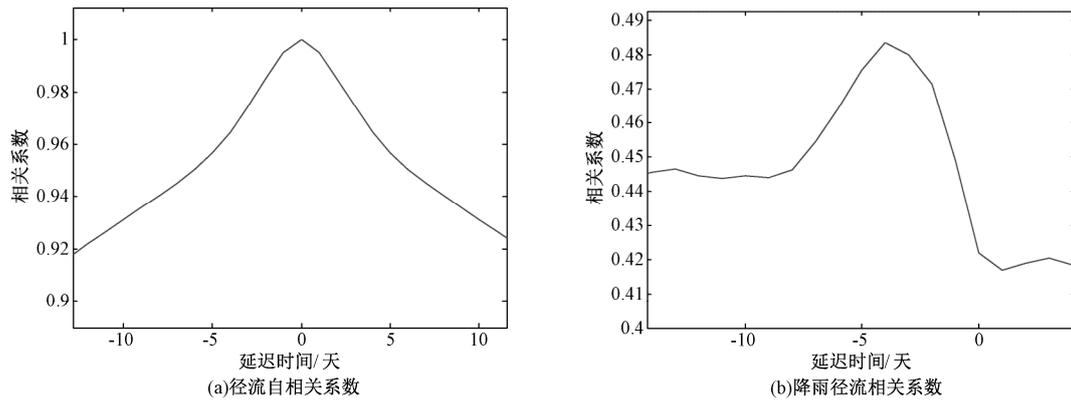


图 3 三峡流域降雨径流相关关系图
Fig.3 Correlation of rainfall and streamflow in the Three Gorges region

为消除算法中存在的随机因素，NSGA-II 和 SCE-UA 分别独立运行 10 次，多目标优化中选取优化结果中误差最小的作为预测流量，以 3.3 节中的三种评价指标比较不同优化模式的优化性能，如表 1 所示，其中 SCE-UA- i 表示第 i 种模型结构下的单目标优化结果，表中每个指标值的第一行为平均值，第二行为标准差，最优值加粗标示，次优采用斜体加粗标示。

由表 1 可得如下结论：①SCE-UA-2 在训练期和校验期的结果要优于 SCE-UA-1，表明所有 9 个输入并不是必须的；②SCE-UA-3 和 SCE-UA-4 的预报结果误差较大，说明依靠传统的数据相关性确定模型的输入往往不能得到最优的模型结构；③SCE-UA-3 和 SCE-UA-4 的优化结果较 SCE-UA-1 更优，说明在模型增加冗余的输入反而会降低模型的预报性能；④NSGA-II 的优化结果相比单目标优化结果有较大的提升，说明多目标优化可以充分考虑水文各方面的动态变化特性，可避免传统单目标优化导致的误差均化效应，提高模型预报性能。

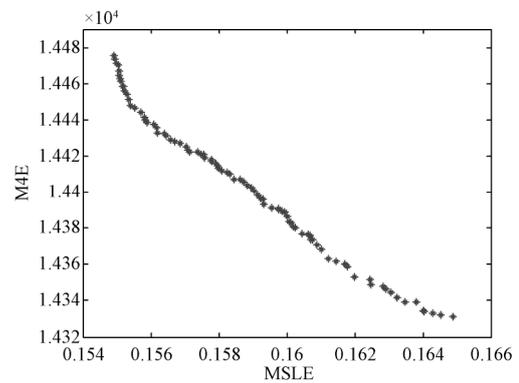


图 4 NSGA-II 多目标优化非劣前沿
Fig.4 Pareto frontier generated by NSGA-II algorithm

表 1 优化结果对比
Table 1 Performance comparison for different algorithms

| 评价指标 | | NSGA-II | SCE-UA-1 | SCE-UA-2 | SCE-UA-3 | SCE-UA-4 |
|-------------|----------|------------------|-----------|------------------|-----------|------------------|
| RMSE | 平均值 | 1698.9438 | 2936.4522 | 2680.1119 | 3148.1326 | 2896.3564 |
| | 标准差 | 229.5098 | 189.0662 | 222.4092 | 34.2152 | 161.7360 |
| 率定期 Q_r | 平均值 | 90.9124 | 53.6953 | 63.8321 | 38.0931 | 52.9653 |
| | 标准差 | 4.5570 | 12.6674 | 9.7008 | 1.3806 | 17.0784 |
| R^2 | 平均值 | 0.9723 | 0.9182 | 0.9317 | 0.9064 | 0.9205 |
| | 标准差 | 0.0075 | 0.0105 | 0.0113 | 0.0021 | 0.0087 |
| RMSE | 平均值 | 1400.3634 | 2416.5280 | 2123.4993 | 2945.8051 | 2201.6242 |
| | 标准差 | 204.4519 | 289.6664 | 353.1138 | 67.9437 | 464.2811 |
| 校验期 1 Q_r | 平均值 | 95.6944 | 66.7778 | 72.0833 | 38.8056 | 61.2778 |
| | 标准差 | 1.8576 | 21.0852 | 15.6365 | 0.2943 | 29.7579 |
| R^2 | 平均值 | 0.9764 | 0.9301 | 0.9454 | 0.8975 | 0.9405 |
| | 标准差 | 0.0069 | 0.0169 | 0.0196 | 0.0048 | 0.0235 |
| 校验期 2 | RMSE 平均值 | 1455.3390 | 2362.6159 | 2244.2684 | 2909.1495 | 2234.3701 |

| | | | | | | |
|-------------|-----|----------------|-----------|------------------|-----------|-----------|
| | 标准差 | 172.5659 | 286.8709 | 391.0564 | 80.6658 | 443.5639 |
| Q_r | 平均值 | 96.5479 | 63.6438 | 71.2055 | 30.0000 | 56.6849 |
| | 标准差 | 2.2115 | 23.6595 | 16.1762 | 0.9246 | 33.3961 |
| R^2 | 平均值 | 0.9748 | 0.9335 | 0.9392 | 0.9005 | 0.9392 |
| | 标准差 | 0.0059 | 0.0168 | 0.0220 | 0.0056 | 0.0229 |
| RMSE | 平均值 | 1091.3733 | 2050.5829 | 1788.6131 | 2946.4342 | 1956.5967 |
| | 标准差 | 167.9471 | 457.1427 | 499.9178 | 98.6026 | 668.9281 |
| 校验期 3 Q_r | 平均值 | 92.2740 | 58.2466 | 64.9315 | 18.5753 | 51.3425 |
| | 标准差 | 3.9614 | 25.8017 | 17.6561 | 1.0397 | 37.0180 |
| R^2 | 平均值 | 0.9436 | 0.7964 | 0.8413 | 0.5972 | 0.8039 |
| | 标准差 | 0.0169 | 0.0933 | 0.1036 | 0.0276 | 0.1171 |

将多目标优化的结果与 SCE-UA-2 的优化结果绘制于一张图中, 如图 5 所示。由图可以明显看出单目标优化由于优化目标函数 RMSE 对误差的均化处理, 导致在小流量和峰值流量均呈现较大的误差而多目标优化能够兼顾大流量和小流量的预报性能, 可有效提高预报精度。另外, 多目标优化的预报流量结果有些情况并不能完全包含实测流量值, 表明预报模型的结构还不够完善, 有待进一步改进。

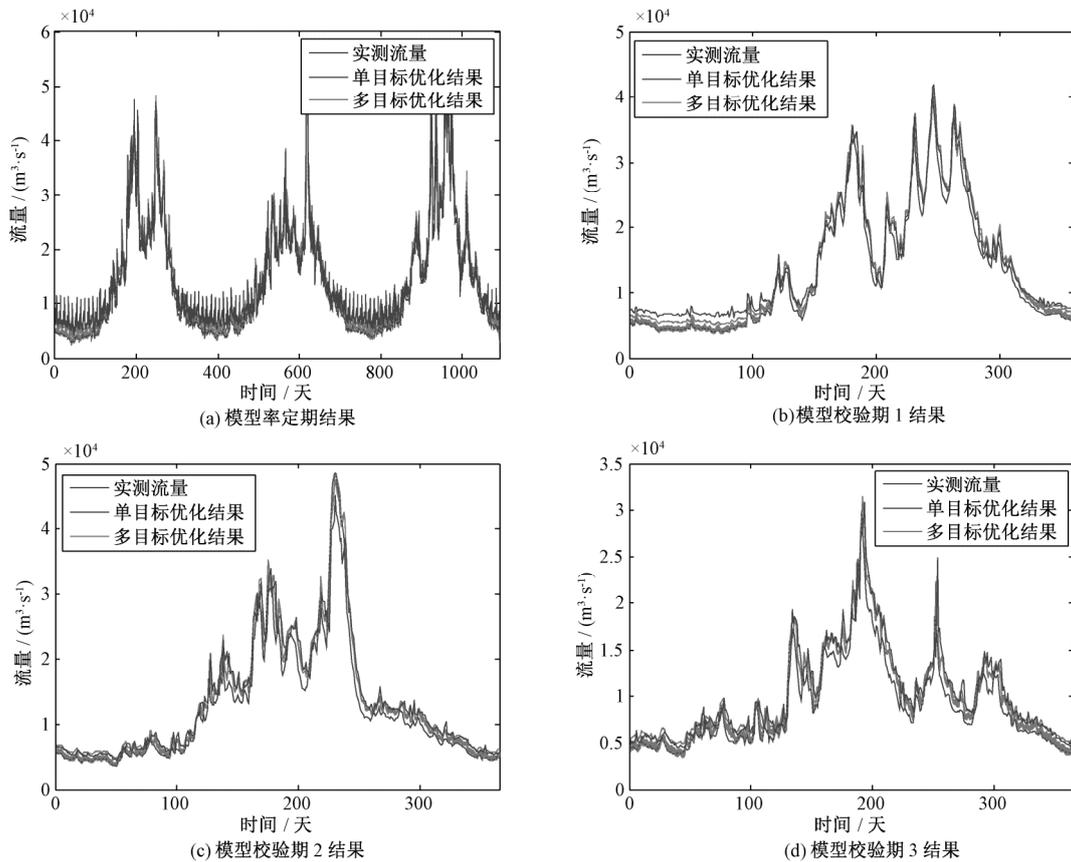


图 5 模型预报结果比较

Fig.5 Forecasting results of calibration period and validation period

为进一步分析水文模型结构对模型预报性能的影响, 以 NSGA-II 算法运行一次的结果为例, 将 9 个输入对应的参数值 p_i 与目标函数 MSLE 的关系绘制于图 6 中, 图中若 p_i 的值位于平面以上, 则表明模型包含该输入, 反之, 则表明该输入不包含在模型中。由图 6 可得如下结论: ①第 5、8、9 输入不包含在模型中, 表明这些输入对模型的构建是冗余的; ②对于输入 1、2、4、7 分两种情况。当目标 MSLE 的值较小时 (相应的目标 M4E 的值较大), 输入 2、4、7 包含在模型中, 输入 1 不包含在模型中; 对应地, 当目标 MSLE

的值较大时（相应的目标 MSLE 的值较小），输入 1 包含在模型中，而输入 2、4、7 不包含在模型中。表明输入 2、4、7 有利于模拟小流量，而输入 1 更有利于模型大流量；③模型的结构并不是一旦确定就一直不变，而应该随着不同水文特性的变化作相应的调整，以下图为例，当需要考虑小流量的预报性能时，则需在模型结构中增加输入 2、4、7 并去除输入 1，而当需要重点考虑大流量的预报性能时，此时最优模型结构就需要增加输入 1 并去除输入 2、4、7。

5 结论

本文以一种基于支持向量回归原理的系统理论模型为研究对象，针对传统单目标优化率定模型参数带来的预报误差均化效应，以及依靠经验方法确定模型结构难获得最佳模型结构且未考虑模型参数与模型结构的交互影响的不足，本研究提出了一种模型结构和参数同时优化的方法，并将优化计算置于多目标优化框架中，通过实际工程应用研究表明，本研究方法能有效处理模型参数与结构的交互影响，找出并剔除模型结构中存在的冗余部分，最后获得较经验确定模型结构方法和单目标优化率定方法更优的模型性能，同时通过模型结构和参数的多目标优化结果分析，发现针对不同时期的不同水文特性需要改变模型的结构以提高预报性能，为水文模型参数和结构优化提供了一种新的途径和方法。

参考文献：

- [1] 张刚, 解建仓, 罗军刚. 基于免疫克隆选择算法的新安江模型参数率定 [J]. 水力发电学报, 2011, 30 (4): 6-13.
ZHANG Gang, XIE Jiancang, LUO Jungang. Parameter calibration of Xin'anjiang rainfall-runoff model by immune clonal selection algorithm [J]. Journal of Hydroelectric Engineering, 2011, 30 (4): 6-13. (in Chinese)
- [2] 陈田庆, 解建仓, 张刚, 等. 基于 BP 神经网络的马斯京根模型参数动态估计 [J]. 水力发电学报, 2012, 31 (3): 31-38.
CHEN Tianqing, XIE Jiancang, ZHANG Gang, et al. Dynamic parameter estimation for Muskingum routing model based on BP artificial neural network [J]. Journal of Hydroelectric Engineering, 2012, 31 (3): 31-38. (in Chinese)
- [3] Vrugt J A, Gupta H V, Bastidas L A, et al. Effective and efficient algorithm for multiobjective optimization of hydrologic models [J]. Water Resources Research, 2003, 39 (8): 1214.
- [4] 张洪刚, 郭生练, 王才君, 等. 概念性流域水文模型参数优选技术研究 [J]. 武汉大学学报: 工学版, 2004, 37 (3): 18-22, 26.
ZHANG Honggang, GUO Shenglian, WANG Caijun, et al. Review and research of calibration techniques for conceptual hydrological model [J]. Engineering Journal of Wuhan University, 2004, 37 (3): 18-22, 26. (in Chinese)
- [5] de Vos N J, Rientjes T H M. Multiobjective training of artificial neural networks for rainfall-runoff modeling [J]. Water Resources Research, 2008, 44: W08434.
- [6] 王宇晖, 雷晓辉, 蒋云钟. 基于 MOSCEM-UA 算法的水文模型参数优化 [J]. 人民长江, 2010, 41 (19): 95-99.
WANG Yuhui, LEI Xiaohui, JIANG Yunzhong. Parameter calibration of Hymod hydrological model using MOSCEM-UA algorithm [J]. Yangtze River. 2010. 41 (19): 95-99. (in Chinese)
- [7] Vapnik V. Statistical Learning Theory [M]. New York: Springer, 1998.
- [8] Deb K, Pratap A, Agarwal S, et al. A Fast and Elitist Multiobjective Genetic Algorithm: NSGA-II [J]. IEEE Transactions on Evolutionary Computation, 2002, 6 (2): 182-197.
- [9] Hsu C W, Chang C C, Lin C J. A Practical Guide to Support Vector Classification [R]. Technical report, Department of Computer Science and Information Engineering, National Taiwan University, 2003.
- [10] Duan Q Y, Gupta V K, Sorooshian S. Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models [J]. Water Resources Research, 1992, 28 (4): 1015-1031.
- [11] Hogue T S, Sorooshian S, Gupta H, et al. A multi-step automatic calibration scheme for river forecasting models [J]. Journal of Hydrometeorology, 2000, 1: 524-542.
- [12] Zhang X S, Srinivasan R, Liew M V. On the use of multi-algorithm, genetically adaptive multi-objective method for multi-site calibration of the SWAT model [J]. Hydrological Processes, 2010, 24 (8): 955-969.

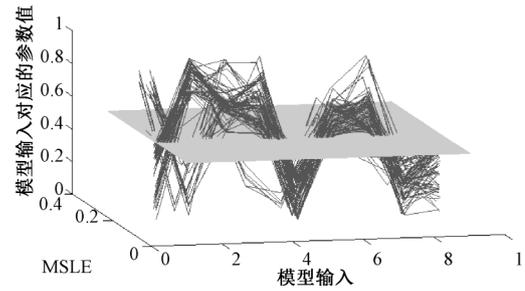


图 6 输入对应的参数值与目标函数 MSLE 的关系
Fig.6 Relationship between the inputs and the objective function MSLE