基于贝叶斯模型平均的径流模拟及不确定性分析

杜新忠 1.2,李叙勇 1,王慧亮 1.2,李文赞 1.2

(1.中国科学院生态环境研究中心,城市与区域生态国家重点实验室,北京 100085;

2.中国科学院大学,北京 100049)

摘 要:水文模型是模拟水循环过程重要手段,依靠单个模型进行模拟往往存在很大的不确定性,使通 过多模型进行组合模拟成为必然趋势。选取3个集总式水文模型应用贝叶斯模型平均(BMA)进行流域 月径流量的多模型模拟,采用期望最大化算法推求BMA分布参数以得到BMA均值模拟序列和90%不 确定性区间。以武烈河实测数据为例进行分析,结果表明:BMA方法既能通过均值模拟提供更高精度的 模拟效果,还可通过不确定性置信区间定量评价模型结构不确定性,为径流模拟提供丰富信息。

关键词:水文模型;贝叶斯平均;多模型;不确定性

中图分类号:P338 文献标识码: A 文章编号:1000-0852(2014)03-0006-05

1 研究背景

迄今为止,国内外水文专家开发了各种流域水文 模型,不同模型结构以不同方式描述水文物理过程,实 质上是对"真实水文物理过程"的一种近似。实践表明, 没有任何一个模型能够肯定其在任何条件下都优于其 他模型、应用单一模型得到的模拟结果无法避免由模 型结构带来的不确定性[]。研究表明,可以通过多模型 组合的方法来减少模型结构不确定性、很多水文学家 将多模型模拟方法应用到水文模拟与预报中、提高了 水文模型模拟与预报精度。目前,已经提出了一些用于 水文模型多模型组合的方法,如简单平均法、加权平均 法、线性回归和神经网络等迎。这些方法基于确定性理 论综合不同模型结果、可提供精度更高的合成模拟结 果,却无法对模型结构不确定性进行评价。近年来,基 于贝叶斯模型平均法 (Bayesian model averaging BMA)的多模型综合模拟在众多领域得到了广泛的应 用^[3-4]。除了可提供精度较高的多模型综合结果,BMA 还可以对模型结构不确定性进行定量评价。利用 BMA 方法组合不同水文模型模拟结果可得到模拟序列的概 率分布,其中,分布的均值可作为多模型综合模拟值,

分布的方差和置信区间反映了由模型结构带来的不确 定性^[5]。

本文选取 3 个集总式水文模型,首先,统一用蒙特 卡洛随机取样方法来进行参数率定,得到 3 个模型的 最优模拟序列用于 BMA 多模型组合;然后,通过目标 函数和 3 个模拟精度指标来分析比较 BMA 均值模拟 和组成它的单个模型模拟序列的效果;最后,通过模拟 值概率分布计算出 BMA 模拟序列的 90%不确定性置 信区间,对模型结构不确定性进行评价。

2 方法原理

2.1 贝叶斯平均方法的基本原理

设 *y* 为多模型模拟变量, $D=[y_1, y_2, \dots, y_r]$ 为率定 模型所需的实测径流资料, $f=[f_1, f_2, \dots, f_k]$ 代表选取的 k 个水文模型组成的模型空间。 $p_k(y|f_k, D)$ 为给定观测 数据 D 和模型模拟值 f_k 的条件下模拟变量 *y* 的后验 分布。根据总概率法则,BMA 模拟变量 *y* 的概率密度 函数可表示为:

$$p(y|D) = \sum_{k=1}^{K} p(f_k|D) \cdot p_k(y|f_k, D)$$
(1)

式中: $p(f_k|D)$ 为模型的模拟序列 f_k 后验概率,或称为在

收稿日期:2013-02-04

作者简介:杜新忠 (1986–),男,黑龙江巴彦人,博士研究生,主要从事流域水文与污染负荷模型研究。E-mail: xinzhong_du@163.com

基金项目:国家自然科学基金(41071323);国家水体污染控制与治理科技重大专项(2012ZX07203003, 2012ZX07029002)

通讯作者:李叙勇 (1965-),男,新疆乌鲁木齐人,研究员,博士生导师,中国科学院百人计划入选者。主要研究方向是流域生态模型与管理。 E-mail:xyli@rcees.ac.cn

给定数据条件下模型为最优模型的概率。设 $w_{k=p}(f_{k}|D)$, 应得到 $\sum_{k=1}^{K} w_{k}=1$ 。BMA 模拟变量的后验分布均值和方 差可表示为:

$$E(y|D) = \sum_{k=1}^{K} p(f_k|D) \cdot E[p_k(y|f_k, D)] = \sum_{k=1}^{K} w_k f_k$$
(2)

$$Var[y|D] = \sum_{k=1}^{K} w_k (f_k - \sum_{k=1}^{K} w_k f_k)^2 + \sum_{k=1}^{K} w_k \sigma_k^2$$
(3)

式中: σ_k^2 为给定观测数据 D 和模型 f_k 的条件下模拟 变量的方差。本质上,BMA 均值模拟序列是以 w_i 为权 重对不同模型最优模拟序列进行加权平均。BMA 模拟 变量方差包括模型间误差和模型内误差,其中式(3)中 $\sum_{k=1}^{K} (f_k - \sum_{k=1}^{K} w_k f_k)^2$ 为模型间误差, $\sum_{k=1}^{K} w_k \sigma_k^2$ 为模型内误 差。同确定性多模型组合方法相比,BMA 模拟变量方 差更好地描述了模拟变量的不确定性。

2.2 期望最大化算法

采用期望最大化算法(EM)推求 BMA 模拟变量概 率分布参数 w_k 和 σ_k^2 。EM 算法假设各模型模拟序列服 从正态分布,在利用 EM 算法之前,采用 Matlab 中的 Box-Cox 函数对实测和模型模拟序列进行了正态转化。

EM 算法通过引入潜在变量来计算 BMA 模拟量 概率分布的参数,该算法在 E (expectation)步和 M (maximization)步之间切换。在 E 步中,潜在变量是 BMA 分布参数的假设估计值;在 M 步骤中,分布参数 是潜在变量的当前估计值。这两步重复进行,直到满足 精度要求为止,详细介绍可参考文献[6]。

2.3 模型结构不确定性置信区间估计

利用 EM 算法估计出 BMA 模拟变量分布参数 w_k 和 σ_k^2 之后,应用蒙特卡罗随机抽样方法生成各时刻 指定数目的模拟值,以推求模拟序列的不确定性区间, 详细步骤可参看文献[7]。本文在每个时刻取样 1 万次, 将它们从小到大进行排序,推求的 BMA90%不确定性 区间即为 5%和 95%分位数之间的部分。

3 水文模型选取及研究数据

3.1 水文模型选取与参数率定

选取3个结构不同,复杂度不同的3个集总式水 文模型进行月径流模拟,分别为三参数月水量平衡 (MWB, monthly water balance)模型^[8]、HIMS 模型^[9]和 GWLF 模型^[10]。表1为3个模型结构的简要对比,其 中:MWB 模型计算时间步长为月,采用月水量平衡和 非线性出流原理来计算各月的总径流量,并未对径流 成分进行划分,结构最为简单;GWLF 模型计算时间步 长为日,径流划分为地表径流和地下径流,分别采用 SCS—CN 法和地下径流线性水库法进行计算,将计算 出的日径流量累加得到月径流量;HIMS 模型计算时 间步长为日,径流划分为地表径流、壤中流和地下径 流,采用 LCM 降雨入渗公式计算下渗量,通过水量平 衡得到地表径流量,壤中和地下径流采用线性水库方 法,计算出日径流量累加得到月径流量,模型结构最 复杂。

表1 3个水文模型结构对比 Table1 The comparison of the three different hydrological model structures

模型	MWB 模型	GWLF 模型	HIMS 模型
计算步长	月	日	日
水源划分	一水源	二水源	三水源
参数个数	3	4	6
主要计 算原理	月水量平衡、 非线性出流	SCS—CN 法、 地下基流线性水库	LCM 降雨入渗公式、 壤中和地下径流线 性水库

对三个模型均用蒙特卡罗随机抽样方法来率定参数,在各参数取值范围内随机抽取 100 万组参数组合以推求各模型最优参数组。选取均方根误差(*RMSE*)为目标函数,并选取确定性系数(*ENS*)、水量平衡系数(*WBE*)及线性相关系数(*R*²)作为模拟精度评定指标。目标函数与 3 个精度指标公式如下:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n} (y_{sim}^{t} - y_{obs}^{t})^{2}}{n}}$$
(4)

$$ENS=1-\frac{\sum_{i=1}^{n}(y_{sim}^{t}-y_{obs}^{t})^{2}}{\sum_{i=1}^{n}(y_{obs}^{t}-\overline{y_{obs}})^{2}}$$
(5)

$$WBE = \frac{\sum_{i=1}^{n} y^{t}_{sim}}{\sum_{i=1}^{n} y^{t}_{obs}}$$
(6)

$$R^{2} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\gamma_{sim}^{t} - \overline{\gamma_{sim}}) \cdot (\gamma_{obs}^{t} - \overline{\gamma_{obs}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n} (\gamma_{sim}^{t} - \overline{\gamma_{sim}})^{2} \cdot \sum_{i=1}^{n} (\gamma_{sim}^{t} - \overline{\gamma_{sim}})^{2}}}$$
(7)

式中: y'_{obs} 和 y'_{sim} 分别为t时刻的实测和模拟径流量;n

为时段个数; $\overline{y_{sim}}$ 和 $\overline{y_{obs}}$ 分别为模拟和实测径流序列 均值。

3.2 研究流域和数据

研究以河北省滦河流域的武烈河子流域为例。该 流域为滦河流域重要支流之一,地处滦河中游左 岸,流域面积2460km²。本文采用武烈河流域1995~ 1998年的实测日平均降水量、气温和径流资料进行流 域月径流量模拟,以验证 BMA 多模型模拟效果及对 模型结构不确定性进行评价。

4 结果分析与讨论

采用 EM 算法推求 BMA 模拟变量概率分布参数, 其中参数 w_k 即为各模型的 BMA 权重,并采用 2.3 介 绍方法推求 BMA 模拟序列 90%置信区间。

4.1 BMA 均值模拟与单个模型的模拟值对比

以均方根误差(RMSE)为目标函数,以蒙特卡罗随 机取样方法进行各模型参数率定,得到了三个模型的最 优模拟序列。通过 2.3 介绍的 EM 算法计算 BMA 模拟量 概率分布的参数,得到 BMA 均值模型序列。通过各模拟 序列与实测径流序列的过程线进行模拟效果初步比较, BMA 与组成它的三个模型的模拟序列与实测序列对比 如图 1 所示。从图 1 中可看出:3 个模型的模拟序列都模 拟出了径流量的月份变化,总体效果良好,但不同月份 的模拟值各有不同;3 个模型在径流峰值月份的模拟 有一定的偏差,总体上小于实测值;3 个模型在非汛期 退水月份的模拟值也有一定的偏差,总体上小于实测 值;BMA 均值模拟序列在峰值和非汛期退水月份模拟 效果与单个模型相比,效果有所提高,但仍小于实测值。

用 3.1 节中介绍的目标函数及 3 个模拟精度评定 指标对 BMA 均值模拟和 3 个模型的最优模拟序列进 行更详细的比较。表 2 列出了所得到的结果,从表 2 中 可看出,除水量平衡系数 WBE 外,BMA 均值模拟序列 的目标函数 RMSE、确定性系数 ENS 及线性相关系数 R² 均要优于模拟效果最好的单个模型 (HIMS 模型)。 BMA 均值模拟序列的水量平衡系数为 0.98,与各模型 的效果相差不大。总体上而言,BMA 均值模拟序列与 各模型最优模拟序列相比,目标函数值更小,模拟精度 更高。



图 1 BMA 均值模拟和组成它的 3 个模型与实测序列的对比 Fig.1 The comparison between measured and different simulating series

表2 BMA均值模拟与单个模型最优模拟序列效果比较 Table2 The comparison between BMA mean and

single model's optimal simulating series						
模型	RMSE	WBE	ENS	R^2		
MWB	1.88	1.00	0.78	0.79		
HIMS	1.64	1.01	0.83	0.84		
GWLF	1.91	1.04	0.77	0.78		

0.98

0.88

0.88

注:黑色加粗字表示的是最优值

1 37

BMA

图 2 为 3 个模型的 BMA 权重 $w_{k\circ}$ 由 3 个单个模 型模拟效果和 BMA 权重分析得到 :HIMS 模型为单个 最优模型,其 BMA 权重最高,为 0.38;MWB 和 GWLF 模型模型效果次之,其 BMA 权重分别为 0.33 和 0.29; BMA 多模型模拟保证模型精度较高的模型得到更多 权重,同时也充分利用其他模型的结果以得到比单个 模型更好的效果。



4.2 BMA 模型结构不确定性分析

通过 BMA 模拟序列 90%不确定性区间来分析 模型结构不确定性,采用覆盖度和区间宽度两个指 标来判断 BMA 置信区间的优良性。覆盖率是指置信 区间覆盖实测径流数据的比率,其值越大,表示推求 置信区间效果越好。区间宽度也是常用的置信区间 的评价指标之一,对于指定置信水平,在保证有较高 的覆盖度的前提下,区间的宽度越窄越好。图 3 为 BMA 模拟序列 90%不确定性区间、实测值及 BMA 均 值模拟序列。从图 3 可看出:大多数实测值在不确定 性区间之内,区间对实测值的覆盖度为88%;汛期峰 值月份的实测值均在区间内,但区间宽度较大,说明 对峰值模拟的不确定性较大:实测值在 90%区间外 的点均发生在非汛期退水月份、说明对退水月份模 拟存在一定的不确定性,但与汛期峰值相比,非汛期 退水月份的区间宽度较小。以上表明、总体上 BMA90%置信区间效果良好,对实测值覆盖度较高,3 个模型结构在模拟汛期峰值和非汛期退水月份存在 一定的误差,有较大的不确定性。其中,模型结构在 模拟汛期峰值存在较大误差的可能原因是:研究区 为半干旱地区,少数较大的洪水过程可能会占据了 汛期峰值月份径流量的大部分,而3个模型采用日 和月时间步长进行径流模拟、未能有效描述短历 时、高强度的降雨—径流过程。模型结构在非汛期 退水月份存在较大误差可能原因是:研究区内汛期 降雨量占年降雨量的 70%~80%,非汛期的降雨较 少,主要是地下水的退水过程,3个模型对非汛期退 水月份过程描述相对简单, MWB 模型采用非线性 出流计算月径流,而 HIMS 模型和 GWLF 模型采用 简单的线性水库法进行地下径流的计算,这可能导 致模拟存在一定偏差。



5 结论

贝叶斯模型平均是组合不同模型结果进行多模型 模拟的方法,既可提供均值模型序列,又可推求不确定 性置信区间进行模型结构不确定性评价。得到如下主 要结论: (1)通过 BMA 均值模拟与单个模型的最优模拟 序列的对比,可得出:总体上而言,BMA 均值模拟序列 目标函数值更小,模拟精度更高。

(2)利用 BMA90%不确定性区间对模型结构不确 定性进行评价,得出:汛期峰值的实测值均在区间内, 但区间宽度较大;有5个实测值在90%置信区间之 外,均发生在非汛期退水月份;3个模型结构在汛期峰 值和非汛期退水月份的模拟上存在一定的误差,有较 大的不确定性。

参考文献:

- Duan Q Y, Ajami N K, Gao X G, et al. Multi-model ensemble hydrologic prediction using Bayesian model averaging [J]. Advances in Water Resources, 2007, 30(5): 1371–1386.
- [2] 王慧亮,李叙勇, 解莹. 多模型方法在非点源污染负荷中的应用展望 [J]. 水科学进展, 2011,(5): 727-732. (WANG Huiliang, LI Xuyong, XIE Ying, Application prospects of multi-model approach for modeling non-point source pollution[J]. Advances in Water Science, 2011,(5): 727-732. (in Chinese))
- [3] Raftery A E, Gneiting T, Balabdaoui F, et al. Using Bayesian model averaging to calibrate forecast ensembles[J]. Monthly Weather Review, 2005, 133(5): 1155–1174.
- [4] Tsai FTC. Bayesian model averaging assessment on groundwater management under model structure uncertainty[J]. Stochastic Environmental Research and Risk Assessment, 2010, 24 (6): 845– 861.
- [5] 梁忠民, 戴荣, 王军, 等. 基于贝叶斯模型平均理论的水文模型合

成预报研究 [J]. 水力发电学报,2010,29 (2): 114-119. (LIANG Zhongmin, DAI Rong, WANG Jun, et al. Study on forecast combination of different hydrological models by Bayesian model averaging[J]. Journal of Hydroelectric Engineering, 2010, 29 (2): 114-119. (in Chinese))

- [6] 董磊华,熊立华,万民,等. 基于贝叶斯模型加权平均方法的水文模型 不确定性分析[J]. 水利学报,2011,(9):1065-1074. (DONG Leihua, XIONG Lihua, WAN Min, et al. Uncertainty analysis of hydrological modeling using the Bayesian Model Averaging Method [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2011,(9): 1065-1074. (in Chinese))
- [7] Bilmes J A. A Gentle tutorial of the EM algorithm and its application to parameter estimation for gaussian mixture and hidden markov models [R]. Berkeley: Department of Electrical Engineering and Computer Science U. C., 1998:1–13.
- [8] 胡庆芳, 王银堂, 刘克琳, 等. 基于改进的两参数月水量平衡模型的月径流模拟 [J]. 河海大学学报(自然科学版), 2007,(6): 638-642.
 (HU Qingfang, WANG Yintang, LIU Kelin, et al. Monthly runoff simulation based on improved two-parameter monthly water volume balance model[J]. Journal of Hohai University (Natural Sciences), 2007,(6): 638-642. (in Chinese))
- [9] 刘昌明, 王中根, 郑红星, 等. HIMS 系统及其定制模型的开发与应用 [J]. 中国科学(E 辑:技术科学),2008,(3):350-360. (LIU Changming, WANG Zhonggen, ZHENG Hongxing, et al. The development and application of HIMS system and its customized model [J]. Science in China(Series E), 2008,(3): 350-360.)
- [10] Li X Y, Weller D E, Jordan T E. Watershed model calibration using multi-objective optimization and multi-site averaging [J]. Journal of Hydrology, 2010, 380(3-4): 277-288.

Multi-model Ensemble Runoff Simulation Based

on Bayesian Model Averaging Method and Model Structure Uncertainty Analysis

DU Xinzhong^{1,2}, LI Xuyong¹, WANG Huiliang^{1,2}, LI Wenzan^{1,2}

(1.State Key Laboratory of Urban and Regional Ecology, Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China; 2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: Hydrologic model is a significant tool to simulate the water cycle, while there is great uncertainty depending on single model simulation which makes ensemble hydrologic model simulation become inevitable trend. Three lumped hydrological models were selected to conduct watershed monthly runoff ensemble simulation, and the expectation maximum algorithm was used to estimate the parameters of the BMA in order to obtain BMA mean simulation and 90% uncertainty interval. The result using the observed data of the Wuliehe watershed indicates that the BMA method can not only provide simulation with higher precision through mean simulation, but also provide quantitative evaluation of the model structure through confidence interval which could offer rich information of the runoff simulation.

Key words: hydrological model; Bayesian model averaging (BMA); multi-model; uncertainty