

模型多参数灵敏度与不确定性分析

王纲胜, 夏 军*, 陈军锋

(中国科学院地理科学与资源研究所 陆地水循环及地表过程重点实验室, 北京 100101)

摘要: 以潮白河为研究区域, 探讨了与模型参数及模型模拟性能有关的多参数灵敏度及不确定性分析方法 (Multi-Parameter Sensitivity and Uncertainty Analysis, MPSUA)。基于 Monte Carlo 模拟的多参数灵敏度分析, 可以评价模型中多个参数的相对重要性。GLUE 不确定性分析则能对模型性能进行量化评估。实例研究表明, 通过 MPSUA 方法, 可以减少优化参数的个数。而且, 在没有对模型进行参数优化之前, 基于 MPSUA 就可以确定模型的模拟精度。例如同样的模型在潮河可以获得比在白河更高的模拟精度。这种同一模型在不同流域所体现的差异性, 一方面是源于模型结构本身的不完善, 另一方面则与用于建模的数据误差有关。SCE-UA 参数优化结果与 MPSUA 结果几乎一致, 说明本文的参数灵敏度与模型总体性能评估方法比较合理。

关键词: 模型性能; 参数; 灵敏度分析; SCE-UA 算法; 潮白河流域

文章编号: 1000-0585 (2010)02-0263-08

1 引言

从水文模拟的发展历史来看, 水文模型都是受到数据制约的, 即通常根据数据的可用性建立概念性模型^[1,2]。概念性模型的可靠性依赖于所采用率定程序的恰当性^[3]。在给定数据的条件下, 模型率定的关键就是要在模型复杂性与预测不确定性之间找到较好的平衡。

模型率定算法一般分为局部优化算法和全局优化算法, 关于这些常用的算法, Duan 作了比较细致的总结^[4,5]。毫无疑问, 全局最优比局部最优更有说服力。在流域水文模型率定中常用的全局优化算法包括: 模拟退火法、遗传算法和 SCE-UA (Shuffled Complex Evolution)^[4-7]。关于算法的评价, 主要有两个方面, 一个是算法的有效性和稳健性, 另一个则是算法的执行效率。对比分析表明, SCE-UA 与一些常用算法相比, 具有更好的稳健性和高效性^[5]。

采用适当的优化算法确定模型参数固然重要, 评估这些参数的相对重要性同样不可或缺。对于那些相对重要的参数, 在确定参数取值范围时必须更加慎重, 因为这些参数对模型性能起着决定性的作用。对水文模拟模型的经验研究结果表明, 灵敏度与重要性之间存在对应性。

可见, 灵敏度分析是一个必要的建模工具, 因为它能够让模型使用者了解每个参数的

收稿日期: 2009-01-03; 修订日期: 2009-06-14

基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (40730632); 中国科学院院长奖获得者科研启动专项资金

作者简介: 王纲胜 (1978-), 男, 湖北鄂州人, 副研究员。主要从事水文水资源研究。

*通讯作者: 夏军 (1954-), 男, 湖北广水人, 教授, 博导。主要从事陆地水文学与水资源研究。

E-mail: xiaj@gsnrr.ac.cn

重要性以及输入数据误差对于计算输出的影响。由于大多数水文模型的复杂性，利用解析微分计算灵敏度不具备可行性。简单的“因子扰动” (factor perturbation) 方法^[8]，在水文分析中是常用的方法；其中，参数灵敏度一般表示为输出变量与该参数变化值的比值，这种灵敏度即绝对灵敏度，不能用于参数灵敏度的比较，因此，考虑参数量纲因素的相对灵敏度是比较模型中不同参数灵敏度的合理手段。因子扰动方法每次针对一个参数开展分析，最后综合多个参数各自分析的结果^[9,10]。这种方法一般是在一组特定参数值的基础上进行的。显然，这种方法没有考虑参数之间的相关性。

多参数灵敏度分析^[11] (MPSA: Multi-Parameter Sensitivity Analysis) 则是基于 Monte Carlo 模拟同时变化所有参数的取值，综合考虑多次 (如 N 次) 模型运行结果同时给出每个参数的灵敏度。而且，灵敏度的度量不是对比输出变量变化值与参数变化值，而是根据定义的目标函数值 (例如误差平方和)，通过给定的指标对 N 次模拟的目标函数值进行分类，然后计算两组的累积频率，据此对每个参数的灵敏度作出判断。

通常，灵敏度分析和不确定性^[12]分析是同时进行的。不确定性分析方法一般都是基于更复杂的 Monte Carlo 模拟，如 Markov Chain Monte Carlo (MCMC)^[13,14]。MCMC 方法通常是在贝叶斯理论的基础上采用 Metropolis^[13] 之类的算法进行抽样，从而获得参数的后验分布及其不确定性。这种方法不仅可以评估参数不确定性，还可以评估模型结构及输入数据的不确定性。普适似然度不确定性估计^[15,16] (Generalized Likelihood Uncertainty Estimation, GLUE) 则是一种评估模型总体不确定性的方法。

本文的目的是评估参数的相对重要性及模型性能，因此采用 GLUE 的思路。在 Monte-Carlo 模拟的基础上，结合 MPSA 和 GLUE 形成一个综合的模型参数灵敏度及不确定性分析方法 (Multi-Parameter Sensitivity and Uncertainty Analysis, MPSUA)。最后，根据 MPSUA 的分析结果，对其中相对重要的参数采用 SCE-UA 进行参数优化。将参数优化结果与 MPSUA 分析进行对比，可以验证 MPSUA 分析的有效性。

2 方法

本文的研究思路 (见图 1) 是将 MPSA、GLUE 及 SCE-UA 参数优化结合在一起，形成一个相互耦合，相互印证的综合模拟方法。下面分别介绍三种算法的基本步骤。

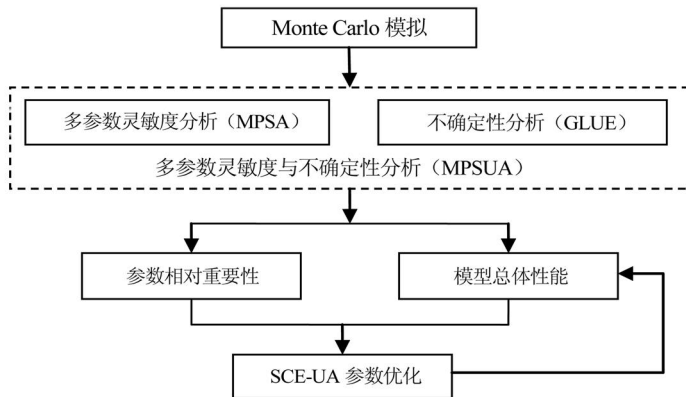


图 1 模型多参数灵敏度与不确定性分析及参数优化

Fig. 1 Multi-Parameter Sensitivity and Uncertainty Analysis (MPSUA) and parameter optimization

2.1 多参数灵敏度分析方法

多参数灵敏度分析 (MPSA)^[11] 包括以下步骤 (见图 2):

(1) 选择试验参数; (2) 根据野外和室内实验测量值, 设置每个参数的取值范围; (3) 对于每个选取的参数, 生成一个序列, 如在取值范围内生成 N 个均匀分布的独立随机数; (4) 应用生成的 N 个随机数运行模型, 并计算相应的目标函数值; (5) 将目标函数值与给定的指标 (R) 进行比较, 确定 N 个参数值中, 哪些是“可接受的”, 哪些是“不可接受的”; (6) 评价参数灵敏度: 对每个参数, 比较“可接受的”与“不可接受的”两组参数值的分布情况 (计算累积频率, 绘制累积频率曲线图), 如果两种分布形式相同, 则表明该参数不敏感, 反之, 则该参数较敏感。两条累积频率曲线分离的程度代表了参数的灵敏度, “目标函数值”采用模拟值与实测值误差平方和表示。

“实测值”通常是用每个参数取值范围的中值代入模型进行模拟得到, 而不是通常意义上的实际观测值。每个参数的取值范围 (最小值和最大值) 是由参数估计和对研究区域进行野外测量确定的。如果模拟的目标函数值小于“主观指标”, 该结果被认为是“可接受的”; 否则, 该结果被认为是“不可接受的”。三种不同的目标函数值通常用作“主观指标”: 就是取模拟得到的 N 个目标函数值排序后的 33%、50% 和 66% 分位点的目标函数值作为“主观指标”。

2.2 模型不确定性及性能评估方法 GLUE

GLUE 方法在评估模型不确定性的同时也评估模型的性能。GLUE 方法中的重要概念是“等效性 (equifinality)”和“可行模型空间 (behavioural model space)^[15]”。GLUE 是在参数空间中利用 Monte Carlo 模拟, 并结合似然度度量方法, 在模拟残差基础上评价每个参数组的可接受性及模型性能。似然度应该随着吻合度的增加而单调增大, 不可行 (non-behavioural) 的模型的似然度为 0^[15]。例如 Nash 和 Sutcliffe 建议的一种量度形式——Nash-Sutcliffe 效率系数^[17]。

2.3 SCE-UA 全局优化算法

SCE-UA 原来被设计用来处理概念性流域水文模型参数率定中碰到的一些特性问题。该方法基于以下 4 种概念的综合^[4~7]: (1) 确定性和概率论方法结合; (2) 在全局优化/改善方向上, 覆盖参数空间的复合形点的系统演化; (3) 竞争演化; (4) 复合形重洗 (complex shuffling)。SCE-UA 算法的一般步骤及计算流程如图 3。SCE-UA 中包含许多由一些算法参数控制的概率和确定性成分。为了更好地执行优化, Duan 对这些参数的选择进行了细致的研究, 并建议了一些默认取值^[6]。

3 实例分析

3.1 研究区域与水文模型

本文的研究区域为华北密云水库以上潮白河流域^[17] (东支为潮河, 西支为白河), 面积 13846km², 划分为 136 个子流域。13 年 (1961 ~ 1966 年, 1973 ~ 1979 年; 因为 1967 ~ 1972 年数据缺失) 水文气象数据用于实例研究。水文模型采用一种

表 1 DTVGM 月模型中需要优化的参数

Tab 1 Parameters in the monthly hydrological model				
参数	参数含义	取值下限	取值上限	单位
g_1	地表产流系数	0.02	0.40	-
g_2	地表产流指数	0.10	3.00	-
Kr	土壤水蓄泄系数	0.005	0.100	1/month
$KA W$	蒸散发计算参数	0.1	1.0	-
$A W O$	土壤湿度初值	5	30	mm

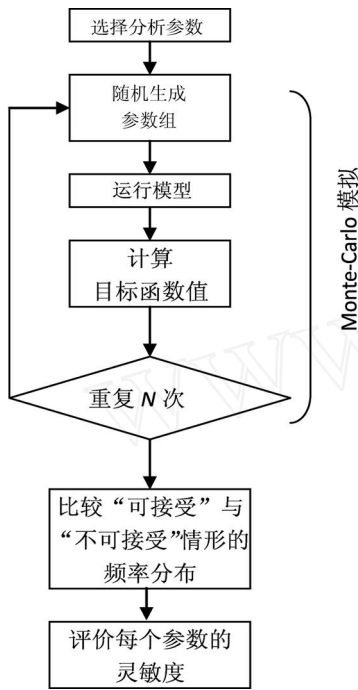


图 2 多参数灵敏度分析 (MPSA) 流程

Fig. 2 Flow chart illustrating MPSA (after Choi, 1999)

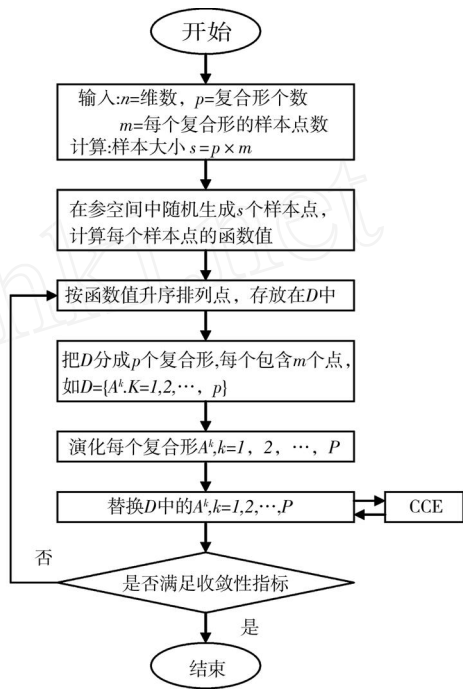


图 3 SCE-UA 计算流程

Fig. 3 Flow chart of SCE-UA algorithm (after Duan, 1992) (CCE: Competitive Complex Evolution algorithm)

月尺度水量平衡模型 DTV GM^[17]。由于本文的重点是探讨多参数灵敏度及不确定性分析, 适用于任何模型。因此, 对 DTV GM 模型不做详细介绍。DTV GM 月模型的参数见表 1。

3.2 参数灵敏度及不确定性分析

Monte-Carlo 模拟中模型运行次数 $N = 10000$, 白河流域 MPSA 统计结果见图 4, 其中“实线”的累积频率分布曲线表示“可接受”的情形, “虚线”累积频率分布曲线代表“不可接受”的情形, 两条曲线分离的程度越大, 表示该参数的灵敏度越大。通过计算图 4 中每个参数的两条曲线的分离程度 SD (采用与 Nash-Sutcliffe 效率系数^[13]), SD 值越接近 1, 表明参数越不灵敏。由此得到, 5 个参数的灵敏度从大到小依次是: $KA W$ 、 g_1 、 Kr 、 g_2 、 AWO , 即蒸散发计算参数、产流系数和土壤水蓄泄系数 (出流系数) 是比较重要的参数, 初始计算时段的土壤湿度初值可以比较容易地赋值, 对模拟过程不会造成显著的影响。

本研究中 GLUE 分析采用了多种似然度量方法。下面以常用的 Nash-Sutcliffe 效率系数 $NSEC$ 为例进行结果分析。图 5 中的柱状图是由 10000 次 Monte-Carlo 模拟统计得到的似然度 $NSEC$ 的频率分布图, 曲线是累积频率分布曲线。

从图 5 可以算出, 白河 $NSEC$ 累积频率分布曲线的 95% 分位点为 0.74, 该曲线说明: 对于模型输入的 13 年数据, 由选取的参数空间 (表 1) 所决定的模型, 它的 $NSEC$ 高于 0.74 只有 5% 的可能性, 高于 0.78 的可能性为 0; 潮河的 $NSEC$ 累积频率分布曲线则表明 $NSEC$ 高于 0.80 的可能性为 5%, 高于 0.84 的可能性为 0。因此, 得到理想模拟效果的参数组合还是局限在较小的参数空间之内, 这就说明了由选取的参数空间决定的模

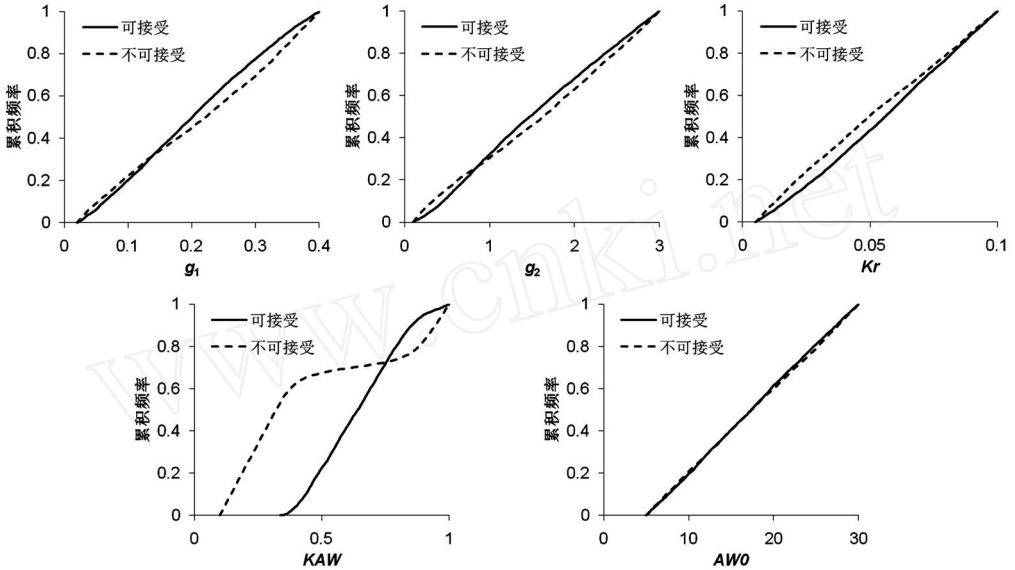


图 4 多参数灵敏度分析 (白河流域)

Fig. 4 Multi-parameter sensitivity analysis (Baihe River basin)

型尽管存在不确定性，但是不确定性并不太大。参数-似然度 (NSEC) 散点图 (图 6 也支持以上的观点：高似然度 (NSEC 峰值) 所对应的最灵敏的两个参数 (KAW 和 g_1) 的取值局限在一定的范围，说明在高似然度区域，存在的参数组合不会很多。显然，湿润多雨期和干旱少雨期的前期土壤湿度有显著的差别。本研究采用的模拟初始计算时段都是 1 月 1 日，即干旱少雨期，在这种初始计算时段相对不变的情形下，AWO 不太敏感；如果初始计算时段属于不同的时期，AWO 需要作相应的调整。以上分析说明：DTVGM 模型在潮白河的应用中具有较好的稳健性。

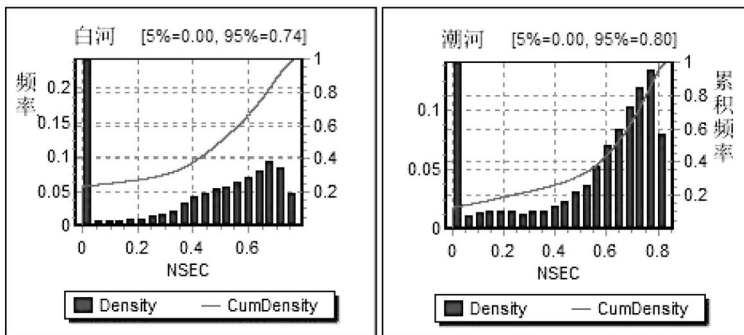


图 5 似然度及累积频率曲线 (NSEC 为效率系数)

Fig. 5 Accumulated density of the likelihood (NSEC-represents Nash-Sutcliffe efficient coefficient)

3.3 SCE-UA 参数优化

根据前面的参数灵敏度及不确定性分析，本文选取最灵敏的 3 个参数 (KAW、 g_1 、

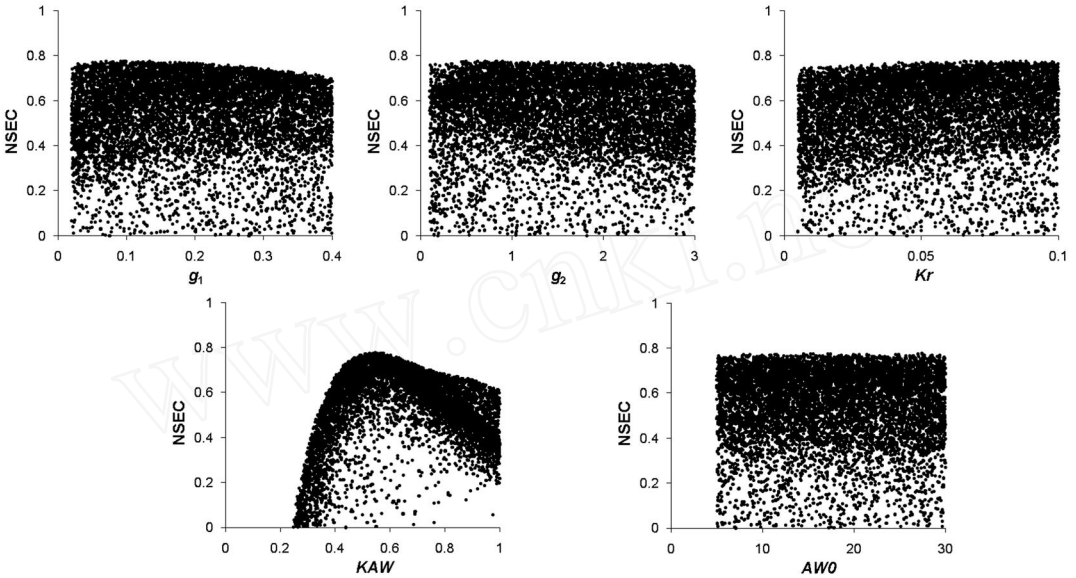


图 6 参数-似然度散点图 (白河流域)

Fig. 6 Dotty maps of parameter against likelihood (Baihe River basin)

Kr), 采用 SCE-UA 算法进行优化。其他两个不灵敏的参数设为固定值: AWO = 25 mm, g2 = 0.4。目标函数有两个: 水量平衡指标和模型效率系数, 在优化中将它们合成一个目标函数:

$$OBF = w \times (1.0 - IVF) + (1.0 - w) \times (1.0 - NSEC) \tag{1}$$

式中, IVF 是水量平衡指标, 即模拟径流量与实测径流量的比值; NSEC 是效率系数; w 是水量平衡指标权重, 一般取 0.5。该目标函数既考虑了总水量平衡因素, 也考虑了过程模拟的效果。

参数优化结果见表 2。潮河与白河的模拟径流量都等于实测径流量。白河 NSEC = 0.74, 潮河 NSEC = 0.82。上述优化结果的 NSEC 值与 GLUE 分析结果一致, 说明 SCE-UA 能有效地确定 DTVGM 的参数。

表 2 SCE-UA 算法优化结果

Tab 2 Parameter optimization results using SCE-UA algorithm

流域	IVF	NSEC	产流系数 g1	蓄泄系数 Kr	蒸散发计算参数 KAW
白河	1.00	0.74	0.07	0.072	0.45
潮河	1.00	0.82	0.08	0.080	0.52

4 结论与讨论

本文探讨了与模型参数及模型模拟性能有关的多参数灵敏度及不确定性分析方法。基于 Monte-Carlo 模拟的 MPSUA 方法, 通过对比“可接受”与“不可接受”两组参数值的分布曲线的分离程度, 可以评价一个模型中多个参数的相对重要性, 为参数优化提供了依据; 另外, 似然度累积频率曲线则可以评估模型的总体性能及其不确定性。换句话说, 在没有对模型进行参数优化之前, 基于本文的多参数灵敏度及不确定性分析, 即可以知道模

型的模拟精度能达到怎样的水平。以潮河与白河为例, 同样的 DTVGM 模型在潮河可以获得比在白河更高的模拟精度。这种同一模型在不同流域所体现的差异性, 一方面是源于模型结构本身的不完善, 另一方面则与用于建模的数据误差有关。多参数灵敏度及不确定性分析结果与参数优化结果的相互印证, 也说明了本文的参数灵敏度与模型总体性能评估方法的有效性。

事实上, MPSUA 的结果同时验证了 Beven 等提出的“异参同效性”, 即不同的参数组合给出了相近的模拟效果。以潮河为例, 10000 种参数组合中, 6% 的参数组合(即 600 组)得出的 NSEC 介于 0.80~0.84 之间。以 NSEC 作为目标函数, 6% 的参数组合都是相对较优的参数值。因此, 以后的研究中应该考虑不同目标函数所带来的结果差异, 甚至可以考虑将多目标法则引入模型性能评估方法之中。

参考文献:

- [1] Gupta Hoshin V, Sorooshian Soroosh, Hogue Terri S, *et al.* Advances in automatic calibration of watershed Models. In: Duan Q. *et al.* (Eds), Calibration of Watershed Models, Water Sci. and Appl. 6, AGU, Washington, DC, 2003, 9~28.
- [2] Schultz G A, Engman E T. (Eds.) Remote Sensing in Hydrology and Water Management. Springer Verlag Berlin Heidelberg, Germany, 2000.
- [3] Rozos Evangelos, Efstratiadis Andreas, Nalbantis Ioannis, *et al.* Calibration of a semi-distributed model for conjunctive simulation of surface and groundwater flows. Hydrological Sciences Journal, 2004, 49(5): 819~842.
- [4] Duan Q Y. Global optimization for watershed model calibration. In: Duan Q. *et al.* (Eds), Calibration of Watershed Models, Water Sci. and Appl. 6, AGU, Washington, DC, 2003: 89~102.
- [5] Duan Q, Sorooshian S, Gupta V K. Effective and Efficient Global Optimization for Conceptual Rainfall-Runoff Models. Water Resour. Res., 1992, 28(4): 1015~1031.
- [6] Duan Q, Sorooshian S, Gupta V K. Optimal Use of the SCE-UA Global Optimization Method for Calibrating Watershed Models. J. of Hydrol., 1994, 158: 265~284.
- [7] Duan Q, Gupta V K, Sorooshian S. A Shuffled Complex Evolution Approach for Effective and Efficient Global Optimization. J. Optim. Theo. and Its Appl., 1993, 76(3): 501~521.
- [8] McCuen Richard H. Modeling hydrologic change: statistical methods. Lewis publishers, 2003, 333~365.
- [9] White K L, Chaubey I. Sensitivity analysis, calibration, and validations for a multisite and multivariable SWAT model. Journal of the American Water Resources Association, 2005, 41: 1077~1089.
- [10] Lenhart T, Eckhardt K, Fohrer N, *et al.* Comparison of two different approaches of sensitivity analysis. Physics and Chemistry of the Earth, 2002, 27: 645~654.
- [11] Choi J, Harvey J W, Conklin M. Use of Multi-parameter sensitivity analysis to determine relative importance of factors influencing natural attenuation of mining contaminants. In: Proceedings of the Toxic Substances Hydrology Program Meeting, Charleston, SC, (D. Morganwalp, ed.). 1999, 185~192.
- [12] Thorsen M, Refsgaard J C, Hansen S, *et al.* Assessment of uncertainty in simulation of nitrate leaching to aquifers at catchment scale. Journal of Hydrology, 2001, 242: 210~227.
- [13] Ajami N K, Duan Q Y, Sorooshian S. An integrated hydrologic Bayesian multimodel combination framework: Confronting input, parameter, and model structural uncertainty in hydrologic prediction. Water Resources Research, 2007, 43(1), doi: 10.1029/2005wr004745.
- [14] Feyen L, Vrugt J A, Nuallain B O, *et al.* Parameter optimisation and uncertainty assessment for large-scale streamflow simulation with the LISFLOOD model. Journal of Hydrology, 2007, 332: 276~289.
- [15] Beven Keith, Freer Jim. Equifinality, data assimilation, and uncertainty estimation in mechanistic modeling of complex environmental systems using the GLUE methodology. Journal of Hydrology, 2001, 249: 11~29.

- [16] Demarty J, Ottl C, Braud I, *et al.* Constraining a physically based Soil-Vegetation-Atmosphere Transfer model with surface water content and thermal infrared brightness temperature measurements using a multiobjective approach, *Water Resour. Res.*, 2005, 41, W01011, doi: 10.1029/2004WR003695.
- [17] 王纲胜,夏军,牛存稳. 分布式水文模拟汇流方法及应用. *地理研究*, 2004, 23(2): 175~182.

A multi-parameter sensitivity and uncertainty analysis method to evaluate relative importance of parameters and model performance

WANG Gang-sheng, XIA Jun, CHEN Jun-feng

(Key Laboratory of Water Cycle & Related Land Surface Processes, Institute of Geographic Sciences and Natural Resources Research, CAS, Beijing 100101, China)

Abstract : A Multi-Parameter Sensitivity and Uncertainty Analysis (MPSUA) method is developed to evaluate the relative importance of parameters and model performance. The idea of MPSUA is to couple the Generalized Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE) with the Multi-Parameter Sensitivity Analysis (MPSA) based on Monte Carlo simulation. The implementation of MPSA includes the following steps: (1) Running the model using randomly generated parameter sets; (2) Computing the objective function values, which are defined as the sum of squared errors between observed and simulated values. The observed values are the output from model simulations using the median of the characteristic range for each parameter. (3) Identifying the 'acceptable' and 'unacceptable' parameter sets by comparing the objective function values to a given criterion, e. g., the 50% division of all sorted objective functions. The objective function value which is less than the criterion is classified as 'acceptable', otherwise it is classified as 'unacceptable'. (4) Measuring the separating degree between two cumulative distribution curves for "acceptable" and "unacceptable" parameters. Larger discrepancy means higher sensitivity. The case study in the Chaobai River Basin of North China showed that the model performance can be evaluated based on MPSUA, even though the optimum parameter values were unknown. For example, the same model could reach a higher modeling precision for the Chaohe River Basin than that for the Baihe River Basin. Such a difference in model performance is likely caused by both the uncertainty from model structure and the uncertainty from input data. The consistency between parameter optimization by SCE-UA algorithm and MPSUA also illustrated the rationality of the methodology applied in this paper. Further studies can take into account multiple objectives into the MSPUA.

Key words : model performance; parameter; sensitivity analysis; SCE-UA algorithm; Chaohe and Baihe river basins in North China