

基于不确定性分析的 M PULSE 模型预测能力评价

何炜琪, 陈吉宁, 曾思育, 刘毅

(清华大学 环境科学与工程系, 北京 100084)

摘要: 为解决分布式参数非点源污染(M PULSE)模型不确定性分析中采样量和计算量过大的问题,在Bayes 概率理论基础上,构建了基于Sobol 序列的GLUE 算法,用来描述多种扰动因素共同作用下的全局参数不确定性,从而对模型预测能力进行全面评价。将该方法应用于M PULSE 模型,对分布式参数的全局进行不确定性分析。结果表明:该模型结构优良,具有良好的预测能力,对空间不确定性有较高的预测稳定性和鲁棒性,可以满足实际流域污染模拟需要。

关键词: 非点源污染; 分布式参数; 不确定性分析; Sobol 序列

中图分类号: X 522

文献标识码: A

文章编号: 1000-0054(2009)06-0850-05

Assessment of M PULSE model simulation capability based on uncertainty analysis

HE Wei qi, CHEN J ining, ZENG S iyu, LU Yi

(Department of Environmental Science and Engineering,
Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: A Sobol-sequence-based GLUE (generalized likelihood uncertainty estimation) algorithm was developed based on Bayesian probability theory to improve analysis of huge samples for the uncertainty analysis of the distributed parameters nonpoint source pollution model. The method describes the global uncertainties of the distributed parameters for multiple disturbances to assess the model's simulation capability. The method was applied to M PULSE (integrated model of non-point sources pollution processes) model. The results show that the model has good simulation capability, with steady, robust results for spatially distributed uncertainties and can be applied to watershed simulations with spatial uncertainties.

Key words: nonpoint source pollution; distributed parameters; uncertainty analysis; Sobol sequence

事件驱动型分布式参数非点源模型(integrated model of non-point sources pollution processes, M PULSE)是清华大学环境科学与工程系综合当前国际多种非点源模型的优势和中国实际应用需要

而研制开发的^[1-2]。它已经在三河三湖(淮河、海河、辽河、太湖、巢湖、滇池)、官厅水库、洱海等流域非点源污染模拟中得以应用,但尚未经过完整的不确定性分析。

随着非点源模型算法复杂程度和流域模拟空间范围的加大,空间不确定性对模拟结果的影响也越来越大,模型应用存在很大不确定性^[3],尤其是分布式参数非点源模型^[4]。分布式参数模型一方面通过在每个网格单元中引入大量具有空间分布特征的独立参数而实现对系统的精细描述,另一方面却由于这些参数在实际应用中难以全面准确监测、获取而带来空间不确定性。参数空间分布不确定性相互叠加最终会对预测结果产生什么影响,模型预测是否稳定等问题,都需要通过基于不确定性分析的模型预测能力评价来回答。

目前,模型不确定性分析方法均是从集总式参数模型发展而来,分布式参数非点源模型不确定性的研究才刚刚起步^[5-6]。由于分布式模型参数众多,如果简单沿用集总式参数模型不确定性分析的方法,其采样量和计算量均会呈指数式增长,导致传统的Monte Carlo 不确定性分析方法难以有效应用。

本文针对M PULSE 模型,在Bayes 概率理论基础上,构建了基于Sobol 序列的GLUE 算法,解决分布式参数采样量和计算量过大的问题,通过描述多种扰动因素共同作用下的全局参数不确定性,对模型的预测能力进行全面评价。

1 方法学构建

1.1 总体方法框架

识别 M PULSE 模型的预测能力,就是考察其

收稿日期: 2008-06-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(40701057)

作者简介: 何炜琪(1980—),男(汉),广东,博士研究生。

通讯联系人: 陈吉宁,教授, E-mail: jchen1@tsinghua.edu.cn

分布式参数在给定不确定性扰动下, 模型模拟结果准确度、稳定性、可靠性的高低, 总体方法框架如图 1 所示。

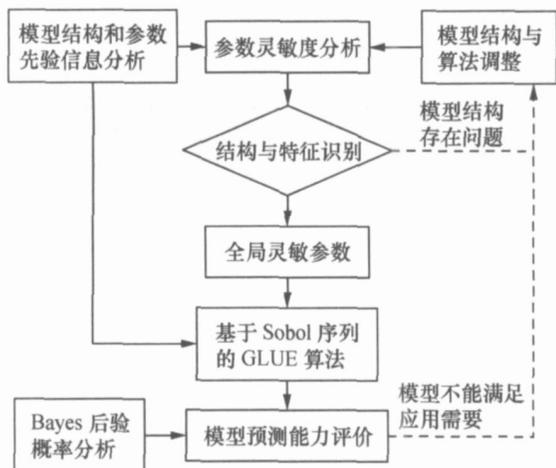


图1 MPULSE 模型预测能力评价总体方法框架

首先对模型结构和参数的先验信息进行分析, 然后通过参数的局部灵敏度分析, 初步识别模型结构的特点和合理性, 识别出模型的冗余参数、响应错误参数等基本模型结构问题。若模型存在基本结构问题, 则必须先进行结构与算法调整。

模型通过结构检验后, 再一次利用参数灵敏度分析识别出全局灵敏的参数, 用于后续不确定性分析, 以便减少不确定性分析中参数采样空间的维度, 提高采样效率, 加快收敛速度。

在全局不确定性分析中, 为了解决分布式参数数量增长带来的采样量、计算量过大、收敛速度过慢的问题, 本文构建了基于 Sobol 序列的 GLUE 算法。

最后, 在分布式参数全局不确定性分析结果的基础上进行模型预测能力评价, 即考察模拟结果在空间不确定性扰动下的准确度、稳定性和可靠性。若不能满足实际应用的精度需要, 则需要进行相应的模型结构与算法调整。

1.2 基于 Sobol 序列的 GLUE 算法

GLUE 算法是目前不确定性分析中常用的一种算法, 最初由 Beven 在 1992 年提出^[7], 其易用性和有效性都比较高。但把 GLUE 算法直接用于分布式参数模型存在难以收敛的问题。假设模型有 M 个分布式参数, 研究区域划分为 N 个网格, 那么实际采样参数个数是 $M \times N$ 个(实际应用中, M 通常不小于 10, N 一般大于 1000), 因此要得到具有代表性的参数组合样本, 采样量是非常大的, 而且采样过程应采用 M 维参数向量的随机采样, 常规的一维均匀

分布随机数的采样结果会偏离原有的均匀分布。

本研究引入 Sobol 序列来解决 GLUE 算法收敛和分布式参数采样的问题。Sobol 序列是 Sobol 在 1976 年提出的一个拟随机序列, 该序列稳定、覆盖率高, 而且可以扩展到任意维度, 其优良性质得到了研究者们的一致认可, 并进行了多方面的改进^[8]。由于其均匀性非常好, 应用到复杂的随机过程中, 可以获得很好的收敛性^[9-10]。Sobol 序列的产生算法已经相当成熟和稳定^[8]。

GLUE 算法部分, 合理的似然度定义是其核心。结合非点源模型参数的实际情况, 本研究将参数样本 θ 下的模拟结果似然度 $UL(\theta)$ 定义为:

$$UL(\theta) = \max \left\{ 1 - \sqrt{\frac{1}{K} \sum_{i=1}^K \left[\frac{C_i(\theta) - C_{i,obs}}{C_{i,obs}} \right]^2}, 0 \right\}$$

式中: K 为模型中模拟变量的个数, $C_i(\theta)$ 为给定参数样本 θ 下模型计算出的第 i 个结果变量的值, $C_{i,obs}$ 为该变量相应的观测值(真值)。 $UL(\theta)$ 为 1 表示结果与观测值(真值)完全吻合, $UL(\theta)$ 越小表示结果与观测值(真值)差异越大, $UL(\theta)$ 是模拟结果与观测真值的相对误差的综合量度。当输出变量个数为 1 的时候, $UL(\theta)$ 就退化为相对误差。

2 研究区域与数据准备

2.1 研究区域

本文选择滇池流域的一个示范区作为研究区域, 该示范区位于东经 102 45 50 ~ 102 47 57, 北纬 24 46 42 ~ 24 51 19, 地处滇池东岸的呈贡县境内, 位于捞渔河流域下游入湖口处, 示范区是一个封闭的小流域, 土地面积 12.7 km², 其中耕地面积 10.89 km², 非点源污染显著。

2.2 数据准备

首先使用 100m × 100m 的网格将示范区进行网格概化, 共分为 1255 个网格, 将土地利用类型等分布式参数信息按照网格进行整理组织, 以便输入 M PULSE 模型计算。

由于缺乏足够的实际监测数据, 本文使用数学实验的方法对 M PULSE 模型进行不确定性分析。首先利用示范区 2000 年 3 场暴雨监测数据率定其模型参数作为基准参数, 以 M PULSE 模型在使用基准参数条件和 30mm 降雨量下的模拟结果作为目标真值。后续不确定性分析中, 扰动程度、模型模拟结果准确度(似然度)的计算, 均以目标真值为基准进行计算。

3 结果与讨论

3.1 参数灵敏度分析

对基准参数施加 $\pm 5\%$ 的扰动, 开展 M PULSE 模型的参数灵敏度分析。M PULSE 模型共有 23 个主要的分布式参数, 研究区域划分为 1 255 个网格, 因此共有 $23 \times 1 255$ 个分布式参数。通过 28 865 次模拟计算, 结果表明, 23 个分布式参数中, 灵敏度显著的有 17 个, 较显著的 2 个, 共占 83%, 过度参数化的情况不严重, 总体模型结构良好, 没有结构性问题。

根据灵敏度分析结果识别出在全流域范围内灵敏度最显著的参数 12 个, 用于后续的不确定性分析, 如表 1 所示。

表 1 M PULSE 模型全局灵敏参数

参数名	对应输出变量	参数名	对应输出变量
曲线数	径流量、悬浮物 总氮、总磷、COD	土壤可蚀性因子	悬浮物
磷残留性因子	总磷	施氮肥量	总氮
作物因子	悬浮物	施磷肥量	总磷
措施因子	悬浮物	氮衰减率	总氮
COD 因子	COD	磷衰减率	总磷
氮残留性因子	总氮	COD 衰减率	COD

3.2 参数先验分布

考虑各个分布式参数均会有不确定性(误差), 不确定性分析中需要同时对 $12 \times 1 255$ 个灵敏的分布式参数进行随机采样模拟, 各个参数的先验分布均采用均匀分布, 其扰动范围 Δ 考虑以下 4 种情况:

- 1) $\Delta = \pm 5\%$: 对应正常工程测量误差;
- 2) $\Delta = \pm 20\%$: 对应一般的工程应用误差;
- 3) $\Delta = \pm 50\%$: 对应较大的工程应用误差;
- 4) $\Delta = \pm 100\%$: 对应极端情况下的工程误差。

3.3 不确定性分析收敛性

根据大数定理和中心极限定理, 随着模拟次数 N 的增加, 模型模拟结果的似然度 $UL(\theta)$ 会收敛到正态分布, 因此可以通过考察其分布的均值 UL 和方差 $VAR(UL)$ 收敛情况来判断分布的收敛情况, 分别如图 2 和图 3 所示。

图 2 表明, 在各扰动水平下, 均值的收敛均比较迅速, 即使在 $\pm 100\%$ 的扰动水平下, 在 3 000 次模拟左右就已经达到收敛。而且均值收敛结果表明, 并非随着扰动水平增加, 模型似然度均值就会简单降低,

在 4 种扰动水平中, 最低的似然度均值对应 $\pm 20\%$ 扰动, 表明空间不确定性与参数扰动之间的复杂性和非线性。

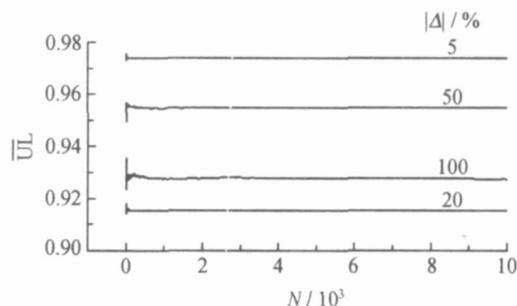


图 2 各扰动水平下模型总体似然度均值收敛情况

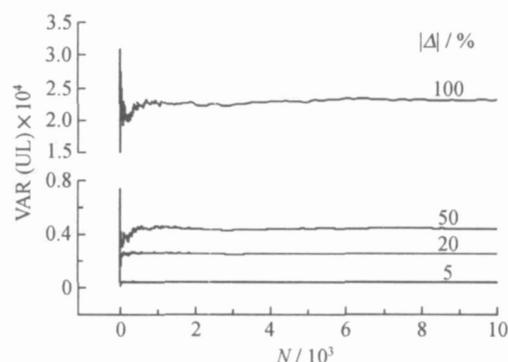


图 3 各扰动水平下模型总体似然度方差收敛情况

根据图 3 结果, 可知模型结果似然度方差的收敛速度比其均值的慢, 而且扰动越大, 方差均值越大, 方差收敛越慢, 这符合方差的概念定义, 是合理的。模拟结果表明, 在 $\pm 50\%$ 扰动水平以下, 3 000 次模拟基本能达到方差收敛, $\pm 100\%$ 扰动水平下, 需要 8 000 次左右的模拟才能达到收敛。

根据似然度的均值和方差的收敛结果分析, 采用 10^4 次采样能保证各个扰动水平下均能达到收敛, 具体收敛到的分布如图 4 所示。

3.4 模型预测能力评价

根据图 4 所示的模型结果似然度后验分布, 可以得到模型在不同空间分布式参数不确定性扰动水平下的模拟似然度(准确度), 这里根据工程应用实际需要, 主要考虑 2 个指标: 平均似然度和 95% 置信度下的似然度, 如表 2 所示。

表 2 各扰动水平下模型模拟结果似然度

$ \Delta /\%$	平均似然度/ $\%$	95% 置信度下的似然度/ $\%$
5	97.4	97.0
20	91.6	90.6
50	95.5	94.2
100	92.8	89.8

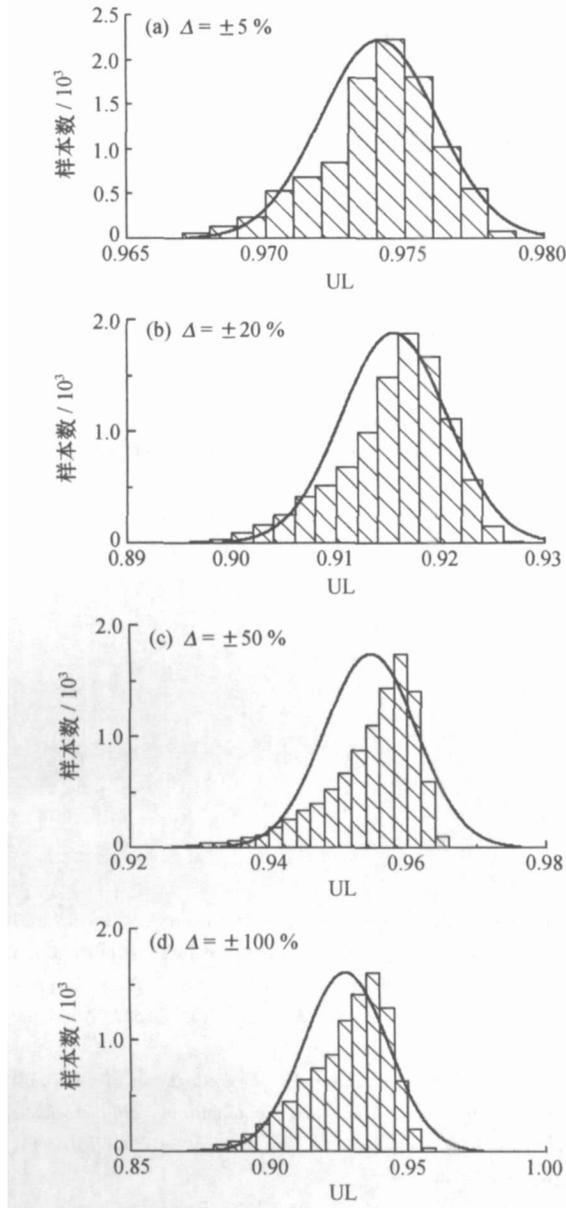


图4 各扰动水平下模型总体似然度分布

结果表明, M PULSE 模型具有非常好的预测能力, 分布式参数的空间不确定性通过模型内部传递和累积, 最终是减小而不是放大, 模拟结果具有相当好的稳定性, 即分布式参数的不确定性并不会导致模拟结果的失效。说明此模型结构优良, 对空间不确定性有较高的稳定性和鲁棒性, 具有良好的可靠性, 可以应用于具有参数不确定性的实际流域模拟。

同时, 从模拟结果可以看出, 似然度并非简单地随着空间不确定性扰动的增加而增加, 表明空间不确定性传递积累的复杂性, 它对于模型最后模拟结果的好坏并非简单的线性关系, 而是一个显著非线性的系统。进一步考察不同扰动水平下的模型模拟结果似然度变化, 如图5所示。

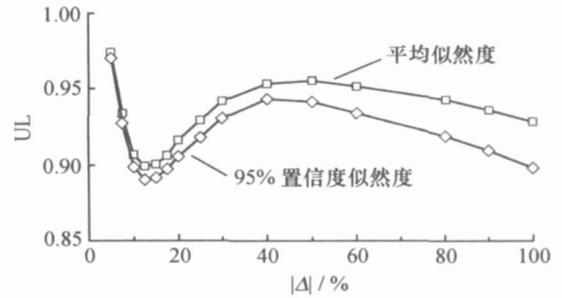


图5 随扰动水平变化的模拟结果似然度

结果表明, 模型模拟结果的似然度并非随着扰动水平增加而单调递减, 在本研究区域内, 不确定性扰动水平在 $\pm 12\%$ 附近时, 模型模拟结果似然度达到最小值, 平均似然度为 89.9% , 95% 置信度下的似然度为 89.0% , 此时模型模拟准确度仍能较好地满足工程应用需要。当不确定性扰动水平大于 $\pm 45\%$, 且继续增大时, 模型模拟结果似然度会单调下降, 但下降幅度不大, 特别是平均似然度, 进一步表明模型的稳定性和鲁棒性, 并不会随着扰动水平的增加而显著降低模拟准确度。

分布式参数模型由于其参数规模的增加, 直接导致了其参数结构的复杂化和非线性化, 参数的空间不确定性的传递和积累过程变得非常复杂, 不再是如集总式参数模型那么直观的变化关系。模型本身的复杂性也使得其机理分析变得困难, 因此对其预测能力的识别, 有效的方法仍然是通过数学实验进行大量采样模拟实际可能存在的空间不确定性扰动, 考察模型模拟结果的准确度, 从而确定模型的预测能力。

4 结论

本文通过构建基于 Sobol 序列的 GLUE 算法, 有效地对分布式参数非点源模型 M PULSE 模型进行了参数全局不确定性分析。在本案例研究中, 模型共有 12×1255 个灵敏的分布参数, 对它们同时进行采样, 只需要 10^4 次模拟即可以达到结果收敛, 表明 Sobol 序列性质优良, 基于 Sobol 序列的 GLUE 算法能够高效地对分布式参数模型进行参数不确定性分析。同时不确定性分析结果表明, M PULSE 模型具有非常好的预测能力, 在分布式参数存在空间不确定性的条件下, 模型模拟结果仍能保持相当好的稳定性和鲁棒性, 模型结构优良, 空间不确定性不会被放大而导致模拟结果的失效。因此, 此模型可以应用于具有空间参数不确定性的实际流域模拟。

参考文献 (References)

- [1] 石峰, 杜鹏飞, 张大伟, 等. 滇池流域大棚种植区面源污染模拟 [J]. 清华大学学报(自然科学版), 2005, 45(3): 363 - 366
SHI Feng, DU Pengfei, ZHANG Dawei, et al. Nonpoint source pollution simulation in greenhouse region of Dianchi Basin [J]. *J Tsinghua Univ (Sci & Tech)*, 2005, 45(3): 363 - 366 (in Chinese)
- [2] 张大伟. 流域非点源污染模拟与控制决策支持系统的开发与应用 [D]. 北京: 清华大学, 2006
ZHANG Dawei. The Development and Application of Decision Support System for Watershed Nonpoint Source Pollution Simulation and Management [D]. Beijing: Tsinghua University, 2006 (in Chinese)
- [3] Hamel R D, Cooper R J, Slade R M, et al. Cumulative uncertainty in measured streamflow and water quality data for small watersheds [J]. *Trans ASABE*, 2006, 49(3): 689 - 701
- [4] Sohrahi T M, Shimohammadi A, Montas H, et al. Uncertainty in nonpoint source pollution models and associated risks [J]. *Enviro Forensics*, 2002, 3(2): 179 - 189
- [5] Kao J J, Hong H J. NPS model parameter uncertainty analysis for an off-stream reservoir [J]. *Water Resources Bulletin*, 1996, 32(5): 1067 - 1079
- [6] McFarland A M, Hauck L M. Determining nutrient export coefficients and source loading uncertainty using in-stream monitoring data [J]. *J Am Water Resources Assoc*, 2001, 37(1): 223 - 236
- [7] Beven K, Binley A. The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction [J]. *Hydrological Process*, 1992, 6: 279 - 298
- [8] Bratley P, Fox B. Algorithm 659: Implementing Sobol's quasirandom sequence generator [J]. *ACM Trans Math Software*, 1988, 14(1): 88 - 100
- [9] Karaivanova A, Dimov I, Ivanovska S, et al. A quasi-Monte Carlo method for integration with improved convergence [J]. *Large-Scale Scientific Computing*, 2001, 2179: 158 - 165
- [10] L N JengShiaw, HWANG Chyi. Enhancement of the global convergence of using iterative dynamic programming to solve optimal control problems [J]. *Indu & Eng Chan Res*, 1998, 37(6): 2469 - 2478

(上接第 849 页)

参考文献 (References)

- [1] Bumpus J A, Tien M, Wright D, et al. Oxidation of persistent environmental pollutants by a white rot fungus [J]. *Science*, 1985, 228: 1434 - 1435
- [2] Blázquez P, Caminal P, Montserrat S, et al. The effect of HRT on the decolorization of the grey lanaset G textile dye by *Trametes versicolor* [J]. *Chem Eng Journal*, 2007, 126: 163 - 169
- [3] Saucedo J E N, Barbotin J N, Thomas D. Physiological and morphological modifications in immobilized *Gibberella fujikuroi* Mycelia [J]. *Appl Microbiol Biotech*, 1989, 55(9): 2377 - 2384
- [4] Bottcher U F, Trojanowski J, Huttemann A. New form of lignolytically active mycelium generated by immobilization of protoplasts isolated from white rot fungi *Heterobasidion annosum* and *Polyporus pinsitus* [J]. *Appl Microbiol Biotech*, 1988, 29: 380 - 386
- [5] Sayadi S, Zorgani F, Ellouz R. Decolorization of olive mill waste-waters by free and immobilized *Phanerochaete chrysosporium* cultures [J]. *Appl Biochem Biotech*, 1996, 56: 265 - 276
- [6] Gerin P A, Asther M, Rouxhet P G. Peroxidase production by the filamentous fungus *Phanerochaete chrysosporium* in relation to immobilization in Yiltering 'carriers' [J]. *Enzyme and Microbial Tech*, 1997, 20: 294 - 300
- [7] Paszczynski A, Crawford R L, Huynh V B. Manganese peroxidase of *Phanerochaete chrysosporium*: Purification [J]. *Methods in Enzymology*, 1988, 161(2): 264 - 270