

融合 MCMC 方法的差分进化算法 在水文模型参数优选中的应用

曹飞凤¹, 尹祖宏²

(1. 浙江工业大学 建筑工程学院 港口航道与海岸工程系, 杭州 310014;

2. 浙江大学 海洋学院 港口、海岸与近海工程研究所, 杭州 310058)

摘要: 传统差分进化算法在优选水文模型参数时容易出现“早熟收敛”问题, 基于马尔可夫链蒙特卡罗方法的差分进化算法——DREAM 算法, 对嘉陵江流域降雨径流模型的参数优选问题进行了分析。结果发现, DREAM 算法融合了自适应 Metropolis 方法的优点, 能有效克服“早熟收敛”问题, 适用于推求先验信息较少的复杂水文模型参数后验分布。

关键词: 差分进化算法; MCMC 方法; 参数优选; DREAM 算法; 降雨径流模型

中图分类号: TV 213.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 1672-1683(2015)02-0202-04

Application of differential evolution algorithm combined with Markov Chain Monte Carlo in parameter optimization of hydrologic model

CAO Feifeng¹, YIN Zuhong²

(1. Institute of Harbor-Channel and Coastal Engineering, Department of Civil Engineering, Zhejiang University of Technology, Hangzhou 310014, China; 2. Institute of Harbor and Coastal Engineering, College of Ocean, Zhejiang University, Hangzhou 310058, China)

Abstract: Premature convergence problem exists in the parameter optimization of hydrological model using the traditional differential evolution. In this paper, differential evolution adaptive metropolis algorithm (DREAM) was proposed, which combines the advantages of differential evolution algorithm and Markov Chain Monte Carlo (MCMC) sampler, and applied in the parameter optimization of CMD-3PAR hydrologic model in the Jialing River Basin. The results showed that DREAM has the advantages of self adaptive Metropolis method, can effectively overcome the problem of premature convergence, and is capable to infer the posterior distribution of model parameters which is lack of prior information.

Key words: differential evolution algorithm; Markov Chain Monte Carlo method; parameter optimization; Differential Evolution Adaptive Metropolis; rainfall runoff model

差分进化(Differential Evolution, 简称 DE)算法^[1-2]是一种高效的并行搜索算法, 它是由 Storn 等人于 1995 年提出的, 主要包括变异、交叉和选择三个步骤。DE 算法是解决复杂优化问题的有效方法, 具有算法通用、原理简单、协同搜索性能强、易于与其他算法混合构造等特点, 但收敛速度很大程度上依赖于算法的控制参数。迄今, 许多学者对 DE 算法进行了研究和改进, 孙成富等^[3]提出了基于高斯扰动和免疫搜索策略的改进差分算法, 高斯扰动的交叉操作可增加种群的多样化, 免疫搜索可实现自适应地修正缩放因子和交叉因子, 大大改善了传统差分进化算法的搜索性能; Kaelo 等^[4]

利用竞争选择机制来选取进行变异操作的父代基向量, 同时利用反射和收缩操作来实施局部搜索; Liu 等^[5]利用模糊逻辑控制器来调整变异和交叉操作的控制参数, 从而加速算法搜索的进程; Fan 等^[6]在 DE 中引入三角法变异, 增强了算法跳出局部极小点的概率, 较好地克服了“早熟收敛”问题。Ter Braak^[7]将 DE 算法融入马尔可夫链蒙特卡罗方法, 形成 DE-MC 算法, 在此基础上, Vrugt 等^[8]将自适应的 Metropolis 算法与差分进化算法相结合, 提出了具有较强全局收敛能力和鲁棒性的 DREAM (Differential Evolution Adaptive Metropolis) 算法。

收稿日期: 2014-01-06 修回日期: 2014-05-09 网络出版时间: 2014-03-20
网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/detail/13.1334.TV.20150320.1625.002.html>
基金项目: 国家自然科学基金(50809058)
作者简介: 曹飞凤(1983-), 女, 浙江宁波人, 高级工程师, 博士, 主要从事水文与水资源方面研究。E-mail: caoifeifeng@gnail.com

降雨径流模型参数优选问题带有非线性、多维、不连续、非凸性及带噪声等特征,传统的进化算法在求解模型参数解的过程中常常遭遇“早熟收敛”问题^[9]。本文尝试将DREAM算法应用于嘉陵江流域降雨-径流模型的参数优选研究,以探讨该算法在推求模型参数后验概率分布时的搜索性能。

1 DREAM 算法基本原理

1.1 基本差分进化算法

DE算法首先要进行初始化操作,随机产生一个初始种群;然后在整个搜索寻优过程中,保持种群规模不变,对种群中的个体进行变异、交叉和竞争选择操作,最终得到最优解^[1]。其中,变异操作见式(1);交叉操作见式(2),它是为了保证群体的多样性,针对原始个体的每一个分量,产生位于区间 $[0, 1]$ 中的随机数,再根据随机数与交叉概率因子CR的大小关系确定是否用 $v_{i,j}^{G+1}$ 代替 $u_{i,j}^{G+1}$;竞争选择操作采用贪婪搜索方法进行,如果新个体的适应度优于原始个体,则替换原始个体,否则保留原个体。

$$V_{i,j}^{G+1} = x_{i,j}^G + F(x_{i,2}^G - x_{i,3}^G) \quad (1)$$

$$u_{i,j}^{G+1} = \begin{cases} v_{i,j}^{G+1} & \text{rand}(0, 1) \leq CR, \quad j = \text{rand}(D) \\ x_{i,j}^G & \text{其他} \end{cases} \quad (2)$$

式中: $x_{i,1}^G, x_{i,2}^G, x_{i,3}^G$ 为随机选取的互不相同的三个个体; F 为位于区间 $[0, 2]$ 的缩放因子,控制着差分矢量 $(x_{i,2}^G - x_{i,3}^G)$ 的幅值。

1.2 DREAM 算法原理

DREAM算法结合了差分进化算法和自适应Metropolis算法的优点,将DE算法融入到马尔可夫链,并按照推荐分布来获取样本。差分算法采用如式(3)所示的变异操作,以确保马尔可夫链的各态遍历性。Vrugt等^[10]使用多元正态分布函数和双峰分布函数进行了验证计算,结果表明DREAM算法融合了自适应差分算法的优点,可确保马尔可夫链收敛于高概率后验分布区,减少陷入局部最优区域的可能性,因此可大大提高参数后验概率分布的搜索效率和精度。

$$v^i = \theta^i + \gamma(\delta) \left(\sum_{j=1}^{\delta} \theta^{r(i)} - \sum_{n=1}^{\delta} \theta^{r(n)} \right) + \varepsilon \quad (3)$$

式中: $r(j), r(n) \in \{1, \dots, N\}, r(j) \neq r(n) \neq i$; δ 是用于产生候补样本的对数(number of pairs); ε 由具有很小方差的对称分布 $N_d(0, b)$ 产生; γ 为跳跃率依赖于 δ ,建议 $\gamma = 2.38 / \sqrt{2\delta t}$ ^[10]。

1.3 DREAM 算法实现

DREAM算法的基本框架与进化算法十分相似,主要区别在于采用了不一样的选择策略。DREAM算法能同时运行几个具有不同搜索起点的平行序列且在搜索的过程中能自适应地调整搜索步长和方向,能有效搜索到多个全局最优区域。DREAM算法能确保群体的多样性,随进化过程的进行而不断更新最优个体,最终加速算法找到全局最优解。该算法的计算步骤如下。

步骤1:产生样本并计算后验概率密度。确定模型参数个数 n ,在可行域 $\Theta \subset R^n$ 内,根据先验分布随机抽取 N 个样本,由公式(4)计算各样本的后验概率密度 $\{p(\theta^{(1)} | y), p(\theta^{(2)} | y), \dots, p(\theta^{(N)} | y)\}$;假设残差 $e_i(\theta | \hat{y}) = y_i(\theta) - \hat{y}_i$ 相互独立并服从高斯分布。

$$p(\theta^{(i)} | y) = \alpha \cdot p(\theta) \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \cdot \exp \left[-\frac{(y_i(\theta) - \hat{y}_i)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (4)$$

步骤2:实施变异操作。根据公式(3)对第 i 代的每一个个体实施变异操作,得到与其对应的变异个体 v^i 。

步骤3:实施交叉操作。根据公式(5)判断是否取代新样本。如果 $U \leq 1 - CR$,用 θ_j^i 替换 v_j^i ,反之,不替换。 U 是根据0-1均匀分布产生的随机数;定义交叉概率 $CR \in [0, 1]$,并令 $d_{off} = d$ 。

$$v_j^i = \begin{cases} \theta_j^i & U \leq 1 - CR, D_{off} = d_{off} - 1 \\ v_j^i & \text{其他} \end{cases} \quad (5)$$

步骤4:根据式(6)计算接受概率。

$$\alpha(\theta^{(i)}, v^{(i)}) = \begin{cases} \min \left[\left(\frac{p(v^{(i)} | y)}{p(\theta^{(i)} | y)} \right), 1 \right] & p(\theta^{(i)} | y) > 0 \\ 1 & p(\theta^{(i)} | y) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

步骤5:判断是否接收新样本。如果新样本被接收,那么 $\theta^i = v^i$;反之,不接收新样本并保持平行序列的当前点位置,并再次进化平行序列。

步骤6:判断收敛性。如果 $\sqrt{SR} \leq 1.2$,则计算结束,否则,继续进化平行序列。

2 应用实例

2.1 模型输入

选取嘉陵江北碛站以上流域作为研究区域,该流域面积为156 142 km²,多年平均降雨量为1 098 mm。选取2000年-2004年周时段平均流量数据用于模型率定,2005年-2007年的数据用于模型验证。模型输入为周时段的面雨量和气温。为了减轻初始条件对模型计算的影响,时间序列数据的前20%不用于模型率定过程。

2.2 模型选取

产流部分采用Evans和Jakeman^[11]提出的流域湿度亏损模型(Catchment Moisture Deficit Loss Function,简称CMD模型);汇流部分采用个平行线性水库模型进行计算^[11]。模型参数主要包括5个产流模型参数($c1, c2, c3, c4$ 及 in_cmd)和5个汇流模型参数($k1, k2, k3, a$ 及 b)。表1给出了模型中10个参数的先验取值范围。模型的实现基于RRMT(Rainfall Runoff Modelling Toolbox)^[12]降雨径流模型工具包。

表1 降雨径流概念模型参数取值及其物理意义

Tab. 1 Ranges and physical meaning of the conceptual rainfall runoff model parameters

模型参数	取值范围	物理意义
$c1$	0~1	换算系数
$c2$	0~0.1	换算系数
$c3$	0~10	土壤最大蓄水量
$c4$	1~100	土壤最大缺水量
in_cmd	0~1	初始土壤缺水量
$k1$	1~15	第一个线性水库的滞留时间
$k2$	15~200	第二个线性水库的滞留时间
$k3$	15~200	第三个线性水库的滞留时间
a	0~1	第一个线性水库蓄水量占总净雨量的比例
b	0~1	第二个线性水库蓄水量占总净雨量的比例

2.3 算法的参数设置

初始样本数选取 3 000 个, 马尔科夫链 $N = d = 10, b = 0.05$, 设置链长 $L = 30$, 模型计算次数为 20 000 次。算法采用定量收敛判断指标 $\sqrt{SR}^{[13]}$ 和 NSE 目标函数值。 \sqrt{SR} 指标的计算见式(7), 当采样序列的比例缩小系数 \sqrt{SR} 接近 1.2 时, 判断算法收敛于稳定的后验分布。目标函数采用式(8)所示的 Nash Sutcliffe 法^[14]。

$$\sqrt{SR} = \sqrt{\frac{g-1}{g} + \frac{q+1}{q} \frac{B}{W}} \quad (7)$$

$$NSE^* = \frac{\sum_{i=1}^N (\alpha_i - c_i(\theta))^2}{\sum_{i=1}^N (\alpha_i - \bar{\alpha})^2} \quad (8)$$

式中: g 为每条马尔科夫链的迭代次数; B 为 q 条马尔科夫链平均值的方差; W 为 q 条马尔科夫链方差的平均值; α_i 为实测流量; $c_i(\theta)$ 为计算流量; $\bar{\alpha}$ 为实测平均流量; N 为实测值的个数。

2.4 结果与讨论

为了系统探讨算法的各项性能指标, 选取由 DREAM 算法取样获得的对应 NSE^* 小于临界值 1 的模型参数组, 每个参数的取值范围被等分成 20 个直方图, 每个直方图所对应的概率根据式(4)求得。据此, 由 DREAM 算法抽样得到的嘉陵江流域 cmd_3pars 降雨-径流模型各参数边缘分布情况见图 1, 横坐标刻度值代表参数的取值, 纵坐标的刻度值表示该参数值落在对应刻度值之间的概率。

由图 1 可知, 参数 $c1, c4, k1$ 的边缘后验概率分布呈正态分布, 而参数 $c2, c3, in.cmd, k2, k3, a$ 及 b 呈不规则分布, 它们的最高后验概率都是位于参数边界取值的最大或最小值。嘉陵江流域模型参数 $in.cmd$ 和 b 后验分布较为平坦, 反应出不同的模型参数组合可以使模型得到相同的模型输出值, 即存在“异参同效”现象。究其原因, 模型参数冗余及相关性、模型结构误差以及输入输出误差等因素可能是造成上述现象的原因。

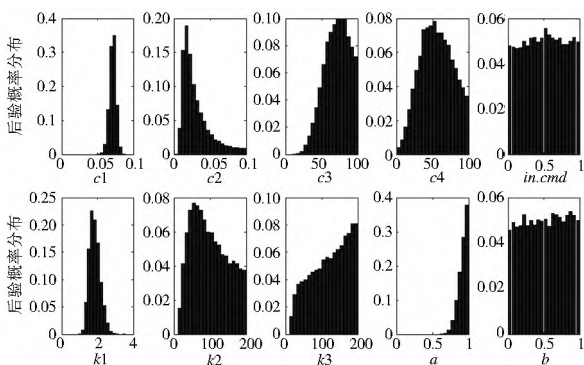


图 1 嘉陵江流域 cmd_3par 模型各参数边缘后验概率分布

Fig. 1 Marginal posterior probability distribution of the cmd_3par model parameters in the Jialing River Basin

本文对比例缩小系数小于 1.2 的样本进行了统计分析, 包括参数后验分布均值、最大值、最小值、DREAM 算法对应的后验概率分布、SCE-UA 算法得到的最优解、相对误差(表 2), 发现均值和 DREAM 算法获得的参数最大后验概率对应参数值较为接近, 说明参数分布是朝着高概率区进行收敛;

最大值和最小值基本和参数取值范围相一致, 说明了马尔科夫链具有各态遍历性。

一般认为 DREAM 算法的对应最优解应该位于最高后验概率分布区内, 因此对比分析了 DREAM 算法获得的参数最大后验概率对应参数值和 SCE-UA 算法获取的最佳参数值, 发现由 SCE-UA 算法搜索到的参数 $c1, c3, c4, k1$ 及 a 最优值基本落在由 DREAM 算法推求得到的各对应参数概率最大的区域。由此可见, SCE-UA 算法和 DREAM 算法获得的最佳参数值基本相一致, 但 DREAM 算法可以给出模型各参数的后验分布。参数本身的辨识性不强是造成 DREAM 列和 SCE-UA 列个别参数相对误差较大的主要原因。

表 2 DREAM 算法的参数后验分布统计情况

Tab. 2 Statistic analysis of parameter posterior distribution

参数	取值范围	均值	最大值	最小值	DREAM	SCE	相对误差(%)
$c1$	0~1	0.712	0.998	0.003	0.733	0.701	4.37
$c2$	0~0.1	0.030	0.099	0.002	0.017	0.023	35.29
$c3$	0~10	7.070	9.999	0.010	8.24	7.87	4.49
$c4$	1~100	55.485	99.998	1.003	52.49	48.76	7.11
$in.cmd$	0~1	0.505	0.999	0.002	0.525	0.88	67.62
$k1$	1~15	1.847	14.995	1.003	1.688	1.81	7.23
$k2$	15~200	99.672	199.998	15.004	54.99	63.72	15.88
$k3$	15~200	122.598	199.997	15.007	184.99	156.8	15.24
a	0~1	0.917	0.996	0.003	0.970	0.921	5.05
b	0~1	0.047	0.998	0.001	0.040	0.030	25

注: DREAM 列代表由 DREAM 算法最大后验概率对应的参数取值, SCE-UA 列代表由 SCE-UA 算法获取的最佳参数取值。相对误差(%) 列分别代表 DREAM 列与 SCE 列的相对误差。

3 结语

DREAM 算法融合了自适应 Metropolis 方法的优点, 对传统差分进化算法的变异算子进行了改进, 很好地解决 MCMC 算法中搜索步长的恰当取值以及搜索方向的准确定位问题, 在不破坏原有算法维护群体多样性的前提下, 可有效克服“早熟收敛”问题。以嘉陵江流域降雨-径流模型参数优选研究为例, 分析了改进算法在推求模型参数后验分布的搜索性能和效率, 发现 DREAM 算法能有效确保参数推荐分布朝着目标后验概率分布演化, 参数推荐分布随着计算过程自动更新, 整体计算效率和解的精度要明显优于传统的差分进化算法, 适用于参数先验信息较少的复杂水文模型参数后验分布的推算。

参考文献(References):

[1] Storn R, Price K. Differential evolution: a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces [R]. International Computer Science Institute, 1995.

[2] 刘波, 王凌, 金以慧. 差分进化算法研究进展[J]. 控制与决策, 2007, 22(7): 721-729. (LIU Bo, WANG Ling, JIN Yihui. Advances in differential evolution[J]. Control and Decision: 2007, 46(3): 721-729. (in Chinese))

[3] 孙成富, 张亚红, 陈剑洪, 等. 基于高斯扰动和免疫搜索策略的改进差分进化算法[J]. 南京大学学报: 自然科学, 2013, 49(2):

- 202-209. (SUN Cheng-fu, ZHANG Ya-hong, CHEN Jiarr hong, et al. Improved differential evolution based on Gaussian disturbance and immune search strategy[J]. Journal of Nanjing University: Nat Sci Ed: 2013, 49(2): 202-209. (in Chinese))
- [4] Kaelo P, Ali M M. A numerical study of some modified differential evolution algorithms[J]. European Journal of Operational Research, 2006, 169(3): 1176-1184.
- [5] Liu Junhong, Lampinen J. A Fuzzy Adaptive Differential Evolution Algorithm[J]. Soft Computing: A Fusion of Foundations, Methodologies and Applications, 2005, 9(6): 48-462.
- [6] Ter Braak C J F, Vrugt J A. Differential Evolution Markov Chain with snooker updater and fewer chains[J]. Statistics and Computing. 2008, 18(4): 435-446.
- [7] Vrugt J A, C J F ter Braak, C G H Diks, et al. Accelerating Markov chain Monte Carlo simulation by differential evolution with self adaptive randomized subspace sampling[J]. Int. J. Nonlinear Sci. Numer. Simul. .
- [8] 曹飞凤. 基于MCMC方法的概念性流域水文模型参数优选及不确定性研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2010. (CAO Feifeng. Study on parameter optimization and uncertainty analysis for conceptual hydrological model based on MCMC method[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2010. (in Chinese))
- [9] Vrugt J A, C F F ter Braak, H V Gupta, et al. Equifinality of formal(DREAM) and informal(GLUE) Bayesian approaches in hydrologic modeling[J]. Stochastic Environ. Res. Risk Assess. , 2008.
- [10] Evans J P, Jakeman A J. Development of a simple, Catchment scale, rainfall-evapotranspiration-runoff model[J]. Environmental Modelling & Software. 1998, 13: 385-393.
- [11] Wagener T, Lees M J. Rainfall Runoff Modelling Toolbox user manual[J]. Department of Civil and Environmental Engineering, Imperial College London, UK. 2001.
- [12] Gelman A, Rubin D B. Inference from iterative simulation using multiple sequences[J]. Statistic Science, 1992(7): 457-472.
- [13] Nash J E, Sutcliffe J V. River flow and forecasting through conceptual models 1: A discussion of principles[J]. Journal of Hydrology, 1970(10): 282-290.

(上接第201页)

- [9] 张峰, 雷晓辉, 蒋云钟, 等. 珠江上游流域枯水期降水演变特征分析[J]. 水电能源科学, 2012(2): 9-12. (ZHANG Feng, LEI Xiaohui, JIANG Yunzhong, et al. Analysis of Precipitation Variation of Low Water Season in Upstream of Pearl River Basin[J]. Water Resources and Power, 2012(2): 9-12. (in Chinese))
- [10] 李志, 刘文兆, 郑粉莉. 1965年至2005年泾河流域极端降水事件的变化趋势分析[J]. 资源科学, 2010(8): 1527-1532. (LI Zhi, LIU Wenzhao, ZHENG Fenli. Analyzing Variation Trends in Extreme Precipitation Events in the Jing River Watershed during 1965-2005[J]. Resources Science, 2010(8): 1527-1532. (in Chinese))
- [11] 邱海军, 曹明明, 曾彬. 基于小波分析的西安降水时间序列的变化特征[J]. 中国农业气象, 2011(32): 23-27. (QIU Haijun, CAO Mingming, ZENG Bin. Wavelet Analysis on the Temporal Series of Precipitation in Xi'an[J]. Chinese Journal of Agrometeorology, 2011(32): 23-27. (in Chinese))
- [12] 李淼, 夏军, 陈社明, 等. 北京地区近300年降水变化的小波分析[J]. 自然资源学报, 2011(6): 1001-1011. (LI Miao, XIA Jun, CHEN Sheming, et al. Journal of Natural Resources, 2011(6): 1001-1011. (in Chinese))
- [13] 杨树滩, 张文新, 贾锁宝. 略论江苏沿海地区水资源配置[J]. 江苏水利, 2011(5): 8-11. (YANG Shutan, ZHANG Weixin, JIA Suobao. Study on Jiangsu Coastal Water Resources Allocation[J]. Jiangsu Water Resource, 2011(5): 8-11 (in Chinese))
- [14] 郭彦, 侯素珍, 林秀芝. 近51年西柳沟流域水沙变化特征分析[J]. 干旱区资源与环境, 2014(10): 176-183. (GUO Yan, HOU Suzhen, LIN Xiuzhi. Variation Characteristics of Runoff and Sediment in Xiliugou River basin for Recent 51 Years[J]. Journal of Arid Land Resources and Environment, 2014(10): 176-183. (in Chinese))
- [15] 余世鹏, 杨劲松, 王相平, 等. 滨海滩涂地区降水变化的多尺度周期特征分析与趋势预测[J]. 中国农业气象, 2013(4): 377-383. (YU Shipeng, YANG Jingsong, WANG Xiangping, et al. Multiscale Periodic Analysis and Trend Prediction for Precipitation Dynamics in Coastal Tidal Flat Region[J]. Chinese Journal of Agrometeorology, 2013(4): 377-383. (in Chinese))