Σημειώσεις στα πλαίσια του μαθήματος:

Βελτιστοποίηση συστημάτων υδατικών πόρων – Υδροπληροφορική

Βαθμονόμηση μαθηματικών μοντέλων – Το «αντίστροφο» πρόβλημα της υδρολογίας

Ανδρέας Ευστρατιάδης & Χρήστος Μακρόπουλος
Τομέας Υδατικών Πόρων και Περιβάλλοντος
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο, Μάρτιος 2011

Μοντέλα, μετρήσεις, παράμετροι: Εισαγωγικό παράδειγμα (1)

- Φυσικό φαινόμενο: χωροχρονική μεταβολή στάθμης και παροχής υδατορεύματος κατά τη διάρκεια πλημμύρας, οπότε ισχύουν οι εξής πραγματικές συνθήκες:
  - ακανόνιστη μεταβολή γεωμετρίας και τραχύτητας διατομής
  - μη ευθύγραμμη οριζοντιογραφία (π.χ. μαιανδρισμοί)·
  - πλευρικές επιφανειακές εισροές, εισροές από υποδερμική ροή, εισροές λόγω εκφόρτισης υδροφορέα, απώλειες λόγω διήθησης·
  - μεταφορά φερτών, επικαθήσεις.
- Απλοποίηση προβλήματος, με τις ακόλουθες υποθέσεις:
  - ισχύουν οι εξισώσεις συνέχειας (μηδενικές εισροές και εκροές ενδιάμεσα) και διατήρησης της ποσότητας κίνησης·
  - σχετικά ήπια κατά μήκος κλίση, ώστε η ροή να μην είναι υπερκρίσιμη·
  - σταθερά γεωμετρικά χαρακτηριστικά διατομών, πρακτικά ευθύγραμμη ροή·
  - χρονικά αμετάβλητα υδραυλικά χαρακτηριστικά αγωγού, ώστε να μπορούν να εφαρμοστούν οι συντελεστές τριβών της μόνιμης ομοιόμορφης ροής·
  - αγνοούνται οι απώλειες λόγω διαστολής και συστολής των διατομών.
- Με τις παραπάνω υποθέσεις, το φαινόμενο περιγράφεται από τις **εξισώσεις St. Venant** (σύστημα μη γραμμικών διαφορικών εξισώσεων, χωρίς αναλυτική λύση).

Μοντέλα, μετρήσεις, παράμετροι: Εισαγωγικό παράδειγμα (2)

- Περαιτέρω απλοποίηση: διόδευση πλημμυρικού κύματος με το **μοντέλο διάχυσης Muskingum**, για το οποίο εισάγονται οι επιπλέον παραδοχές:
  - ελέγχεται η παροχή μόνο σε δύο σημεία, ανάντη και κατάντη, στα οποία η εξίσωση συνέχειας διατυπώνεται ως εξίσωση διαφορών:

$$\Delta S / \Delta t = I(t) - O(t)$$

  - η μεταβολή της γραμμής ενέργειας οφείλεται στις δυνάμεις βαρύτητας και στη διαφορά των δυνάμεων πίεσης, λόγω μεταβολής της στάθμης (με τον τρόπο αυτό αγνοούνται διάφοροι όροι των εξισώσεων St. Venant)
  - η αποθήκευση νερού στο ενδιάμεσο τμήμα περιλαμβάνει δύο συνιστώσες (πρισματική, σφηνοειδής) και δίνεται από τη σχέση:

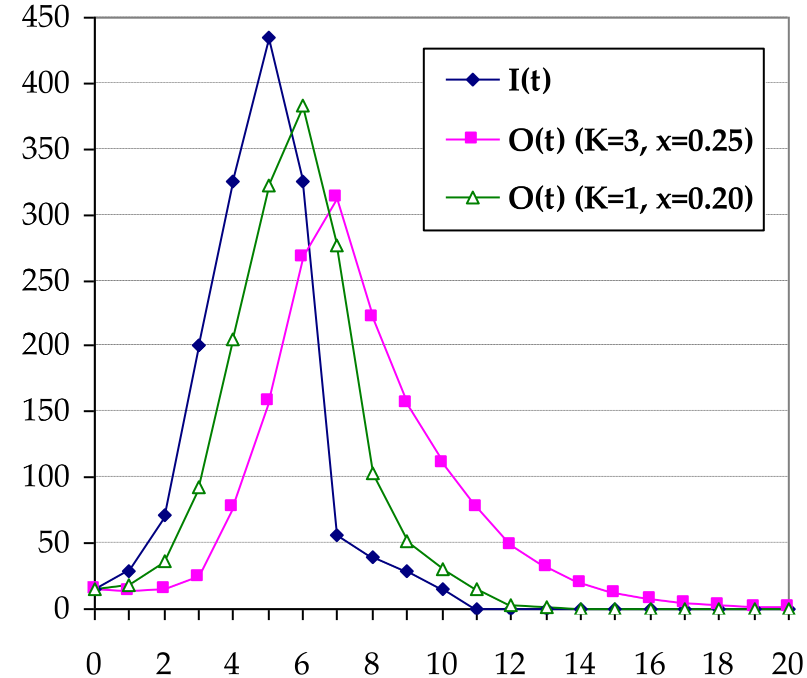
$$S(t) = K\,[\theta\, I(t) + (1 - \theta)\, O(t)]$$

- Η παράμετρος K εκφράζει τη χρονική υστέρηση μεταξύ των αιχμών των δύο υδρογραφημάτων, ενώ η παράμετρος θ, με $0 \le \theta \le 0.5$, εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά του αγωγού (τυπική τιμή $\theta = 0.20$ για υδατορεύματα)
- Για γνωστό υδρογράφημα εισόδου $I(t)$ και γνωστές τιμές παραμέτρων K και θ, το υδρογράφημα εξόδου υπολογίζεται από μια αναδρομική σχέση της μορφής:

$$O(t) = c_0\, I(t) + c_1\, I(t-1) + c_2\, O(t-1), \text{ όπου } c_0, c_1, c_2 = c(K, \theta, \Delta t)$$

Μοντέλα, μετρήσεις, παράμετροι: Εισαγωγικό παράδειγμα (3)

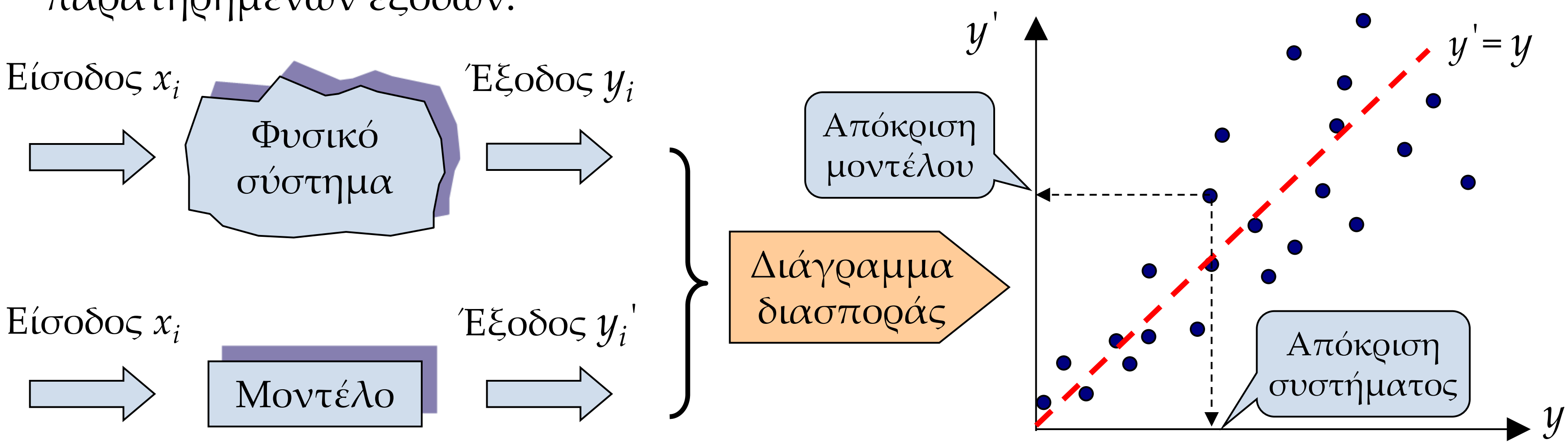
- Ευθύ πρόβλημα:
  - Δίνεται το υδρογράφημα εισόδου $I(t)$ (παρατηρημένο ή «συνθετικό»)
  - Δίνονται «εύλογες» τιμές στις παραμέτρους K, θ
  - Ζητείται το υδρογράφημα εξόδου $O(t)$
- Αντίστροφο πρόβλημα:
  - Δίνονται τα υδρογραφήματα εισόδου $I(t)$ και εξόδου $O(t)$ (παρατηρημένα)
  - Ζητούνται οι τιμές των K, θ



- Παρατηρήσεις:
  - Ένα εξαιρετικά σύνθετο υδραυλικό φαινόμενο, με διαδοχικές απλουστεύσεις, περιγράφεται από ένα εννοιολογικό μοντέλο μόλις δύο παραμέτρων.
  - Μπορούν να οριστούν εκ των προτέρων αντιπροσωπευτικές τιμές των K, θ;
  - Αν υπάρχουν μετρήσεις παροχών εξόδου, πώς μπορούν να αξιοποιηθούν για τον εντοπισμό των πλέον πρόσφορων τιμών των παραμέτρων;

Εκτίμηση παραμέτρων μαθηματικών μοντέλων μέσω βαθμονόμησης (calibration)

- **Γενικός ορισμός βαθμονόμησης**: Συστηματική διαδικασία εκτίμησης των τιμών των παραμέτρων ενός μοντέλου, με τρόπο ώστε οι *έξοδοι* (outputs) ή *αποκρίσεις* (responses) του μοντέλου y_i', ως προς ένα σύνολο παρατηρημένων *εισόδων* (inputs) x_i, να προσαρμόζονται όσο το δυνατό καλύτερα σε ένα αντίστοιχο σύνολο πραγματικών (π.χ. παρατηρημένων) αποκρίσεων y_i του φυσικού ή μαθηματικού συστήματος που αναπαριστά το μοντέλο.
- Η απόκλιση $e_i = y_i' - y_i$ καλείται *σφάλμα* (error) ή *υπόλοιπο* (residual) του μοντέλου.
- Το άθροισμα των σφαλμάτων, Σe_i, υποδηλώνει τη *μεροληψία* (bias) του μοντέλου – αν το εν λόγω άθροισμα είναι μηδέν, το μοντέλο αναπαράγει τη μέση τιμή των παρατηρημένων εξόδων.



Η βαθμονόμηση παραμέτρων ως πρόβλημα βελτιστοποίησης (αυτόματη βαθμονόμηση)

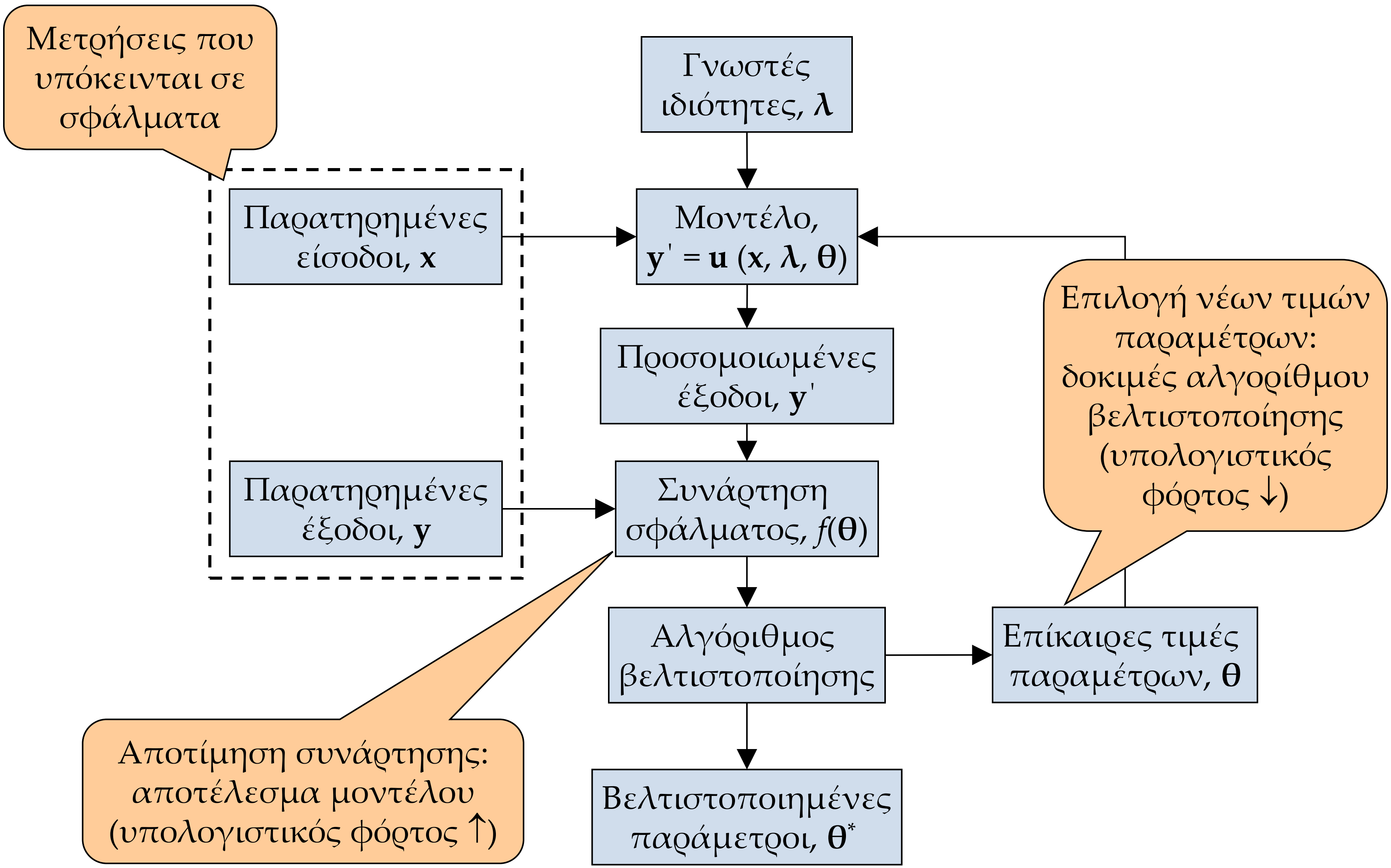
1. Επιλέγεται το κατάλληλο μαθηματικό μοντέλο, για το οποίο διαμορφώνεται μια *ρεαλιστική παραμετροποίηση*·
2. Επιλέγεται ένα *αντιπροσωπευτικό* δείγμα παρατηρημένων αποκρίσεων του συστήματος **y** ως προς ένα δείγμα μεταβλητών εισόδου **x**, το οποίο είναι κοινό για το σύστημα και το μοντέλο·
3. Μεταξύ των ελεύθερων μεταβλητών του μοντέλου, σε ορισμένες δίνονται εκ των προτέρων τιμές (διάνυσμα γνωστών ιδιοτήτων, $\boldsymbol{\lambda}$), ενώ οι υπόλοιπες $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \ldots, \theta_n)$ είναι άγνωστες και αντιμετωπίζονται ως *μεταβλητές ελέγχου* (παράμετροι)·
4. Διατυπώνεται ένα *καθολικό μέτρο σφάλματος* $f(\mathbf{e})$, που είναι *στατιστικά συνεπές* με τα χαρακτηριστικά των υπολοίπων του μοντέλου $\mathbf{e} = (e_1, \ldots, e_N)$, ήτοι:

$$f(\mathbf{e}) = f(\mathbf{y}' - \mathbf{y}) = f[\mathbf{y}'(\boldsymbol{\theta}) - \mathbf{y}]$$

5. Ορίζεται ο εφικτός χώρος Θ, εισάγοντας άνω και κάτω όρια των παραμέτρων (ρητοί περιορισμοί, $\boldsymbol{\theta}^{\min} \le \boldsymbol{\theta} \le \boldsymbol{\theta}^{\max}$), καθώς και περιορισμούς που σχετίζονται με την αναπαραγωγή της στατιστικής δομής των σφαλμάτων·
6. Επιλέγεται κατάλληλος αλγόριθμος *μη γραμμικής βελτιστοποίησης* για την επίλυση του προβλήματος:

$$\text{minimize } f(\mathbf{e}) = f(\boldsymbol{\theta}),\ \boldsymbol{\theta} \in \Theta$$

Διάγραμμα ροής αυτόματης βαθμονόμησης



Ειδική περίπτωση: μοντέλα παλινδρόμησης

- Απλή γραμμική παλινδρόμηση: $y' = a\,x + b$
- Υποθέσεις ως προς τη *στατιστική δομή* των σφαλμάτων (= λευκός θόρυβος):
  - Μηδενική μεροληψία, $\mu_\varepsilon = 0$ (αναπαράγεται η μέση τιμή των παρατηρήσεων)
  - Σταθερή διασπορά, σ_ε^2 (ομοσκεδαστικά σφάλματα)
  - Στατιστική ανεξαρτησία, ήτοι $\mathrm{Cov}(e_i, e_j) = 0$ για κάθε $i, j = 1, \ldots, n$
- Συνάρτηση σφάλματος: αθροιστικό τετραγωνικό σφάλμα

$$f(\mathbf{e}) = \sum e_i^2$$

- Βελτιστοποίηση παραμέτρων – μέθοδος «ελαχίστων τετραγώνων»:

$$\text{minimize} \quad f(a, b) = \sum e_i^2 = \sum (y_i' - y_i)^2 = \sum (a\,x_i + b - y_i)^2$$

$$\text{subject to:} \quad \mu_\varepsilon = \sum e_i = \sum (a\,x_i + b - y_i) = 0$$

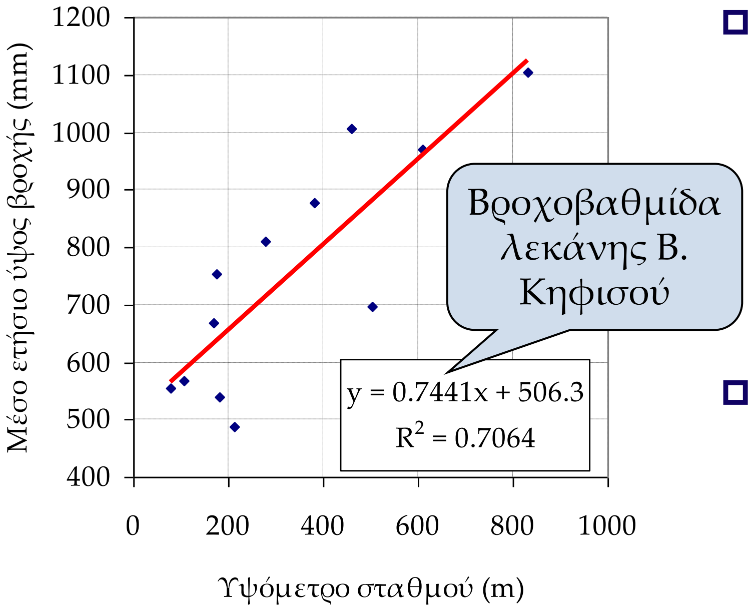
- Το πρόβλημα επιλύεται αναλυτικά (δεσμευμένα ακρότατα, Kuhn-Tucker):

$$a^* = \sum (x_i - \mu_\mathrm{x})\,(y_i - \mu_\mathrm{y}) \,/\, \sum (x_i - \mu_\mathrm{x})^2$$

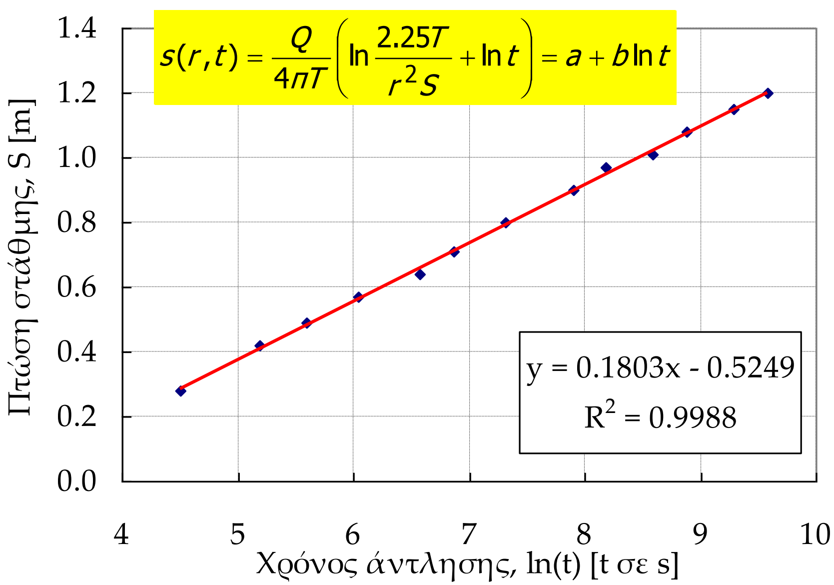
$$b^* = \sum y_i \,/\, n - a^* \sum x_i \,/\, n = \mu_\mathrm{y} - a^*\,\mu_\mathrm{x}$$

- Αναλυτικές σχέσεις προκύπτουν μόνο για στοιχειώδεις δομές, όπως μοντέλα δύναμης, εκθετικά, λογαριθμικά, πολυωνυμικά, πολυμεταβλητά γραμμικά, κτλ.
- Στη γενική περίπτωση, απαιτείται η επίλυση ενός προβλήματος *μη γραμμικής βελτιστοποίησης*, όπου η συνάρτηση σφάλματος αποτιμάται μέσω προσομοίωσης.

Εφαρμογές σε τυπικά υδρολογικά προβλήματα



- Συμπλήρωση ελλιπουσών τιμών σε υδρολογικά δείγματα, με βάση μετρήσεις της ίδιας μεταβλητής σε έναν ή περισσότερους γειτονικούς σταθμούς βάσης, με τους οποίους υπάρχει ικανοποιητική συσχέτιση (απλή ή πολλαπλή γραμμική παλινδρόμηση)·
- Εκτίμηση βροχοβαθμίδας υδρολογικής λεκάνης (υπόθεση γραμμικής αύξησης του ύψους βροχής συναρτήσει του υψομέτρου)·
- Κατασκευή καμπυλών στάθμης-παροχής από δείγματα υδρομετρήσεων·
- Εκτίμηση παραμέτρων μοντέλων διήθησης (π.χ. Horton, Kostiakov)·
- Εκτίμηση παραμέτρων υδροφορέα (αποθηκευτικότητα, ειδική απόδοση) από μετρήσεις πτώσης στάθμης-χρόνου στη διάρκεια δοκιμαστικής άντλησης.



Κριτήρια προσαρμογής γραμμικών μοντέλων

- Η καταλληλότητα του μοντέλου γραμμικής παλινδρόμησης ελέγχεται μέσω του *συντελεστή γραμμικής συσχέτισης* (correlation coefficient):

$$r_{xy} = \Sigma(x_i - \mu_x)\,(y_i - \mu_y) \,/\, [\Sigma(x_i - \mu_x)^2\, \Sigma(y_i - \mu_y)^2]^{1/2}$$

- Ο συντελεστής r λαμβάνει τιμές από -1 έως 1. Αρνητικές τιμές υποδηλώνουν αντίστροφη συσχέτιση μεταξύ των x και y (το ένα μέγεθος μειώνεται όταν αυξάνει το άλλο), ενώ η μηδενική τιμή υποδηλώνει ότι δεν μπορεί να διατυπωθεί μια γραμμική σχέση μεταξύ των x και y.
- Αντί του συντελεστή συσχέτισης, συχνά χρησιμοποιείται ως κριτήριο καλής προσαρμογής ο *συντελεστής προσδιορισμού* (determination coefficient) r^2, που λαμβάνει τιμές από 0 (καμία προσαρμογή) έως 1 (τέλεια προσαρμογή).
- Η ελαχιστοποίηση του ολικού τετραγωνικού σφάλματος εξασφαλίζει ότι ο συντελεστής προσδιορισμού μεταξύ των x και y ισούται με τον συντελεστή προσδιορισμού μεταξύ των y' και y, καθώς $|r_{xy}| = r_{y'y}$ (προφανώς $|r_{xy'}| = 1$).
- Η ισότητα δεν ισχύει σε παραλλαγές του μοντέλου παλινδρόμησης, όπως:
  - **Ομογενές μοντέλο**: $y' = a\,x$ (τίθεται $b = 0$, ώστε να εξασφαλίζεται η μη αρνητικότητα της μεταβλητής y)·
  - **Οργανική συσχέτιση**: αναπαράγεται η διασπορά των παρατηρήσεων σ_y^2 αλλά όχι η μέση τιμή μ_y.

Τυπικά κριτήρια καλής προσαρμογής μη γραμμικών μοντέλων

1. Μέσο τετραγωνικό σφάλμα:

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i')^2}$$

Αν, αντί του τετραγώνου, το σφάλμα υψωθεί σε μεγαλύτερη άρτια δύναμη, δίνεται έμφαση στην αναπαραγωγή των υψηλών τιμών των παρατηρήσεων

2. Αποτελεσματικότητα (efficiency):

$$\text{EFF} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(y_i - y_i')^2}{\sum_{i=1}^{n}(y_i - \mu_y)^2}$$

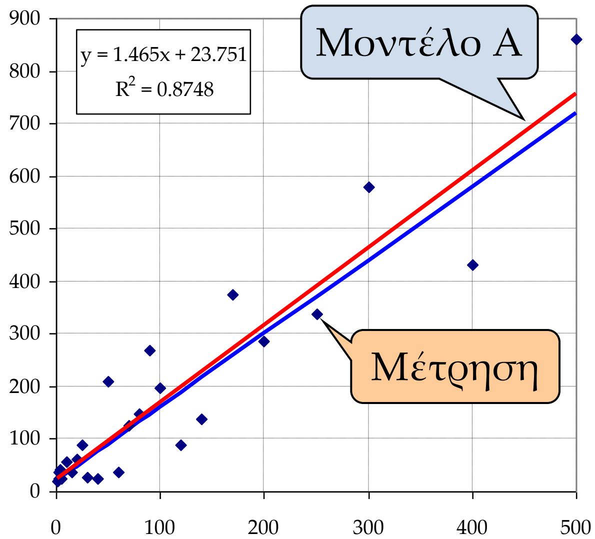
Συγκρίνει τη διασπορά του μοντέλου προς τη διασπορά των σφαλμάτων, λαμβάνοντας τιμές από $-\infty$ μέχρι 1 (τέλεια προσαρμογή)· η τιμή EFF = 0 υποδηλώνει ότι η μέση τιμή των παρατηρήσεων, ήτοι το στοιχειώδες μοντέλο $y_i = \mu_y$, αποτελεί εξίσου καλή εκτιμήτρια με το μη γραμμικό μοντέλο

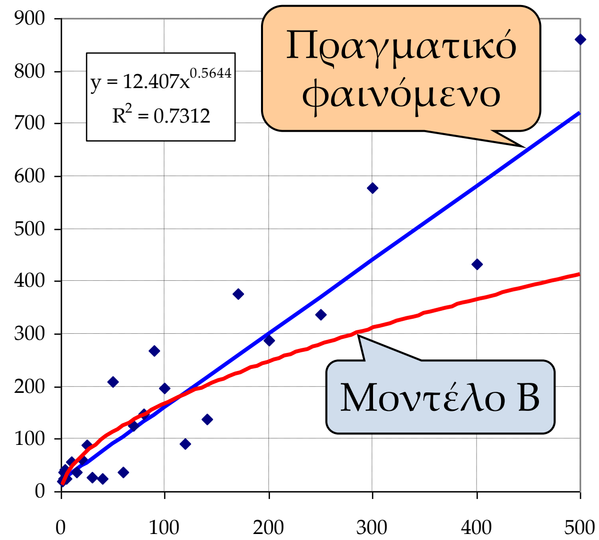
3. Μέσο σφάλμα ή μεροληψία:

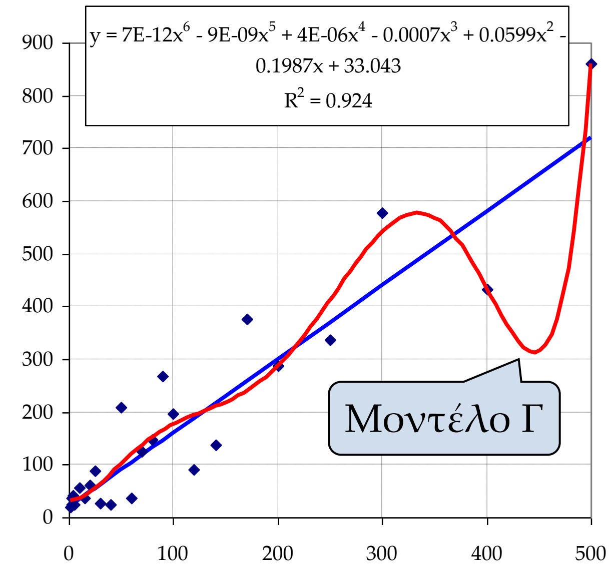
$$\text{BIAS} = \frac{\mu_y' - \mu_y}{\mu_y}$$

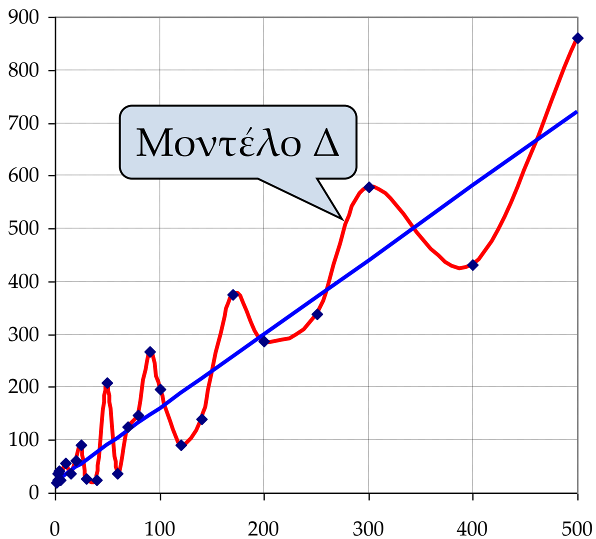
Εκφράζει την ποσοστιαία διαφορά της μέσης τιμής του μοντέλου σε σχέση με τη μέση τιμή των παρατηρήσεων (στη γραμμική παλινδρόμηση ισχύει εξ ορισμού BIAS = 0)

Ποιο μοντέλο; Πόσες παράμετροι;









«Πραγματικό» φαινόμενο: $y = 1.4x + 20$

Μετρήσεις: $y_m = y + w$, όπου w τυχαία διαταραχή από κανονική κατανομή $\mathcal{N}(0, \sigma)$, με διασπορά σ_y^2 ανάλογη του μετρούμενου μεγέθους y (σφάλμα μέτρησης)

Μοντέλο Α: γραμμικό, 2 παράμετροι, $r^2 = 0.875$

Μοντέλο Β: εκθετικό, 2 παράμετροι, $r^2 = 0.\ 731$

Μοντέλο Γ: πολυώνυμο 6ης τάξης, 7 παράμετροι, $r^2 = 0.924$

Μοντέλο Δ: μη γραμμικό μοντέλο «καρικατούρα», $n + 1$ παράμετροι για δείγμα n μετρήσεων, $r^2 = 1$

Η αρχή της φειδούς (principle of parsimony)

- Θεμελιώδης απαίτηση μαθηματικών και στατιστικών μοντέλων, σύμφωνα με την οποία ένα μοντέλο που βαθμονομείται με στατιστικές μεθόδους προσαρμογής οφείλει να έχει την απλούστερη δυνατή παραμετροποίηση.
- Ισοδύναμα πορίσματα:
  - Οι παράμετροι ενός μοντέλου πρέπει να είναι τόσες όσες μπορούν να υποστηρίξουν τα δεδομένα παρατηρήσεων, με βάση τα οποία γίνεται η βαθμονόμησή τους·
  - Η κατάλληλη δομή ενός μοντέλου είναι αυτή που επιτυγχάνει τη βέλτιστη (ή σχεδόν βέλτιστη) προσαρμογή με το ελάχιστο πλήθος παραμέτρων.
- **Υπο-παραμετροποίηση**: Υπερβολικά αδρομερής δομή μοντέλου, ανεπιτυχής αναπαράσταση (ή και απόκρυψη) ουσιωδών διεργασιών του συστήματος, εξαιτίας της εφαρμογής αδικαιολόγητα μικρού αριθμού παραμέτρων
  - Συστηματικά κακή προσαρμογή μοντέλου
- **Υπερ-παραμετροποίηση**: Υπερβολικά λεπτομερής δομή μοντέλου, με χρήση περισσότερων παραμέτρων από όσες επιβάλουν η πολυπλοκότητα του συστήματος και οι ανάγκες της μελέτης, και τις οποίες μπορούν να υποστηρίξουν τα διαθέσιμα δείγματα παρατηρήσεων
  - Παραπλανητικά καλή προσαρμογή μοντέλου (υπερπροσαρμογή, overfitting)

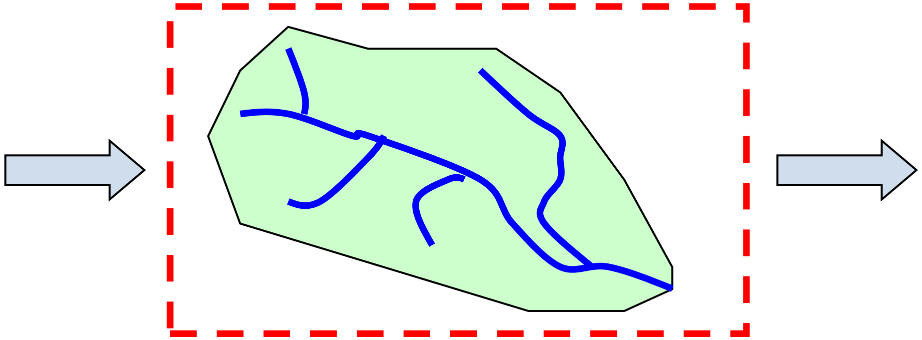
Υδρολογικά μοντέλα

- **Ορισμός**: Ως υδρολογικό μοντέλο νοείται ένα σύνολο μαθηματικών μετασχηματισμών που χρησιμοποιούν δεδομένα πεδίου και εύλογες υποθέσεις σχετικά με τις διεργασίες του υδρολογικού κύκλου και τις αλληλεπιδράσεις τους, με στόχο την ποσοτική εκτίμηση των μεταβλητών ενδιαφέροντος (π.χ. απορροή).
- Η γενική μαθηματική αναπαράσταση ενός υδρολογικού μοντέλου είναι:

  $$\mathbf{y}(t) = \mathbf{h}[\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}_0, \mathbf{s}_\mathrm{b}]$$

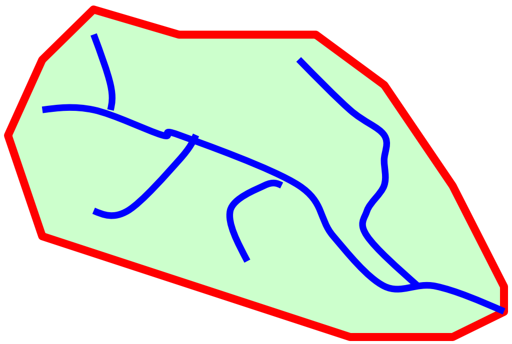
  όπου $\mathbf{x}(t)$ οι μεταβλητές εισόδου του μοντέλου (χρονοσειρές φόρτισης), $\mathbf{y}(t)$ οι μεταβλητές εξόδου (χρονοσειρές απόκρισης), $\boldsymbol{\lambda}$ τα μετρήσιμα μεγέθη του φυσικού συστήματος (π.χ. έκταση λεκάνης), $\boldsymbol{\theta}$ τα μη μετρήσιμα μεγέθη (παράμετροι), $\mathbf{s}_0$ οι τιμές των μεταβλητών στην αρχή της προσομοίωσης (αρχικές συνθήκες) και $\mathbf{s}_\mathrm{b}$ οι τιμές των μεταβλητών στα όρια του συστήματος (οριακές συνθήκες).
- Κατά κανόνα, τα υδρολογικά μοντέλα είναι διακριτού χρόνου ($t = 1, \ldots, N$).

Φορτίσεις, $\mathbf{x}(t)$: βροχή, δυνητική εξατμοδιαπνοή, απολήψεις κλπ.

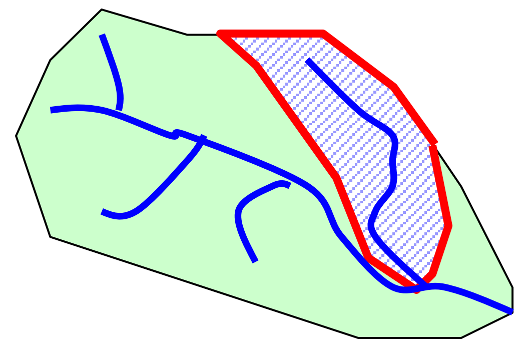


Αποκρίσεις, $\mathbf{y}(t)$: απορροή, πραγματική εξατμοδιαπνοή, εκφόρτιση υπόγειων νερών κλπ.

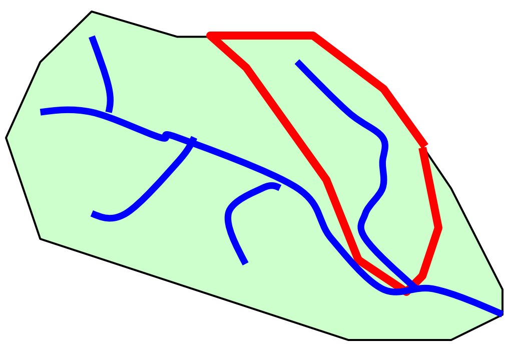
Σχηματοποίηση και παραμετροποίηση υδρολογικών μοντέλων



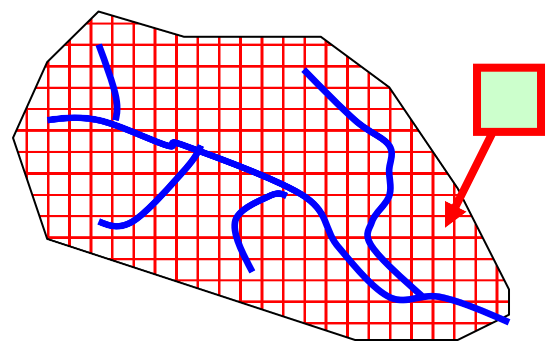
Αδιαμέριστα (lumped)



Ημι-κατανεμημένα (semi-distributed)



Ημι-αδιαμέριστα (semi-lumped)



Κατανεμημένα (distributed)

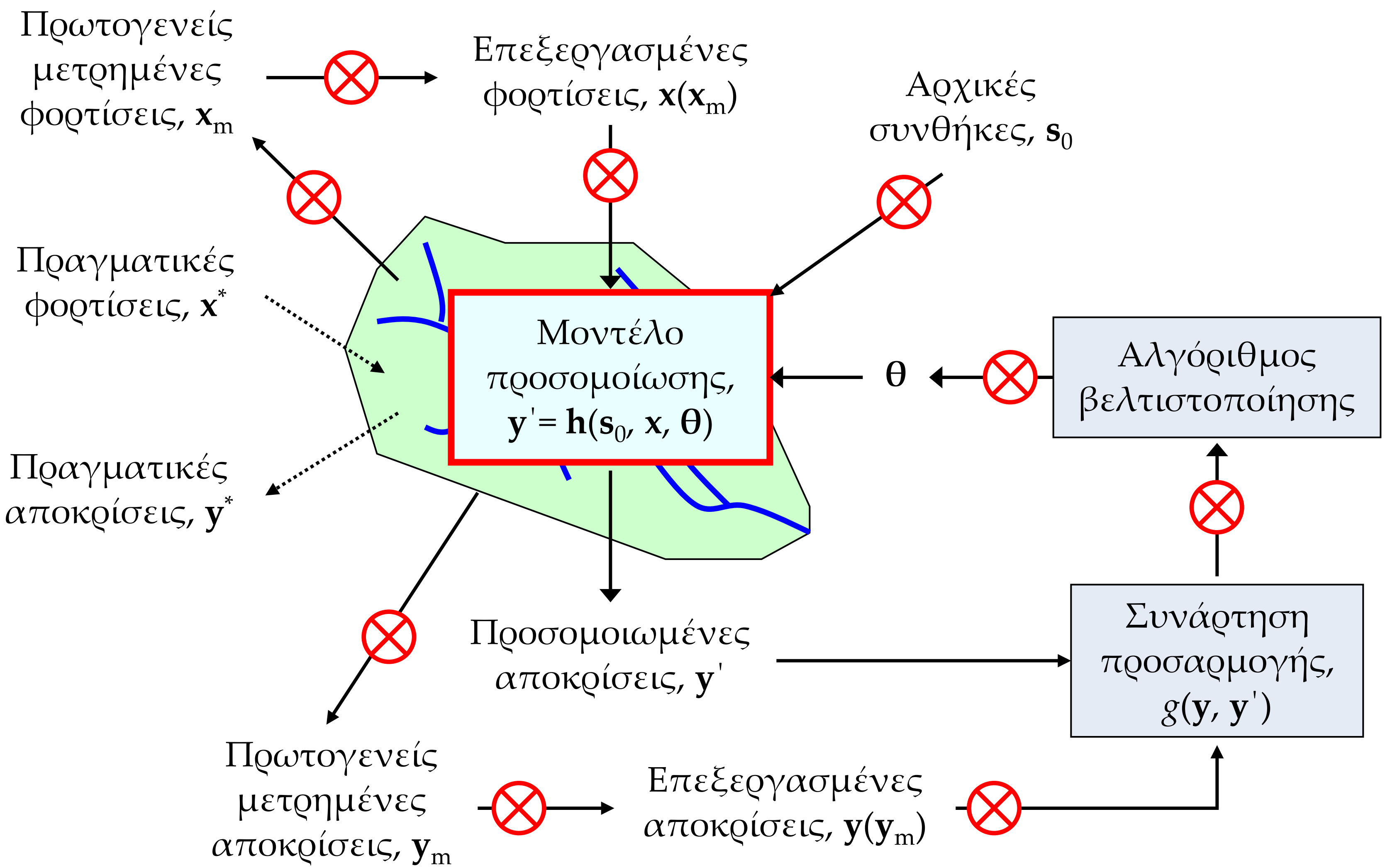
Μαθηματική δομή μοντέλων

Τύπος μοντέλου	Θεωρητικό υπόβαθρο	Πλήθος παραμέτρων και φυσική συνέπεια
Φυσικής βάσης, κατανεμημένο	Φυσικές εξισώσεις ακόρεστης και κορεσμένης ροής, ημιεμπειρικές σχέσεις από πειραματικές λεκάνες	Πολύ μεγάλο πλήθος ιδιοτήτων «πεδίου», με φυσική συνέπεια σε πολύ μικρή (απειροστή;) χωρική κλίμακα
Εννοιολογικό, αδιαμέριστο ή ημικατανεμημένο	Παραμετρικές σχέσεις, σε υδραυλικά ανάλογα που αναπαριστούν τις κύριες υδρολογικές διεργασίες	Μικρός αριθμός παραμέτρων που αντιπροσωπεύουν τα βασικά «μακροσκοπικά» χαρακτηριστικά της λεκάνης
Στατιστικό ή στοχαστικό	Σχέσεις που αναπαράγουν την στατιστική δομή των υδρολογικών δειγμάτων	Στοιχειώδης φυσική συνέπεια, ελεγχόμενη (από το μοντέλο) στατιστική συνέπεια
«Μαύρου κουτιού»	Μη γραμμικοί μετασχηματισμοί των δεδομένων εισόδου για την εξαγωγή κλειστών σχέσεων αιτίου-αποτελέσματος	Πολύ μεγάλος αριθμός μαθηματικών συντελεστών, χωρίς απολύτως καμία φυσική ερμηνεία

Αυτόματη βαθμονόμηση υδρολογικών μοντέλων: κλασική προσέγγιση

- Η διαδικασία εκτίμησης των παραμέτρων ενός υδρολογικού μοντέλου (γνωστή ως το **αντίστροφο υδρολογικό πρόβλημα**) μπορεί να αυτοματοποιηθεί ως εξής:
  - Επιλέγεται ένα δείγμα μετρημένων (παρατηρημένων) αποκρίσεων (συνήθως θεωρείται η χρονοσειρά παροχής στην έξοδο της λεκάνης)·
  - Επιλέγεται ένα μέτρο προσαρμογής του μοντέλου στις παρατηρήσεις (συνήθως χρησιμοποιείται ο δείκτης αποτελεσματικότητας)·
  - Διατυπώνεται το πρόβλημα ολικής βελτιστοποίησης (στοχική συνάρτηση, μεταβλητές ελέγχου, εφικτά όρια παραμέτρων)·
  - Επιλέγεται κατάλληλος αλγόριθμος για την αναζήτηση των πλέον πρόσφορων τιμών των παραμέτρων, με εύλογο αριθμό δοκιμών.
- Μετά τη βαθμονόμηση, ελέγχεται πάντοτε η επίδοση των βελτιστοποιημένων παραμέτρων του μοντέλου σε μια ανεξάρτητη (κατά κανόνα μεταγενέστερη) χρονική περίοδο (επαλήθευση, validation) – με τη διαδικασία αυτή αξιολογείται η *προγνωστική ικανότητα* (predictive capacity) του μοντέλου.
- Τα σύγχρονα μοντέλα, που χαρακτηρίζονται από υψηλές απαιτήσεις σε δεδομένα, έντονο υπολογιστικό φόρτο και μεγάλο αριθμό παραμέτρων, η εφαρμογή της διαδικασίας καθίσταται, στην πράξη, προβληματική.

Αυτόματη βαθμονόμηση υδρολογικών μοντέλων: ένα υπολογιστικό «παιχνίδι»;

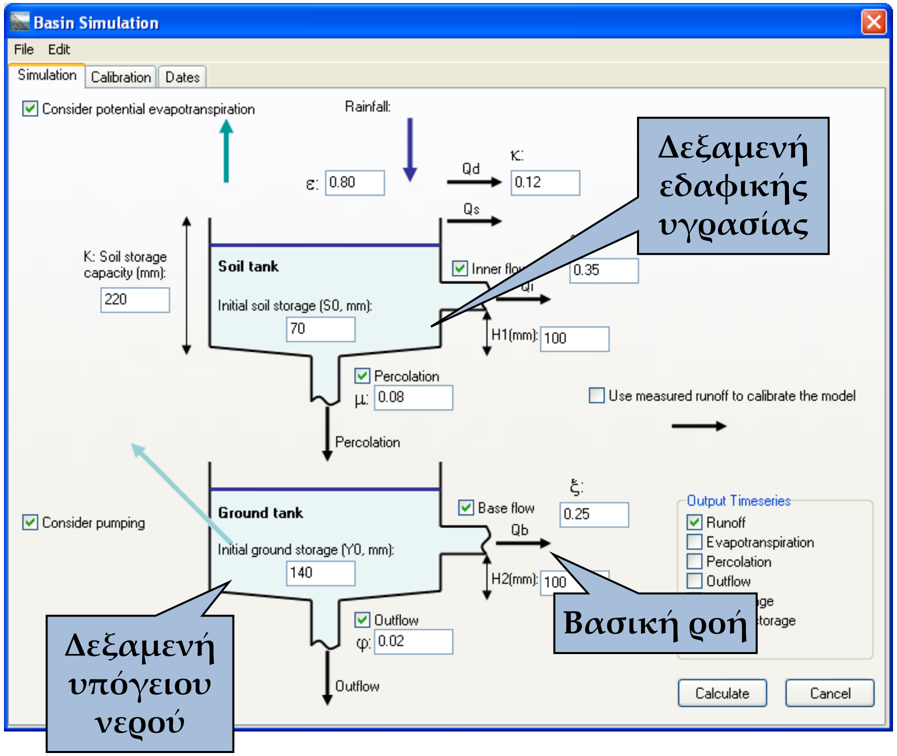


Η έννοια της αβεβαιότητας στη βαθμονόμηση των υδρολογικών μοντέλων

- **Μαθηματική δομή μοντέλου**: Υπερβολικά αδρή αναπαράσταση των φυσικών διεργασιών, έως και απόκρυψη σημαντικών πτυχών του υδρολογικού κύκλου (υπο-παραμετροποίηση) ή χρήση περισσότερων παραμέτρων από όσες μπορούν να υποστηρίξουν η πολυπλοκότητα των φυσικών διεργασιών, σε συνδυασμό με τα διαθέσιμα ιστορικά δεδομένα (υπερ-παραμετροποίηση).
- **Αντιπροσωπευτικότητα πληροφορίας**: Προσαρμογή σε δείγματα που δεν καλύπτουν όλο το φάσμα των υδρολογικών καταστάσεων της λεκάνης, τόσο των «μέσων» όσο και των «ακραίων.
- **Σφάλματα δεδομένων**: Οι ιστορικές χρονοσειρές φορτίσεων και αποκρίσεων προέρχονται από την επεξεργασία πρωτογενών μετρήσεων. Τόσο οι μετρήσεις όσο και οι επεξεργασίες υπόκειται σε συστηματικά και τυχαία σφάλματα.
- **Αρχικές και οριακές συνθήκες**: Οι συνθήκες εκκίνησης της προσομοίωσης (υγρασία εδάφους, αποθήκευση υπόγειου νερού), είναι μη μετρήσιμες και, συνεπώς, άγνωστες.
- **Στοχική συνάρτηση**: Η βαθμονόμηση με χρήση διαφορετικών μέτρων καλής προσαρμογής, καθώς και η επιλογή διαφορετικών περιόδων ελέγχου, οδηγεί σε βέλτιστες τιμές παραμέτρων που διαφέρουν, και ενδεχομένως σημαντικά.

Παράδειγμα: Προσαρμογή μοντέλου Ζυγός στη λεκάνη του Βοιωτικού Κηφισού

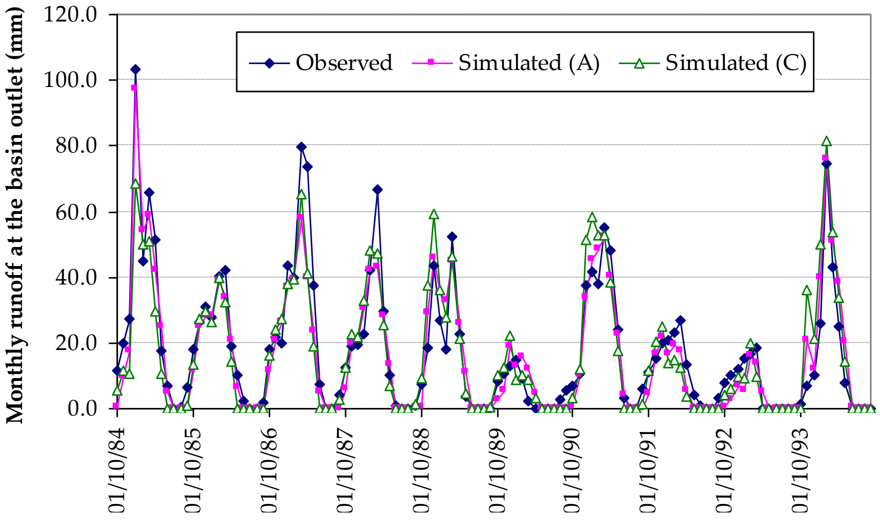
- Μηνιαία δεδομένα εισόδου (περίοδος προσομοίωσης 1984-1994):
  - Χρονοσειρές εισόδου (βροχόπτωση, δυνητική εξατμοδιαπνοή, απολήψεις από επιφανειακά νερά και γεωτρήσεις)·
  - Χρονοσειρά έλεγχου: απορροή στην έξοδο της λεκάνης·
- Υδρολογικά χαρακτηριστικά λεκάνης:
  - Σημαντική συνεισφορά βασικής ροής (καρστικό σύστημα), με σχετικά μικρή μεταβλητότητα·
  - Ξηρό υδροκλιματικό καθεστώς, υψηλές απώλειες εξατμοδιαπνοής·
  - Απώλειες λόγω διαφυγών.
- Επιπλέον δεδομένα ελέγχου:
  - Μέση τιμή και τυπική απόκλιση χρονοσειράς βασικής απορροής (συνάθροιση δειγμάτων παροχής έξι ομάδων καρστικών πηγών).

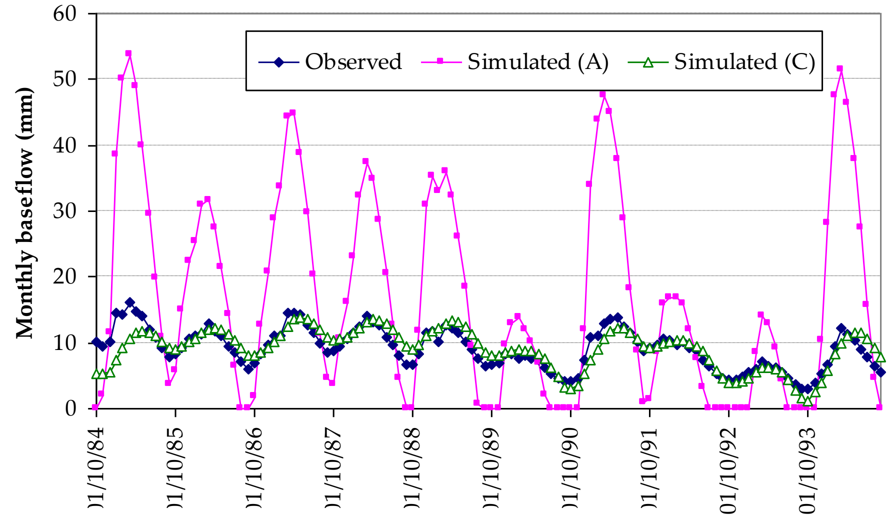


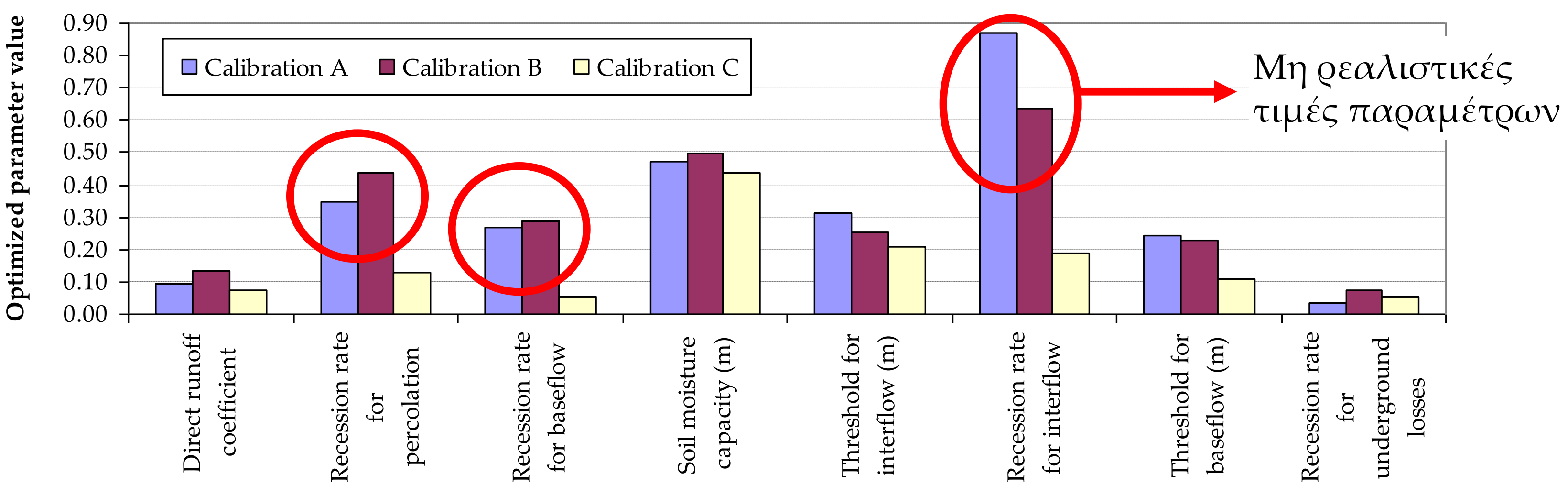
Παράδειγμα: Σενάρια βαθμονόμησης

- **Σενάριο Α**: Μοναδικό κριτήριο, αποτελεσματικότητα μεταξύ υπολογισμένης και μετρημένης χρονοσειράς απορροής
  - Πολύ ικανοποιητική αναπαραγωγή παρατηρημένης απορροής (EFF = 0.878).
  - Μη ρεαλιστική διακύμανση απορροής πηγών (σχεδόν διπλάσια μέση τιμή, σχεδόν τετραπλάσια τυπική απόκλιση)
- **Σενάριο Β**: Προσθήκη συνάρτησης ποινής, ώστε να ελαχιστοποιείται το σφάλμα αναπαραγωγής των στατιστικών μεγεθών (μέση τιμή, διασπορά) των πηγών
  - Μείωση του δείκτη αποτελεσματικότητας από 0.878 σε 0.784.
  - Ρεαλιστική απορροή πηγών, πολύ κοντά στη συνολικά παρατηρημένη.
  - Μη ρεαλιστικό μέσο υδατικό ισοζύγιο λεκάνης (απαράδεκτα χαμηλή μέση ετήσια εξατμοδιαπνοή, ίση περίπου με το 1/3 της ετήσιας βροχόπτωσης).
- **Σενάριο Γ**: Προσθήκη εμπειρικού όρου στη στοχική συνάρτηση, ώστε να μεγιστοποιείται η παραγωγή εξατμοδιαπνοής
  - Ικανοποιητική αναπαραγωγή της συνολικής απορροής εξόδου (EFF = 0.807) και των στατιστικών χαρακτηριστικών της βασικής απορροής.
  - Αύξηση απωλειών εξατμοδιαπνοής σε 50% της μέσης ετήσιας βροχόπτωσης.
  - Ευλογοφανείς τιμές παραμέτρων.

Παράδειγμα: Αποτελέσματα προσομοιώσεων







Πηγή: Efstratiadis, A., and D. Koutsoyiannis, On the practical use of multiobjective optimisation in hydrological model calibration, *EGU General Assembly 2009, Geophysical Research Abstracts*, 11, Vienna, 2326, 2009 (http://itia.ntua.gr/el/docinfo/901/)

Τελικές επισημάνσεις: Πώς μπορεί να εξασφαλιστεί μια εύρωστη βαθμονόμηση;

- Η κύρια δυσκολία στη βαθμονόμηση έγκειται στην ύπαρξη πολλών συνδυασμών παραμέτρων, που παράγουν *ισοδύναμα καλές αποκρίσεις* της λεκάνης (στη βιβλιογραφία χρησιμοποιείται ο όρος equifinality), γεγονός που συνεπάγεται μεγάλη αβεβαιότητα ως προς την πρακτική χρήση του μοντέλου ως εργαλείου λήψης αποφάσεων (για υδρολογικό σχεδιασμό ή προγνώσεις).
- Η αβεβαιότητα ελέγχεται καλύτερα όταν για την εκτίμηση των παραμέτρων αξιοποιούνται στο μέγιστο βαθμό όλα τα διαθέσιμα υδρολογικά δεδομένα (μετρήσεις), σε συνδυασμό με την υδρολογική εμπειρία (*υβριδική βαθμονόμηση*).
- Μια εύρωστη (robust) βαθμονόμηση οφείλει να εξασφαλίζει:
  - ικανοποιητική αναπαραγωγή των παρατηρημένων αποκρίσεων κάτω από διαφορετικές συνθήκες φορτίσεων·
  - συνέπεια των βελτιστοποιημένων τιμών των παραμέτρων ως προς το φυσικό-εννοιολογικό τους υπόβαθρο·
  - ρεαλιστική δίαιτα των μη ελεγχόμενων (από μετρήσεις) αποκρίσεων και εύλογη κατανομή των υδατικών πόρων της λεκάνης (υδατικό ισοζύγιο).
- Γενικά, η χρήση μοντέλων *φειδωλών σε παραμέτρους* περιορίζει την αβεβαιότητα και συνεπάγεται πιο ευσταθή και πιο αξιόπιστα μαθηματικά σχήματα.

Υδρολογική βαθμονόμηση: επιλεγμένα άρθρα (1)

- Ajami, N. K., H. Gupta, H., T. Wagener, and S. Sorooshian, Calibration of a semi-distributed hydrologic model for streamflow estimation along a river system, *Journal of Hydrology*, 298(1-4), 112–135, 2004.
- Andréassian, V., C. Perrin, L. Berthet, N. Le Moine, J. Lerat, C. Loumagne, L. Oudin, T. Mathevet, M.-H. Ramos, and A. Valéry, HESS Opinions «Crash tests for a standardized evaluation of hydrological models», *Hydrology and Earth System Sciences Discussions*, 6(3), 3669-3685, 2009.
- Bardossy, A., Calibration of hydrological model parameters for ungauged catchments, *Hydrology and Earth System Sciences*, 11, 703–710, 2007.
- Beven, K. J., and A. M. Binley, The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction, *Hydrological Processes*, 6, 279-298, 1992.
- Beven, K. J., and J. Freer, Equifinality, data assimilation, and uncertainty estimation in mechanistic modelling of complex environmental systems using the GLUE methodology, *Journal of Hydrology*, 249, 11-29, 2001.
- Boyle, D. P., H. V. Gupta, and S. Sorooshian, Toward improved calibration of hydrologic models: Combining the strengths of manual and automatic methods, *Water Resources Research*, 36(12), 3663-3674, 2000.
- Duan, Q., H. V. Gupta, S. Sorooshian, A. N. Rousseau, and R. Turcotte (editors), *Calibration of Watershed Models*, AGU Water Science and Applications Series Volume 6, 2002.
- Duan, Q., S. Sorooshian, and V. Gupta, Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models, *Water Resources Research*, 28(4), 1015-1031, 1992.
- Efstratiadis, A., and D. Koutsoyiannis, One decade of multiobjective calibration approaches in hydrological modelling: a review, *Hydrological Sciences Journal*, 55(1), 58–78, 2010.
- Gan, T. Y., E. M. Dlamini, and G. F. Biftu, Effects of model complexity and structure, data quality, and objective functions on hydrologic modelling, *Journal of Hydrology*, 192, 81-103, 1997.
- Gupta, H. V., S. Sorooshian, and P. O. Yapo, Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and non-commensurable measures of information, *Water Resources Research*, 34(4), 751-763, 1998.
- Klemeš, V., Operational testing of hydrologic simulation models, *Hydrological Sciences Journal*, 31, 13-24, 1986.

Υδρολογική βαθμονόμηση: επιλεγμένα άρθρα (2)

- Kuczera, G., and M. Mroczkowski, Assessment of hydrologic parameter uncertainty and the worth of multiresponse data, *Water Resources Research*, 34(6), 1481-1489, 1998.
- Madsen, H., G. Wilson, and H. C. Ammentorp, Comparison of different automated strategies for calibration of rainfall-runoff models, *Journal of Hydrology*, 261, 48-59, 2002.
- McCuen, R. H., Z. Knight, and A. G. Cutter, Evaluation of the Nash-Sutcliffe efficiency index, *Journal of Hydrologic Engineering*, ASCE, 11(6), 597-602, 2006.
- Mroczkowski, M., G. P. Raper, and G. Kuczera, The quest for more powerful validation of conceptual catchment models, *Water Resources Research*, 33(10), 2325-2335, 1997.
- Nalbantis, I., A. Efstratiadis, E. Rozos, M. Kopsiafti, and D. Koutsoyiannis, Holistic versus monomeric strategies for hydrological modelling of human-modified hydrosystems, *Hydrology and Earth System Sciences*, 15, 743–758, 2011.
- Refsgaard, J. C., Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models, *Journal of Hydrology*, 198, 69-97, 1997.
- Seibert, J., and J. J. McDonnell, On the dialog between experimentalist and modeler in catchment hydrology: use of soft data for multicriteria model calibration, *Water Resources Research*, 38(11), 1241, 2002.
- Sorooshian, S., V. K. Gupta, and J. L. Fulton, Evaluation of maximum likelihood parameter estimation techniques for conceptual rainfall-runoff models: Influence of calibration data variability and length on model credibility, *Water Resources Research*, 19(1), 251-259, 1983.
- Vrugt, J. A., H. V. Gupta, L. A. Bastidas, W. Bouten, and S. Sorooshian, Effective and efficient algorithm for multiobjective optimization of hydrologic models, *Water Resources Research*, 39(8), 1214, 2003.
- Wagener, T., D. P. Boyle, M. J. Lees, H. S. Wheater, H. V. Gupta, and S. Sorooshian, A framework for development and application of hydrological models, *Hydrology and Earth System Sciences*, 5(1), 13-26, 2001.
- Yapo, P. O., H. V. Gupta, and S. Sorooshian, Automatic calibration of conceptual rainfall-runoff models: sensitivity to calibration data, *Journal of Hydrology*, 181, 23-48, 1996.