WODA-ŚRODOWISKO-OBSZARY WIEJSKIE 2011: t. 11 z. 1 (33)
WATER-ENVIRONMENT-RURAL AREAS s. 61–74
www.itep.edu.pl

UŻYTECZNOŚĆ DETERMINISTYCZNYCH METOD OPTYMALIZACJI GLOBALNEJ DO SZACOWANIA PARAMETRÓW W ZAGADNIENIACH HYDROLOGICZNYCH

Mariusz GRZĄDZIEL, Jan JEŁOWICKI

Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Matematyki

Słowa kluczowe: metoda podziału i ograniczeń, model hydrologiczny, optymalizacja globalna, przeszukiwanie siatki, szacowanie parametrów

Streszczenie

Numeryczne metody optymalizacji, powszechnie stosowane w zagadnieniach hydrologicznych, nie gwarantują wyznaczenia minimum globalnego funkcji celu. Ich popularność wiąże się z tym, że mogą one być stosowane w zagadnieniach, w których liczba zmiennych decyzyjnych jest stosunkowo duża. W pracy dokonano przeglądu metod deterministycznych, które umożliwiają znalezienie optimum globalnego w przypadku, gdy funkcja celu ma więcej niż jedno minimum lokalne. Metody te mogą być podzielone na dwie kategorie: asymptotycznie kompletne oraz kompletne. Podczas gdy algorytmy należące do obu klas są w stanie generować ciąg rozwiązań przybliżonych zbieżny do rozwiązania zagadnienia optymalizacji globalnej, to tylko dla algorytmów należących do drugiej z wymienionych kategorii są dostępne nieheurystyczne kryteria stopu. Przykłady przedstawione w pracy ilustrują możliwości zastosowania metod asymptotycznie kompletnych do szacowania parametrów w modelach procesów hydrologicznych, takich jak: modele różniczkowe przepływu wód gruntowych, modele hydrauliczne wchodzące w skład modeli hydrodynamicznych wykorzystywanych do modelowania zasobów wód powierzchniowych, modele typu opad–odpływ czy też integralne modele zlewni.

Adres do korespondencji: dr M. Grządziel, Uniwersytet Przyrodniczy we Wrocławiu, Katedra Matematyki, ul. Grunwaldzka 53, 50-357 Wrocław; tel. 71 3205 664, e-mail: mariusz.grzadziel@up.wroc.pl

WSTĘP

Wiele praktycznych zagadnień hydrologii jest rozwiązywanych z zastosowaniem modeli matematycznych, wymagających oszacowania wartości parametrów. Proces szacowania często sprowadza się do rozwiązania problemu optymalizacyjnego, w którym szukamy wartości argumentu x_0 funkcji f, spełniającej warunek:

$$f(x_0) = \min_{x \in K} f(x) \quad (1)$$

gdzie:

K – zadany podzbiór przestrzeni skończenie wymiarowej (np. przedział),

f – funkcja ciągła, niekoniecznie wypukła.

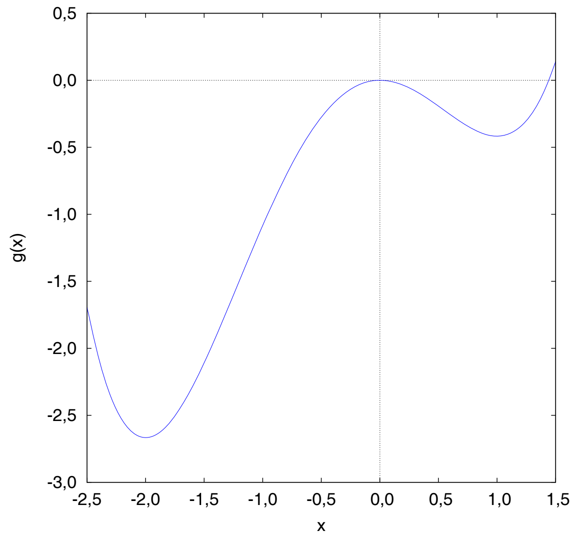
Zagadnienie opisane równaniem (1) będziemy nazywali zagadnieniem optymalizacji globalnej.

Jeżeli funkcja celu oraz zbiór K są wypukłe, to chcąc znaleźć rozwiązanie zagadnienia (1), możemy skorzystać z licznych metod optymalizacji wypukłej; w szczególności, jeśli zbiór ograniczeń K jest równy całej przestrzeni $(K = \mathbb{R}^m,\ m \in \mathbb{N})$, to minimum lokalne jest również minimum globalnym, co uzasadnia stosowanie w tym przypadku metod lokalnych, np. metody Newtona. Stosowanie metod optymalizacji wypukłej bez założenia wypukłości funkcji celu może skutkować wyznaczeniem ciągu rozwiązań przybliżonych zbieżnych do punktu, w którym funkcja f ma minimum lokalne (nie będące minimum globalnym).

Rozważmy następujący przykład. Chcemy wyznaczyć wartość argumentu funkcji $g(x) = \frac{x^4}{4} + \frac{x^3}{3} - x^2$, dla której funkcja g przyjmuje wartość minimalną. Zakładamy, że zbiór rozwiązań dopuszczalnych K jest równy zbiorowi liczb rzeczywistych $\mathbb{R}$. Szukając przybliżonego rozwiązania tego zagadnienia z użyciem metody Newtona, można oczekiwać, że jeśli punkt startowy będzie np. bliski 1, otrzymane rozwiązanie przybliżone będzie równe, z dużą dokładnością, również 1.

Oczywiście, otrzymane przez nas rozwiązanie będzie różnić się istotnie od rozwiązania dokładnego naszego problemu, którym jest $x_0 = -2$ (por. rys. 1). Powyższy przykład potwierdza, że w celu znalezienia przybliżonego rozwiązania numerycznego zagadnienia optymalizacji globalnej, w którym funkcja celu może mieć kilka minimów lokalnych, należy stosować „metody globalne", które umożliwiają ominięcie efektu „utknięcia w minimum lokalnym".

W wielu zagadnieniach optymalizacyjnych, pojawiających się w hydrologii, funkcja celu nie jest wypukła. Zagadnienia te należą więc do klasy zagadnień optymalizacji globalnej. Zazwyczaj są rozwiązywane (w sposób przybliżony) z użyciem metod stochastycznych, takich jak algorytmy genetyczne lub ewolucyjne (por. PINTÉR [1996]).



Rys. 1. Wykres funkcji $y = g(x)$; źródło: opracowanie własne

Fig. 1. Graph of the function $y = g(x)$; source: own study

Użycie tych metod nie gwarantuje znalezienia takiego rozwiązania odpowiedniego problemu optymalizacyjnego, które spełniałoby zadane wymagania, takie jak np. ϵ-optymalność (x_* będziemy nazywać rozwiązaniem ϵ-optymalnym problemu (1), jeśli $f(x_*) - \epsilon < f(x_0)$). W wielu praktycznych zagadnieniach modelowania procesów hydrologicznych, gdy liczba szacowanych parametrów jest relatywnie duża, użycie innych metod nie byłoby nawet celowe, gdyż obliczenia trwałyby zbyt długo. Okazuje się jednak, że w pewnych przypadkach, gdy wystarcza mniejsza liczba parametrów, metody deterministyczne mogą być z powodzeniem stosowane. W takich sytuacjach rezultaty uzyskane z użyciem metod deterministycznych mogą być nawet lepsze niż za pomocą metod stochastycznych.

Celem tej pracy jest przedstawienie przykładów, które ilustrowałyby użyteczność metod deterministycznych optymalizacji globalnej w zagadnieniach modelowania hydrologicznego. Po przedstawieniu klasyfikacji metod optymalizacji oraz krótkim omówieniu przykładowych metod optymalizacji globalnej, które umożliwiają znalezienie rozwiązania z zadaną dokładnością, omówimy przykłady z praktyki modelowania hydrologicznego, w których te metody można zastosować. Pracę kończą uwagi podsumowujące i wnioski dotyczące kierunków dalszych badań.

OPTYMALIZACJA GLOBALNA – STOSOWANE PODEJŚCIA

Podczas rozważania zagadnienia optymalizacji (1) powstaje pytanie: w jakim sensie otrzymane rozwiązanie przybliżone jest bliskie rozwiązaniu dokładnemu (ew. zbiorowi takich rozwiązań). Gdy brak założeń dotyczących wypukłości funkcji celu, znalezienie przybliżonego rozwiązania, które spełnia np. warunek ϵ-optymalności, wymaga wykonania tzw. kompletnego przeszukania zbioru rozwiązań dopuszczalnych K. Za NEUMAIEREM [2004] podajemy klasyfikację metod optymalizacji ze względu na stopień kompletności przeszukania:

- metody niekompletne – bazują na przesłankach heurystycznych; nie zabezpieczają przed „utknięciem w minimum lokalnym";
- metody asymptotycznie kompletne – wyznaczają minimum globalne z całkowitą pewnością (a przynajmniej z prawdopodobieństwem 1), gdy zakładamy, że obliczenia są wykonywane z pełną dokładnością i mogą trwać dowolnie długo;
- metody kompletne – wyznaczają minimum globalne, gdy zakładamy, że obliczenia są wykonywane w sposób dokładny i mogą trwać dowolnie długo; na ich podstawie da się poznać po upływie skończonej ilości czasu, że wartość przybliżona globalnego minimum została obliczona z zadaną dokładnością;
- metody rygorystyczne – wyznaczają minimum globalne z całkowitą pewnością, z zadaną dokładnością, mimo występowania błędów zaokrągleń (poza wyjątkowymi, zdegenerowanymi przypadkami, w których otrzymane przybliżone rozwiązanie nie jest wyznaczone z odpowiednia dokładnością).

Zwracamy uwagę, że istnieją metody deterministyczne (niestochastyczne), które należą do drugiej z wymienionych wyżej kategorii, np. metody przeszukiwania siatki (ang. "grid search"). Wiele z często stosowanych w zagadnieniach hydrologicznych metod stochastycznych również należy do tej kategorii, por. ZHANG i in. [2009]. W naszych rozważaniach będziemy się koncentrować na (deterministycznych) metodach kompletnych i asymptotycznie kompletnych opartych na schemacie podziału i ograniczeń (ang. "branch-and-bound").

DETERMINISTYCZNE METODY KOMPLETNE I ASYMPTOTYCZNIE KOMPLETNE

PRZESZUKIWANIE SIATKI (ANG. "GRID SEARCH")

Metoda przeszukiwania siatki jest najprostszą asymptotycznie kompletną metodą deterministyczną. Pozostałe metody, które zostaną omówione w tym rozdziale, można uważać za jej daleko idące modyfikacje.

W przypadku, gdy zbiór ograniczeń K jest przedziałem w przestrzeni *m*-wymiarowej, algorytm przeszukiwania siatki można opisać następująco:

- w k-tym etapie dzielimy K na $2^{k \cdot m}$ podprzedziałów o równych rozmiarach;
- wyznaczamy wartość funkcji celu w środku każdego spośród tych podprzedziałów (w „punktach siatkowych");
- uruchamiamy procedurę optymalizacji lokalnej, przyjmując za punkt startowy ten spośród $2^{k \cdot m}$ punktów siatkowych, dla którego wartość funkcji celu jest najmniejsza.

Metoda ta może być łatwo zmodyfikowana dla przypadku, gdy zbiór ograniczeń K jest dowolnym zbiorem wypukłym i domkniętym.

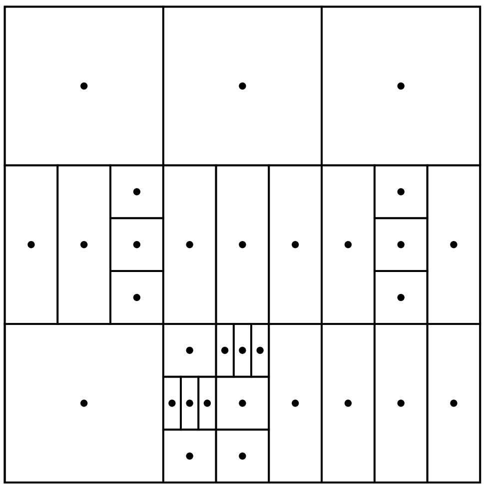
W dalszej części, dla uproszczenia rozumowania, będziemy zakładać, że zbiór dopuszczalny K jest przedziałem wielowymiarowym. Zbiór przedziałów, pokrywający K w aktualnym etapie danej procedury optymalizacyjnej, będziemy nazywać kolekcją.

METODA *DIRect* – UDOSKONALONA WERSJA ALGORYTMU PRZESZUKIWANIA SIATKI

W algorytmie *DIRect* [JONES 2009] w każdym kroku suma przedziałów z kolekcji jest równa K. Metoda przeszukiwania może być przedstawiona następująco:

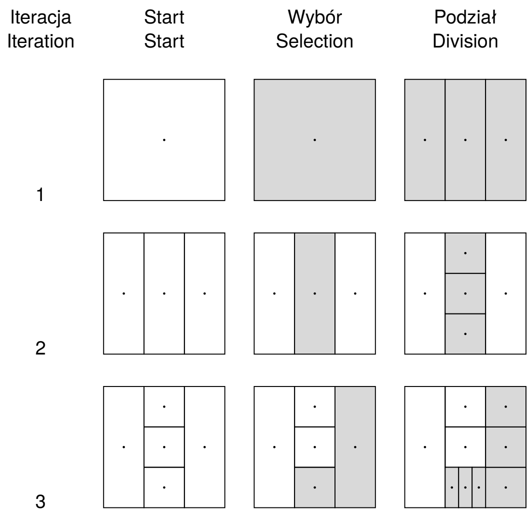
– w kroku pierwszym kolekcja składa się z jednego elementu (przedziału K);
– w kroku k-tym wybrane przedziały z kolekcji są dzielone wzdłuż wybranej krawędzi na trzy mniejsze przedziały;
– kryterium wyboru: dany przedział nie może być zdominowany przez inny przedział z kolekcji; przedział I jest dominowany przez przedział I_1, jeżeli wartość funkcji celu f w środku I_1 jest większa niż wartość funkcji celu w środku I i jednocześnie długość przekątnej I_1 jest mniejsza lub równa długości przekątnej I; w pewnych wersjach przedział I przewidziany do podziału musi spełniać pewne dodatkowe warunki [JONES 2009].

Schemat podziału prostokątów w kolejnych etapach procedury *DIRect* przedstawiają rysunki 2. i 3. Wybór prostokątów do podziału (w kolejnym etapie działania procedury) jest zilustrowany na rysunku 4. Wykres po prawej stronie przedstawia wariant metody, w którym wybierane są tylko te spośród niezdominowanych podprzedziałów, które na wykresie są reprezentowane przez punkty będące wierzchołkami powłoki wypukłej zbioru punktów odpowiadających wszystkim przedziałom z kolekcji. Szczegóły dotyczące tej wersji metody można znaleźć w pracy JONESA [2009].



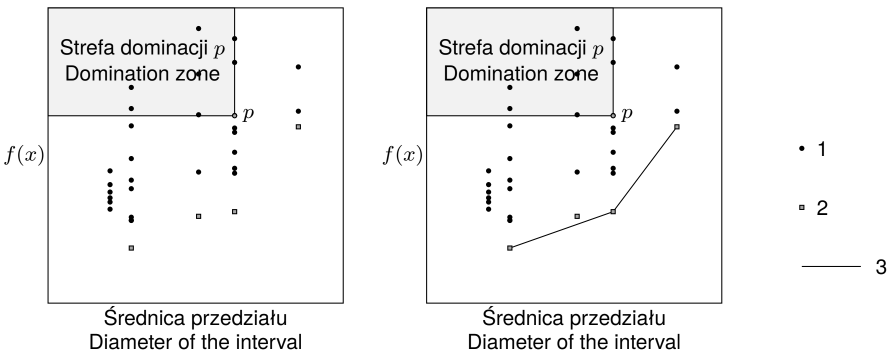
Rys. 2. Początkowe etapy działania procedury *DIRect*; źródło: opracowanie własne na podstawie: JONES [2009]

Fig. 2. Initial stages of the *DIRect* procedure; source: own elaboration based on JONES [2009]



Rys. 3. Kolekcja przedziałów w przykładowym etapie działania procedury *DIRect*;
źródło: opracowanie własne na podstawie: JONES [2009]

Fig. 3. Intervals collection at a certain stage of the *DIRect* procedure;
source: own elaboration based on JONES [2009]



Rys. 4. Wybór przedziałów, które zostaną podzielone w kolejnym kroku procedury;
1 – przedziały zdominowane, *2* – przedziały niezdominowane, *3* – obwiednia wypukła;
źródło: opracowanie własne na podstawie: JONES [2009]

Fig. 4. Selecting intervals that will be divided in the next step of the procedure;
1 – dominated intervals, *2* – non-dominated intervals, *3* – convex envelope;
source: own elaboration based on JONES [2009]

W pewnych sytuacjach jesteśmy w stanie znaleźć ograniczenie dolne m dla funkcji celu f w danym przedziale $I \subset K$. Przedział I można wykluczyć z dalszego postępowania w sytuacji, kiedy $m > f(x)$ dla pewnego $x \in K$. Punkt x może być np. środkiem jednego z przedziałów należących do kolekcji przedziałów w danym etapie.

METODY OPARTE NA SCHEMACIE PODZIAŁU I OGRANICZEŃ

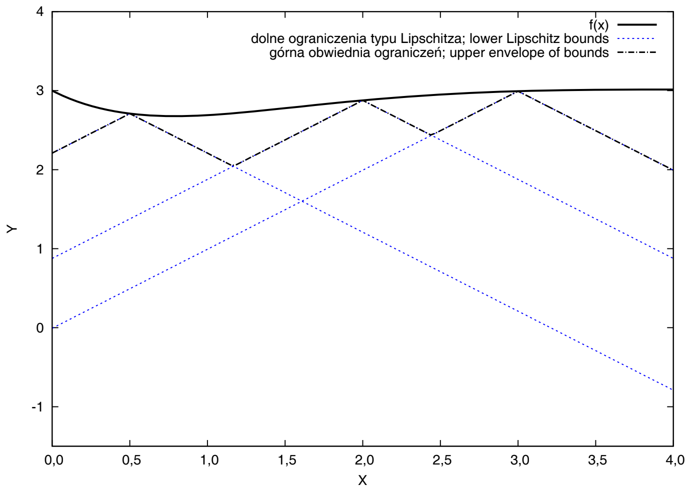
W metodzie podziału i ograniczeń każdy przedział, należący do kolekcji, jest dzielony na podprzedziały. Dla każdego z tych podprzedziałów jest obliczane dolne ograniczenie wartości funkcji celu. Te podprzedziały, dla których nie ma podstaw do wykluczenia (obliczone dolne ograniczenie dla nich nie jest większe od wartości $f(x)$ dla pewnego $x \in K$), dodajemy do kolekcji. Postępowanie kontynuujemy aż do momentu, w którym znajdziemy taki x_ϵ, że $f(x_\epsilon) < m_K + \epsilon$, gdzie ϵ jest zadaną liczbą dodatnią, a m_K jest najmniejszym z dolnych ograniczeń dla f w przedziałach należących do kolekcji; wartość $f(x_\epsilon)$ nie różni się więcej niż o ϵ od $f(x_*)$, gdzie x_* jest rozwiązaniem optymalnym. Punkt x_ϵ jest więc ϵ-optymalnym rozwiązaniem naszego problemu.

Dla konstrukcji metody znajdującej ϵ-optymalne rozwiązanie x_ϵ kluczową kwestią jest określenie sposobu obliczania ograniczenia dolnego f w dowolnym przedziale $I \subset K$.

Jest to możliwe, jeśli jesteśmy w stanie dla danego $I \subset K$ wyznaczyć stałą L (tzw. stałą Lipschitza), dla której

$$|f(x_1) - f(x_2)| \leqslant L \, \|x_1 - x_2\| \,, \quad x_1, x_2 \in I \tag{2}$$

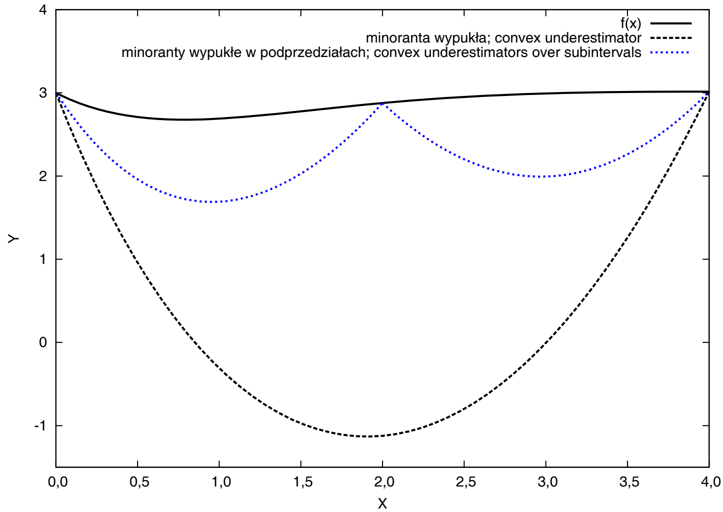
lub skonstruować funkcję wypukłą ograniczającą z dołu f w przedziale I. Efektywność metody zależy istotnie od sposobu wyznaczenia stałej L (w praktyce często uzyskane oszacowania są bardzo pesymistyczne) lub sposobu konstrukcji funk-



Rys. 5. Wyznaczanie dolnego ograniczenia funkcji f na podstawie warunku Lipschitza; źródło: opracowanie własne

Fig. 5. Determining a lower bound for the function f based on Lipschitz condition; source: own study

cji wypukłej, ograniczającej funkcję celu z dołu (tzw. minoranty wypukłej) w przedziale I (w praktyce metoda jest efektywna dla wybranych klas problemów). Graficzne ilustracje metod wyznaczania ograniczenia dolnego wartości funkcji celu w zadanym przedziale przedstawione są na rysunkach 5. i 6., odpowiednio dla wariantu ze stałą Lipschitza i dla wariantu z ograniczeniem wypukłym.



Rys. 6. Wyznaczanie dolnego ograniczenia funkcji f za pomocą minorant wypukłych; źródło: opracowanie własne

Fig. 6. Determining a lower bound for the function f by using convex underestimators; source: own study

PRZYKŁADY OPTYMALIZACJI GLOBALNEJ W HYDROLOGII I HYDROGEOLOGII

POTRZEBA OPTYMALIZACJI GLOBALNEJ

Wiele praktycznych zagadnień hydrologii wymaga rozwiązań obliczeniowych, których istotą jest wyznaczenie globalnego minimum funkcji wielu zmiennych w pewnym obszarze. Do klasy tej należą przede wszystkim:
- zagadnienia identyfikacji parametrów skupionych, np. w modelach typu opad–odpływ oraz w modelach konceptualnych zlewni;
- zagadnienia identyfikacji parametrów charakteryzujących się zmiennością przestrzenną, np. w modelach integralnych zlewni oraz w modelach hydrodynamicznych;
- identyfikacja nieznanego wejścia, np. zmiennego wzdłuż cieku natężenia zasilania ze zlewni [KSHIRSAGAR i in. 1995];

– zagadnienia optymalnego sterowania zasobami wodnymi; w tej grupie zagadnień wykorzystanie metod optymalizacyjnych jest szczególnie intensywne; stanowi ona też istotne źródło inspiracji dla wypracowywania nowych metod optymalizacyjnych, lecz znajduje się poza zakresem niniejszej analizy.

OPTYMALIZACJA W MODELOWANIU WÓD PODZIEMNYCH

PINTÉR [1996] opisał przykład zastosowania globalnej metody optymalizacji *DIRect* dla wyznaczenia optymalnych parametrów modelu przepływu wód gruntowych w strefie przybrzeżnej. Podstawą modelu matematycznego było w nim dwuwymiarowe równanie Boussinesqa:

$$S\frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(T\frac{\partial h}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(T\frac{\partial h}{\partial y}\right) + Q \tag{3}$$

z parametrami opisującymi:
– współczynnik pojemności wodnej $S(x, y)$,
– współczynnik filtracji $T(x, y)$,
– składnik źródłowy $Q(x, y, t)$,
z których wszystkie mają charakter rozłożony.

W opisywanym studium obszar przybrzeżny o powierzchni ok. 300 km^2 podzielono na jednorodne fragmenty o stałych wartościach współczynników pojemności wodnej i filtracji, zaś w jego brzegu wyróżniono jednorodne fragmenty o jednakowym, lecz zależnym od czasu, natężeniu zasilania Q. Wyróżnienie 16 stref wewnętrznych i 14 stref brzegowych dało łącznie 62 parametry (16 · 3 + 14).

Funkcja celu przyjęta jako kryterium minimalizacyjne miała postać:

$$f(\xi) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\frac{|h_{i\mathrm{obl}}(\xi) - h_{i\mathrm{obs}}|^2}{V(h_{\mathrm{obs}})} \tag{4}$$

gdzie:

$h_{i\mathrm{obs}}$ – obserwowany poziom wody gruntowej w i-tym węźle obserwacyjnym;

$h_{i\mathrm{obl}}$ – poziom wody otrzymany z modelu, odpowiadający położeniu i chwili dokonania i-tej obserwacji;

$V(h_{\mathrm{obs}})$ – wariancja w zbiorze obserwowanych poziomów wody gruntowej;

ξ – wektor parametrów;

N – liczba obserwacji.

Obliczenia poziomu zwierciadła wody i odpowiednich przepływów wykonano z użyciem pakietu do obliczeń hydrodynamicznych MODFLOW. Kalibracja wymagała ok. 500 000 wywołań funkcji celu.

Eksperyment ten, dziś już klasyczny, wskazuje na realną możliwość zastosowania metod optymalizacji globalnej nawet w przypadku obiektów o relatywnie dużej rozciągłości przestrzennej, pod warunkiem odpowiedniej agregacji parametrów.

OPTYMALIZACJA W MODELOWANIU WÓD POWIERZCHNIOWYCH

Podczas kalibracji hydrodynamicznych modeli wezbrań rzecznych istotne jest dopasowanie dynamiki modelowanego systemu do istniejących obserwacji. W tym celu wykorzystuje się dane pochodzące z wielu źródeł.

Jeden z etapów polega na porównaniu krzywej natężenia przepływu w przekroju wodowskazowym z podobną zależnością otrzymaną z modelu hydrodynamicznego. Argumentami optymalizacji są w tym przypadku standardowe współczynniki szorstkości n Chézy'ego–Manninga. Przyjęto następującą postać funkcji celu:

$$f(x) = \frac{1}{h_{\max} - h_{\min}} \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} (Q(h,x) - Q_{\mathrm{obs}}(h))^2 \, dh \tag{5}$$

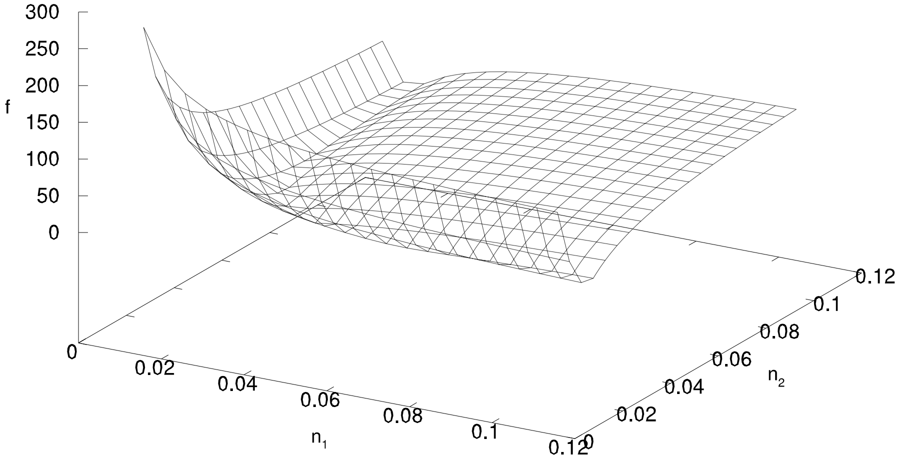
gdzie:

$Q_{\mathrm{obs}}(h)$ – zależność znana z obserwacji terenowych;
$Q(h,x)$ – funkcja przepustowości przekroju hydrometrycznego w zależności od stanu wody h i wektora współczynników szorstkości x;
$[h_{\min}, h_{\max}]$ – zakres zmienności obserwowanych stanów wody;
x – wektor parametrów.

Sformułowanie kryterium w postaci całki umożliwia ukrycie szczegółów technicznych związanych z próbkowaniem funkcji, zwłaszcza z nierównomiernym rozmieszczeniem obserwacji.

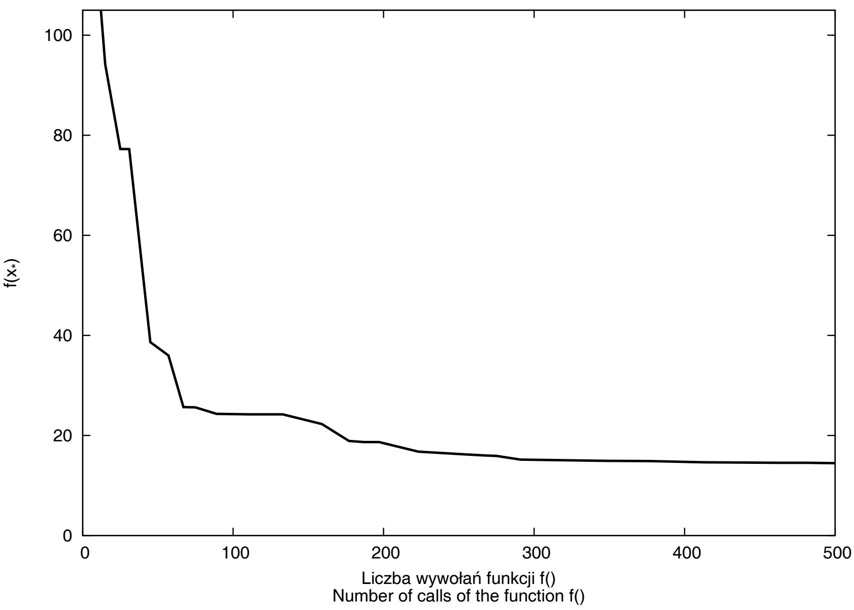
Typowy wykres funkcji błędu, odpowiadający przypadkowi dopasowania dwóch parametrów n_1 i n_2, przedstawiono na rysunku 7.

Na kolejnych rysunkach zamieszczono typowe diagramy zbieżności procesów iteracyjnych, związanych z minimalizacją globalną. W przypadku procedury *DIRect* (rys. 8) oś pozioma jest wyskalowana liczbą wywołań funkcji celu, w przybliżeniu proporcjonalną do czasu działania algorytmu. Jak stwierdzono wcześniej, pojedyncza iteracja tej metody polega na przetworzeniu wszystkich wytypowanych podprzedziałów, zatem koszt pojedynczej iteracji nie jest miarodajny.



Rys. 7. Kalibracja oporów hydraulicznych w przekroju rzecznym (rzeka Bystrzyca, 2 parametry); wykres typowej funkcji błędu; źródło: opracowanie własne

Fig. 7. Calibrating of the roughness function in a river cross section (Bystrzyca River, two parameters); typical error function; source: own study

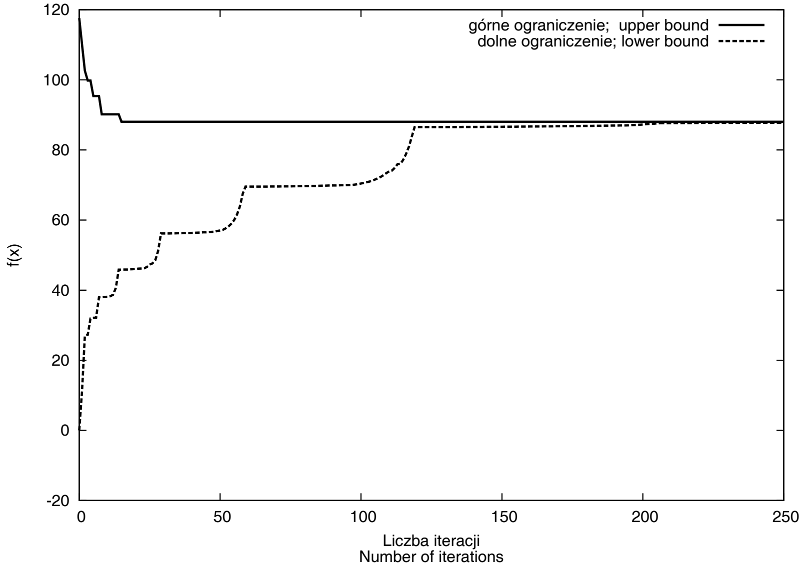


Rys. 8. Kalibracja oporów hydraulicznych w przekroju rzecznym (rzeka Odra, przekrój Ścinawa, 4 parametry); historia zbieżności algorytmu *DIRect*; źródło: opracowanie własne

Fig. 8. Calibrating of the roughness function in a river cross section (the Odra River, cross section Ścinawa, four parameters); convergence history for the *DIRect* algorithm; source: own study

W metodach podziału i ograniczeń (rys. 9) pojedyncza iteracja wymaga stałej liczby wywołań funkcji celu.

Identyfikacja współczynników oporu w profilu podłużnym doliny rzecznej ma na celu uzyskanie zgodności modelu z obserwowanymi stanami wody w wielu punktach obserwacyjnych i w wielu różnych warunkach.



Rys. 9. Typowa historia zbieżności metody podziału i ograniczeń; źródło: opracowanie własne

Fig. 9. Typical convergence history for the branch-and-bound method; source: own study

Funkcja celu przyjmowana jest w postaci:

$$f(x) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} d^2(H(x, \xi_{p_i}, Q_i), (h_i, Q_i)) \tag{6}$$

gdzie:

x – wektor parametrów.
d – funkcja obliczająca odległość punktów;
h_i – obserwacje w punktach ξ_{p_i};
$H(x, \xi, Q)$ – obliczone położenie zwierciadła wody.

Obliczenie funkcji celu wymaga użycia hydrodynamicznego modelu przepływu wód powierzchniowych.

PINTÉR [1996] opisał proces optymalizacji globalnej tego zagadnienia, w którym analiza jest prowadzona oddzielnie w kolejnych przekrojach kontrolnych.

OPTYMALIZACJA W MODELOWANIU ZLEWNI

Szeroka klasa modeli matematycznych, znanych jako modele hydrologiczne, opisuje zależności typu wejście–wyjście, w których obie te wielkości są funkcjami czasu, zaś modelowany system jest scharakteryzowany za pomocą niewielkiej liczby parametrów oraz przez zmienny w czasie wektor stanu.

Do klasy tej należą przede wszystkim modele typu opad–odpływ. Z uwagi na niewielką liczbę parametrów istnieje realna szansa użycia metod kompletnych poszukiwania globalnego minimum funkcji obrazującej dopasowanie modelu do znanego wektora wejścia i odpowiadającego mu znanego wektora wyjścia. W tym celu stosowane mogą być metody typu podziału i ograniczeń, zwłaszcza ich sformułowania w postaci problemów programowania nieliniowego.

Deterministyczne całościowe modele zlewni są opisywane przez większą liczbę parametrów. Na przykład kalibracja modelu SWAT [NEITSCH i in. 2002] wymaga wyznaczenia 16 parametrów. Podobną złożonością (17 parametrów) odznacza się klasyczny model stanfordzki zlewni [CRAWFORD, LINSLEY 1966].

Porównanie kilku metod globalnej optymalizacji niedeterministycznej modelu SWAT przedstawili ZHANG i in. [2009], wskazując, że wymaga ona ok. 10 000 wywołań funkcji celu. Do problemów o tym stopniu złożoności realne jest zastosowanie metod deterministycznych asymptotycznie kompletnych (np. *DIRect*), przedstawionych w drugim rozdziale niniejszej pracy („Optymalizacja globalna – stosowane podejścia").

WNIOSKI

1. Deterministyczne metody asymptotycznie kompletne (np. *DIRect*) mogą znaleźć zastosowanie w modelowaniu procesów hydrologicznych, gdy liczba parametrów jest relatywnie mała (powiedzmy: 20). Do klasy tej należą m.in.:
– modele systemowe i konceptualne o parametrach skupionych;
– modele hydrodynamiczne o wyróżnionych jednorodnych strefach z uśrednionymi wartościami parametrów.

2. Modele hydrodynamiczne bazujące na układach równań różniczkowych, o znacznym stopniu zróżnicowania przestrzennego parametrów, nie dają realnej szansy zastosowania metod asymptotycznie kompletnych optymalizacji globalnej. Natomiast, gdy stopień agregacji przestrzennej jest znaczny, taka optymalizacja jest warta rozważenia (patrz wniosek 1.).

3. Metody kompletne (np. oparte na schemacie podziału i ograniczeń), jako bardziej czasochłonne, mogą być zastosowane do zagadnień, w których liczba parametrów jest mała.

Do klasy tej należą m.in.: zagadnienie szacowania lokalnych współczynników oporu hydrodynamicznego oraz zagadnienie estymacji parametrów rozkładu określonych zmiennych losowych.

LITERATURA

CRAWFORD N.H., LINSLEY R.K. 1966. Digital simulation in hydrology: Stanford Watershed Model IV. Technical Report No. 39. Stanford. Department of Civil Engineering, Stanford University ss. 210.

JONES D. 2009. Direct: global optimization algorithm. W: Encyclopedia of optimization. Pr. zbior. Red. C. Floudas, P. Pardalos. New York. Springer s. 725–735.

KSHIRSAGAR M. M., RAJAGOPALAN B., LAL U., 1995. Optimal parameter estimation for Muskingum routing with ungauged lateral inflow. Journal of Hydrology. Vol. 169 s. 25–35.

NEITSCH S.L., ARNOLD J.G., KINIRY J.R., WILLIAMS J.R., KING K.W. 2002. SWAT Manual. USDA, Agricultural Research Service and Blackland Research Center, Texas A&M University ss. 412.

NEUMAIER A., 2004. Complete search in continuous global optimization and constraint satisfaction. Acta Numerica. Vol. 13 s. 271–370.

PINTÉR J., 1996. Global optimization in action, Continuous and Lipschitz optimization: algorithms, implementations and applications. Dordrecht–Boston–London. Kluwer Academic Publishers ss. 512.

ZHANG X., SRINIVASAN R., ZHAO K., VAN LIEW M., 2009. Evaluation of global optimization algorithms for parameter calibration of a computationally intensive hydrologic model. Hydrological Processes. Vol. 23 s. 430–441.

Mariusz GRZĄDZIEL, Jan JEŁOWICKI

APPLICABILITY OF DETERMINISTIC GLOBAL OPTIMIZATION METHODS FOR HYDROLOGICAL PARAMETERS ESTIMATION

Key words: branch and bound methods, global optimization, grid search, hydrological model, parameter estimation

Most numerical optimization methods that are widely used in hydrology don't guarantee reaching the global minimum of the goal function. They became popular mainly due to their ability of handling relatively multi-dimensional problems. The paper reviews the deterministic methods capable of finding the global optimum in the presence of local optima. They can be divided into two categories: asymptotically complete methods and complete methods. While algorithms from both classes can generate a sequence converging to a solution of the global optimization problem, only for the algorithms from the latter class non-heuristic stopping criteria are available. The examples presented in the paper illustrate the applicability of asymptotically complete methods to parameter estimation in modelling hydrological processes, such as differential models of groundwater flow, hydraulic models embedded into hydrodynamic models of river systems, the precipitation–outflow models or integral catchment models.

Recenzenci:
prof. dr hab. Henryk Mitosek
dr inż. Tomasz Szymczak

Praca wpłynęła do Redakcji 14.04.2010 r.