

Usando R para una fácil y eficiente predicción de la incertidumbre de simulaciones de modelos ambientales

Using R to easily and efficiently predict the uncertainty in simulations of environmental models

(Recepción 05/02/2019; Aceptación 02/07/2019)

Duque-Gardezábal N.¹; Fuentes C.¹

¹Grupo de Investigación en Ingeniería de los Recursos Hídricos (GIREH)

Departamento de ingeniería civil y agrícola, Universidad Nacional de Colombia-Bogotá, Colombia

Teléfono: +57 1 3165000 ext 13406

Email: nduqueg@unal.edu.co

Resumen. Determinar la incertidumbre en modelos medioambientales es una tarea demandante. Se presenta en este trabajo la implementación de la metodología de análisis de incertidumbre DDS-AU en un código de R y se compara la eficiencia del método contra el ampliamente usado GLUE con muestreo uniforme. Se encontró que DDS-AU tiene una mayor eficiencia para encontrar excelentes valores de la función objetivo que la metodología GLUE, incluso en este problema de 10 parámetros. Asimismo, el mejor resultado de la desviación respecto de los caudales observados se obtuvo al usar la metodología DDS-AU. El código se brinda para su libre uso.

Palabras clave. Código; DDS-AU; eficiencia de muestreo; incertidumbre paramétrica; alta dimensionalidad.

Abstract. Assessing the uncertainty in environmental models is a challenging task. We present in this research an implementation of the DDS-AU uncertainty analysis methodology and the code developed in R. Also, the efficiency of the DDS-AU is contrasted with the widely used GLUE with uniform random sampling. It was found that DDS-AU has a major efficiency when trying to find excellent objective function values with GLUE, even in this 10-parameter problem. Moreover, the best deviation of the simulated streamflows respect the observed discharge was obtained with the DDS-AU. The code is made freely available for its use.

Keywords. Code; DDS-AU; parameter uncertainty; sampling efficiency; high-dimensional.

1. Introducción

La modelación de sistemas ambientales es una herramienta de gran utilidad. En general, la modelación permite: conocer el entendimiento que se tiene del sistema analizado; buscar errores e inconsistencias en los datos, mediciones, o llenar la información; y probar las implicaciones de cambios en el sistema, lo que se conoce como escenarios. A estas utilidades también se puede incluir el conocimiento del valor de las variables en puntos no instrumentados.

Sin embargo, las modelaciones y las mediciones siempre están sujetas a cierto grado de incertidumbre. Ésta proviene principalmente de la determinación de parámetros, datos ingresados y estructura del modelo. De ellas la que más ampliamente se aborda es la incertidumbre paramétrica, que es estudiada en la mayoría de modelaciones con experimentos de Montecarlo y la ampliamente conocida metodología GLUE (Keith Beven & Binley, 1992).

Los experimentos de Montecarlo se basan en muestreos aleatorios que son altamente ineficientes para identificar buenos conjuntos de parámetros (Tolson & Shoemaker, 2008). Para abordar el problema de la ineficiencia y para reducir los requerimientos computacionales de las simulaciones, se han propuesto la construcción de metamodelos (modelos de modelos), o mejores técnicas de

muestreo como el Latin Hypercube Sampling (LHS). Dentro de estos últimos se encuentra la metodología Dynamical Dimension Search (DDS) – Analysis of Uncertainty (DDS-AU), propuesta por Tolson & Shoemaker (2008).

En consecuencia, este trabajo busca presentar los resultados obtenidos del análisis de incertidumbre usando la metodología DDS-AU, desarrollados con una herramienta creada en la plataforma R (R Core Team, 2017). Asimismo, se compara el desempeño del algoritmo DDS-AU contra la metodología GLUE con el ampliamente usado muestreo uniforme, en la calibración del modelo TOPMODEL (K Beven, Lamb, Quinn, Romanowicz, & Freer, 1995; Buytaert, 2018). La herramienta es de código abierto y está disponible en el siguiente enlace para su libre uso (<https://github.com/nduqueg/DDS-Aproximation-of-Uncertainty>), bajo el reconocimiento de Tolson & Shoemaker (2008), y de la implementación en R expuesta en este artículo.

2. DDS-AU y descripción del código

La metodología DDS-AU se fundamenta en el marco del concepto de equifinalidad y de los conjuntos de parámetros “comportamentales” (Keith Beven & Binley, 1992). Un umbral subjetivo debe ser definido por el modelador, que generalmente se basa en los resultados de una función objetivo (FO) y en el



número de simulaciones realizadas que tiene un comportamiento aceptable, bueno o muy bueno de acuerdo con esa FO. No obstante, DDS-AU busca atacar el problema de la baja probabilidad de muestreo cerca del óptimo global cuando se usa el muestreo uniforme.

Al estar en el marco de la metodología GLUE, el algoritmo DDS-AU se basa en identificar múltiples e independientes conjuntos de parámetros comportamentales. Para ello, utiliza N algoritmos DDS aleatorios e independientes (Tolson & Shoemaker, 2007). El algoritmo DDS se creó para obtener un buen resultado con un número limitado de simulaciones en problemas inversos dimensionalmente altos. Éste busca aleatoriamente cerca del mejor resultado que haya obtenido hasta la iteración i , pero se caracteriza por ir reduciendo el número de parámetros calibrados a medida que avanzan las iteraciones (Tolson & Shoemaker, 2007). Tolson & Shoemaker (2007) reportan con sus experimentos como el algoritmo DDS tiene, en muchos casos, un mejor desempeño que el ampliamente conocido Shuffled Complex Evolution (SCE) (Duan, Sorooshian, & Gupta, 1992). En consecuencia, DDS-AU escoge como parámetro comportamental el conjunto de parámetros con mejor F.O. para cada DDS independiente.

El código del DDS-AU se implementó como funciones en la plataforma R. Estas incluyen una función para: el algoritmo DDS, el DDS-AU, y una para el post-procesamiento de los resultados del DDS-AU. Siguiendo las sugerencias de Tolson & Shoemaker (2008), el código recibe el número máximo de simulaciones (N_{Total}), la cantidad de muestras “comportamentales” que se quieren hallar (n_{Beh}). Con base en estos datos, genera aleatoriamente el número de iteraciones que realiza cada uno de los DDS independientes en un intervalo. Dicho intervalo se crea basado en un porcentaje que ingresa el usuario y que se relaciona con el número de promedio iteraciones de los DDS independiente; este es igual a:

$$m_{DDS} = \frac{N_{Total}}{n_{Beh}} \quad (1)$$

El intervalo se extiende en el porcentaje hacia valores superiores e inferiores respecto de ese punto central.

3. Área de estudio y datos

La cuenca del río Casanare se encuentra en los llanos de la Orinoquía colombiana. Tiene un área de 14700 km² en su mayoría sobre las planicies, y la cuenca tiene su parte alta en la cordillera oriental de los Andes colombianos. Para los datos de precipitación, se crearon campos combinando datos del MSWEP (Beck et al., 2017), y de estaciones en tierra con la metodología Double Smoothing (Duque-Gardezabal, Zamora, & Rodríguez, 2018). Para los datos de evapotranspiración, se descargaron los estimados de Penman-Monteith del proyecto eartH2Observe (www.earth2observe.eu), debido a

que no se cuenta con estaciones de temperatura en la zona. El punto de cierre de la cuenca, y que también proporcionó las series de caudales observados, fue la estación Cravo Norte (LM-36027050). Todas las estaciones pluviométricas y limnológicas usadas, pertenecen al Instituto de Meteorología, Hidrología y Estudios Ambientales (IDEAM).

4. Metodología

Para comparar las dos metodologías de análisis de incertidumbre, se definió como límite un total de 20.000 simulaciones del modelo TOPMODEL, en ambas metodologías. Este modelo se aplicó a la cuenca del río Casanare, calibrando 10 parámetros. Se hizo un muestreo uniforme para el caso de GLUE y para el DDS-AU se implementaron 50, 100 y 200 DDS independientes. Con esto se buscó aumentar o reducir el número de simulaciones en cada DDS, y lograr mejores o peores valores en la F.O. (se escogió para este estudio el ampliamente conocido Nash-Sutcliffe Efficiency (NSE). Los resultados de la F.O. se clasificaron mediante la variación del valor del umbral de comportamentales, analizando así la eficiencia del muestreo.

Asimismo, se graficaron las bandas envolventes de los caudales simulados con cada método. Así se obtuvieron métricas asociadas al contenido de datos observados que se encuentran dentro de las bandas de confianza. Las métricas fueron: el ancho medio, máximo y mínimo; la relación de contenido y la desviación del promedio de las simulaciones respecto de las observaciones. Cabe resaltar que las envolventes se calcularon con los caudales simulados únicamente con conjuntos de parámetros comportamentales. Para este procedimiento, se definió el valor de 0.5 como umbral de los conjuntos comportamentales.

5. Resultados

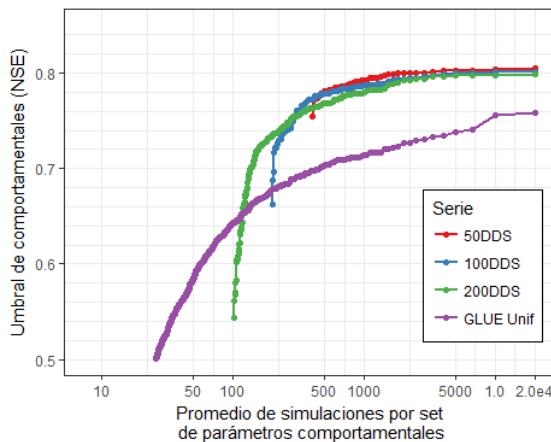


Figura 1. Simulaciones y cantidad de parámetros comportamentales variando el umbral de comportamentales definido

Para analizar las diferencias entre el muestreo uniforme y el DDS-AU, se halló la cantidad de simulaciones por cada conjunto comportamental. Este

cálculo indica la eficiencia de las metodologías de muestreo para hallar parámetros comportamentales. En la Fig. 1, se puede apreciar como dicha cantidad va cambiando a medida que se tienen valores más altos de la F.O. Se puede ver que para conjuntos que están alejados del máximo conocido de la F.O. (0.81), el muestreo uniforme tiene un mejor rendimiento. No obstante, la tendencia cambia después de un NSE de 0.65, en el que los valores comportamentales del DDS-AU con 200 conjuntos independientes obtiene valores más altos de la F.O. con el mismo número de simulaciones.

Igualmente, los DDS-AU con 50, 100 y 200 DDS, tienen una mejor eficiencia que el muestreo uniforme después del umbral de 0.68. Más importante aún, el muestreo uniforme no logró muestrear parámetros con NSE superiores a 0.76, mientras que la mayoría de los conjuntos de parámetros encontrados por los tres DDS-AU presentan F.O. mayores a ese valor. No existen mayores diferencias entre los tres DDS-AU implementados, solamente se debe resaltar que la corrida con 200 DDS presenta un leve menor desempeño que las corridas con 50 y 100 DDS, a causa de que cada uno de los 200 DDS independientes tiene un menor número de iteraciones. Lo anterior se debe a que el límite total de simulaciones fue de 20.000, con lo cual se asignan en promedio 400 iteraciones para los 50 DDS, 200 iteraciones para 100 y 100 iteraciones para los 200 DDS independientes.

En la Fig. 2 se pueden ver las bandas envolventes de las simulaciones. Es claro que las bandas más anchas son las producidas por el muestreo uniforme (GLUE), mientras que las más angostas son producidas por los DDS-AU, siendo la de 50 DDS la más angosta. Puede verse que las bandas producidas por GLUE presentan picos que desvían el desempeño general de las simulaciones, que se producen por ser construidas con conjuntos de parámetros comportamentales que no se encuentran cercanos al óptimo de la F.O.

Lo anterior es más claro al calcular las métricas de las bandas, como se muestra en la Tabla 1. Para este ejercicio se encontró que GLUE tiene la mayor

relación de contenido con 68.79 % pero el ancho promedio de las bandas es de 2 a 4 veces el ancho de los DDS-AU. El mayor contenido, usando el DDS-AU, se obtuvo con 200 DDS (57 %). La mejor desviación promedio respecto de los observados se obtuvo usando 100 DDS independientes ($116.85 \text{ m}^3/\text{s}$), seguido de las otras pruebas con DDS-AU. Por su parte GLUE, tuvo una desviación aproximadamente 40 % mayor que los muestreos realizados con DDS-AU ($182.97 \text{ m}^3/\text{s}$).

Tabla 1. Métricas asociadas a los anchos de banda (en m^3/s) y a los datos observados contenidos en ellas.

	50DDS	100DDS	200DDS	GLUE
Ancho medio	238.81	326.09	529.29	1061.06
Ancho máximo	2200.69	2387.09	2477.63	8687.79
Ancho Mínimo	17.59	36.10	71.41	136.32
Relación de contenido	32.55 %	42.85 %	57.02 %	68.79 %
Desviación Prom. de la Amplitud	122.61	116.85	120.10	182.97

6. Conclusiones y recomendaciones

A partir de las metodologías DDS-AU y del muestreo uniforme, se investigó la eficiencia y la representatividad de las simulaciones del modelo TOPMODEL en la cuenca del río Casanare. Se confrontaron las dos metodologías por medio de un número limitado de simulaciones, garantizando así una comparación fidedigna de los ejercicios.

Se encontró que, incluso en un problema de solo 10 parámetros, el algoritmo DDS-AU tiene una mayor eficiencia que el muestreo uniforme. Igualmente, para este problema 10-dimensional, una baja cantidad de iteraciones por DDS no conlleva a obtener bajos resultados de la F.O. Para problemas inversos más complejos (modelos físicamente basados o con un gran número de parámetros), la complejidad de la F.O. puede requerir más iteraciones por DDS.

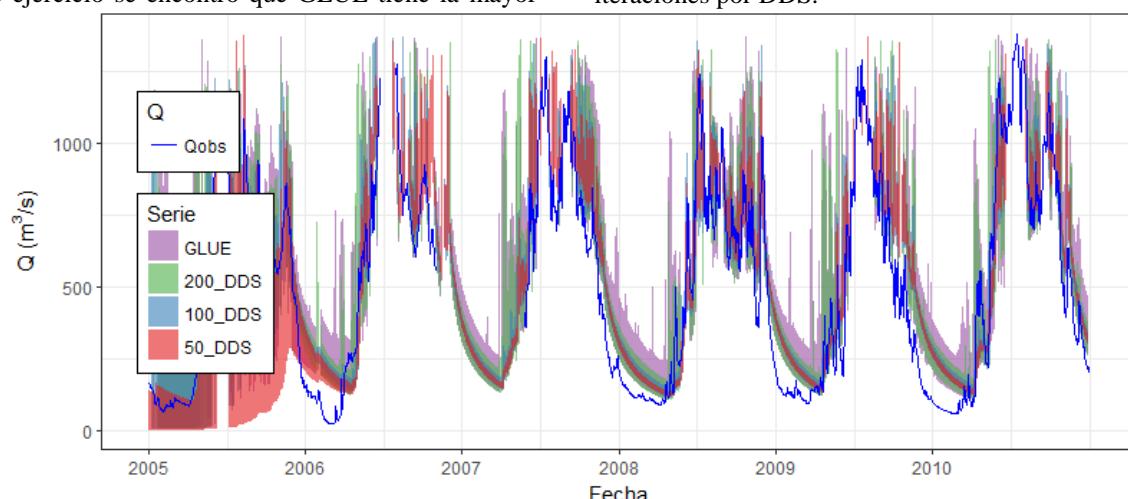


Figura 2. Bandas envolventes de las simulaciones obtenidas con las dos metodologías en conjunto con los caudales observados.

Tener varios conjuntos de parámetros muy cercanos al óptimo de la F.O. no implica que se obtengan más observaciones dentro de las bandas envolventes. Asimismo, tener anchos de bandas muy amplios puede implicar una mayor desviación del promedio del conjunto de simulaciones (serie de tiempo promedio que generalmente se usa posterior a una calibración donde se ha tenido en cuenta la equifinalidad del proceso de calibración). En consecuencia, se debe generar un balance entre un muestreo lo suficientemente abundante, que obtenga, de todas formas, resultados con desempeños eficientes.

Análisis en otras cuencas y con otros modelos son necesarios. Esto permitirá conocer más sobre las particularidades del método DDS-AU, de sus ventajas y desventajas, con respecto al muestreo uniforme.

Agradecimientos

Se quiere agradecer al revisor anónimo por los comentarios que permitieron complementar el manuscrito y a los editores de la revista. Igualmente, al Grupo de Investigación en Ingeniería de los Recursos Hídricos (GIREH) por sus comentarios sobre la idea de generar un código libre de la metodología DDS-AU.

Referencias

- Beck, H. E., Van Dijk, A. I. J. M., Levizzani, V., Schellekens, J., Miralles, D. G., Martens, B., & de Roo, A. (2017). MSWEP: 3-hourly 0.25° global gridded precipitation (1979-2015) by merging gauge, satellite, and reanalysis data. *Hydrology and Earth System Sciences*, 21(1), 589-615. <https://doi.org/10.5194/hess-21-589-2017>
- Beven, K., Lamb, R., Quinn, P., Romanowicz, R., & Freer, J. (1995). TOPMODEL. En V. P. Singh (Ed.), *Computer Models of Watershed Hydrology* (pp. 627-668). Highlands Ranch CO, USA: Water Resources Publications.
- Beven, Keith, & Binley, A. (1992). The future of distributed models: model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, 6(May 1991), 279-298. <https://doi.org/10.1002/hyp.3360060305>
- Buytaert, W. (2018). topmodel: Implementation of the Hydrological Model TOPMODEL in R. London, UK. Recuperado de <https://cran.r-project.org/web/packages/topmodel/index.html>
- Duan, Q., Sorooshian, S., & Gupta, H. V. (1992). Effective and efficient global optimization for conceptual rainfall-runoff models. *Water Resources Research*, 28(4), 1015-1031. <https://doi.org/10.1029/91WR02985>
- Duque-Gardeazábal, N., Zamora, D., & Rodríguez, E. (2018). Analysis of the Kernel Bandwidth Influence in the Double Smoothing Merging Algorithm to Improve Rainfall Fields in Poorly Gauged Basins. En 13th International Conference on Hydroinformatics (Vol. 3, pp. 635-626). <https://doi.org/10.29007/2xp6>
- R Core Team. (2017). R: A Language and Environment for Statistical Computing. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing. Recuperado de <https://www.r-project.org/>
- Tolson, B. A., & Shoemaker, C. A. (2007). Dynamically dimensioned search algorithm for computationally efficient watershed model calibration. *Water Resources Research*, 43(1), 1-16. <https://doi.org/10.1029/2005WR004723>
- Tolson, B. A., & Shoemaker, C. A. (2008). Efficient prediction uncertainty approximation in the calibration of environmental simulation models. *Water Resources Research*, 44(4), 1-19. <https://doi.org/10.1029/2007WR005869>