

Πολυτεχνείο Κρήτης Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος Διατμηματικό Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών «Έλεγχος Ποιότητας και Διαχείριση Περιβάλλοντος»

Διδακτορική Διατριβή

«Ανάπτυξη Μοντέλων Υπογείων Υδάτων με Χρήση Εργαλείων Υπολογιστικής Νοημοσύνης και Ποσοτικοποίηση της Αβεβαιότητας»

Ιωάννης Χ. Τριχάκης Διπλωματούχος Μηχανικός Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης MSc «Επιστήμη και Τεχνολογία Υδατικών Πόρων» Εθνικού Μετσοβίου Πολυτεχνείου

Εξεταστική Επιτροπή Καθηγητής Καρατζάς Γεώργιος (Επιβλέπων) Επίκουρος Καθηγητής Νικολός Ιωάννης Καθηγητής Νικολαΐδης Νικόλαος Καθηγητής Διαμαντόπουλος Ευάγγελος Καθηγητής Καλογεράκης Νικόλαος Καθηγητής Μαντόγλου Αριστοτέλης Καθηγητής Τσάνης Ιωάννης

Χανιά, 23 Μαρτίου 2011

Ιωάννης Χ. Τριχάκης

Ανάπτυξη Μοντέλων Υπογείων Υδάτων με Χρήση Εργαλείων Υπολογιστικής Νοημοσύνης και Ποσοτικοποίηση της Αβεβαιότητας

ΔΙΔΑΚΤΟΡΙΚΗ ΔΙΑΤΡΙΒΗ

Υποβλήθηκε στο Πρόγραμμα Μεταπτυχιακών Σπουδών του Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος – Πολυτεχνείο Κρήτης.

Εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος – Πολυτεχνείο Κρήτης, Τομέας Περιβαλλοντικής Υδραυλικής και Γεωπεριβαλλοντικής Μηχανικής.

Ημερομηνία Προφορικής Εξέτασης: 28 / 2 / 2011

ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ

- Γ. Π. Καρατζάς, Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης, Επιβλέπων.
- Ι. Κ. Νικολός, Επίκουρος Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης Πολυτεχνείου Κρήτης, Μέλος Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής.
- 3. Ν. Π. Νικολαΐδης, Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης, Μέλος Τριμελούς Συμβουλευτικής Επιτροπής.
- 4. Ε. Διαμαντόπουλος, Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης, Εξεταστής.
- 5. Α. Μαντόγλου, Καθηγητής Σχολής Αγρονόμων και Τοπογράφων Μηχανικών Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, Εξεταστής.
- 6. Ν. Καλογεράκης, Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης, Εξεταστής.
- Γ. Κ. Τσάνης, Καθηγητής Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος Πολυτεχνείου Κρήτης, Εξεταστής.

Τίτλος Διδακτορικής Διατριβής:

Ανάπτυξη Μοντέλων Υπογείων Υδάτων με Χρήση Εργαλείων Υπολογιστικής Νοημοσύνης και Ποσοτικοποίηση της Αβεβαιότητας

«Η έγκριση της παρούσης διδακτορικής Διδακτορικής Διατριβής από το Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος του Πολυτεχνείου Κρήτης δεν υποδηλώνει αποδοχή των γνωμών του συγγραφέως» (Ν. 5343/1932, άρθρο 202, παρ. 2)

Στην οικογένειά μου

Ευχαριστίες

Στο τελείωμα της μακρόχρονης διαδρομής, θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους εκείνους που με στήριξαν με υλικό ή ηθικό τρόπο κατά την διάρκεια αυτής της πορείας.

Ιδιαιτέρως θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντά μου Καθηγητή Γεώργιο Καρατζά του οποίου οι συμβουλές με ώθησαν στην αναζήτηση νέων δρόμων στην έρευνα των θεμάτων που απασχολούν τον κλάδο μας και ταυτόχρονα με επανέφεραν στον ορθό δρόμο όταν ο ενθουσιασμός ή/και ο εγωισμός με παρέσυραν μακριά από το στόχο μου.

Ιδιαίτερης σημασίας ήταν και η συμβολή του δεύτερου τελούντος χρέη επιβλέποντος της παρούσας εργασίας, Επίκουρου Καθηγητή Ιωάννη Νικολού, τον οποίο και ευχαριστώ για τη βοήθεια που μου προσέφερε ώστε να μπορέσω να κατανοήσω και να εξηγήσω την συμπεριφορά των εργαλείων τεχνητής νοημοσύνης και για την εμπιστοσύνη που μου έδειξε όλα αυτά τα χρόνια.

Για τη βοήθεια τόσο στην επίλυση ακαδημαϊκών προβλημάτων όσο και την ηθική στήριξη θα ήθελα να ευχαριστήσω τη Δρ. Ζωή Δόκου και για το υπέροχο κλίμα μέσα στο εργαστήριο τον Εμμανουήλ Βαρουχάκη και όλους τους προπτυχιακούς, μεταπτυχιακούς φοιτητές και υποψήφιους διδάκτορες που πέρασαν τα τελευταία χρόνια από το εργαστήριο Γεωπεριβαλλοντικής Μηχανικής.

Ευχαριστώ επίσης τα μέλη της Επταμελούς Εξεταστικής Επιτροπής για το χρόνο που διέθεσαν στην αξιολόγηση της παρούσας εργασίας και τις παρατηρήσεις τους για τη βελτίωση της ποιότητάς της.

Πίνακας Περιεχομένων

Πίνακας Περιεχομένωννι
Κατάλογος Εικόνωνix
Κατάλογος Πινάκων
Περίληψηxiv
Abstractxvi
Κεφάλαιο 1ο1
Εισαγωγή1
1.1 Σκοπός της Διατριβής1
1.2 Ορισμός του Προβλήματος2
1.3 Δομή της Διατριβής
1.4 Πρωτοτυπία της Διατριβής – Δημοσιεύσεις4
Κεφάλαιο 2ο
Θεωρητικό Υπόβαθρο6
2.1 Καρστικοί Υδροφορείς7
2.2 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα11
Αλγόριθμος Ανάστροφης Διάδοσης (Back Propagation)
Μέθοδος Συζυγούς Κλίσης (Conjugate Gradient)17
Τροποποιημένος Τυχαίος Περίπατος (Modified Random Walk)
Εφαρμογές στην Υδρολογία20
2.3 Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος24
Δομή του Πληθυσμού
Αρχικοποίηση
Μετάλλαξη
Διασταύρωση
Επιλογή
2.4 Η Μέθοδος Bootstrap (Αυτοδύναμη)33
Κεφάλαιο 3ο
Μεθοδολογία
3.1 Προτεινόμενη Δομή Νευρωνικού Δικτύου
Μεταβλητές Εισόδου και Εξόδου40
Δομή του Δικτύου

Αλγόριθμοι Εκπαίδευσης	. 45
3.2 Αρχεία Εισόδου και Αρχεία Εξόδου	. 48
Αρχείο «neural_init.txt»	. 49
Αρχείο «neural_data.txt»	. 50
Αρχείο «initialize.txt»	. 51
Αρχείο «out_minmax.txt»	. 52
Αρχείο «neuralerror.txt»	. 53
Αρχείο «chromosome.txt»	. 54
Αρχείο «fitness.txt»	. 55
Αρχείο «neural_weights.txt»	. 56
3.3 Χρονική Υστέρηση Παραμέτρων	. 57
Ανάλυση Συντελεστή Συσχέτισης	. 58
Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος	. 59
3.4 Μεσοπρόθεσμη Πρόβλεψη	. 59
3.4 Εύρεση Διαστημάτων Εμπιστοσύνης	. 60
Κεφάλαιο 4ο	. 64
Περιπτώσεις Εφαρμογής	. 64
4.1 Αττική	. 65
Γεωλογία της Περιοχής	. 66
Διαθέσιμα Δεδομένα	. 67
Δομή του Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου	. 70
Βελτιστοποίηση με Διαφορικό Εξελικτικό Αλγόριθμο	. 71
4.2 Τέξας	. 72
Γεωλογία της Περιοχής	. 73
Διαθέσιμα Δεδομένα	. 75
Δομή του Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου	. 78
Κεφάλαιο 5ο	. 80
Αποτελέσματα – Συζήτηση	. 80
Αττική	. 80
Ανάλυση συντελεστών συσχέτισης	. 83
Υδραυλικά ύψη ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ	. 84
Διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ	. 87
Βελτιστοποίηση του ΤΝΔ με χρήση ενός ΔΕ αλγορίθμου	. 91
Υδραυλικά ύψη ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ	. 91

Διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ
Χρησιμοποιώντας τα δύο ΤΝΔ για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη
Μέθοδος bootstrap103
Ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης για ονομαστική κάλυψη 95%
Αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης για ονομαστική κάλυψη 95%. 105
Πραγματική κάλυψη για διαφορετικά επίπεδα βεβαιότητας
Διαφορετικές μέθοδοι εκπαίδευσης110
Τέξας
Ανάλυση συντελεστών συσχέτισης113
Βαθμονόμηση και έλεγχος114
Διαφορετικές μέθοδοι εκπαίδευσης116
Κεφάλαιο 6ο
Συμπεράσματα
Κεφάλαιο 7ο
Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα125
Βιβλιογραφία
Παραρτήματα
Διαθέσιμα Δεδομένα για την Περιοχή της Αττικής

Κατάλογος Εικόνων

Εικόνα 1. Σχηματική απεικόνιση ενός καρστικού σχηματισμού	6
Εικόνα 2. Σχηματική απεικόνιση ενός νευρώνα	12
Εικόνα 3. Πλήρως διασυνδεδεμένο νευρωνικό δίκτυο με δύο κρυφά επίπεδα	13
Εικόνα 4. Διάγραμμα ροής της μεθόδου συζυγούς κλίσης	18
Εικόνα 5. Διάγραμμα ροής του τροποποιημένου τυχαίου περιπάτου όπως προτείνεται	από
τους Tan και Gu	19
Εικόνα 6. Αρχικοποίηση του πληθυσμού του διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου	25
Εικόνα 7. Δημιουργία της διαταραχής xr1 – xr2	26
Εικόνα 8. Μετάλλαξη	26
Εικόνα 9. Επιλογή. Επειδή έχει μικρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης, το ${f u}{f 0}$	
αντικαθιστά το διάνυσμα με αριθμό 0 στην επόμενη γενιά	27
Εικόνα 10. Ένα νέο διάνυσμα του πληθυσμού μεταλλάσσεται με μια τυχαία υπολογισμ	ιένη
διαταραχή	27
Εικόνα 11. Επιλογή. Σε αυτή την περίπτωση, το δοκιμαστικό διάνυσμα χάνει	28
Εικόνα 12. Ψευδο-κώδικας για μια απλοποιημένη μορφή των λειτουργιών γένεσης κα	ι
ελέγχου του ΔΕ	28
Εικόνα 13. Διαφορική μετάλλαξη: η πολλαπλασιασμένη επί ένα συντελεστή $m F$ διαφορ	ά
$xr1$, $m{g}-xr2$, $m{g}$, προστίθεται στο αρχικό διάνυσμα, $xr0$, $m{g}$ για να παραχθεί το	
μεταλλαγμένο <i>νi, g</i>	30
Εικόνα 14. Τα πιθανά επιπλέον δοκιμαστικά διανύσματα $u^\prime i,g$ και $u^{\prime\prime}i,g$ όταν τα xi,g	g και
${\it vi}, {\it g}$ διασταυρώνονται ομοιόμορφα	31
Εικόνα 15. Σχηματική αναπαράσταση της διαδικασίας εφαρμογής της μεθόδου bootst	rap.
	33
Εικόνα 16. Γραφική απεικόνιση της διαδικασίας δημιουργίας ενός συνόλου	34
Εικόνα 17. Διάγραμμα Ροής Τροποποιημένου Τυχαίου Περιπάτου όπως υλοποιήθηκε.	47
Εικόνα 18. Τυπική μορφή αρχείου «neural_init.txt»	49
Εικόνα 19. Τυπική μορφή αρχείου «neural_data.txt»	50
Εικόνα 20. Τυπική μορφή αρχείου «initialize.txt»	51
Εικόνα 21. Τυπική μορφή αρχείου «out_minmax.txt»	52
Εικόνα 22. Τυπική μορφή αρχείου «neuralerror.txt»	53
Εικόνα 23. Τυπική μορφή αρχείου «chromosome.txt»	54
Εικόνα 24. Τυπική μορφή αρχείου «fitness.txt»	55
Εικόνα 25. Τυπική μορφή αρχείου «neural_weights.txt»	56
Εικόνα 26. Διάγραμμα Ροής του Αλγορίθμου για Μεσοπρόθεσμη Πρόβλεψη	60
Εικόνα 27. Διάγραμμα ροής για την εφαρμογή της μεθόδου bootstrap σε τεχνητά	
νευρωνικά δίκτυα	61
Εικόνα 28. Χάρτης της ΒΑ Αττικής με σημειωμένη τη θέση του αντλιοστασίου	65
Εικόνα 29. Πανοραμική εικόνα της περιοχής όπως φαίνεται στην εφαρμογή Google Ea	rth.66
Εικόνα 30. Υδρογεωλογικός χάρτης της επιφανειακής λεκάνης απορροής Μαλακάσας	
Μαυροσουβάλας	67

Εικόνα 31. Δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου όπως αυτό εφαρμόστηκε στην περιοχή
της Αττικής
Εικόνα 32. Θέση του πηγαδιού παρατήρησης J-17 στον χάρτη του υδροφορέα Έντουαρντς.
Εικόνα 33. Χάρτης της Κομητείας Μπέξαρ (Bexar County) με σημειωμένη τη θέση του
πηγαδιού παρακολούθησης J-17 (AY-68-37-203). (Schindel et al. 2007)
Εικόνα 34. Δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου όπως αυτό εφαρμόστηκε στην περιοχή
του Τέξας
Εικόνα 35. Αρχική κατάσταση αναφοράς των αποτελεσμάτων προσομοίωσης του
υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού
Εικόνα 36. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο
πηγάδι στην αρχική κατάσταση αναφοράς
Εικόνα 37. Αρχική κατάσταση αναφοράς των αποτελεσμάτων προσομοίωσης του
υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού
Εικόνα 38. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο
πηγάδι στην αρχική κατάσταση αναφοράς
Εικόνα 39. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού με
χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από την ανάλυση των συντελεστών
συσχέτισης
Εικόνα 40. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο
πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών
συσχέτισης
Εικόνα 41. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού
με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από την ανάλυση των συντελεστών
συσχέτισης
Εικόνα 42. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο
πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών
συσχέτισης
Εικόνα 43. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου
πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των
συντελεστών συσχέτισης
Εικόνα 44. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών μεταβολής στάθμης ως προς τις
παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη
μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης
Εικόνα 45. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του δευτέρου
πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των
συντελεστών συσχέτισης
Εικόνα 46. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών μεταβολής στάθμης ως προς τις
παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη
μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης
Εικόνα 47. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους
του πρώτου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε
από τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης

εικόνα 48. Αποτελεόματα μετατροπης της προσομοιωμενής μεταρολής σορασλικου σφοος
του δευτερού πηγαδιού δε σομασκικό σφος με χρηση της χρονικής συτερησης που
(1) είνα 49. Πορεία συγκλισης της σιασικασίας ρελιτοτοποτησης με σιαφορικό εξελικτικό
αλγοριθμο για το πρωτο τηδ
εικονα 50. Αποτελεοματα προσομοιωσης του υσραυλικου υψους του πρωτου πηγαδιου με
χρηση της χρονικής υστερήσης που προεκυψε από τον διαφορικό εξελικτικό αλγοριθμό. $.92$
= $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$ $+$
ληγάδι και προσδιορισμο της χρονικής υστερήσης από τον διαφορικό εξελικτικό αλγοριθμό.
Εικόνα 52. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού
με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο. οз
Εικόνα 53. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο
πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.
Εικόνα 54. Πορεία σύγκλισης της διαδικασίας βελτιστοποίησης με διαφορικό εξελικτικό
αλγόριθμο για το δεύτερο ΤΝΔ95
Εικόνα 55. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου
πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό
αλγορισμο
εικόνα 38. Διαγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρωτό πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.
96 Εικόνα 57. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου
πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό
αλγόριθμο
Εικόνα 58. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο
πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.
Εικόνα 59. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους
του πρώτου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε
από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο97
Εικόνα 60. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους
του δευτέρου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που
προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο
Εικόνα 61. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη του υδραυλικού ύψους χρησιμοποιώντας τα
αποτελέσματα του πρώτου ΤΝΔ (πηγάδι 1 – 1η και 2η χρονική περίοδος)
Εικόνα 62. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη του υδραυλικού ύψους χρησιμοποιώντας τα
αποτελέσματα του πρώτου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η χρονική περίοδος)
Εικόνα 63. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα
αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 1 – 1η και 2η χρονική περίοδος)
Εικόνα 64. Μετατροπή σε υδραυλικό ύψος της μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης της μεταβολής
της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου TNΔ (πηγάδι 1 − 1η και 2η
χρονική περίοδος)

Εικόνα 65. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα
αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η χρονική περίοδος) 102
Εικόνα 66. Μετατροπή σε υδραυλικό ύψος της μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης της μεταβολής
της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η
χρονική περίοδος)
Εικόνα 67. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης
95% για το πρώτο πηγάδι
Εικόνα 68. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης
95% για το δεύτερο πηγάδι
Εικόνα 69. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα
εμπιστοσύνης 95% για το πρώτο πηγάδι106
Εικόνα 70. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα
εμπιστοσύνης 95% για το δεύτερο πηγάδι106
Εικόνα 71. Ποσοστά πραγματικής κάλυψης των ποσοστιαίων διαστημάτων εμπιστοσύνης
ως προς τα ονομαστικά
Εικόνα 72. Ποσοστά πραγματικής κάλυψης των αμερόληπτων επιταχυμένων διαστημάτων
εμπιστοσύνης ως προς τα ονομαστικά109
Εικόνα 73. Ρυθμός σύγκλισης του σφάλματος αξιολόγησης για τις τρεις μεθόδους
εκπαίδευσης στην περιοχή της Αττικής111
Εικόνα 74. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο
πρώτο πηγάδι για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.
Εικόνα 75. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο
δεύτερο πηγάδι για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.
Εικόνα 76. Παρατηρημένες και προσομοιωμένες τιμές μεταβολής υδραυλικού ύψους στο
πηγάδι παρατήρησης J-17 (AY-68-37-203)
Εικόνα 77. Λεπτομέρεια των παρατηρημένων και προσομοιωμένων τιμών μεταβολής
υδραυλικού ύψους στο πηγάδι παρατήρησης J-17 (ΑΥ-68-37-203)
Εικόνα 78. Ρυθμός σύγκλισης του σφάλματος αξιολόγησης για τις τρεις μεθόδους
εκπαίδευσης στην περιοχή του Τέξας117
Εικόνα 79. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο
πηγάδι παρατήρησης για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής
συνάρτησης

Κατάλογος Πινάκων

Πίνακας 1. Συνοπτική παρουσίαση προηγούμενων εφαρμογών ΤΝΔ σε υπόγεια ύδατα 23
Πίνακας 2. Κάτω και άνω όρια των μεταβλητών απόφασης της διαδικασίας
βελτιστοποίησης
Πίνακας 3. Διαθέσιμες ημερήσιες τιμές παραμέτρων στην περιοχή του Τέξας
Πίνακας 4. Συντελεστές συσχέτισης μεταξύ βροχόπτωσης (από 3 βροχομετρικούς σταθμούς
- Β1, Β2, Β3) και διαφοράς υδραυλικού ύψους (σε 2 πηγάδια - Π1, Π2) για διαφορετικές
τιμές χρονικής υστέρησης
Πίνακας 5. Σφάλμα εκπαίδευσης, αξιολόγησης (κανονικοποιημένα), RMSE της περιόδου
εκπαίδευσης και αξιολόγησης και RMSE της περιόδου ελέγχου κάθε TNΔ με και χωρίς
βελτιστοποίηση
Πίνακας 6. Θεωρητική και πραγματική κάλυψη των ποσοστιαίων διαστημάτων
εμπιστοσύνης107
Πίνακας 7. Θεωρητική και πραγματική κάλυψη των αμερόληπτων διαστημάτων
εμπιστοσύνης
Πίνακας 8. Σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης και απαιτούμενος χρόνος για κάθε
αλγόριθμο εκπαίδευσης στην περιοχή της Αττικής110
Πίνακας 9. Συντελεστές συσχέτισης της βροχόπτωσης και της άντλησης με τη μεταβολή
υδραυλικού ύψους για διάφορες τιμές χρονικής υστέρησης
Πίνακας 10. Συχνότητα και πιθανότητα το σφάλμα να βρίσκεται εντός συγκεκριμένου
εύρους
Πίνακας 11. Σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης και απαιτούμενος χρόνος για κάθε
αλγόριθμο εκπαίδευσης στην περιοχή του Τέξας116

Περίληψη

Οι εφαρμογές που μπορούν να βρουν τα εργαλεία της υπολογιστικής νοημοσύνης για την προσομοίωση υπογείων υδάτων αποτέλεσαν το πεδίο έρευνας της παρούσας διατριβής. Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αποτελούν μία εναλλακτική μέθοδο η οποία δεν απαιτεί επακριβή γνώση των γεωλογικών χαρακτηριστικών ενός υδροφορέα, αλλά σειρές παρατηρημένων τιμών υδρολογικών και υδρογεωλογικών παραμέτρων.

Για να έχει μεγαλύτερο φυσικό νόημα το μοντέλο, έγινε προσπάθεια να συνδεθεί όσο γίνεται περισσότερο με το υδατικό ισοζύγιο. Έτσι οι παράμετροι εισόδου και εξόδου επιλέχθηκαν ούτως ώστε να περιγράφουν κατά το δυνατόν πληρέστερα τους χρονικά μεταβαλλόμενους όρους του υδατικού ισοζυγίου. Σχετικά με την επιλογή της παραμέτρου εξόδου, αναπτύχθηκαν οι λόγοι αλλά και αποδείχθηκε από τα αποτελέσματα η υπεροχή της μεταβολής της στάθμης, σε σύγκριση με την ίδια τη στάθμη του υδροφορέα, ως παραμέτρου εξόδου του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Οι δύο εφαρμογές σε περιοχές με διαθέσιμα δεδομένα συνηγορούν στην ικανότητα της μεθοδολογίας να προσομοιώσει το φυσικό σύστημα. Ταυτόχρονα καταδεικνύουν τα σημεία εκείνα που πρέπει να τύχουν της προσοχής του ερευνητή, όπως η σωστή επιλογή παραμέτρων εισόδου και εξόδου, ο προσδιορισμός της χρονικής υστέρησης των παραμέτρων εισόδου και η βελτιστοποίηση της δομής του νευρωνικού δικτύου.

Για τον προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης προτείνονται δύο εναλλακτικές μέθοδοι. Η ανάλυση συντελεστών συσχέτισης μπορεί να παρέχει μια πρώτη εκτίμηση σε ελάχιστο χρόνο, αλλά είναι δυνατόν να επηρεαστεί από τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των παραμέτρων. Ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος είναι μία πιο εξελιγμένη μέθοδος που μπορεί να καταλήξει σε βέλτιστες τιμές χρονικής υστέρησης και ταυτόχρονα να υποδείξει τη βέλτιστη δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Στην περιοχή της Αττικής επιλέχθηκαν ως παράμετροι εισόδου η θερμοκρασία, η βροχόπτωση από τρία σημεία, ο ρυθμός άντλησης δεκαέξι πηγαδιών και η στάθμη κατά την προηγούμενη χρονική στιγμή δύο πηγαδιών παρατήρησης, ενώ εξετάστηκε και το ενδεχόμενο να συμπεριληφθεί ο αριθμός της ημέρας. Δύο διαφορετικά τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αναπτύχθηκαν, το πρώτο με το υδραυλικό ύψος στα πηγάδια παρατήρησης ως παραμέτρους εξόδου και το δεύτερο με τις μεταβολές της στάθμης στα πηγάδια παρατήρησης. Τα δύο νευρωνικά δίκτυα, μετά από τη βελτιστοποίηση της δομής τους με χρήση διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου, χρησιμοποιήθηκαν για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη. Τα αποτελέσματα του δευτέρου δικτύου κατέδειξαν την ικανότητά του να προσομοιώνει το φυσικό σύστημα χωρίς να συσσωρεύει το σφάλμα.

Το βελτιστοποιημένο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο αποτέλεσε το μοντέλο στο οποίο εφαρμόστηκε η μέθοδος bootstrap για τον προσδιορισμό διαστημάτων εμπιστοσύνης. Έγινε σύγκριση μεταξύ δύο διαφορετικών τρόπων υπολογισμού των διαστημάτων. Η ποσοστιαία μέθοδος απαιτεί λιγότερο χρόνο και παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα ενώ η αμερόληπτη επιταχυμένη είναι πιο εξελιγμένη, αλλά η επιλογή της αυξάνει τον υπολογιστικό φόρτο. Τα αποτελέσματα της πραγματικής κάλυψης των διαστημάτων εμπιστοσύνης συγκρίθηκαν με τις θεωρητικά αναμενόμενες τιμές. Αν και υπήρχαν διαφωνίες μεταξύ πραγματικής και ονομαστικής κάλυψης, κάτι τέτοιο θεωρείται αναμενόμενο σε μικρό βαθμό. Επίσης τα διαστήματα εμπιστοσύνης δε λαμβάνουν υπ' όψιν τους ακραία σημεία τα οποία δεν μπορεί να περιγράψει το μοντέλο ανεξαρτήτως βαθμονόμησης. Το σύνολο δεδομένων ελέγχου του δευτέρου πηγαδιού, που δεν περιείχε ακραία σημεία, έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα. Αυτό και μόνο το γεγονός αρκεί για να θεωρηθεί η μέθοδος πολλά υποσχόμενη.

Τέλος, ένας αλγόριθμος εκπαίδευσης βασισμένος στη μέθοδο του τυχαίου περιπάτου συγκρίθηκε με τους ευρέως χρησιμοποιούμενους αλγορίθμους backpropagation και συζυγών κλίσεων (conjugate gradient). Τα αποτελέσματά του έδειξαν βελτιωμένη συμπεριφορά του τεχνητού νευρωνικού δικτύου αλλά με το τίμημα του δεκαπλασιασμού του απαιτούμενου χρόνου, που εγείρει ερωτήματα για τη χρησιμότητα σε πρακτικές εφαρμογές.

Η εφαρμογή σε μία περιοχή του Τέξας στις Η.Π.Α. έδωσε λιγότερο καλά αποτελέσματα κυρίως λόγω της έλλειψης σειρών δεδομένων άντλησης για κάθε πηγάδι άντλησης στην περιοχή. Η εκπαίδευση με τον αλγόριθμο του τροποποιημένου τυχαίου περιπάτου κατέληξε σε καλύτερη λύση όπως και στην προηγούμενη περιοχή ενώ ο χρόνος εκπαίδευσης αυξήθηκε κατά έξι φορές.

Abstract

Applications of computational intelligence tools for ground water simulation were this thesis's object of research. Artificial neural networks constitute an alternative method, which does not require exact knowledge of an aquifer's geological characteristics, instead, time series of hydrological and hydrogeological parameters values.

In order for the model to achieve a higher level of physical meaning, effort has been made to connect it as much as possible to the aquatic equilibrium. Thus the input and output parameters were chosen so that they describe at the highest possible degree the time varying terms of the aquatic equilibrium. Concerning the output parameter choice reasoning was provided along with results to support the hydraulic head change supremacy.

Two applications in areas with available data advocate for the methodology's ability to simulate the physical system. Simultaneously demonstrate those points, which should be cared for by the researcher, like the correct choice of input and output parameters, the input parameters' time lag determination and the neural network structure optimization.

For the time lag determination two alternative methods are proposed. The correlation coefficient analysis can provide a first estimate in minimum time, although it is susceptible to affected by parameter interactions. A differential evolutionary algorithm is a more sophisticated method, which can result in optimal time lag values while simultaneously indicate the optimal artificial neural network structure.

In the Attica case study, the temperature, rainfall from three stations, pumping rate of sixteen wells and the previous time step hydraulic head at two observation wells were selected as input parameters, while the day number was examined in order to assess if it should be included. Two different artificial neural networks were developed, the first having hydraulic head at the observation wells as output parameters and the second having hydraulic head change at the observation wells. The two neural networks after optimization of their structure using a differential evolutionary algorithm were utilized for midterm prediction. The second neural network's results prove its ability to simulate the physical system without error accumulation.

The optimized artificial neural network constituted the model on which the bootstrap method was applied in order to estimate confidence intervals. Two different methods of intervals calculation were compared. The percentile method requires less time and provides satisfactory results, while the bias-corrected and accelerated is more sophisticated but its choice increases the computational effort. The actual coverage results were compared to the theoretically expected values. Even though there was a slight mismatch between actual and nominal coverage this is considered expected to a small degree. Furthermore, the confidence intervals do not take into account outliers that the model is unable to describe regardless of the calibration. The second well's testing data set, which did not contain outliers, provided the best results. This fact alone is sufficient to consider the method promising.

Finally, a training algorithm based on the random walk method was compared to the widely used algorithms backpropagation and conjugate gradient. The results showed an

improved behavior yet with the price of a tenfold increase of the required time for a single run, which raises questions concerning the effectiveness for practical applications.

The application in Texas, U.S.A. resulted in a worse simulation of the physical system, mainly because of the lack of pumping rate data time series for each individual well in the region. Training with the modified random walk based algorithm reached an improved solution similarly to the previous case study while the training time increased six times.

Κεφάλαιο 1ο

Εισαγωγή

Η διατριβή αυτή συνετάχθη ως μέρος των υποχρεώσεων για την απόκτηση του Διδακτορικού Διπλώματος του Διατμηματικού Προγράμματος Μεταπτυχιακών Σπουδών «Έλεγχος Ποιότητας και Διαχείριση Περιβάλλοντος» του Τμήματος Μηχανικών Περιβάλλοντος, του τμήματος Μηχανικών Παραγωγής και Διοίκησης, του Τμήματος Μηχανικών Ορυκτών Πόρων και του Γενικού Τμήματος του Πολυτεχνείου Κρήτης, το οποίο συντονίζεται από το Τμήμα Μηχανικών Περιβάλλοντος.

1.1 Σκοπός της Διατριβής

Στην παρούσα διατριβή μελετώνται οι δυνατότητες χρήσης τεχνικών υπολογιστικής νοημοσύνης, όπως τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα και οι εξελικτικοί αλγόριθμοι, για την προσομοίωση της απόκρισης καρστικών υδροφορέων. Η προσέγγιση αυτή διαφέρει εντελώς από την μέθοδο της προσομοίωσης με μαθηματικά μοντέλα. Αντιθέτως, τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα δεν περιγράφουν την ροή με βάση εξισώσεις κίνησης αλλά στηρίζονται στην προσομοίωση του υδατικού ισοζυγίου. Το μοντέλο ακολουθεί μία προσέγγιση μαύρου κουτιού (black box) και προσπαθεί να χαρτογραφήσει τις σχέσεις μεταξύ υδρολογικών και υδρογεωλογικών παραμέτρων εισόδου και εξόδου.

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα είναι ένα πολύ χρήσιμο εργαλείο στην περιγραφή περίπλοκων σχέσεων μεταξύ διαφορετικών παραμέτρων. Με χρήση αυτών μπορούν να προσομοιωθούν περίπλοκα φυσικά συστήματα των οποίων τα χαρακτηριστικά δεν είναι εκτενώς γνωστά. Η περιγραφή του υδρολογικού κύκλου με νευρωνικά δίκτυα και άλλες μορφές τεχνητής νοημοσύνης είναι μια νέα περιοχή έρευνας στον κλάδο της καρστικής υδρολογίας. Ήδη έχουν γίνει μελέτες πάνω στο θέμα με περιορισμένο αριθμό δημοσιεύσεων. Με τη βοήθεια των τεχνητών νευρωνικών δικτύων μπορούν να βρεθούν οι υπάρχουσες σχέσεις μεταξύ των παραμέτρων του υδρολογικού κύκλου και να προσδιοριστούν παράμετροι ενδιαφέροντος (όπως η στάθμη υπόγειου νερού) από παραμέτρους που μετρώνται στο πεδίο ή είναι αναμενόμενες με βάση διάφορα υδρολογικά σενάρια (βροχοπτώσεις, θερμοκρασίες, παροχές).

Σε δεύτερη φάση εξετάζεται η δυνατότητα ποσοτικοποίησης του σφάλματος ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου με τη μέθοδο bootstrap ούτως ώστε να δημιουργηθεί ένα μοντέλο με στοχαστική (stochastic) αντί για προσδιοριστική (deterministic) έξοδο, το οποίο να μπορεί να χρησιμοποιηθεί από λήπτες αποφάσεων για ορθή διαχείριση των υπογείων υδάτων. Η ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας έχει ιδιαίτερη αξία σε κάθε περίπτωση λήψης αποφάσεων και η διαχείριση υδάτινων πόρων είναι κατ' εξοχήν ένας τομέας όπου οι αποφάσεις επηρεάζουν μεγάλο αριθμό ατόμων και οφείλουν να είναι όσο καλύτερα στοιχειοθετημένες γίνεται.

Μετά την ανάπτυξη της προτεινόμενης μεθοδολογίας γίνεται εφαρμογή σε δύο περιοχές μελέτης με σκοπό την επιβεβαίωση της αξίας και της δυνατότητας χρήσης ακόμα και σε καρστικούς υδροφορείς. Η λειτουργία ανεξάρτητα από το υδρογεωλογικό καθεστώς του υδροφορέα δεν αποκλείει την εφαρμογή και σε πορώδεις ή υδροφορείς που εκτείνονται σε κάποιο περίπλοκο γεωλογικό σύστημα, που αποτελείται από ένα συνδυασμό τόσο από καρστικούς όσο και πορώδεις σχηματισμούς.

Η πρώτη εφαρμογή γίνεται για την περιοχή του αντλιοστασίου της ΕΥΔΑΠ στη βόρεια Αττική, για την οποία υπάρχουν διαθέσιμες χρονοσειρές. Μια τέτοια εφαρμογή μπορεί να δώσει ένα μαθηματικό ομοίωμα του υδροφορέα, το οποίο μπορεί να επεκταθεί και για δεδομένα που αναμένονται μελλοντικά. Για την εξακρίβωση της ικανότητας προσομοίωσης για διάστημα που υπερβαίνει το ημερήσιο χρονικό βήμα, έγινε μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη της στάθμης με την αντικατάσταση της παρατηρημένης τιμής με την προσομοιωμένη στο σύνολο δεδομένων εισόδου.

Η δεύτερη εφαρμογή γίνεται στο καρστικό σύστημα του υδροφορέα Έντουαρντς (Edwards Aquifer) στο Τέξας των Ηνωμένων Πολιτειών Αμερικής. Λόγω της έλλειψης δεδομένων αντλήσεων από γεωτρήσεις και πηγάδια, στη συγκεκριμένη περιοχή μελέτης η μεθοδολογία προσαρμόστηκε στα διαθέσιμα στοιχεία. Σε περιπτώσεις στις οποίες τα στοιχεία δεν είναι πλήρη, σίγουρα εισάγεται στο μοντέλο ένα σφάλμα, αλλά εξετάζεται η ικανότητα του μοντέλου να δώσει μια εκτίμηση της τάσης, ακόμα κι αν δεν καταφέρει να περιγράψει με ακρίβεια την απόκριση του υδροφορέα.

1.2 Ορισμός του Προβλήματος

Η σημασία των υπογείων υδάτων για τον σημερινό πολιτισμό είναι τεράστια καθώς αποτελούν το 80% του διαθέσιμου στον άνθρωπο γλυκού νερού για την κάλυψη των (υδρευτικών, αρδευτικών κ.ά.) αναγκών του. Η Οδηγία πλαίσιο 2000/60 ΕΚ και η ενσωμάτωση αυτής στην ελληνική νομοθεσία με τον Ν. 3199/2006 προβλέπουν την παρακολούθηση των υπογείων υδάτων που χρησιμοποιούνται ή αναμένεται να χρησιμοποιηθούν για ύδρευση, με σκοπό τη διατήρηση της καλής ποσοτικής και ποιοτικής κατάστασης.

Για τη σύνταξη ενός σχεδίου βέλτιστης διαχείρισης των αντλήσεων σε μια περιοχή είναι απαραίτητη η γνώση της κατάστασης στην οποία θα περιέλθει ο υδροφορέας μετά την εφαρμογή οποιουδήποτε υποψήφιου σεναρίου. Απαιτείται συνεπώς η χρήση ενός μοντέλου για την προσομοίωση της κατάστασης του φυσικού συστήματος. Ανάλογα με το είδος της εξόδου τους, τα μοντέλα μπορούν να διαχωριστούν σε προσδιοριστικά ή στοχαστικά. Τα στοχαστικά μοντέλα προσφέρουν εκτός από μια προσομοιωμένη τιμή της παραμέτρου εξόδου και μία εκτίμηση της αβεβαιότητας.

Για την προσομοίωση των υπογείων υδάτων συνήθης πρακτική αποτελεί η χρήση αριθμητικών μοντέλων. Τα μοντέλα αυτά βασίζονται σε μεθόδους, όπως τα πεπερασμένα στοιχεία ή οι πεπερασμένες διαφορές, για την επίλυση των μερικών διαφορικών εξισώσεων κίνησης των υπογείων υδάτων. Η εφαρμογή των μοντέλων αυτών προϋποθέτει την ακριβή γνώση των γεωλογικών και υδρογεωλογικών συνθηκών που επικρατούν σε ολόκληρη την έκταση του υδροφορέα. Η απόκτηση των στοιχείων αυτών συχνά αποτελεί πρόκληση, ειδικά στις περιπτώσεις όπου οι υδρογεωλογικές συνθήκες είναι εξαιρετικά περίπλοκες (π.χ. καρστικοί σχηματισμοί).

Ένας διαφορετικός τρόπος προσομοίωσης των υπογείων υδάτων είναι η χρήση μοντέλων που βασίζονται στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Τα μοντέλα αυτά,

ενώ δεν απαιτούν τη λεπτομερή γνώση των υδρογεωλογικών χαρακτηριστικών (π.χ. υδραυλική αγωγιμότητα, πορώδες), χρειάζεται να εκπαιδευτούν με παρατηρημένα υδρολογικά δεδομένα (π.χ. βροχόπτωση, θερμοκρασία) και υδρογεωλογικά δεδομένα (π.χ. στάθμη υπογείων υδάτων). Η δημιουργία ενός τέτοιου μοντέλου παρουσιάζει εξειδικευμένες προκλήσεις, τόσο κατά το στάδιο επιλογής των παραμέτρων εισόδου και εξόδου όσο και κατά το στάδιο της εκπαίδευσης, με σκοπό την εύρεση των βέλτιστων τιμών των συναπτικών βαρών του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Το στάδιο της επιλογής των παραμέτρων εισόδου και εξόδου μπορεί να διαχωριστεί σε δύο τμήματα. Αρχικά πρέπει να καθοριστεί το είδος των παραμέτρων οι οποίες θα αποτελέσουν τις παραμέτρους εισόδου και εξόδου και μετέπειτα πρέπει να καθοριστεί και η χρονική υστέρηση που πιθανόν να εμφανίζεται σε ορισμένες από αυτές. Η επιλογή ενός εξεζητημένου αλγορίθμου εκπαίδευσης του δικτύου είναι δυνατόν να συμβάλει στη μείωση του χρόνου εκπαίδευσης ή να καταφέρει να εντοπίσει ένα καλύτερο σύνολο συναπτικών βαρών που να μειώνει τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Είναι εύκολα αντιληπτό ότι για τη λήψη αποφάσεων είναι επιθυμητή η ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας. Υπάρχει η πιθανότητα μία προτεινόμενη λύση η οποία αρχικά φαίνεται καλύτερη από μία δεύτερη, να παρουσιάζει τόσο μεγάλη αβεβαιότητα στις τιμές των παραμέτρων εξόδου που τελικά να μην είναι προτιμητέα.

1.3 Δομή της Διατριβής

Στο πρώτο κεφάλαιο της παρούσας διατριβής παρουσιάζεται αρχικά ο σκοπός και ορίζεται το προς επίλυση πρόβλημα. Γίνεται ανάλυση της δομής της διατριβής και αναφέρονται η πρωτοτυπία της, καθώς και οι δημοσιεύσεις που έχουν προκύψει κατά τη διάρκεια των ετών που προηγήθηκαν μέσα από την έρευνα στο γνωστικό αντικείμενο του θέματος της διατριβής.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια ανάλυση του θεωρητικού υποβάθρου στο οποίο στηρίχτηκε, καθώς και μια βιβλιογραφική ανασκόπηση παλαιότερων δημοσιευμένων εργασιών που σχετίζονται με την παρούσα. Επεξηγούνται οι βασικές αρχές των εργαλείων υπολογιστικής νοημοσύνης που χρησιμοποιήθηκαν (τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος) και παρουσιάζεται το βασικό μαθηματικό υπόβαθρο της μεθόδου bootstrap για τη δημιουργία διαστημάτων εμπιστοσύνης.

Μια λεπτομερής περιγραφή της μεθοδολογίας που ακολουθήθηκε αναλύεται στο τρίτο κεφάλαιο. Εκτός από την προτεινόμενη δομή του νευρωνικού δικτύου, αναφέρεται ο τρόπος με τον οποίο πρέπει να δημιουργηθούν τα αρχεία εισόδου, ενώ παρουσιάζονται και παραδείγματα αρχείων εξόδου. Παρουσιάζονται επίσης σε διαγράμματα ροής και επεξηγούνται τα βήματα που ακολουθήθηκαν για τον προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης, την μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη των παραμέτρων εξόδου, αλλά και την εύρεση των διαστημάτων εμπιστοσύνης των προσομοιωμένων τιμών των παραμέτρων εξόδου.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα δεδομένα και γίνεται περιγραφή των πραγματικών περιοχών μελέτης στις οποίες έγινε εφαρμογή της μεθοδολογίας. Συνοπτικά αναφέρονται στοιχεία για τη γεωλογία κάθε περιοχής και σημειώνονται οι ιδιαιτερότητες της κάθε περιοχής. Τα διαθέσιμα δεδομένα καταγράφονται αναλυτικά, ενώ ακολουθεί η αιτιολογημένη επιλογή της δομής του τεχνητού νευρωνικού δικτύου για τη βέλτιστη προσομοίωση του φυσικού συστήματος της κάθε περιοχής.

Το πέμπτο κεφάλαιο περιέχει τα αποτελέσματα από τις εφαρμογές της μεθοδολογίας και τον σχολιασμό τους. Χωρίζεται σε δύο τμήματα, ένα για κάθε περιοχή εφαρμογής. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται περιλαμβάνουν μεταξύ άλλων διαγράμματα των παρατηρημένων και των προσομοιωμένων τιμών ως προς τα χρονικά σημεία δεδομένων, συγκριτικά διαγράμματα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες, καθώς και πίνακες με τις τιμές των σφαλμάτων. Γίνεται ανάλυση των αποτελεσμάτων και οι προτάσεις-παραινέσεις προς μελλοντικούς χρήστες αυτών των εργαλείων.

Γενικά συμπεράσματα που προέκυψαν από την εργασία κωδικοποιούνται στο έκτο κεφάλαιο και αναφέρονται εν συντομία οι καινοτομίες της παρούσας διατριβής. Στο έβδομο προτείνονται πεδία για μελλοντική έρευνα και συνοψίζονται οι προτάσεις που βελτιώνουν την ικανότητα προσομοίωσης των υπογείων υδροφορέων με μοντέλα στηριζόμενα στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Προεκτάσεις στην έρευνα οι οποίες είτε προγραμματίζεται να διερευνηθούν στο άμεσο μέλλον είτε προτείνονται ως ιδέες για άλλες εργασίες, κλείνουν τα κεφάλαια της παρούσας διατριβής.

1.4 Πρωτοτυπία της Διατριβής - Δημοσιεύσεις

Η χρήση μοντέλων τεχνητών νευρωνικών δικτύων για την προσομοίωση της στάθμης υπογείων υδάτων δεν έχει βρει ευρεία εφαρμογή στην Ελλάδα, κυρίως λόγω της έλλειψης των απαιτούμενων μετεωρολογικών και υδρολογικών δεδομένων. Η παρούσα εφαρμογή είναι η πρώτη που πραγματοποιείται για δεδομένα με ημερήσιο χρονικό βήμα. Δύο είναι οι σημαντικότερες καινοτομίες της διατριβής, οι οποίες αποτελούν τη συμβολή στην υποβοηθούμενη από υπολογιστική νοημοσύνη υδρολογία. Αυτές αποτελούν η απόδειξη της ανωτερότητας της χρήσης της μεταβολής της στάθμης ως παραμέτρου εξόδου αντί της στάθμης και η εύρεση διαστημάτων εμπιστοσύνης για ένα μοντέλο υπογείων υδάτων που στηρίζεται στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων.

Η διαφορά στάθμης είναι πιο άμεσα συνδεδεμένη με τη διαφορά στην αποθήκευση του υδροφορέα, που υπεισέρχεται στη διατύπωση του υδατικού ισοζυγίου. Επομένως η επιλογή της έχει μεγαλύτερο φυσικό νόημα από ότι η επιλογή του υδραυλικού ύψους. Εξάλλου ως παράμετρος εξόδου προσθέτει ένα βαθμό δυσκολίας στο πρόβλημα και εξωθεί το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο στην ανακάλυψη ακόμα και μικρών επιδράσεων που έχουν οι παράμετροι εισόδου στις τιμές των παραμέτρων εξόδου. Η αναγκαιότητα αυτής της επιλογής υπαγορεύεται και από την ισχυρή συσχέτιση της στάθμης σε ένα πηγάδι μεταξύ δύο διαδοχικών ημερών. Η εξαιρετικά υψηλή συσχέτιση μπορεί να οδηγήσει σε απαξίωση του ρόλου των υπολοίπων μεταβλητών εισόδου πλην της στάθμης της προηγούμενης ημέρας, γεγονός που αναπόφευκτα θα οδηγούσε σε υποβάθμιση της ποιότητας του μοντέλου.

Η σημαντικότητα της εύρεσης διαστημάτων εμπιστοσύνης υποστηρίζεται από την ανάγκη που έχει ο κάθε λήπτης αποφάσεων για περιβαλλοντικά θέματα να γνωρίζει επακριβώς όχι μόνο τις τιμές συγκεκριμένων παραμέτρων αλλά και την αβεβαιότητα των τιμών αυτών. Με τον τρόπο αυτό μπορεί να μπορεί να εκτιμηθεί ο κίνδυνος και να τεθούν σωστά όρια ασφαλείας κατά τη διάρκεια της περιβαλλοντικής διαχείρισης. Γίνεται πλέον το μοντέλο ένα πρακτικό εργαλείο, το οποίο καθιστά εφικτή την κατάρτιση σχεδίων που θα συμβάλλουν στην προστασία του περιβάλλοντος και ταυτόχρονα θα εξασφαλίζουν μια αειφόρο αξιοποίηση των διαθέσιμων φυσικών πόρων.

Ο κύριος λόγος στον οποίο μπορεί να αποδοθεί η μη ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας μοντέλων τεχνητών νευρωνικών δικτύων που έχουν αναπτυχθεί για υδρολογικές εφαρμογές κατά το παρελθόν είναι η δυσκολία εύρεσης μιας κατάλληλης μεθόδου. Η πολυπλοκότητα των μαθηματικών συναρτήσεων που περιγράφουν ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο δημιουργεί μεγάλα προβλήματα στην κατασκευή και αντιστροφή του πίνακα Hessian, ο οποίος είναι προαπαιτούμενος για τις περισσότερες μεθόδους εύρεσης διαστημάτων εμπιστοσύνης. Η μέθοδος bootstrap, που εφαρμόστηκε στην παρούσα εργασία, παρέχει έναν εναλλακτικό τρόπο ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας του μοντέλου ο οποίος είναι μαθηματικά ορθός και μπορεί να προγραμματιστεί, ώστε να υπολογίζει τα διαστήματα εμπιστοσύνης του μοντέλου με αυτόματο τρόπο.

Τα τρία άρθρα, τα οποία έχουν ήδη δημοσιευθεί κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας εργασίας σε διεθνή επιστημονικά περιοδικά με κριτές, επισυνάπτονται στο Παράρτημα. Το πρώτο άρθρο (Trichakis et al., 2009) πραγματεύεται τη βέλτιστη επιλογή παραμέτρων ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου για την πρόβλεψη της απόκρισης ενός καρστικού υδροφορέα. Η καινοτομία της επιλογής της μεταβολής του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου, αναλύεται σε συνδυασμό με τη χρήση ενός διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου για τη βελτιστοποίηση της δομής του τεχνητού νευρωνικού δικτύου και τον καθορισμό της τιμής της χρονικής υστέρησης. Η εναλλακτική μέθοδος προσδιορισμού της χρονικής υστέρησης μέσω της ανάλυσης συντελεστών συσχέτισης παρουσιάστηκε και επισημάνθηκε η δυνατότητα να χρησιμοποιηθεί εάν η διαδικασία βελτιστοποίησης κρίνεται υπερβολικά χρονοβόρα για να έχει πρακτική εφαρμογή.

Μία τέτοια ήταν η περίπτωση του υδροφορέα Έντουαρντς στο Τέξας των ΗΠΑ, η οποία αποτέλεσε την περιοχή μελέτης του δευτέρου άρθρου (Trichakis et al., In Press). Η ανάλυση συντελεστών συσχέτισης υπέδειξε πιθανή επίδραση της βροχόπτωσης και της άντλησης για περισσότερες από μία ημέρες. Η δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου που εφαρμόστηκε, διαφοροποιήθηκε για να προσαρμοστεί στα διαθέσιμα δεδομένα και στα αποτελέσματα της ανάλυσης συντελεστών συσχέτισης.

Το τρίτο άρθρο έχει γίνει αποδεκτό για δημοσίευση στο περιοδικό Hydrological Processes. Στο άρθρο αυτό παρουσιάζεται η εφαρμογή που μπορεί να βρει η μέθοδος bootstrap για τον προσδιορισμό διαστημάτων εμπιστοσύνης τεχνητών νευρωνικών δικτύων που χρησιμοποιούνται για προσομοίωση υπογείων υδάτων.

Κεφάλαιο 2ο

Θεωρητικό Υπόβαθρο

Η περίπλοκη δομή των καρστικών σχηματισμών (Εικόνα 1) είναι η κύρια αιτία της δυσκολίας μοντελοποίησης με συμβατικές μεθόδους, όπως τα αριθμητικά μοντέλα προσομοίωσης υπογείων υδάτων. Για την υπέρβαση του προβλήματος αυτού έχουν αναπτυχθεί κατά καιρούς διαφορετικές θεωρήσεις που απλοποιούν το πρόβλημα και επιτρέπουν την προσομοίωση του φυσικού συστήματος. Σε αυτές τις μεθόδους περιλαμβάνονται η θεώρηση ισοδύναμου πορώδους μέσου, διπλού πορώδους ή ακόμα και η θεώρηση του καρστικού συστήματος ως ένα δίκτυο αγωγών που μπορεί να περιγραφεί με μοντέλα προσομοίωσης αγωγών ομβρίων υδάτων. Η πιο απλή θεώρηση είναι εκείνη του ισοδύναμου πορώδους μέσου, κατά την οποία το καρστικό σύστημα θεωρείται σαν ένα ισοδύναμο, ανισότροπο, συνεχές μέσο. Η κύρια παραδοχή της εν λόγω θεώρησης είναι ότι λαμβάνεται ο μέσος όρος των φυσικών ιδιοτήτων (πορώδες, διαπερατότητα) επί αντιπροσωπευτικά μεγάλων όγκων του πετρώματος. Η θεώρηση διπλού πορώδους χρησιμοποιεί μία μεταβλητή πρωτογενούς πορώδους, για να περιγράψει τους όγκους του πορώδους του στερεού πετρώματος, καθώς και ένα δευτερογενές πορώδες που περιγράφεται από ένα μεγάλο αριθμό τυχαία κατανεμημένων ρωγμών που διατρέχουν το πέτρωμα. Λόγω των παραδοχών των παραπάνω θεωρήσεων, οι οποίες σε αρκετές περιπτώσεις απέχουν πολύ από την πραγματικότητα, καθένα από τα αντίστοιχα μοντέλα μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο υπό συγκεκριμένες συνθήκες, ενώ έχουν και αρκετούς περιορισμούς.



Εικόνα 1. Σχηματική απεικόνιση ενός καρστικού σχηματισμού.

Τα τελευταία χρόνια η έρευνα στους τομείς της υδρολογίας έχει χρησιμοποιήσει μοντέλα που στηρίζονται στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων. Τα μοντέλα αυτά μπορούν να θεωρηθούν ως ένας σύνθετος τρόπος μη γραμμικής παλινδρόμησης μεταξύ παραμέτρων εισόδου και παραμέτρων εξόδου (Maier & Dandy, 2000). Χρησιμοποιούνται είτε αυτόνομα (Coppola et al., 2005b[·] Nayak et al., 2006) είτε για να προσομοιώσουν πιο πολύπλοκα και χρονοβόρα μοντέλα (Nikolos et al., 2008). Και στις δύο περιπτώσεις η έξοδος αποτελείται από παραμέτρους ενδιαφέροντος όπως η παροχή που εισέρχεται από μία λεκάνη απορροής σε έναν ταμιευτήρα, η παροχή μίας πηγής ή η στάθμη του υδροφόρου ορίζοντα σε ένα πηγάδι παρατήρησης.

Ιδιαίτερα στην υπόγεια υδραυλική έχουν δημοσιευτεί εργασίες πάνω στην εφαρμογή τεχνητών νευρωνικών δικτύων για προσομοίωση της απόκρισης είτε ενός πορώδους είτε ενός καρστικού υδροφορέα. Όταν η εφαρμογή αυτή δεν βασίζεται πάνω σε κάποιο συμβατικό (π.χ. αριθμητικό) μοντέλο, απαιτείται ένας μεγάλος αριθμός δεδομένων πεδίου για την εκπαίδευση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου, αλλά το μοντέλο που προκύπτει δεν έχει τους περιορισμούς που προκύπτουν από τις παραδοχές των συμβατικών μοντέλων και αν έχει εκπαιδευτεί σωστά, μπορεί να δώσει μια πολύ καλή προσέγγιση της απόκρισης του φυσικού συστήματος στις παραμέτρους που το επηρεάζουν.

Για τη βελτίωση των αποτελεσμάτων του μοντέλου και την καλύτερη δυνατή προσομοίωση του υδροφορέα μπορεί να εφαρμοστεί μία διαδικασία βελτιστοποίησης της δομής και των παραμέτρων του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Εξ αιτίας της αδιαφανούς θεώρησης σαν μαύρο κουτί, οι παράμετροι της μεθόδου δεν είναι πάντα εύκολο να προσδιοριστούν, ειδικά εκείνες που στερούνται φυσικού νοήματος. Μία πολλά υποσχόμενη μέθοδος με ταχεία σύγκλιση είναι ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος. Η μέθοδος είναι παρόμοια με άλλους εξελικτικούς αλγορίθμους. Σε κάθε γενιά δημιουργούνται νέα υποψήφια άτομα με συνδυασμό ατόμων του προηγούμενου πληθυσμού και μετάλλαξη και τα άτομα με τη βέλτιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης επιλέγονται για να αποτελέσουν τον πληθυσμό της επόμενης γενιάς.

Για την μετάβαση από την προσδιοριστική έξοδο σε στοχαστική πρέπει να εφαρμοστεί μια μεθοδολογία, η οποία να παρέχει τρόπο υπολογισμού του διαστήματος εμπιστοσύνης της μεταβλητής εξόδου για κάθε επίπεδο βεβαιότητας. Οι προσπάθειες για χρήση μεθόδων ελαχίστων τετραγώνων ή προσεγγίσεων τέτοιων μεθόδων δεν στέφθηκαν με επιτυχία λόγω της δυσκολίας εφαρμογής σε τόσο πολυσύνθετες συναρτήσεις όπως τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα. Μια σχετικά νέα στατιστική μέθοδος που είναι ικανή να παρέχει διαστήματα εμπιστοσύνης για πολύπλοκες συναρτήσεις, είναι η μέθοδος bootstrap (μπούτστραπ). Η μέθοδος εφαρμόζει την επαναληπτική δειγματοληψία για να μπορέσει να εκτιμήσει την αβεβαιότητα μίας παραμέτρου χωρίς περίπλοκους υπολογισμούς με μια σχετικά απλή (αλλά και χρονοβόρα) επαναληπτική διαδικασία.

2.1 Καρστικοί Υδροφορείς

Η εμφάνιση καρστικών φαινομένων συνδέεται πάντα με την ύπαρξη συγκεκριμένων ειδών πετρωμάτων τα οποία είναι ευδιάλυτα στο νερό και δεν αφήνουν υπολείμματα, με αποτέλεσμα τα διάκενα να διευρύνονται με τη διεργασία της διάλυσης και επιτρέπουν τη ροή ύδατος μέσω αυτών στο υπέδαφος. Σε αυτά τα είδη πετρωμάτων, τα οποία είναι γνωστά ως καρστικά (Bögli, 1980), ανήκουν ανθρακικοί σχηματισμοί, όπως οι ασβεστόλιθοι και οι δολομίτες, που είναι πολύ διαδεδομένοι στην Ελλάδα.

Σχετικά με την εξέλιξη του καρστ έχουν προταθεί μοντέλα προσομοίωσης και πρόβλεψης τα οποία έχουν τη δυνατότητα να εξετάζουν διαφορετικά σενάρια μηχανισμών διάλυσης του αρχικού πετρώματος (Gabrovsek et al., 2004). Τα σενάρια έχουν δοκιμαστεί σε μοντέλα που προσομοιώνουν τα δίκτυα των διακλάσεων με ένα πυκνό δίκτυο από παράλληλες και κάθετες ρωγμές, ανάμεσα στις οποίες βρίσκονται οι μεγαλύτεροι αγωγοί του καρστ.

Ενώ υπάρχει η αντίληψη ότι η μεταβολή του καρστ είναι μια πολύ χρονοβόρα διαδικασία, κατά την οποία η διάκλαση χρειάζεται ακόμα και χίλια ή δέκα χιλιάδες χρόνια για να συνδεθεί με τον αποδέκτη και να αποκτήσει αυξημένη μεταφορική ικανότητα, υπάρχουν περιπτώσεις υπό συνθήκες όπου το καρστ μπορεί να εξελιχθεί ραγδαία μέσα σε εκατό χρόνια. Συγκεκριμένο παράδειγμα αναφέρεται σε χώρους υγειονομικής ταφής, όπου λόγω και της χημικής σύστασης των στραγγισμάτων υπάρχει πιθανότητα σε περίπτωση διαρροής να αυξηθεί σημαντικά ο ρυθμός καρστικοποίησης των υφιστάμενων πετρωμάτων. (White, 2002)

Οι ανθρακικοί καρστικοί υδροφορείς θεωρούνται σαν να περιέχουν τριών ειδών πορώδη: το πορώδες μεταξύ των κόκκων του στερεού πετρώματος, το πορώδες των διακλάσεων του καρστ και το πορώδες των μεγάλων ρωγμών και κύριων αγωγών του καρστ. Πολύ συχνά, για λόγους απλούστευσης θεωρείται ότι η κίνηση του ύδατος πραγματοποιείται μόνο μέσα στις διακλάσεις και τους αγωγούς αλλά υπάρχουν περιπτώσεις όπου ανάλογα με την περίοδο (υγρή – ξηρή) το κυρίαρχο είδος του πορώδους που παρέχει νερό σε μια κατάντη πηγή, αλλάζει (Martin & Dean, 2001). Παρατηρήσεις του υδροφόρου ορίζοντα δείχνουν ότι συνήθως το διαθέσιμο γλυκό νερό σε ένα παράκτιο καρστικό υδροφορέα εξαρτάται περισσότερο από την ποσότητα νερού που ψικρού δικτύου διακλάσεων.

Από το υδρογράφημα μιας καρστικής πηγής υπάρχουν μέθοδοι χαρακτηρισμού του υδροφορέα ανάλογα με το στάδιο εξέλιξης του καρστ και το καθεστώς ροής μέσα σε αυτόν (Kovacs et al., 2005). Έτσι μπορούν να χωριστούν σε εκείνους στους οποίους η κυρίαρχη ροή είναι μέσα από το πέτρωμα ή σε εκείνους που η κυρίαρχη ροή είναι μέσα από το καρστικό σύστημα είναι ακόμα σε στάδιο ανάπτυξης ενώ στην δεύτερη θεωρείται ώριμο καρστ.

Τα αποτελέσματα μεθόδων που χρησιμοποιούνται ευρέως για την επεξεργασία και εξήγηση των υδρογραφημάτων καρστικών πηγών, έχει βρεθεί ότι δεν ανταποκρίνονται πάντα στην πραγματικότητα. Συχνά για παράδειγμα γίνεται διάσπαση του υδρογραφήματος σε τρία τμήματα, τα οποία θεωρούνται ότι αντιπροσωπεύουν καθένα μια από τις τρεις διαφορετικές υδραυλικές αγωγιμότητες ενός καρστικού υδροφορέα. Ωστόσο, από παραδείγματα που έχουν γίνει, φαίνεται ότι το ενδιάμεσο τμήμα εμφανίζεται και σε περιπτώσεις που δεν υπάρχει ενδιάμεσο είδος υδραυλικής αγωγιμότητας. Εξάλλου, το μη εκθετικό τμήμα το οποίο θεωρείται ότι αντιπροσωπεύει τη βασική ροή, δεν εξαρτάται μόνο από τα χαρακτηριστικά του χαμηλής υδραυλικής αγωγιμότητας πετρώματος, αλλά από όλες τις παραμέτρους του υδροφορέα. (Eisenlohr et al., 1997b) Οι υδρογεωλογικές ερμηνείες που δίδονται από στατιστική ανάλυση, δεν βασίζονται αποκλειστικά στην πυκνότητα του δικτύου αγωγών του καρστ, δηλαδή στο εύρος των αποθεμάτων υπόγειου ύδατος. Το τρίπτυχο μορφή του διαγράμματος συσχέτισης – βαθμός καρστικοποίησης του υδροφορέα – ρυθμιστική ικανότητα δεν δίνει πάντα ορθά συμπεράσματα. Υπάρχει ανάγκη καλής υδρογεωλογικής πληροφορίας για ένα καρστικό υδροφορέα πριν χρησιμοποιηθούν στατιστικές μέθοδοι. Είναι σημαντική η γνώση του κλιματικού καθεστώτος – της συχνότητας καταιγίδας καθώς και της χωρικής και χρονικής κατανομής της βροχόπτωσης. (Eisenlohr et al., 1997a)

Για την προσομοίωση καρστικών υδροφορέων έχουν προταθεί πολλές διαφορετικές μέθοδοι που μπορεί να προσομοιώνουν τη στάθμη του καρστικού υδροφορέα ή την απόκριση μιας πηγής στην οποία καταλήγει ο καρστικός υδροφορέας. Οι διαφορετικές θεωρήσεις και παραδοχές που γίνονται κατά τη διαδικασία υλοποίησης του εννοιολογικού μοντέλου, εισάγουν μεγαλύτερες ή μικρότερες αποκλίσεις από την πραγματική κατάσταση και πρέπει να εξετάζεται εάν οι παραδοχές αυτές ικανοποιούνται πριν από την εφαρμογή οποιουδήποτε μοντέλου σε μία υπό μελέτη περιοχή.

Για την παροχή της πηγής έχουν προταθεί γραμμικά μοντέλα ανάλυσης συστημάτων καρστικών υδροφορέων που εισάγουν την φιλοσοφία του μοναδιαίου υδρογραφήματος, που χρησιμοποιείται στα επιφανειακά, και στα υπόγεια ύδατα. Όπως το μοναδιαίο υδρογράφημα συσχετίζει την βροχή σε μια λεκάνη απορροής με την απορροή από αυτήν, έτσι και η μέθοδος αυτή συσχετίζει το ρυθμό εμπλουτισμού ενός υδροφορέα με τη στάθμη του υδροφορέα σε ένα πηγάδι παρατήρησης. Ο εμπλουτισμός μπορεί να προέρχεται από κατακρήμνιση ή υπόγεια απορροή (Long & Derickson, 1999)

Εναλλακτικά, τα ρήγματα μπορούν να προσομοιωθούν από μια αλυσίδα σημείων εκφόρτισης του υδροφορέα συνδεόμενα μεταξύ τους. Η οπτική αυτή έχει το πλεονέκτημα ότι δεν εισάγει αριθμητικά σφάλματα στους υπολογισμούς λόγω εφαρμογής σε μια περιοχή υπερβολικά αυξημένης τιμής υδραυλικής αγωγιμότητας. Το μειονέκτημα είναι ότι χρειάζεται μελέτη για να βρεθούν οι σχέσεις των καρστικών αγωγών και πού καταλήγει η ροή μέσα από τον καθένα από αυτούς. (Quinn et al., 2006)

Μια διαφορετική μέθοδος προσομοίωσης καρστικών συστημάτων είναι η χρήση μοντέλων που έχουν αναπτυχθεί για την προσομοίωση δικτύων ομβρίων υδάτων (Peterson & Wicks, 2006). Η μέθοδος αυτή θεωρείται βελτίωση των μεθόδων γραμμικών συστημάτων που έχουν χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν, καθώς επιτρέπει μεγαλύτερο έλεγχο του αποτελέσματος. Τα μοντέλα προσομοίωσης ροής σε δίκτυα κλειστών αγωγών χρησιμοποιούνται ευρύτατα σε άλλες εφαρμογές (δίκτυα ύδρευσης, αποχέτευσης ή ομβρίων). Επειδή ένα καρστικό σύστημα είναι ουσιαστικά ένα φυσικό δίκτυο ομβρίων υδάτων, η προσομοίωσή του με ένα μοντέλο δικτύων κλειστών αγωγών φαίνεται λογική, δεδομένου και του παρόμοιου καθεστώτος ροής. Το πρόβλημα είναι ότι στις περισσότερες περιπτώσεις η ακριβής διάταξη και γεωμετρία των ρωγμών δεν είναι γνωστή. Σε μια τέτοια περίπτωση δεν είναι δυνατή η χρήση ενός τέτοιου μοντέλου, μιας και η έξοδός του εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το μήκος, το πλάτος και τον συντελεστή τραχύτητας των ρωγμών.

Ακόμα και η πιο απλή προσομοίωση ενός καρστικού υδροφορέα ως ισοδύναμο πορώδες μέσο βρίσκει εφαρμογή σε περιπτώσεις όπου από τις μετρήσεις φαίνεται μια τέτοιου

είδους συμπεριφορά του υδροφορέα. Πράγματι υπάρχουν περιπτώσεις όπου όταν βρεθεί, από δοκιμαστικές αντλήσεις για παράδειγμα, μια τιμή ισοδύναμης υδραυλικής αγωγιμότητας του καρστικού συστήματος, η προσομοίωση ως ισοδύναμο πορώδες μέσο καταλήγει σε αρκετά ακριβή αποτελέσματα. (Scanlon et al., 2003)

Μια τροποποίηση της μεθόδου του ισοδύναμου πορώδους μέσου προτείνεται από τον Martin και την ομάδα του (Martin et al., 2005), στην οποία κάθε ρήγμα σε ένα υδροφορέα προσομοιώνεται σαν διεπιφάνεια η οποία μπορεί να διευκολύνει ή να περιορίζει την υπόγεια ροή. Σε κάθε ρήγμα που διευκολύνει την κίνηση του νερού, δημιουργείται μια διεπιφάνεια που επιτρέπει την αλλαγή της κανονικής συνιστώσας της ταχύτητας μεταξύ της μιας και της άλλης πλευράς, γεγονός που ουσιαστικά χωρίζει τον υδροφορέα σε υποπεριοχές, οι οποίες επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω των διεπιφανειών με συγκεκριμένες εξισώσεις. Στην αντίθετη περίπτωση ουσιαστικά δημιουργείται ένα γεωλογικό φράγμα που επιτρέπει μικρή υδραυλική επικοινωνία στις δύο εκατέρωθέν του περιοχές. Σε αυτή την περίπτωση η πίεση είναι το μέγεθος που αλλάζει διαμέσου της διεπιφάνειας.

Στην περίπτωση που υπάρχουν μετρήσεις παροχής πηγής και στάθμης υδροφορέα, η χρήση μικτών εξισώσεων, κατάλληλων τόσο για συνθήκες ελεύθερης επιφάνειας όσο και ροής υπό πίεση μέσα στους αγωγούς του καρστ, μπορεί να δώσει βελτιωμένα αποτελέσματα στην αναπαραγωγή των χαρακτηριστικών των χρονοσειρών που έχουν καταγραφεί, ειδικά της στάθμης του υπόγειου υδροφόρου ορίζοντα. (Rozos & Koutsoyiannis, 2006)

Παρατηρήσεις δείχνουν ότι το διαθέσιμο γλυκό νερό που αποθηκεύεται σε ένα παράκτιο καρστικό υδροφορέα, εξαρτάται από την ποσότητα που φτάνει στον υδροφορέα με μεγάλη ταχύτητα σε σχέση με το υπόλοιπο που κατεισδύει με μικρότερη ταχύτητα μέσω του δικτύου των μικρών διακλάσεων.

Η δυσκολία προσομοίωσης ανεξαρτήτως μοντέλου του υδροφόρου ορίζοντα φαίνεται να οφείλεται στη σημαντική μεταβλητότητα των φυσικών ρυθμών εμπλουτισμού και αποθήκευσης και στην ύπαρξη άλλων μεταβλητών (όπως η ακριβής θέση των καρστικών αγωγών ή ένας σύνθετος γεωλογικός σχηματισμός, όπως επίσης μετεωρολογικά δεδομένα που δεν καλύπτουν την περιοχή μελέτης σε όλο το εύρος της) που δε λαμβάνονται υπ' όψιν στο μοντέλο (Jocson et al., 2002). Για μια ακριβή εκτίμηση δύο παράμετροι θεωρούνται κρίσιμες στην προσομοίωση υπογείων υδάτων: (α) η ικανότητα επακριβούς χαρακτηρισμού των γεωμετρικών και υδρολογικών χαρακτηριστικών αξιοποιώντας για τη μέτρησή τους γεωφυσικές μεθόδους και (β) η αύξηση της υπολογιστικής ισχύος που θα επιτρέψει την επισκόπηση της ροής και μεταφοράς μάζας σε τρισδιάστατα συστήματα ροής μεγάλης κλίμακας (Berkowitz, 2002).

Προβλήματα όπως η δυσκολία προσομοίωσης επακριβώς των μηχανισμών του φυσικού συστήματος και η ανάγκη ακριβέστερων μετρήσεων των γεωμετρικών παραμέτρων μπορούν να ξεπεραστούν με τη βοήθεια ενός μοντέλου που να βασίζεται στη θεωρία τεχνητών νευρωνικών δικτύων, ώστε να έχει την ικανότητα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους χωρίς εκτενή γνώση των γεωλογικών και υδρογεωλογικών χαρακτηριστικών του φυσικού συστήματος. Έχοντας μια εντελώς διαφορετική προσέγγιση σε σχέση με τα αριθμητικά μοντέλα, στα οποία ο υδροφορέας είναι το αντικείμενο της προσομοίωσης, η εφαρμογή των ΤΝΔ εστιάζεται στην προσομοίωση του υδρολογικού κύκλου. Η μέθοδος αυτή έχει το πλεονέκτημα της εφαρμοσιμότητας σε κάθε τύπο υδροφορέα. Η μόνη απαίτηση, η οποία δεν ικανοποιείται πάντα, είναι μια ποικιλία δεδομένων (μετεωρολογικά, στάθμη υπογείων υδάτων) για μεγάλα χρονικά διαστήματα, που δεν είναι πάντα διαθέσιμα. Οι χρονοσειρές δεδομένων αυτές είναι το μόνο απαιτούμενο για την εκπαίδευση (βαθμονόμηση) του τεχνητού νευρωνικού δικτύου (ΤΝΔ) και την αξιολόγηση της αξιοπιστίας του βαθμονομημένου ΤΝΔ. Τα ΤΝΔ έχουν θεωρητικά την ικανότητα να προσεγγίσουν σύνθετες συναρτήσεις, αρκεί να χρησιμοποιηθεί επαρκής αριθμός δεδομένων εκπαίδευσης και κρυφών κόμβων (Haykin, 1999). Σε πραγματικές καταστάσεις όμως οι αδυναμίες των δυνατοτήτων πρόβλεψης και γενίκευσης παρατηρούνται συχνά, εξ αιτίας της έλλειψης επαρκών και αξιόπιστων δεδομένων, της πιθανής ύπαρξης άλλων παραμέτρων που επηρεάζουν το φυσικό σύστημα και δεν λαμβάνονται υπ' όψιν, καθώς και των περιορισμών υπολογιστικής ισχύος που δεν επιτρέπουν τη χρήση μεγάλων δικτύων και διαδικασιών βελτιστοποίησης (Pinkus, 1999).

2.2 Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, πιο συχνά αποκαλούμενα «νευρωνικά δίκτυα», είναι μαθηματικά μοντέλα τα οποία έχουν ως αφετηρία τη θεώρηση ότι ο ανθρώπινος εγκέφαλος έχει εντελώς διαφορετικό τρόπο επεξεργασίας των πληροφοριών σε σχέση με έναν συμβατικό ηλεκτρονικό υπολογιστή. Ο πολύπλοκος, μη γραμμικός και παράλληλος τρόπος λειτουργίας του εγκεφάλου επιτρέπει την επεξεργασία πληροφοριών μέσω των δομικών του στοιχείων (νευρώνων) τα οποία είναι σε θέση να πραγματοποιήσουν υπολογισμούς, όπως η αναγνώριση μοτίβων και η αντίληψη, σαφώς ταχύτερα από ψηφιακούς υπολογιστές. (Haykin, 1999)

Η σύγχρονη εποχή των νευρωνικών δικτύων ξεκίνησε με την πρωτοπόρα εργασία του ψυχιάτρου και νευρολόγου ασχολούμενου με την ανατομία του νευρικού συστήματος Warren Sturgis McCulloch και του ιδιοφυούς στα μαθηματικά και τη λογική Walter Pitts (McCulloch & Pitts, 1943). Η εργασία αυτή είναι από τις πλέον πολυδιαβασμένες μέχρι και σήμερα εργασίες στον κλάδο και από τα συμπεράσματά της γεννήθηκαν οι αρχές των νευρωνικών δικτύων και της τεχνητής νοημοσύνης. Την επόμενη μεγάλη εξέλιξη αποτέλεσε η δημοσίευση του βιβλίου του Donald Olding Hebb σχετικά με την οργάνωση της συμπεριφοράς (Hebb, 1949). Στο βιβλίο αυτό πρωτοεμφανίστηκε ο ομώνυμος κανόνας για την ενημέρωση των συναπτικών βαρών μεταξύ των νευρώνων.

Περίπου 15 χρόνια μετά την πρωτοπόρα εργασία των McCulloch και Pitts, παρουσιάστηκε η πρώτη εργασία που αφορούσε το απλούστερο νευρωνικό δίκτυο το οποίο χρησιμοποιούσε μία καινούρια μέθοδο επιβλεπόμενης μάθησης, το perceptron (Rosenblatt, 1958). Σε μία προσπάθεια να προσομοιώσει καλύτερα τη συμπεριφορά ενός πραγματικού (βιολογικού) νευρώνα ο Cowan επέλεξε αντί της μέχρι τότε χρησιμοποιούμενης συνάρτησης κατωφλίου, μία ομαλή συνάρτηση ενεργοποίησης ενός νευρώνα, τη λεγόμενη λογιστική συνάρτηση (Cowan, 1967). Η μεγάλη εξέλιξη όμως που βοήθησε την ευρεία εφαρμογή των perceptronπολλών επιπέδων, ήταν η δημοσίευση του αλγορίθμου εκπαίδευσης back propagation (Rumelhart et al., 1986) ο οποίος είναι και ο βασικός αλγόριθμος εκπαίδευσης που χρησιμοποιείται σε δίκτυα perceptron πολλών επιπέδων και με τον οποίο συγκρίνονται οι εναλλακτικοί αλγόριθμοι.

Η πρώτη δημοσίευση που παρουσιάζει εφαρμογή ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου για χωρική και χρονική πρόβλεψη βροχόπτωσης, εμφανίστηκε το 1992 (French et al., 1992). Την ίδια χρονιά δημοσιεύθηκε και μία εφαρμογή νευρωνικών δικτύων για την προσομοίωση της αλατότητας (DeSilet et al., 1992). Την επόμενη χρονιά ακολούθησε η δημοσίευση μίας εργασίας που εφάρμοζε νευρωνικά δίκτυα για την πρόβλεψη της ξηρασίας (Crespo & Mora, 1993) και από εκεί και έπειτα τα νευρωνικά δίκτυα βρήκαν πάρα πολλές εφαρμογές στην υδρολογία (Clair & Ehrman, 1998[.] Coulibaly et al., 1999[.] Kuligowski & Barros, 1998[.] Raman & Sunilkumar, 1995). Η πρώτη δημοσιευμένη εφαρμογή νευρωνικού δικτύου σε υπόγεια υδρολογία αφορούσε στην προσομοίωση της στάθμης του υπόγειου υδροφορέα (Shukla et al., 1996).

Ανάμεσα στα εργαλεία της τεχνητής νοημοσύνης (TN), η μοντελοποίηση με ΤΝΔ μπορεί να εκληφθεί ως μια εξεζητημένη τεχνική μοντελοποίησης που αξιοποιεί διαθέσιμα δεδομένα στην προσπάθεια να ανακαλύψει σχέσεις μεταξύ δειγμάτων εισόδου και εξόδου χωρίς λεπτομερή γνώση των διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα (Lallahem & Mania, 2003a). Το γεγονός αυτό είναι ιδιαίτερα βολικό όταν το φυσικό μοντέλο δεν είναι ρητά καθορισμένο ή είναι εξαιρετικά δύσκολο να περιγραφεί επακριβώς, ή/και όταν υπάρχει έλλειψη δεδομένων για τη δημιουργία και εκτέλεση ενός λεπτομερούς μοντέλου.

Τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα αρχικά δημιουργήθηκαν ως υπεραπλουστευμένα ανάλογα προς τα βιολογικά νευρωνικά δίκτυα. Και στα δύο δίκτυα υπάρχουν μονάδες επεξεργασίας (νευρώνες), που επικοινωνούν μεταξύ τους με αποστολή σημάτων μέσα από σταθμισμένες συνδέσεις. Κάθε μονάδα ενός ΤΝΔ εκτελεί τη σχετικά απλή εργασία της εισδοχής σημάτων από γειτονικές μονάδες ή εξωτερικές πηγές και χρήσης αυτών για τον υπολογισμό ενός σήματος που μεταφέρεται σε άλλες μονάδες (Kröse & van der Smagt, 1996).

Με μια αρχική σκέψη παραγόμενη από το ανθρώπινο νευρωνικό δίκτυο, τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα είναι μαθηματικές δομές που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την προσομοίωση διαφόρων συναρτήσεων. Υπάρχουν περιπτώσεις κατά τις οποίες δεδομένα εξαρτημένων (εξόδου) και ανεξάρτητων (εισόδου) μεταβλητών έχουν παρατηρηθεί αλλά ο μαθηματικός τύπος της συνάρτησης που τα συνδέει είναι άγνωστος. Τα ΤΝΔ είναι ικανά να καθορίσουν την υποκείμενη συνάρτηση που παράγει μια συγκεκριμένη έξοδο για μια δεδομένη είσοδο.



Υπολογιστική Μονάδα

Εικόνα 2. Σχηματική απεικόνιση ενός νευρώνα.

Κάθε νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από ένα πλήθος υπολογιστικών μονάδων οι οποίες συνδέονται μεταξύ τους και επικοινωνούν στέλνοντας σήματα μέσα από σταθμισμένες συνδέσεις. Οι υπολογιστικές αυτές μονάδες καλούνται νευρώνες ή κόμβοι. Στην Εικόνα 2 αναπαριστάται ένας νευρώνας με τρεις εισόδους που δίνει μία έξοδο. Ένα νευρωνικό δίκτυο αποτελείται από κόμβους που επικοινωνούν μεταξύ τους. Τα feed forward (πρόσω τροφοδότησης) είναι η πιο απλή μορφή νευρωνικών δικτύων. Σε αυτά υπάρχει ένα επίπεδο εισόδου, ένα επίπεδο εξόδου και προαιρετικά ένα ή περισσότερα ενδιάμεσα κρυφά επίπεδα (Βλαχάβας κ.α. 2002). Η ύπαρξη κρυφών επιπέδων υπαγορεύτηκε από τη μαθηματική απόδειξη ότι τα απλά νευρωνικά δίκτυα ενός επιπέδου δεν είχαν τη δυνατότητα προσομοίωσης οποιασδήποτε συνάρτησης. Τα κρυφά επίπεδα παρέχουν στο νευρωνικό δίκτυο μεγαλύτερη ευελιξία, καθώς ουσιαστικά αυξάνουν τους βαθμούς ελευθερίας. Ένα πλήρως διασυνδεδεμένο πολυεπίπεδο νευρωνικό δίκτυα 3.





Οι είσοδοι του δικτύου τροφοδοτούνται από τους κόμβους του επιπέδου εισόδου στους κόμβους του πρώτου κρυφού επιπέδου. Μετά την επεξεργασία των σημάτων, οι έξοδοι των κόμβων του πρώτου κρυφού επιπέδου αποτελούν τις εισόδους των κόμβων του δεύτερου κρυφού επιπέδου. Στη συνέχεια τα υπολογισμένα σήματα εξόδου των κόμβων του δεύτερου κρυφού επιπέδου εισάγονται στους κόμβους του επιπέδου εξόδου, από τους οποίους και υπολογίζονται οι τελικές έξοδοι του νευρωνικού δικτύου.

Η διεργασία που λαμβάνει χώρα εντός κάθε υπολογιστικής μονάδας (κόμβου) είναι ο πολλαπλασιασμός των εισόδων του κόμβου με τα αντίστοιχα συναπτικά βάρη της κάθε εισόδου (όπως αυτά προσδιορίστηκαν κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης) ώστε να προκύψουν οι σταθμισμένες είσοδοι του κάθε κόμβου, ανάλογα με τη σημαντικότητα που λαμβάνουν από τα αντίστοιχα βάρη τους, το άθροισμα των παραπάνω σταθμισμένων πλέον εισόδων, η πρόσθεση του κατωφλίου του κόμβου για τον υπολογισμό της εξόδου του κόμβου. Μαθηματικά η παραπάνω διαδικασία περιγράφεται από την εξίσωση:

$$y_k = F_k \left(\sum_{i=1}^n w_{ik} \cdot y_i + b_k \right)$$
(2.1)

όπου:

 y_n , η έξοδος του κόμβου n

 w_{ik} , το συναπτικό βάρος που συνδέει τον κόμβο i με τον κόμβο k

n, ο αριθμός των κόμβων του προηγούμενου επιπέδου από εκείνο του κόμβου k

 b_k , η πόλωση (bias) του κόμβου k

F_k, η συνάρτηση ενεργοποίησης του κόμβου k

Οπότε οι μεταβλητές εξόδου y_k ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου (απλής τροφοδότησης πλήρως διασυνδεδεμένο Multi Layer Perceptron) μπορούν να αποδοθούν ως μια πολύπλοκη μαθηματική συνάρτηση των μεταβλητών εισόδου y_i . Έστω n ο αριθμός των κόμβων εισόδου, m ο αριθμός των κόμβων του πρώτου κρυφού επιπέδου, p ο αριθμός των κόμβων του δεύτερου κρυφού επιπέδου, b_x η πόλωση (bias) και F_x η συνάρτηση ενεργοποίησης του κόμβου x, τότε η έξοδος ενός κόμβου k δίνεται από τον τύπο:

$$y_o = F_o\left(\sum_{k=1}^p \left(w_{ko} \cdot F_k\left(\sum_{j=1}^m \left(w_{jk} \cdot F_j\left(\sum_{i=1}^n (w_{ij} \cdot y_i) + b_j\right)\right) + b_k\right)\right) + b_o\right)$$
(2.2)

Μια απλή και ευρέως χρησιμοποιούμενη συνάρτηση ενεργοποίησης είναι η λογιστική συνάρτηση, η οποία έχει σιγμοειδή μεταβολή από το μηδέν στο ένα. Ο αλγεβρικός τύπος της συνάρτησης είναι:

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{2.3}$$

Είναι εύκολα αντιληπτό ότι η αντικατάσταση της (2.3) στην (2.2) δημιουργεί μια εξαιρετικά πολύπλοκη συνάρτηση η οποία είναι αρκετά δύσκολο να μελετηθεί με κλασσικές αλγεβρικές μεθόδους. Η πολυπλοκότητα της συνάρτησης οδηγεί συνήθως στην αναζήτηση διαφορετικών τρόπων αντιμετώπισης των υπό επίλυση προβλημάτων.

Ένα τέτοιο θέμα είναι και η βαθμονόμηση του μοντέλου, η οποία στα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα καλείται εκπαίδευση του δικτύου και είναι η διαδικασία μέσω της οποίας υπολογίζονται οι βέλτιστες τιμές των συναπτικών βαρών. Στα κλασσικά μοντέλα παλινδρόμησης η συνήθης διαδικασία που ακολουθείται είναι η ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των σφαλμάτων μεταξύ παρατηρημένων και προσομοιωμένων τιμών της συνάρτησης. Οι τιμές για τις παραμέτρους προκύπτουν από την επίλυση ενός συστήματος εξισώσεων, οι οποίες μάλιστα συνήθως είναι γραμμικές ως προς τις παραμέτρους. Το πρόβλημα που θα προέκυπτε σε μια προσπάθεια εφαρμογής της μεθόδου αυτής σε ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι ότι το σύστημα που θα δημιουργείτο θα ήταν ιδιαιτέρως μη γραμμικό, δηλαδή θα υπήρχαν παράμετροι σε όρισμα εκθετικής συνάρτησης η οποία βρίσκεται στον παρανομαστή κλάσματος το οποίο αποτελεί όρισμα άλλης εκθετικής συνάρτησης.

Αλγόριθμος Ανάστροφης Διάδοσης (Back Propagation)

Η εναλλακτική προσέγγιση που διατηρεί την ιδέα της ελαχιστοποίησης του τετραγώνου των σφαλμάτων και την προσαρμόζει στα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα, είναι ο λεγόμενος αλγόριθμος ανάστροφης διάδοσης του σφάλματος (error back propagation algorithm ή απλά Back Propagation). Η βασική ιδέα είναι να κατανεμηθεί το συνολικό σφάλμα στα βάρη του κάθε νευρώνα. Με τον τρόπο αυτόν είναι δυνατό να υπολογιστούν οι διορθώσεις στα βάρη του κάθε νευρώνα ξεχωριστά, παρά την πολύπλοκη δομή, η οποία ειδικά στα κρυφά επίπεδα αυξάνει την πολυπλοκότητα, καθώς οι έξοδοί τους επηρεάζουν πολλούς νευρώνες ταυτόχρονα.

Στην ανάστροφη μετάδοση σφάλματος υπολογίζεται το σφάλμα των κόμβων εξόδου με τρόπο παρόμοιο με εκείνον του κανόνα Δέλτα. Ο κανόνας Δέλτα υπολογίζει τη μεταβολή του βάρους που απαιτείται για να εξαλειφθεί το σφάλμα εξόδου ενός κόμβου. Έστω ότι σε ένα ΤΝΔ η συνάρτηση ενεργοποίησης παίρνει πραγματικές τιμές όπως η λογιστική συνάρτηση (2.3). Τότε η έξοδος του νευρώνα *k* μπορεί να υπολογιστεί βάσει της σχέσης (2.1). Η γενίκευση του κανόνα Δέλτα πραγματοποιείται θέτοντας:

$$\Delta w_{ik} = -\gamma \frac{\partial E}{\partial w_{ik}} \tag{2.4}$$

Το σφάλμα Ε ορίζεται ως το συνολικό τετραγωνικό σφάλμα των κόμβων εξόδου:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{o=1}^{N_o} (d_o - y_o)^2$$
(2.5)

Όπου No ο αριθμός των κόμβων εξόδου. Έστω ότι

$$s_k = \sum_{i=1}^{n} w_{ik} \cdot y_i + b_k$$
(2.6)

Χρησιμοποιώντας τον κανόνα της αλυσίδας ισχύει ότι:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ik}} = \frac{\partial E}{\partial s_k} \cdot \frac{\partial s_k}{\partial w_{ik}}$$
(2.7)

Από την εξίσωση (2.6) φαίνεται ότι ο δεύτερος παράγοντας είναι

$$\frac{\partial s_k}{\partial w_{ik}} = y_i \tag{2.8}$$

Ορίζοντας

$$\delta_k = -\frac{\partial E}{\partial s_k} \tag{2.9}$$

Προκύπτει ο κανόνας ενημέρωσης των βαρών που οδηγεί σε μέθοδο gradient descent στην επιφάνεια του σφάλματος.

$$\Delta w_{ik} = -\gamma \cdot \delta_k \cdot y_i \tag{2.10}$$

Εφαρμόζοντας τον κανόνα της αλυσίδας και στην εξίσωση (2.9) ο όρος δ_k μπορεί να γραφεί ως το γινόμενο της μεταβολής του σφάλματος συναρτήσει της εξόδου του κόμβου επί τη μεταβολή της εξόδου συναρτήσει της εισόδου του κόμβου.

$$\delta_k = -\frac{\partial E}{\partial s_k} = -\frac{\partial E}{\partial y_k} \cdot \frac{\partial y_k}{\partial s_k}$$
(2.11)

Ο δεύτερος όρος είναι εύκολο να υπολογιστεί καθώς είναι ουσιαστικά η πρώτη παράγωγος της συνάρτησης ενεργοποίησης του κόμβου *k* υπολογισμένη για την τιμή *s_k*.

$$\frac{\partial y_k}{\partial s_k} = F'(s_k) \tag{2.12}$$

Για τον υπολογισμό του πρώτου όρου θεωρούνται δύο περιπτώσεις. Όταν ο κόμβος είναι κόμβος εξόδου (k = o) προκύπτει από τον ορισμό του σφάλματος E στην εξίσωση (2.5) ότι

$$\frac{\partial E}{\partial y_o} = -(d_o - y_o) \tag{2.13}$$

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (2.12) και (2.13) στην εξίσωση (2.11) προκύπτει η εξίσωση υπολογισμού της τιμής δ_o για κάθε κόμβο εξόδου o.

$$\delta_o = (d_o - y_o) \cdot F'(s_o) \tag{2.14}$$

Εάν ο κόμβος k δεν είναι κόμβος εξόδου αλλά κόμβος κρυφού επιπέδου (k = h) η συμβολή του κόμβου στο σφάλμα εξόδου του δικτύου δεν είναι άμεσα γνωστή. Παρ' όλα αυτά η τιμή του σφάλματος μπορεί να γραφεί ως συνάρτηση των καθαρών εισόδων από το κρυφό επίπεδο προς το επίπεδο εξόδου. Εφαρμογή του κανόνα της αλυσίδας στη συγκεκριμένη περίπτωση δίνει

$$\frac{\partial E}{\partial y_h} = \sum_{o=1}^{N_o} \frac{\partial E}{\partial s_o} \cdot \frac{\partial s_o}{\partial y_h} = \sum_{o=1}^{N_o} \frac{\partial E}{\partial s_o} \cdot \frac{\partial}{\partial y_h} \sum_{j=1}^p w_{jo} \cdot y_j = \sum_{o=1}^{N_o} \frac{\partial E}{\partial s_o} \cdot w_{ho} = -\sum_{o=1}^{N_o} \delta_o \cdot w_{ho}$$
(2.15)

Αντικαθιστώντας στην εξίσωση (2.11) προκύπτει

$$\delta_h = F'(s_h) \cdot \sum_{o=1}^{N_o} \delta_o \cdot w_{ho}$$
(2.16)

Αντίστοιχα σε περίπτωση που υπάρχουν παραπάνω από ένα κρυφά επίπεδα η εξίσωση (2.16) δίνει τις τιμές των δ_h ως συνάρτηση των δ_j των κόμβων του επόμενου κρυφού επιπέδου

$$\delta_h = F'(s_h) \cdot \sum_{j=1}^{N_j} \delta_j \cdot w_{hj}$$
(2.17)

Όπου N_j ο αριθμός των κόμβων του επόμενου κρυφού επιπέδου από εκείνο στο οποίο ανήκει ο κόμβος h.

Οι εξισώσεις (2.14), (2.16) και (2.17) παρέχουν μία επαναληπτική διαδικασία υπολογισμού όλων των δ για όλους τους κόμβους του νευρωνικού δικτύου, τα οποία κατόπιν χρησιμοποιούνται για να υπολογιστούν οι μεταβολές των βαρών σύμφωνα με την εξίσωση (2.10). Η διαδικασία αυτή αποτελεί τον γενικευμένο κανόνα δέλτα για ένα απλής τροφοδότησης δίκτυο το οποίο απαρτίζεται από κόμβους με μη γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης. (Kröse & van der Smagt, 1996)

Η διαδικασία διάδοσης των σφαλμάτων συνεχίζεται για ολόκληρο το διαθέσιμο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης και επαναλαμβάνεται μέχρι να συμπληρωθεί ένας προκαθορισμένος αριθμός εποχών. Ως μία εποχή θεωρείται ένα πλήρες πέρασμα των διαθέσιμων δεδομένων εκπαίδευσης και η τροποποίηση των συναπτικών βαρών σύμφωνα με τον παραπάνω αλγόριθμο.

Η μέθοδος back-propagation δεν έχει τη μέγιστη ταχύτητα σύγκλισης και υπάρχει περίπτωση να καταλήξει σε μία λύση η οποία να έχει αρκετά μεγαλύτερη τιμή συνάρτησης σφάλματος από άλλες λύσεις. Για την επίτευξη ταχύτερης σύγκλισης και τη μείωση του απαιτούμενου χρόνου εκπαίδευσης ή σε μία προσπάθεια εύρεσης μιας καλύτερης λύσης από εκείνη στην οποία συγκλίνει η μέθοδος back-propagation, εξετάστηκαν και εναλλακτικές μέθοδοι εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου. Οι στόχοι της αύξησης της ταχύτητας σύγκλισης και της μείωσης της τιμής της συνάρτησης σφάλματος είναι συνήθως αντικρουόμενοι και μία μέθοδος που σημειώνει καλή επίδοση στον ένα στόχο υστερεί στον άλλο.

Μέθοδος Συζυγούς Κλίσης (Conjugate Gradient)

Η μέθοδος της συζυγούς κλίσης έχει ταχύτερο ρυθμό σύγκλισης από τη μέθοδο backpropagation και η χρήση της αναμένεται να μειώσει το χρόνο εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου. Αποτελεί τη βάση στην οποία στηρίζεται μία οικογένεια αλγορίθμων με αυξημένο ρυθμό σύγκλισης, που εξασφαλίζει σύγκλιση σε τοπικό βέλτιστο μετά από πεπερασμένο αριθμό επαναλήψεων. Ακολουθεί στρατηγική τοπικής ελαχιστοποίησης με επαναλαμβανόμενους προσεγγιστικούς υπολογισμούς, που βασίζονται στην παρούσα θέση που έχει το διάνυσμα των συναπτικών βαρών του τεχνητού νευρωνικού δικτύου στο χώρο των λύσεων. Οι περισσότεροι αλγόριθμοι που έχουν αναπτυχθεί με τη μέθοδο αυτή, βασίζονται στην εκτίμηση ότι η συνάρτηση λάθους, Ε_T, όλων των βαρών, w, του νευρωνικού δικτύου στην εφικτή περιοχή μπορεί να προσεγγισθεί με ακρίβεια από τη σχέση:

$$E_T(w) = \frac{1}{2} \cdot w^T \cdot H \cdot w - b^T \cdot w$$
(2.18)

όπου H είναι ο πίνακας Hessian με τις δεύτερες παραγώγους ως προς όλα τα βάρη του δικτύου, με γενική μορφή για μια συνάρτηση f με n ανεξάρτητες μεταβλητές:

$$H(f) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \cdot \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \cdot \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \cdot \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \cdot \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \cdot \partial x_1} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n \cdot \partial x_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f}{\partial x_n^2} \end{bmatrix}$$
(2.19)

Η διάσταση του πίνακα είναι ίση με τον αριθμό των συναπτικών βαρών, ο οποίος μπορεί να ανέλθει στην τάξη των χιλιάδων, γεγονός που δυσχεραίνει την εύρεση των συζυγών διευθύνσεων στην επιφάνεια της συνάρτησης σφάλματος. Για την παράκαμψη αυτού του προβλήματος έχουν αναπτυχθεί αλγόριθμοι που υπολογίζουν τις συζυγείς διευθύνσεις και τροποποιούν τα συναπτικά βάρη του τεχνητού νευρωνικού δικτύου κατά μήκος αυτών των διευθύνσεων, χωρίς να υπολογίζουν με αναλυτικό τρόπο τα στοιχεία του πίνακα Hessian για το δίκτυο. (Shewchuk, 1994)

Η διαδικασία που ακολουθεί ο αλγόριθμος συζυγούς κλίσης σύμφωνα με την παραλλαγή «Fletcher-Reeves» (Fletcher & Reeves, 1964), απεικονίζεται στην Εικόνα 4.



Εικόνα 4. Διάγραμμα ροής της μεθόδου συζυγούς κλίσης.

Η μέθοδος συζυγούς κλίσης έχει αποδεδειγμένα ταχύτατη σύγκλιση σε ένα τοπικό βέλτιστο αλλά είναι εξαιρετικά ευαίσθητη σε περιπτώσεις που η συνάρτηση έχει μεγάλο αριθμό τοπικών βέλτιστων, οπότε και αυξάνεται η πιθανότητα εγκλωβισμού της σε ένα από αυτά.

Τροποποιημένος Τυχαίος Περίπατος (Modified Random Walk)

Μια διαφορετική προσέγγιση που δεν έχει βρει πολλές εφαρμογές στην εκπαίδευση τεχνητών νευρωνικών δικτύων, είναι η αξιοποίηση κάποιου αλγορίθμου που να στηρίζεται στη μέθοδο του τυχαίου περιπάτου. Η μέθοδος αυτή είναι ίσως η απλούστερη μορφή αλγορίθμου βελτιστοποίησης. Κινούμενος τυχαία στον υπερχώρο των εφικτών λύσεων, ο αλγόριθμος δίνει τιμές στο διάνυσμα των μεταβλητών απόφασης και εξετάζει την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Εάν η τιμή βελτιώνεται, το νέο διάνυσμα αποθηκεύεται στη μνήμη, αν όχι η μέθοδος προχωράει στο επόμενο διάνυσμα. Είναι αρκετά σαφές ότι εάν η

εφικτή περιοχή είναι μεγάλη και πολύπλοκη θα απαιτείται ένα σημαντικό χρονικό διάστημα και πολλές αξιολογήσεις της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης για μια ικανοποιητική εξερεύνηση. Αυτός είναι ο κύριος λόγος, σε συνδυασμό με την απουσία βεβαιότητας σύγκλισης, για τον οποίο η μέθοδος δεν έχει βρει εφαρμογές πρόσφατα.

Σε μια προσπάθεια να αντιμετωπίσουν τα μειονεκτήματα της μεθόδου οι Tan και Gu πρότειναν αντί για εντελώς τυχαία, η εξερεύνηση να εστιάζεται σε μία παράμετρο απόφασης κάθε φορά και να εκμεταλλεύεται την ήδη υπάρχουσα λύση αντί να ακολουθεί μια τυχαία διαδρομή (Tan & Gu, 2004). Σε κάθε επανάληψη ο αλγόριθμος αυξάνει κατά ένα μικρό αριθμό την παράμετρο υπό βελτιστοποίηση και υπολογίζει την τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Εάν η τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης δεν βελτιωθεί τότε μειώνει την παράμετρο κατά τον ίδιο μικρό αριθμό. Σε πολλές περιπτώσεις αυτή η αύξηση ή μείωση της παραμέτρου καταλήγει σε βελτίωση της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης. Εάν αποτύχει, ο αλγόριθμος εξετάζει τυχαίες τιμές για την παράμετρο για ένα πεπερασμένο αριθμό δοκιμών προτού περάσει στην επόμενη παράμετρο. Μια γραφική απεικόνιση των βημάτων που ακολουθούνται αποτυπώνονται στην Εικόνα 5.



Εικόνα 5. Διάγραμμα ροής του τροποποιημένου τυχαίου περιπάτου όπως προτείνεται από τους Tan και Gu.
Με τις τροποποιήσεις αυτές ο αλγόριθμος αντιμετωπίζει μερικές από τις εγγενείς ατέλειες των αλγορίθμων τυχαίου περιπάτου. Αρχικά εκμεταλλεύεται τη βέλτιστη λύση της προηγούμενης επανάληψης. Με τον τρόπο αυτό μειώνει κατά πολύ την ανάγκη για τυχαίες αποτιμήσεις της αντικειμενικής συνάρτησης, οι οποίες θα είχαν μικρότερη πιθανότητα επιτυχίας. Εξάλλου, η πιθανότητα βελτίωσης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης με την αλλαγή κάθε παραμέτρου απόφασης ξεχωριστά είναι ευκολότερα ελεγχόμενη από την περίπτωση που ο αλγόριθμος αλλάζει ταυτόχρονα όλες τις παραμέτρους απόφασης. Αξιοσημείωτο είναι επίσης το γεγονός ότι ο πεπερασμένος αριθμός τυχαίων δοκιμών παρέχει έναν τρόπο για να παρακαμφθεί μια παράμετρος απόφασης, η μεταβολή της οποίας δεν φαίνεται να επιδρά θετικά στην τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης. Παρά ταύτα ο αλγόριθμος συνεχίζει να έχει μειονεκτήματα που δεν επιτρέπουν να γίνει μία εξαιρετική εναλλακτική παραδοσιακών μεθόδων, με εφαρμογές σε κάθε είδους πρόβλημα. Η δυσκολότερη ίσως απόφαση που πρέπει να λάβει ο ερευνητής είναι η τιμή του μικρού αριθμού τον οποίο χρησιμοποιεί ο αλγόριθμος για να μεταβάλλει τις παραμέτρους απόφασης. Εάν ο αριθμός είναι πολύ μικρός, η βελτίωση που θα επιτευχθεί θα είναι πιθανότατα επίσης μικρή, όπως άλλωστε και ο ρυθμός βελτιστοποίησης της αντικειμενικής συνάρτησης. Υπάρχει όμως και μια οριακή τιμή η οποία εάν ξεπεραστεί καταλήγει σε αυξημένη αποτυχία του τμήματος εκμετάλλευσης του αλγορίθμου, γεγονός που οδηγεί σε περισσότερες τυχαίες δοκιμές και αυξημένο χρόνο υπολογισμών.

Εφαρμογές στην Υδρολογία

Όταν μακρές χρονοσειρές εισόδων-εξόδων είναι διαθέσιμες είναι δυνατή μια επιτυχημένη εκπαίδευση του ΤΝΔ που οδηγεί σε ένα αξιόπιστο ανάλογο του φυσικού συστήματος. Η αξιολόγηση όμως του μοντέλου όπως και η βεβαιότητα του ερευνητή είναι αμφισβητήσιμη. Η πιο ευρέως χρησιμοποιούμενη μέθοδος εκτίμησης της αξίας της διαδικασίας εκπαίδευσης είναι ο έλεγχος με παρατηρημένα δεδομένα που δεν έχουν χρησιμοποιηθεί. Εάν το σφάλμα του ελέγχου είναι κοντά στο σφάλμα εκπαίδευσης, η εκπαίδευση θεωρείται επιτυχημένη. Το ερώτημα της εκτίμησης της αβεβαιότητας στα ΤΝΔ δεν ετίθετο στα αρχικά στάδια εφαρμογής της μεθόδου για δημιουργία περιβαλλοντικών μοντέλων, αλλά εγείρεται όλο και πιο συχνά τα τελευταία χρόνια (Chryssolouris et al., 1996).

Αρκετές εφαρμογές ΤΝΔ σε υπόγεια και επιφανειακή υδρολογία έχουν δημοσιευτεί το τελευταίο διάστημα. Στον τομέα των υπογείων υδάτων συμπεριλαμβάνονται εφαρμογές για προσομοίωση ενός αριθμητικού μοντέλου με σκοπό την εύρεση αποτελεσμάτων σε λιγότερο χρόνο και με μικρότερο υπολογιστικό κόστος (Arndt et al., 2005⁻ Hani et al., 2006⁻ Nikolos et al., 2008)⁻ για εκτίμηση των παραμέτρων ενός υδροφορέα (υδραυλική αγωγιμότητα) με επίλυση του αντίστροφου προβλήματος, όπου από μετρήσεις υδραυλικών υψών υπολογίζονται οι παράμετροι του υδροφορέα (Garcia & Shigidi, 2006⁻ Samani et al., 2007⁻ Wosten et al., 2001⁻ Zio, 1997)⁻ για πρόβλεψη παροχής μιας πηγής, συνδυάζοντας ένα μαθηματικό μοντέλο που υπολογίζει τις παραμέτρους εισόδου ενός νευρωνικού δικτύου (Lallahem & Mania, 2003b)⁻ πρόγνωση ενός πεδίου ροής, που βρίσκεται ακόμα σε αρχικό στάδιο και συνδυάζει ένα τυπικό αριθμητικό μοντέλο με ένα ΤΝΔ με σκοπό την δημιουργία ενός χάρτη του πεδίου ροής (Benning et al., 2001)⁻ και την πρόβλεψη κινδύνου ρύπανσης, βασισμένη στις τιμές της αγωγιμότητας, της βροχόπτωσης, της θερμοκρασίας και των δεδομένων άντλησης (Coppola et al., 2005⁻ Kuo et al., 2004⁻ Sahoo et al., 2006). Στην

επιφανειακή υδρολογία οι βασικές εφαρμογές αφορούν σε πρόβλεψη παροχής μιας λεκάνης απορροής για τη διαχείριση κινδύνου πλημμύρας ή αποθήκευσης σε έναν ταμιευτήρα (Aqil et al., 2007[.] Coulibaly et al., 2001)[.] μοντελοποίηση βροχής - απορροής, που μπορεί να είναι είτε συνολικά για την λεκάνη απορροής είτε ημικατανεμημένα (Chen & Adams, 2006[.] Lallahem & Mania, 2003b[.] Sajikumar & Thandaveswara, 1999)[.] και για μοντελοποίηση χρονοσειρών, η οποία σε σύνδεση με συστήματα ασαφούς λογικής έχει βρει εφαρμογή στη μοντελοποίηση παροχής ενός ποταμού (Nayak et al., 2004).

Σε πορώδεις υδροφορείς τα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα έχουν χρησιμοποιηθεί ακόμα και για καθορισμό της ευαισθησίας συστημάτων σε ρύπανση από φυτοφάρμακα. Με δεδομένα κατηγοριοποιημένους δείκτες για το βάθος του υδροφόρου στρώματος, το βαθμό διαρροής των φυτοφαρμάκων, την ευαισθησία του υδροφορέα στην ρύπανση, τον χρόνο (μήνα) της συλλογής δείγματος, το βάθος του πηγαδιού, το βάθος του νερού από την επιφάνεια και το μέσο βάθος του φίλτρου του πηγαδιού από την επιφάνεια του εδάφους, το μοντέλο προβλέπει την ολική συγκέντρωση φυτοφαρμάκων στο δείγμα νερού κάθε πηγαδιού. (Sahoo et al., 2006)

Η ρύπανση και γενικότερα η μεταφορά μάζας ξεφεύγει από το σκοπό της παρούσας εργασίας είναι όμως μια πολύ ενδιαφέρουσα προοπτική και παραμένει σαν αντικείμενο μελλοντικής εργασίας. Ειδικά σε παραθαλάσσιους καρστικούς υδροφορείς εξαιρετική σημασία θα είχε η δυνατότητα προσομοίωσης της συγκέντρωσης ιόντων χλωρίου ως ένδειξη υφαλμύρινσης.

Στην υδρολογία, η βασική εξίσωση που όλα τα ΤΝΔ προσπαθούν να προσομοιώσουν, είναι το υδατικό ισοζύγιο. Τα νευρωνικά δίκτυα μπορούν να προσομοιώσουν παραμέτρους όπως το υδραυλικό ύψος, οι οποίες σχετίζονται με άλλες παραμέτρους όπως η βροχόπτωση και η εξατμισοδιαπνοή. Κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης με παρατηρημένες τιμές παραμέτρων εισόδου-εξόδου τα συναπτικά βάρη τροποποιούνται, ούτως ώστε το δίκτυο να δίνει για μια δεδομένη είσοδο μια έξοδο όσο το δυνατό πιο κοντά στην παρατηρημένη. Αυτή η διαδικασία συμπεριλαμβάνει μέσα στα συναπτικά βάρη κάθε σταθερή παράμετρο του υδατικού ισοζυγίου. Εξ αιτίας της προσέγγισης ως μαύρο κουτί και της πολύπλοκης δομής του δικτύου κάθε σταθερή παράμετρος δεν είναι δυνατόν να αναγνωριστεί ως ένα συγκεκριμένο συναπτικό βάρος, αλλά η συνολική διαδικασία λαμβάνει υπ' όψιν όλες τις σταθερές παραμέτρους κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, καταλήγοντας σε μια μη γραμμική αποτύπωση της σχέσης μεταξύ των δεδομένων εισόδου και εξόδου. Αναφορικά με τους καρστικούς υδροφορείς, το μοντέλο ΤΝΔ δεν απαιτεί γνώση όλων των σύνθετων παραμέτρων που επηρεάζουν την έξοδο, καθώς έχει μια εξαιρετική ικανότητα περιγραφής σχέσεων μεταξύ παραμέτρων. Με δεδομένη την υψηλή συσχέτιση μεταξύ των παραμέτρων του υδατικού ισοζυγίου όπως η βροχόπτωση, η διαφορά στην αποθήκευση του υδροφορέα, η απορροή η εξατμισοδιαπνοή κτλ., όλοι οι σταθεροί όροι μπορούν να παραλειφθούν, επειδή θα ενσωματωθούν στα βάρη που θα υπολογιστούν από το μοντέλο ΤΝΔ.

Εξ αιτίας της αδιαφανούς προσέγγισής τους και της ικανότητάς τους να προσεγγίζουν ένα μεγάλο εύρος συναρτήσεων, τα ΤΝΔ έχουν βρει εφαρμογές τόσο στην επιφανειακή όσο και στην υπόγεια υδρολογία (Coppola et al., 2005b' Dash et al., In Press' Lallahem & Mania, 2003a' Lallahem et al., 2005' Nayak et al., 2006). Οι παράμετροι εισόδου είναι συνήθως συνδεδεμένες με το υδατικό ισοζύγιο και οι παράμετροι εξόδου μπορούν να περιλαμβάνουν την παροχή από μια λεκάνη απορροής, την παροχή μιας πηγής, τη στάθμη του υπόγειου ύδατος ή άλλες υδρολογικές παραμέτρους. Κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης το ΤΝΔ τροφοδοτείται με παρατηρημένες σειρές υδρολογικών και μετεωρολογικών δεδομένων για τις παραμέτρους εισόδου και εξόδου και τα βάρη του δικτύου τροποποιούνται ούτως ώστε να περιγράφουν τον τρόπο σύνδεσης των πρώτων με τις δεύτερες. Μετά από την εκπαίδευση το δίκτυο είναι ικανό να προβλέψει την έξοδο για οποιοδήποτε σύνολο παραμέτρων εισόδου με ένα προσδιοριστικό τρόπο: το δίκτυο παράγει τις ίδιες πάντα τιμές εξόδου για ένα συγκεκριμένο σετ παραμέτρων εισόδου.

Ο κύριος λόγος εφαρμογής των ΤΝΔ στην υπόγεια υδρολογία είναι ότι μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε περιοχές όπου τα ακριβή γεωλογικά χαρακτηριστικά δεν είναι διαθέσιμα στον ερευνητή ή είναι ιδιαίτερα πολύπλοκα για να περιγραφούν επακριβώς με ένα αριθμητικό μοντέλο. Σε αυτή την περίπτωση ένα ΤΝΔ μπορεί να προσομοιώσει την απόκριση του υδροφορέα με την προϋπόθεση διαθέσιμων χρονοσειρών υδρολογικών δεδομένων.

Υπενθυμίζεται ότι το γεγονός με την εφαρμογή νευρωνικών δικτύων σε καρστικούς υδροφορείς είναι ότι το μοντέλο δεν είναι ανάγκη να γνωρίζει όλες τις σύνθετες παραμέτρους που επηρεάζουν το αποτέλεσμα καθώς έχει εξαιρετική ικανότητα περιγραφής σχέσεων μεταξύ παραμέτρων. Με δεδομένη την υψηλή συσχέτιση μεταξύ των παραμέτρων του υδατικού ισοζυγίου, όλοι οι σταθεροί παράγοντες του ισοζυγίου μπορούν να παραλειφθούν καθώς θα συμπεριληφθούν τελικά στα βάρη που θα υπολογιστούν από το μοντέλο.

Για να είναι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης τα καλύτερα δυνατά, υπάρχει η δυνατότητα χρήσης ΤΝΔ με διαφορετική αρχιτεκτονική, όπως τα δίκτυα πρόσω τροφοδότησης (feed-forward), τα ανατροφοδοτούμενα (recurrent) ή τα δίκτυα συναρτήσεων ακτινικής βάσης (radial basis function), ανάλογα με το εξεταζόμενο πρόβλημα, καθώς υπάρχει η πιθανότητα η μία δομή να έχει καλύτερη απόκριση από τις υπόλοιπες. Η επιλογή του καταλληλότερου αλγορίθμου εκπαίδευσης μπορεί επίσης να βελτιώσει περαιτέρω την ικανότητα του δικτύου. Σημαντική δουλειά έχει γίνει σε αυτόν τον τομέα χρησιμοποιώντας και αξιολογώντας διαφορετικές μεθόδους, για την εύρεση της καταλληλότερης δομής για προσομοίωση μιας συγκεκριμένης περιοχής μελέτης (Daliakopoulos et al., 2005). Στο πρόσφατο παρελθόν έγιναν προσπάθειες εφαρμογής μοντέλων ΤΝΔ σε διάφορους υδροφορείς.

Στη βόρεια Γαλλία (Lallahem et al., 2005) ένα μοντέλο Perceptron πολλών επιπέδων (Multi Layer Perceptron – MLP) χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της απόκρισης ενός υδροφορέα σε ένα συγκεκριμένο σημείο παρατήρησης. Για κάθε σημείο δεδομένων (ημέρα) οι παράμετροι εισόδου ήταν η βροχόπτωση, η ενεργή βροχόπτωση, η μέση θερμοκρασία και η εξατμισοδιαπνοή από δύο σταθμούς και τα υδραυλικά ύψη από δώδεκα γειτονικά πηγάδια. Οι συγγραφείς εξετάζουν επίσης το ενδεχόμενο να χρησιμοποιηθούν περισσότερες ημέρες υδραυλικών υψών ως παράμετροι εισόδου, ωστόσο είναι αμφίβολο το αν υπάρχει φυσικό νόημα σε μια τέτοια πρόταση.

Ένα νευρωνικό δίκτυο που εφαρμόστηκε στην Ινδία (Nayak et al., 2006), χρησιμοποιούσε ως εισόδους την μηνιαία βροχόπτωση, την απορροή από αρδευτικά κανάλια και τα υδραυλικά ύψη όχι μόνο του τελευταίου μήνα αλλά έως και των τεσσάρων τελευταίων μηνών. Η έξοδος είναι το επίπεδο του υπόγειου ύδατος σε δύο πηγάδια και τα αποτελέσματα είναι αρκετά ακριβή για πρόβλεψη έως και τέσσερις μήνες μετά. Εντούτοις, το φυσικό νόημα πρέπει να εξεταστεί όταν πρόκειται για τετράμηνη υστέρηση της επίδρασης της βροχόπτωσης ή του υδραυλικού ύψους, επειδή η ταχύτητα των υπογείων υδάτων σε καρστικούς υδροφορείς είναι σχετικά μεγάλη.

Ένα αρκετά απλούστερο δίκτυο εφαρμόστηκε για την περιοχή του Νιου Τζέρσεϊ, στις ΗΠΑ (Coppola et al., 2005b) με εισόδους τους μέσους όρους 30 ημερών θερμοκρασίας, βροχόπτωσης, συνολικής παροχής άντλησης, και αρχικού υδραυλικού ύψους σε ένα πηγάδι παρατήρησης. Η έξοδος είναι η πρόβλεψη της στάθμης στο πηγάδι παρατήρησης 30 ημέρες μετά. Αυτή είναι μια εφαρμογή που μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την απόκτηση μιας γενικής εικόνας του συστήματος και της συμπεριφοράς του.

Στο κρατίδιο Ορίσσα (Orissa State) της Ινδίας συγκρίθηκαν οι δυνατότητες ενός νευρωνικού δικτύου και ενός συστήματος ασαφούς λογικής για την προσομοίωση της στάθμης του υδροφορέα με παραμέτρους εισόδου την βροχόπτωση και την στάθμη του υδροφορέα σε προηγούμενες χρονικές στιγμές (Dash et al., In Press). Η μελέτη αυτή προκρίνει τη μέθοδο εκπαίδευσης Levenberg–Marquardt, η οποία δίνει ελαφρώς καλύτερα αποτελέσματα σε σύγκριση με τους άλλους συντελεστές συσχέτισης, αλλά δε βελτιώνει σημαντικά το σφάλμα, το οποίο παραμένει αρκετά υψηλό – το μέσο τετραγωνικό σφάλμα υπερβαίνει τα 0,45 m κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης, ενώ αυξάνεται στα 0,68 m στο τμήμα δεδομένων ελέγχου.

Ο Πίνακας 1 αποτελεί μία συνοπτική καταγραφή των προηγούμενων εργασιών στις οποίες εφαρμόστηκαν τεχνητά νευρωνικά δίκτυα για την προσομοίωση της απόκρισης υδροφορέων. Παρουσιάζονται οι αρχιτεκτονικές δικτύων που εφαρμόστηκαν κατά περίπτωση καθώς και οι παράμετροι εισόδου. Όπου οι παράμετροι εισόδου αποτελούνταν από τιμές για περισσότερα από ένα χρονικά βήματα δηλώνονται και το ποια βήματα επιλέχθηκαν.

Συγγραφείς	Έτος	Αρχιτεκτονική Δικτύου	Παράμετροι Εισόδου	Χρονική Υστέρηση
Coppola et al.	2005	FFN	Q, ΣQ, Ρ, Τ, GL	t-1 (GL)
Daliakopoulos et al.	2005	FFN, RBF	P, T, GL, F	t, t-1, t-2, t-3, t-4
Lallahem et al.	2005	FFN	P,T, EP, PET, GL	t, t-1, t-2, t-3 (GL)
Nayak et al.	2006	FFN	P,Q, GL	t, t-1, t-2, t-3, t-4
				(*)
Dash et al.	2010	FFN, ANN-GA	P, GL	t-1,t-2 (GL)

Πίνακας 1. Συνοπτικ	ή παρουσίαση προηγα	ούμενων εφαρμογα	ών ΤΝΔ σε υπι	όγεια ύδατα
---------------------	---------------------	------------------	---------------	-------------

Όπου FFN: Δίκτυο εμπρόσθιας τροφοδότησης (feed-forward network), RBF: δίκτυα συναρτήσεων ακτινικής βάσης (radial basis function) GA: γενετικοί αλγόριθμοι (genetic algorithm) και Q: παροχή άντλησης, ΣQ: αθροιστική παροχή άντλησης, P: Κατακρήμνιση, T: Θερμοκρασία, GL: Στάθμη Υδροφορέα, F: Επιφανειακή Απορροή, EP: Ενεργή Βροχόπτωση, PET: δυνητική εξάτμιση-διαπνοή. *Διάφορα σενάρια.

Στην παρούσα εργασία έχουν ληφθεί υπ' όψιν οι μεθοδολογίες που χρησιμοποιήθηκαν παραπάνω και έχουν τροποποιηθεί τα σημεία που εισήγαγαν σφάλματα, όσο αυτό ήταν δυνατό. Πολλά προβλήματα ξεκινούν όταν μοντέλα ΤΝΔ χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση ενός φαινομένου που υπόκειται σε φυσικούς νόμους, εξ αιτίας της ιδιότητάς τους να συμπεριφέρονται ως μαύρα κουτιά. Δηλαδή, ενώ φαίνονται οι παράμετροι εισόδου και εξόδου, τα εσωτερικά στοιχεία στερούνται φυσικού νοήματος και είναι αδύνατη η ερμηνεία τους. Κατά καιρούς εγείρονται ερωτήματα από ερευνητές σχετικά με την αξία τέτοιων μοντέλων και την ερμηνεία των αποτελεσμάτων τους (Christakos, 2002). Είναι αλήθεια ότι όταν ένα μοντέλο δίνει έμφαση στο μαθηματικό κομμάτι και αποτυγχάνει να ενσωματώσει γνωστά χαρακτηριστικά του φυσικού συστήματος, θα παράσχει – τις περισσότερες φορές – αποτελέσματα που είναι αδύνατο να ερμηνευτούν.

Λαμβάνοντας υπ' όψιν αυτό το γεγονός η προσέγγιση αυτής της εργασίας εστιάζεται τόσο στο φυσικό σύστημα όσο και σε καθαυτό το ΤΝΔ. Σκοπός της εργασίας είναι η υποστήριξη της κατασκευής ΤΝΔ με τη γνώση του φυσικού συστήματος και η απόδοση φυσικού νοήματος στις παραμέτρους που χρησιμοποιούνται ως είσοδοι και έξοδοι των ΤΝΔ για να ξεπεραστεί το εμπόδιο της θεώρησης ως μαύρου κουτιού. Η βαθμονόμηση με αυστηρά μαθηματικούς όρους είναι το προβληματικό κομμάτι πολλών μοντέλων ΤΝΔ τα οποία μπορεί να παράγουν αποτελέσματα που δεν συνάδουν με τους υποκείμενους φυσικούς νόμους.

Δύο διαφορετικά ΤΝΔ πολλών επιπέδων χρησιμοποιήθηκαν' το πρώτο για πρόβλεψη του υδραυλικού ύψους σε δύο πηγάδια παρατήρησης, ενώ το δεύτερο τροποποιήθηκε για την πρόβλεψη της διαφοράς στάθμης μεταξύ δύο διαδοχικών ημερών στις αντίστοιχες τοποθεσίες. Μια ανάλυση της συσχέτισης των παρατηρημένων δεδομένων πραγματοποιήθηκε αρχικά για τον καθορισμό της χρονικής υστέρησης μεταξύ της βροχόπτωσης και των παραμέτρων εξόδου. Ένας Διαφορικός Εξελικτικός (ΔΕ) αλγόριθμος χρησιμοποιήθηκε σε επόμενο στάδιο για τον βέλτιστο προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης της βροχόπτωσης καθώς και της αρχιτεκτονικής του δικτύου και των παραμέτρων εκπαίδευσης.

Η προτεινόμενη μεθοδολογία εισηγείται όλες οι παράμετροι εισόδου να είναι έμμεσα ή άμεσα συνδεδεμένες με το υδατικό ισοζύγιο και το TNΔ να αντιμετωπίζεται σαν ένα πολύπλοκο ανάλογο των εμπειρικών μοντέλων του παρελθόντος. Με ιδιαίτερο ενδιαφέρον εξετάστηκε η ποσοτικοποίηση της χρονικής υστέρησης των παραμέτρων εισόδου με σκοπό την εξασφάλιση φυσικού νοήματος, αντί για μια απλή προσπάθεια ελαχιστοποίησης του σφάλματος με μαθηματικούς όρους με την προσθήκη ή αφαίρεση παραμέτρων όπως σε προαναφερθείσα δημοσίευση (Lallahem et al., 2005). Οι συντελεστές συσχέτισης των χρονοσειρών θεωρούνται χρήσιμο εργαλείο για μια εκτίμηση της χρονικής υστέρησης χωρίς βελτιστοποίηση, ενώ ο ΔΕ μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να εξετάσει εναλλακτικές πιθανότητες και να υπολογίσει τις βέλτιστες.

2.3 Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος

Οι Price και Storn ανέπτυξαν τον ΔΕ ώστε να αποτελεί μία αξιόπιστη και ευπροσάρμοστη αλλά ταυτόχρονα εύχρηστη μέθοδο βελτιστοποίησης συναρτήσεων. Η πρώτη δημοσίευση σχετική με τον ΔΕ εμφανίστηκε ως τεχνική αναφορά (technical report) το 1995 (Storn & Price, 1995) και ακολούθησε δημοσίευση σε επιστημονικό περιοδικό (Storn & Price, 1997). Έκτοτε, ο ΔΕ έχει αποδείξει την αξία του σε διαγωνισμούς όπως ο διεθνής διαγωνισμός της IEEE «International Contest on Evolutionary Optimization (ICEO)» το 1996 και 1997 και σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών σε πραγματικά προβλήματα (Price et al., 2005).

Ένας ΔΕ αποτελεί μια απλή εφαρμογή ενός Εξελικτικού Αλγορίθμου (ΕΑ) που έχει επιδείξει καλύτερες επιδόσεις στη σύγκλιση από ότι άλλοι ΕΑ. Ο ΔΕ αλγόριθμος αντιπροσωπεύει ένα τύπο εξελικτικής στρατηγικής ειδικά διαμορφωμένης με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να χειριστεί αποτελεσματικά συνεχή προβλήματα βελτιστοποίησης, που παρουσιάζονται συχνά σε προβλήματα μηχανικών και περιβαλλοντικού σχεδιασμού. Μπορεί εύκολα να τροποποιηθεί για να χειριστεί διακριτές και ακέραιες μεταβλητές και πολλαπλούς περιορισμούς. Έχει αποδειχθεί ως ένας από τους πλέον ελπιδοφόρους νέους ΕΑ σε όρους αποδοτικότητας, αποτελεσματικότητας και εύρεσης εύρωστων (robust) λύσεων και αυτοί είναι οι λόγοι για τους οποίους χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία.

Όπως σχεδόν όλοι οι εξελικτικοί αλγόριθμοι ο ΔΕ είναι μια μέθοδος βελτιστοποίησης που βασίζεται σε έναν πληθυσμό ο οποίος ξεκινά την επίλυση ενός προβλήματος επιλέγοντας πολλά τυχαία σημεία και αξιολογώντας την αντικειμενική συνάρτηση σε αυτά. Προκαθορισμένα όρια για κάθε παράμετρο υπό βελτιστοποίηση καθορίζουν την εφικτή περιοχή εντός της οποίας επιλέγονται τα N_p διανύσματα του αρχικού πληθυσμού (Εικόνα 6). Κάθε διάνυσμα χαρακτηρίζεται από έναν ακέραιο αριθμό-δείκτη που λαμβάνει τιμές από 0 έως N_p – 1.





Όπως και άλλες μέθοδοι που βασίζονται σε πληθυσμό, έτσι και ο ΔΕ δημιουργεί νέα σημεία, που είναι διαταραχές υπαρχόντων σημείων, αλλά αυτές οι αποκλίσεις δεν είναι ούτε αντικατοπτρισμοί όπως στις μεθόδους CRS και Nelder–Mead, ούτε δείγματα από μια προκαθορισμένη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας όπως στις εξελικτικές στρατηγικές.

Αντί για αυτό, ο ΔΕ διαταράσσει διανύσματα με μια υπό κλίμακα διαφορά δύο τυχαία επιλεγμένων διανυσμάτων του πληθυσμού (Εικόνα 7). Η διαφορά δηλαδή των δύο διανυσμάτων πολλαπλασιάζεται επί ένα συντελεστή στάθμισης *F* μικρότερο της μονάδας.

Όσο μεγαλύτερος ο συντελεστής στάθμισης τόσο μεγαλύτερη και η διαταραχή. Σε αρχικά στάδια εφαρμογής του αλγορίθμου είναι επιθυμητή μια μεγαλύτερη τιμή για να έχει ο αλγόριθμος μεγαλύτερη ικανότητα εξερεύνησης. Στα τελευταία στάδια πολλές φορές ο συντελεστής στάθμισης μειώνεται, ούτως ώστε να επιτευχθεί καλύτερη εκμετάλλευση των ήδη ευρεθεισών λύσεων.



Εικόνα 7. Δημιουργία της διαταραχής xr1 - xr2.

Για να παραχθεί το δοκιμαστικό διάνυσμα, u_0 , ο ΔΕ προσθέτει το υπό κλίμακα (σταθμισμένο) διάνυσμα της διαφοράς σε ένα τρίτο τυχαία επιλεγμένο διάνυσμα του πληθυσμού (Εικόνα 8).



Εικόνα 8. Μετάλλαξη.



Εικόνα 9. Επιλογή. Επειδή έχει μικρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης, το \mathbf{u}_0 αντικαθιστά το διάνυσμα με αριθμό 0 στην επόμενη γενιά.

Κατά τη διαδικασία επιλογής, το δοκιμαστικό διάνυσμα συναγωνίζεται με το αντίστοιχο διάνυσμα του πληθυσμού, που στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι το διάνυσμα με αριθμό Ο. Η Εικόνα 9 αποτυπώνει το βήμα επιλογής και αποθήκευσης, κατά το οποίο το διάνυσμα με την καλύτερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης σημειώνεται ως μέλος της επόμενης γενιάς.

Η Εικόνα 10 και η Εικόνα 11 δείχνουν ότι η διαδικασία επαναλαμβάνεται μέχρι όλα τα N_p διανύσματα του πληθυσμού να συναγωνιστούν με κάποιο τυχαία δημιουργημένο δοκιμαστικό διάνυσμα. Όταν και το τελευταίο δοκιμαστικό διάνυσμα ελεγχθεί, οι επιζώντες των N_p διαγωνισμών ζευγών αποτελούν τους γονείς της επόμενης γενιάς του εξελικτικού κύκλου.







Εικόνα 11. Επιλογή. Σε αυτή την περίπτωση, το δοκιμαστικό διάνυσμα χάνει.

Ενώ η διατύπωση που περιγράφεται παραπάνω και παρουσιάζεται στην Εικόνα 12 δουλεύει ήδη ιδιαίτερα καλά, η επίδοση του ΔΕ μπορεί να βελτιωθεί και η μεθοδολογία να προσαρμοστεί σε μια ευρεία ποικιλία προβλημάτων βελτιστοποίησης. Οι βελτιώσεις ενδέχεται να αφορούν σε μικρές ρυθμίσεις των τιμών των παραμέτρων στάθμισης *F* και πιθανότητας μετάλλαξης *Cr*.

Συνοπτικά, οι λειτουργίες που αποτελούν τα βασικά τμήματα ενός διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου, περιλαμβάνουν τον καθορισμό της δομής του πληθυσμού, την αρχικοποίησή του, την διεργασία της μετάλλαξης, τη διεργασία της διασταύρωσης και τελικά την διαδικασία επιλογής των διανυσμάτων που θα περάσουν στον επόμενο πληθυσμό.

```
while (κριτήριο σύγκλισης δεν ικανοποιείται)
 //--χ; ορίζει διάνυσμα του παρόντος πληθυσμού διανυσμάτων--
 //--y ορίζει διάνυσμα του νέου πληθυσμού διανυσμάτων----
 for (i=0; i<NP; i++)</pre>
 {
  r1 = rand(N<sub>P</sub>); //επιλογή τυχαίου δείκτη από 1, 2, ..., N<sub>p</sub>
  r2 = rand(N<sub>P</sub>); //επιλογή τυχαίου δείκτη από 1, 2, ..., N<sub>P</sub>
  r3 = rand(N<sub>P</sub>); //επιλογή τυχαίου δείκτη από 1, 2, ..., N<sub>P</sub>
  u<sub>i</sub> = x<sub>r3</sub> + F* (x<sub>r1</sub> - x<sub>r2</sub>);//δοκιμαστικό διάνυσμα
  if (f(u<sub>i</sub>) <= f(x<sub>i</sub>))//διαγωνισμός δοκιμαστικού με υπάρχον
   {f y}_i = {f u}_i;//το δοκιμαστικό περνάει στον επόμενο πληθυσμό
  }
  else
  {
   y<sub>i</sub> = x<sub>i</sub>;//το υπάρχον επιβιώνει στον επόμενο πληθυσμό
  }
 }
}//end while
. . .
```

Εικόνα 12. Ψευδο-κώδικας για μια απλοποιημένη μορφή των λειτουργιών γένεσης και ελέγχου του ΔΕ.

Ιωάννης Χ. Τριχάκης

Δομή του Πληθυσμού

Η πιο ευπροσάρμοστη εφαρμογή ενός ΔΕ διατηρεί ένα ζεύγος πληθυσμών διανυσμάτων, τα οποία περιέχουν N_p διανύσματα D διαστάσεων πραγματικών παραμέτρων. Ο υπάρχων πληθυσμός, συμβολίζεται με P_x , αποτελείται από τα διανύσματα, $x_{i,g}$, τα οποία έχουν κριθεί αποδεκτά είτε ως αρχικά σημεία είτε σε σύγκριση με άλλα διανύσματα:

$$P_{x,g} = (x_{i,g}), \quad i = 0, 1, \dots, N_p - 1, \qquad g = 0, 1, \dots, g_{max},$$

$$x_{i,g} = (x_{j,i,g}), \quad j = 0, 1, \dots, D - 1.$$
(2.20)

Ο δείκτης, $g = 0, 1, ..., g_{max}$, δηλώνει τη γενιά στην οποία ανήκει το διάνυσμα. Επιπροσθέτως, κάθε διάνυσμα προσδιορίζεται από ένα δείκτη του πληθυσμού, *i*, που κυμαίνεται από 0 έως $N_p - 1$. Οι παράμετροι εντός των διανυσμάτων προσδιορίζονται και από ένα δείκτη *j*, που κυμαίνεται από 0 έως D - 1.

Μετά την παραγωγή του αρχικού πληθυσμού ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος μεταλλάσσει τα τυχαία επιλεγμένα διανύσματα για την παραγωγή ενός ενδιάμεσου πληθυσμού, *P_{v,a}*, από *N_p* μεταλλαγμένα διανύσματα, *v_{i,a}*:

$$P_{v,g} = (v_{i,g}), \quad i = 0, 1, \dots, N_p - 1, \qquad g = 0, 1, \dots, g_{max}, \\ v_{i,g} = (v_{j,i,g}), \quad j = 0, 1, \dots, D - 1.$$

$$(2.21)$$

Κάθε διάνυσμα στον τρέχοντα πληθυσμό συνδυάζεται με ένα μεταλλαγμένο για την παραγωγή ενός δοκιμαστικού πληθυσμού, $P_{u,g}$, από N_p μεταλλαγμένα διανύσματα, $u_{i,g}$:

$$P_{u,g} = (u_{i,g}), \quad i = 0, 1, \dots, N_p - 1, \qquad g = 0, 1, \dots, g_{max}, u_{i,g} = (u_{i,i,g}), \quad j = 0, 1, \dots, D - 1.$$
(2.22)

Κατά τη διάρκεια του συνδυασμού τα δοκιμαστικά διανύσματα μπορούν να αντικαθιστούν τον μεταλλαγμένο πληθυσμό ούτως ώστε ένας μόνο πίνακας να μπορεί να περιλαμβάνει και τους δύο πληθυσμούς. Με τον τρόπο αυτό μειώνεται η ανάγκη για μνήμη του προγράμματος.

Αρχικοποίηση

Πριν την αρχικοποίηση του πληθυσμού πρέπει να καθοριστούν τα άνω και κάτω όρια κάθε παραμέτρου. Έστω ότι οι τιμές αυτές εισάγονται ως δύο διανύσματα αρχικοποίησης, *D* διαστάσεων, b_L και b_U , όπου τα *L* και *U* δείχνουν την ελάχιστη και την μέγιστη τιμή αντίστοιχα και υλοποιούν τους ρητούς περιορισμούς του προβλήματος βελτιστοποίησης. Αφού οριστούν τα όρια αρχικοποίησης, μία γεννήτρια τυχαίων αριθμών αναθέτει σε κάθε παράμετρο κάθε διανύσματος μια τιμή εντός του προκαθορισμένου διαστήματος. Για παράδειγμα, η αρχική τιμή (g = 0) της παραμέτρου με αριθμό *j* που ανήκει στο διάνυσμα με αριθμό *i* είναι

$$x_{j,i,0} = \operatorname{rand}_{j}(0,1) \cdot (b_{j,U} - b_{j,L}) + b_{j,L}.$$
(2.23)

Η γεννήτρια τυχαίων αριθμών, rand_j(0,1), επιστρέφει έναν τυχαίο αριθμό ομοιόμορφα κατανεμημένο μέσα στο διάστημα [0, 1), δηλαδή $0 \leq \text{rand}_j < 1$. Ο δείκτης *j* δηλώνει ότι μία νέα τυχαία τιμή γεννάται για κάθε παράμετρο. Ακόμα και εάν μία παράμετρος είναι διακριτή ή ακέραια, αρχικοποιείται σαν πραγματικός αριθμός καθώς ο ΔΕ εσωτερικά συμπεριφέρεται σε όλες τις παραμέτρους σαν να είναι πραγματικές παράμετροι ανεξάρτητα από το είδος τους.

Μετάλλαξη

Μετά τον υπολογισμό του αρχικού πληθυσμού, ο διαφορικός εξελικτικός μεταλλάσσει και συνδυάζει τον πληθυσμό για την παραγωγή ενός ενδιάμεσου πληθυσμού N_p μεταλλαγμένων διανυσμάτων. Συγκεκριμένα η διαφορική μετάλλαξη εισάγει μια υπό κλίμακα, τυχαία επιλεγμένη, διαφορά διανυσμάτων σε ένα τρίτο διάνυσμα. Η Εξίσωση (2.23) δείχνει πώς συνδυάζονται τρία τυχαία επιλεγμένα διανύσματα $(x_{r0,g}, x_{r1,g}$ και $x_{r2,g})$ για τη δημιουργία ενός μεταλλαγμένου διανύσματος $v_{i,g}$:

$$v_{i,g} = x_{r0,g} + F \cdot (x_{r1,g} - x_{r2,g})$$
(2.24)

Ο παράγοντας, $F \in (0,1+)$, είναι ένας θετικός πραγματικός αριθμός που ελέγχει το ρυθμό με τον οποίο ο πληθυσμός εξελίσσεται. Ενώ δεν υπάρχει άνω όριο για τον παράγοντα *F*, οι αποτελεσματικές τιμές σπάνια υπερβαίνουν την τιμή 1,0.





Ο βασικός δείκτης του διανύσματος δότη, r0, μπορεί να προσδιοριστεί με διάφορες μεθόδους, ωστόσο έστω ότι επιλέγεται τυχαία ένας δείκτης διανύσματος ο οποίος είναι διαφορετικός από το δείκτη του διανύσματος στόχου, *i*. Εκτός από διαφορετικά μεταξύ τους και διαφορετικά τόσο από τον δότη όσο και από τον στόχο οι δείκτες των δύο διανυσμάτων από τα οποία προκύπτει η διαφορά, r1 και r2, επιλέγονται επίσης τυχαία μία φορά για κάθε μεταλλαγμένου διανύσματος, v_{i,g}, σε ένα παραμετρικό χώρο δύο διαστάσεων.

Διασταύρωση

Για την συμπλήρωση της στρατηγικής αναζήτησης με διαφορική μετάλλαξη ο διαφορικός εξελικτικός εφαρμόζει επίσης ομοιόμορφη διασταύρωση. Κάποιες φορές αναφέρεται και ως διακριτός συνδυασμός, η διασταύρωση κατασκευάζει δοκιμαστικά διανύσματα από τιμές παραμέτρων που αντιγράφονται από δύο διαφορετικά διανύσματα. Συγκεκριμένα ο διαφορικός εξελικτικός διασταυρώνει κάθε διάνυσμα του αρχικού πληθυσμού με ένα μεταλλαγμένο διάνυσμα:

$$u_{i,g} = u_{j,i,g} = \begin{cases} v_{j,i,g} & \epsilon \acute{\alpha} v \left(\operatorname{rand}_{j}(0,1) \le Cr \acute{\eta} j = j_{rand} \right) \\ x_{j,i,g} & \delta \iota α \phi o \rho \epsilon \tau \iota \kappa \acute{\alpha}. \end{cases}$$
(2.25)

Η πιθανότητα διασταύρωσης, $Cr \in [0,1]$, είναι μια οριζόμενη από το χρήστη τιμή που ελέγχει το κλάσμα των τιμών των παραμέτρων που αντιγράφονται από το μεταλλαγμένο διάνυσμα. Για να καθοριστεί ποια πηγή συνεισφέρει μια συγκεκριμένη παράμετρο, η ομοιόμορφη διασταύρωση συγκρίνει την πιθανότητα διασταύρωσης με την τιμή μιας γεννήτριας ομοιόμορφων τυχαίων αριθμών, rand_i(0,1). Εάν η τιμή του τυχαίου αριθμού είναι μικρότερη ή ίση με την πιθανότητα διασταύρωσης, η παράμετρος του δοκιμαστικού διανύσματος κληρονομείται από το μεταλλαγμένο διάνυσμα, $v_{i,g}$, διαφορετικά η παράμετρος αντιγράφεται από το διάνυσμα $x_{i,g}$. Επιπλέον η παράμετρος του δοκιμαστικού διανύσματος με τυχαία επιλεγμένο δείκτη, j_{rand}, λαμβάνεται από το μεταλλαγμένο διάνυσμα, ούτως ώστε να εξασφαλιστεί ότι το δοκιμαστικό διάνυσμα δε θα είναι αντίγραφο του x_{i,g}, αφού θα περιέχει τουλάχιστον μία διαφορετική τιμή. Εξ αιτίας της επιπλέον αυτής απαίτησης, η πιθανότητα διασταύρωσης, Cr, αποτελεί προσέγγιση της πραγματικής πιθανότητας, p_{Cr}, μίας παραμέτρου του δοκιμαστικού διανύσματος να έχει κληρονομηθεί από το μεταλλαγμένο διάνυσμα. Η Εικόνα 14 αναπαριστά τα πιθανά δοκιμαστικά διανύσματα που μπορούν να προκύψουν από την ομοιόμορφη διασταύρωση ενός μεταλλαγμένου διανύσματος, $v_{i,a}$, με το διάνυσμα $x_{i,a}$.





Επιλογή

Εάν το δοκιμαστικό διάνυσμα, $u_{i,g}$, έχει ίση ή μικρότερη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης από ότι το διάνυσμα στόχος, $x_{i,g}$, αντικαθιστά το διάνυσμα στόχο στην επόμενη γενιά. Συγκρίνοντας κάθε δοκιμαστικό διάνυσμα με το αντίστοιχο διάνυσμα στόχο από το οποίο κληρονομεί παραμέτρους ο ΔΕ ενοποιεί πιο δυνατά τη διασταύρωση με την επιλογή από ότι άλλοι εξελικτικοί αλγόριθμοι:

$$x_{i,g+1} = \begin{cases} u_{i,g} & εάν f(u_{i,g}) \le f(x_{i,g}) \\ x_{i,g} & διαφορετικά. \end{cases}$$
(2.26)

Μετά την ολοκλήρωση της δημιουργίας του νέου πληθυσμού η διαδικασίες της μετάλλαξης, της διασταύρωσης και της επιλογής επαναλαμβάνονται έως ότου εντοπιστεί το βέλτιστο ή ικανοποιηθεί ένα προκαθορισμένο κριτήριο τερματισμού, π.χ. ο αριθμός των γενεών φτάσει ένα προκαθορισμένο μέγιστο, g_{max} . (Price et al., 2005)

Ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος έχει βρει εφαρμογές στην βελτιστοποίηση προβλημάτων τόσο επιφανειακής όσο και υπόγειας υδρολογίας. Μεταξύ αυτών περιλαμβάνεται η βελτιστοποίηση του ρυθμού άντλησης (Karterakis et al., 2007⁻ Kourakos & Mantoglou, 2009), σχεδιασμό συστήματος αποκατάστασης ρυπασμένου υδροφορέα (Bayer), ενώ σε συνδυασμό με νευρωνικό δίκτυο έχει χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση μεταφοράς φερτών υλικών από ένα ποτάμι (Kisi, 2010).

Μία εφαρμογή του διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου υλοποιήθηκε για την εύρεση του μέγιστου δυνατού ρυθμού άντλησης από έναν υδροφορέα στη βόρεια Κρήτη που γειτνιάζει με ακτή και υπάρχει φόβος υποβάθμισης της ποιότητας. Με την παραδοχή απότομης διεπιφάνειας, συνδύασε και ένα αριθμητικό μοντέλο προσομοίωσης υπογείων υδάτων (Karterakis et al., 2007). Ένας τέτοιος συνδυασμός μπορεί να δώσει μία λύση με μικρό υπολογιστικό κόστος. Οι παράμετροι απόφασης ήταν οι παροχές άντλησης των πηγαδιών στην περιοχή και οι περιορισμοί προέκυπταν από την επιθυμία να μην υπερβεί το μέτωπο της υφαλμύρινσης προς την ενδοχώρα ένα προκαθορισμένο όριο. Το αριθμητικό μοντέλο υπογείων υδάτων παρείχε τις απαραίτητες πληροφορίες σχετικά με την αναμενόμενη κατάσταση του υδροφορέα ανάλογα με κάθε πιθανό εξεταζόμενο σενάριο, ενώ τελικά η αντικειμενική συνάρτηση συνδύαζε την μεγιστοποίηση της συνολικής παροχής άντλησης με όρους κυρώσεων που καθιστούσαν μη ελκυστικά τα σενάρια που παραβίαζαν κάποιο περιορισμό.

Μια διαφορετική προσέγγιση (σε υδροφορέα της Σαντορίνης) χρησιμοποίησε αριθμητικό μοντέλο μεταφοράς μάζας σε υπόγεια ύδατα σε συνδυασμό με εξελικτικό αλγόριθμο και ένα νευρωνικό δίκτυο (Kourakos & Mantoglou, 2009). Το νευρωνικό δίκτυο χρησιμοποιήθηκε για την προσέγγιση των αποτελεσμάτων του αριθμητικού μοντέλου μεταφοράς μάζας, ώστε να μειωθεί ο υπολογιστικός φόρτος που απαιτεί η εκτέλεση του αριθμητικού μοντέλου. Η αντικειμενική συνάρτηση στη συγκεκριμένη περίπτωση είχε ως στόχο την μεγιστοποίηση των αντλήσεων, ενώ οι περιορισμοί προέβλεπαν ένα ανώτατο όριο στη συγκέντρωση χλωριόντων ίσο με το ανώτατο επιτρεπτό στις προδιαγραφές πόσιμου νερού σε κάθε πηγάδι άντλησης.

Στην περίπτωση του σχεδιασμού ενός συστήματος αποκατάστασης ενός ρυπασμένου υδροφορέα στην νοτιοδυτική Γερμανία (Bayer et al., 2009) ένας διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος εφαρμόζεται με σκοπό την εύρεση της βέλτιστης λύσης υπό καθεστώς αβεβαιότητας. Ένα γεωστατιστικό μοντέλο παρέχει πληροφορίες για την αναμενόμενη στάθμη του υδροφορέα σε κάθε σενάριο. Η αβεβαιότητα εισάγεται ως διαφορετικές πιθανές υλοποιήσεις της υδραυλικής αγωγιμότητας, η οποία αποτελεί μεταβλητή εισόδου. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος καταλήγει σε λύσεις που είναι λιγότερο ευαίσθητες στις μικρές αλλαγές της υδραυλικής αγωγιμότητας, όταν οι διαταραχές στα δεδομένα είναι μεγαλύτερες, ενώ μια εξελικτική στρατηγική υπερτερεί στις περιπτώσεις όπου υπάρχουν πολλές υλοποιήσεις με μικρότερη αβεβαιότητα. Σε κάθε περίπτωση και οι δύο τεχνικές καταλήγουν σε πολύ αξιόπιστές κοντά στο ολικό βέλτιστο λύσεις.

Στην επιφανειακή υδρολογία και συγκεκριμένα για προσομοίωση μεταφοράς φερτών υλών από ένα ποτάμι στο Πουέρτο Ρίκο (Kisi, 2010) ένας συνδυασμός διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου με νευρωνικό δίκτυο συγκρίθηκε με ένα απλό νευρωνικό δίκτυο, ένα νευρωνικό δίκτυο ασαφούς λογικής και ένα μοντέλο καμπύλης διαβάθμισης (rating curve). Τα δεδομένα εισόδου που εξετάστηκαν για να βρεθεί η βέλτιστη δομή του νευρωνικού, ήταν η παροχή του ποταμού κατά το χρονικό βήμα της προσομοίωσης και κατά το προηγούμενο χρονικό βήμα καθώς και η παροχή ιζήματος (στερεοπαροχής) κατά το προηγούμενο χρονικό βήμα. Ο διαφορικός εξελικτικός στη συγκεκριμένη εργασία χρησιμοποιήθηκε για τον προσδιορισμό των συναπτικών βαρών του νευρωνικού δικτύου. Το μοντέλο με τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα σε σχέση με την προσομοίωση της παροχής ιζήματος.

2.4 Η Μέθοδος Bootstrap (Αυτοδύναμη)

Η μέθοδος bootstrap (αυτοδύναμη μέθοδος) είναι μια στατιστική μέθοδος που εισήχθη αρχικά από τον Efron (Efron, 1979). Ανήκει σε μία ευρύτερη ομάδα μεθόδων που παίρνουν δείγματα από ένα αρχικό σετ δεδομένων και για το λόγο αυτόν ονομάζονται διαδικασίες επαναλαμβανόμενης δειγματοληψίας (resampling methods). Είναι μια μέθοδος προσδιορισμού τόσο ενός εκτιμητή μιας συγκεκριμένης παραμέτρου όσο και της ακρίβειας του συγκεκριμένου εκτιμητή (Chernick, 2008). Όταν υπάρχει ένα δείγμα πλήθους *n* μιας συγκεκριμένης παραμέτρου, αυτό το δείγμα έχει μια εμπειρική κατανομή της οποίας τα στατιστικά χαρακτηριστικά είναι εύκολο να προσδιοριστούν. Η αυτοδύναμη ιδέα είναι απλά η αντικατάσταση της άγνωστης κατανομής του πληθυσμού με την γνωστή εμπειρική κατανομή. Ιδιότητες του εκτιμητή, όπως το τυπικό σφάλμα, προσδιορίζονται έπειτα βάσει της εμπειρικής κατανομής. Πρακτικές εφαρμογές της μεθόδου απαιτούν τη δημιουργία αυτοδύναμων δειγμάτων (δηλαδή δειγμάτων που δημιουργούνται λαμβάνοντας ανεξάρτητα τυχαία τιμές από το αρχικό δείγμα με αντικατάσταση). Από την αυτοδύναμη δειγματοληψία προκύπτει μια προσέγγιση Μόντε Κάρλο του αυτοδύναμου εκτιμητή (Chernick, 2008). Η διαδικασία εφαρμογής της μεθόδου bootstrap είναι απλή, σχηματικά αποτυπώνεται στην Εικόνα 15.





Η ανεξαρτησία της κάθε επανάληψης από τις υπόλοιπες είναι ιδιαίτερα σημαντική και μπορεί να αξιοποιηθεί κατά την ανάπτυξη του κώδικα, ώστε να δημιουργηθούν παράλληλες διαδικασίες (threads) και να αξιοποιηθούν στο έπακρο οι δυνατότητες των πολυπύρηνων επεξεργαστών. Ο αριθμός των επαναλήψεων μπορεί εύκολα να χωριστεί ανάλογα με τους διαθέσιμους πυρήνες και να κατανεμηθεί με τον τρόπο αυτόν ο υπολογιστικός φόρτος. Η δυνατότητα αυτή μειώνει τον απαιτούμενο χρόνο μίας πλήρους εκτέλεσης της διαδικασίας bootstrap και βοηθά στην υπέρβαση του βασικότερου ίσως εμποδίου για την ευρεία εφαρμογή της σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα.

Επαναλαμβάνοντας τα βήματα 1 και 2 για *B* φορές προκύπτει μια προσέγγιση Μόντε Κάρλο της κατανομής της επιθυμητής παραμέτρου. Η βασική ιδέα της μεθόδου bootstrap είναι ότι για μεγάλη τιμή του *B* η προσέγγιση Μόντε Κάρλο είναι σχεδόν η ίδια με την πραγματική κατανομή. Αν και αυτό μπορεί να φαίνεται περίεργο αρχικά, η ακρίβεια της μεθόδου bootstrap έχει αποδειχθεί σε πολλά δημοσιευμένα άρθρα (Bickel & Freedman, 1981[·] Schervish, 1995[·] Singh, 1981). Η ακρίβεια δεύτερης τάξης και η σύγκλιση της μεθόδου είναι επίσης καλά τεκμηριωμένες (Singh, 1981).

Για τη δημιουργία κάθε ενός από τα δείγματα με αντικατάσταση ακολουθείται η διαδικασία που αναπαριστάται στην Εικόνα 16. Το σύνολο παρατηρημένων δεδομένων εκπαίδευσης μπορεί να διαχωριστεί σε επιμέρους σειρές δεδομένων εισόδου εξόδου. Οι σειρές αυτές περιέχουν παρατηρημένες τιμές των μεταβλητών εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο και τις αντίστοιχες παρατηρημένες τιμές των μεταβλητών εξόδου για τις συγκεκριμένες τιμές εισόδου.



Εικόνα 16. Γραφική απεικόνιση της διαδικασίας δημιουργίας ενός συνόλου.

Κάθε παρατηρημένη σειρά δεδομένων εισόδου-εξόδου έχει την ίδια πιθανότητα κατά τη διαδικασία συμπλήρωσης ενός συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης bootstrap να καταλάβει μία θέση σειράς bootstrap. Με τον τρόπο αυτό δημιουργείται ένα bootstrap σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης το οποίο περιέχει παρατηρημένες σειρές δεδομένων εισόδουεξόδου, αλλά τυχαία αναδιατεταγμένες και με μεγάλη πιθανότητα κάποια από τις παρατηρημένες σειρές να μην υπάρχει στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης bootstrap, ενώ κάποια άλλη να εμφανίζεται παραπάνω από μία φορές.

Στο βιβλίο τους οι Efron και Tibshirani (Efron & Tibshirani, 1993) προτείνουν τέσσερεις διαφορετικούς τρόπους δημιουργίας διαστημάτων εμπιστοσύνης, αξιοποιώντας την αυτοδύναμη μέθοδο. Ο απλούστερος περιλαμβάνει την εκτίμηση ενός τυπικού σφάλματος και την υπόθεση ότι οι τυχαίες τιμές της εξόδου είναι ανεξάρτητες από την τιμή της εισόδου και ακολουθούν συγκεκριμένη κατανομή (π.χ. κανονική ή Student). Εάν το $z^{(\alpha)}$ δείχνει το (100 · α) οστό ποσοστιαίο σημείο μιας κατανομής N(0,1), τότε τα διαστήματα εμπιστοσύνης μίας παραμέτρου $\hat{\theta}$ με τυπικό σφάλμα \hat{se} και επίπεδο εμπιστοσύνης 100 · $(1 - 2\alpha)$ % υπολογίζονται ως εξής:

$$\hat{\theta}_{lo} = \hat{\theta} - z^{(1-\alpha)} \cdot \widehat{se} \quad \text{kon} \quad \hat{\theta}_{up} = \hat{\theta} - z^{(\alpha)} \cdot \widehat{se} \tag{2.27}$$

Ένας τρόπος να παρακαμφθεί η ανάγκη για την υπόθεση ότι η παράμετρος εξόδου ακολουθεί μια γνωστή κατανομή είναι ο υπολογισμός των ποσοστιαίων διαστημάτων εμπιστοσύνης. Η ποσοστιαία μέθοδος είναι ίσως ο πλέον προφανής τρόπος κατασκευής διαστήματος εμπιστοσύνης για μια παράμετρο βασισμένος σε αυτοδύναμες εκτιμήσεις (Efron & Tibshirani, 1993). Μετά την αυτοδύναμη διαδικασία υπάρχουν Β αυτοδύναμες εκτιμήσεις της εξόδου. Εάν ο πληθυσμός είναι αρκετά μεγάλος, ένα διάστημα που περιλαμβάνει π.χ. 90% των αυτοδύναμων εκτιμήσεων μπορεί να θεωρηθεί ότι θα περιέχει των πραγματική τιμή της εξόδου με βεβαιότητα 90%. Η πιο λογική επιλογή των ορίων του διαστήματος εμπιστοσύνης είναι η εύρεση εκείνων που αποκλείουν το μικρότερο 5% και το μεγαλύτερο 5%.

Ένα αυτοδύναμο διάστημα εμπιστοσύνης που δημιουργείται με τον τρόπο αυτόν ονομάζεται ποσοστιαίο διάστημα εμπιστοσύνης. Περιλαμβάνει την υπόθεση ότι η κατανομή της εξόδου είναι συμμετρική, γεγονός που δεν ισχύει πάντα. Με σκοπό την αφαίρεση μεροληπτικής τάσης από τα αποτελέσματα μια βελτιωμένη μεθοδολογία έχει προταθεί (Efron & Tibshirani, 1993) που ονομάζεται αμερόληπτη επιταχυμένη (BCa – Bias-Corrected and Accelerated) και απαιτεί τον υπολογισμό της διόρθωσης μεροληπτικής τάσης (\hat{z}_0) και της επιτάχυνσης (α). Η διόρθωση μεροληπτικής τάσης είναι εύκολο να εκτιμηθεί ως η τιμή της αντίστροφης συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας της κανονικής κατανομής για το ποσοστό των αυτοδύναμων εκτιμήσεων που είναι μικρότερες από την προσομοιωμένη τιμή του μοντέλου.

$$\hat{z}_0 = \Phi^{-1} \left(\frac{\# εκτιμήσεων bootstrap μικρότερων από την προσομοιωμένη τιμή}{B} \right)$$
 (2.28)

 $\Phi^{-1}(\cdot)$ δείχνει την αντίστροφη συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της κανονικής κατανομής.

Για την επιτάχυνση ο Efron προτείνει τον υπολογισμό της χρησιμοποιώντας τις τιμές που προκύπτουν για την παράμετρο $\hat{\theta} = s(\mathbf{x})$ εάν υπολογιστεί αποκλείοντας μια τιμή κάθε φορά από τα αρχικά δεδομένα. Έστω $\mathbf{x}_{(i)}$ το αρχικό δείγμα με διαγεγραμμένο το σημείο στη θέση $i(x_i)$, έστω $\hat{\theta}_{(i)} = s(\mathbf{x}_{(i)})$ και εξ ορισμού $\hat{\theta}_{(\cdot)} = \sum_{i=1}^{n} \hat{\theta}_{(i)} / n$. Τότε

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^{n} (\hat{\theta}_{(\cdot)} - \hat{\theta}_{(i)})^{3}}{6 \left[\sum_{i=1}^{n} (\hat{\theta}_{(\cdot)} - \hat{\theta}_{(i)})^{2} \right]^{\frac{3}{2}}}$$
(2.29)

Η διόρθωση μεροληπτικής τάσης μετακινεί το μέσο όρο της εμπειρικής κατανομής προς την αντίθετη κατεύθυνση από ότι η μεροληπτική τάση, ενώ η επιτάχυνση αναφέρεται στο ρυθμό αλλαγής του τυπικού σφάλματος του $\hat{\theta}$ σε σχέση με την πραγματική τιμή της παραμέτρου θ .

Το αμερόληπτο επιταχυμένο διάστημα εμπιστοσύνης για προτιθέμενη κάλυψη 1-2α, δίνεται από τον τύπο

$$BCa: \left(\hat{\theta}_{lo}, \hat{\theta}_{up}\right) = \left(\hat{\theta}^{*(\alpha_1)}, \hat{\theta}^{*(\alpha_2)}\right)$$
(2.30)

όπου

$$\alpha_1 = \Phi\left(\hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(\alpha)}}{1 - \hat{\alpha}(\hat{z}_0 + z^{(\alpha)})}\right)$$
(2.31)

και

$$\alpha_2 = \Phi\left(\hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)}}{1 - \hat{\alpha}(\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)})}\right)$$
(2.32)

 $\Phi(\cdot)$ δείχνει την συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας της κανονικής κατανομής και $z^{(\alpha)}$ είναι το (100α)στο ποσοστιαίο σημείο της κανονικής κατανομής (Efron & Tibshirani, 1993).

Ο τέταρτος τρόπος αναφέρεται ως προσεγγιστικά αυτοδύναμο διάστημα εμπιστοσύνης (ABC intervals – Approximate Bootstrap Confidence intervals) και δυστυχώς δεν μπορεί να εφαρμοστεί στο παρόν πρόβλημα, καθώς απαιτεί τη γνώση μιας μαθηματικής έκφρασης της παραμέτρου εξόδου ως συνάρτηση του διανύσματος επαναλαμβανόμενης δειγματοληψίας. Το διάνυσμα αυτό αποτελείται από αναλογίες των αρχικών δεδομένων που επιλέγονται σε ένα αυτοδύναμο δείγμα. Η δομή όμως του ΤΝΔ είναι τόσο περίπλοκη που μια τέτοια μαθηματική έκφραση είναι ανύπαρκτη.

Οι εφαρμογές της μεθόδου bootstrap εκτείνονται μεταξύ διαφορετικών επιστημονικών πεδίων από την ιατρική έρευνα για την ανάλυση δεδομένων δοκιμής φαρμάκων (Wahrendorf & Brown, 1980) έως τη γεωστατιστική για τον προσδιορισμό της διακύμανσης των καμπυλών του kriging (Diaconis & Efron, 1983), και από την στατιστική της αστρονομίας, την αστροστατιστική (Babu & Feigelson, 1996), έως την ψυχολογία για εύρεση διαστημάτων εμπιστοσύνης (Efron, 1988). Σχεδόν κάθε επιστημονικό πεδίο που χρησιμοποιεί στατιστικές μεθόδους για την ανάλυση δεδομένων, θα μπορούσε να βρει χρήσιμη την αυτοδύναμη μέθοδο. Μια βιβλιογραφική επισκόπηση σχετικά με την μέθοδος bootstrap (Chernick, 2008) αποκάλυψε περισσότερες από 2000 αναφορές στο αντικείμενο.

Οι πιο συχνές χρήσεις των ΤΝΔ είναι η ταξινόμηση ή η παλινδρόμηση. Η πρώτη περιλαμβάνει την αναγνώριση μοτίβων και η μέθοδος bootstrap εφαρμόζεται για την αξιολόγηση της απόδοσης (da Silva et al., 2005[•] Mougiakakou et al., 2007[•] Silva & Mery, 2007), η δεύτερη έχει μεγαλύτερο εύρος εφαρμογών, αλλά η μέθοδος bootstrap εφαρμόζεται για την δημιουργία διαστημάτων εμπιστοσύνης της προσομοιωμένης τιμής (Papadopoulos et al., 2001), την επιλογή του βέλτιστου αριθμού κρυφών κόμβων (Tsujitani & Sakon, 2009) ή για τον καθορισμό της καταλληλότητας των δεδομένων εισόδου (White & Racine, 2001).

Η μέθοδος bootstrap έχει εφαρμοστεί στο παρελθόν στην υπόγεια υδρολογία για τον προσδιορισμό διαστημάτων εμπιστοσύνης στάθμης υπογείων υδάτων (Cooley, 1997[·] Masumoto, 2003), συντελεστών μεταφοράς μάζας (Chrysikopoulos et al., 2002) ή ακόμα και μικροβιακής κατανομής μέσα σε εδάφη (Thomas et al., 2009).

Κεφάλαιο 3ο

Μεθοδολογία

Εξετάστηκαν πολλά διαφορετικά σχέδια και χρησιμοποιήθηκαν πολλές διαφορετικές μέθοδοι αντιμετώπισης για την εύρεση των καταλληλότερων λύσεων σε θέματα που ανακύπτουν κατά την προσπάθεια εφαρμογής μοντέλων βασισμένων στη θεωρία των νευρωνικών δικτύων για την προσομοίωση της στάθμης του υδροφόρου ορίζοντα σε ένα πηγάδι παρατήρησης. Η μεθοδολογία που κρίθηκε ως η πλέον ολοκληρωμένη και ακριβής και η οποία προτείνεται για χρήση εφεξής, παρέχει απαντήσεις για όλα τα βασικά ζητήματα που ανακύπτουν και δίνει εν τέλει τη δυνατότητα δημιουργίας ενός μοντέλου που στηρίζεται σε ισχυρές θεωρητικές βάσεις, ενώ παράλληλα αξιοποιεί τις δυνατότητες της υπολογιστικής νοημοσύνης και είναι πλήρως αυτοματοποιημένο για την αποτροπή παρεμβάσεων από τον εκάστοτε χρήστη. Ενώ τα μοντέλα που βασίζονται στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων έχουν προσδιοριστική (ντετερμινιστική) έξοδο, η προτεινόμενη μεθοδολογία συμπεριλαμβάνει μια μέθοδο υπολογισητας.

Το πρώτο θέμα που πρέπει να επιλυθεί κατά τη δημιουργία του μοντέλου, είναι η επιλογή των παραμέτρων εισόδου και εξόδου. Κατά το παρελθόν έχουν παρουσιαστεί εφαρμογές που η επιλογή γίνεται είτε με βάση την εμπειρία του ερευνητή είτε στηριζόμενη σε μαθηματικές μεθόδους ελαχιστοποίησης του σφάλματος (Lallahem et al., 2005[•] Nayak et al., 2006). Στην προσέγγιση που ακολουθήθηκε, έγινε προσπάθεια να έχουν όσο το δυνατόν μεγαλύτερο φυσικό νόημα όλες οι παράμετροι εισόδου και εξόδου. Για το σκοπό αυτό, έχοντας πάντα κατά νου ότι η υπό προσομοίωση συνάρτηση δεν είναι άλλη από το υδατικό ισοζύγιο, επιλέχθηκαν ως παράμετροι εισόδου και εξόδου οι υδρολογικές μεταβλητές που είναι άμεσα ή έμμεσα συνδεδεμένες με τον υδρολογικό κύκλο. Στη μέχρι τώρα βιβλιογραφία η παράμετρος εξόδου που έχει χρησιμοποιηθεί είναι το υδραυλικό ύψος σε διάφορα πηγάδια παρατήρησης. Η αιτιολόγηση της υπεροχής που έχει η χρήση της μεταβολής του υδραυλικού ύψους αντί για το ίδιο το υδραυλικό ύψος, τόσο από πλευράς φυσικό νοήματος όσο και από μαθηματικής, θα ακολουθηθεί από σύγκριση σε πραγματικά προβλήματα για να διαπιστωθεί η ορθότητα του συλλογισμού.

Μία συχνή παράβλεψη στην προσομοίωση υπογείων υδάτων είναι η παράμετρος της χρονικής υστέρησης μεταξύ βροχόπτωσης και μεταβολής της στάθμης του υδροφορέα. Όπως και στα επιφανειακά ύδατα υπάρχει ένας χρόνος συγκέντρωσης για κάθε λεκάνη απορροής, έτσι και στα υπόγεια χρειάζεται να μεσολαβήσει ένα χρονικό διάστημα για να φανεί η επίδραση της βροχόπτωσης. Γι αυτόν το λόγο είναι ιδιαίτερα σημαντική η σωστή επιλογή της ημέρας δεδομένων βροχόπτωσης που πρέπει να εισαχθεί ως παράμετρος εισόδου στο μοντέλο. Ο απλούστερος τρόπος προσδιορισμού της χρονικής υστέρησης είναι μέσω μίας ανάλυσης συσχέτισης χρονοσειρών βροχόπτωσης και μεταβολής υδραυλικού ύψους. Αναμένεται η τιμή του συντελεστή συσχέτισης να κορυφώνεται για τη βέλτιστη τιμή χρονικής υστέρησης. Σε περίπτωση που η τιμή του συντελεστή συσχέτισης φαίνεται να είναι πολύ υψηλή για περισσότερες από μία ημέρες, μπορεί να θεωρηθεί ότι η επίδραση της βροχόπτωσης υπερβαίνει τη μία ημέρα και το σύνολο των ημερών που έχουν υψηλό συντελεστή συσχέτισης μπορούν να επιλεγούν ως παράμετροι εισόδου.

Για τη βελτιστοποίηση των στοιχείων της δομής του νευρωνικού δικτύου στα οποία δεν μπορεί, λόγω της προσέγγισης ως «μαύρο κουτί» που εκείνο ακολουθεί, να αποδοθεί φυσικό νόημα, προτείνεται η χρήση μιας μεθόδου βελτιστοποίησης όπως ο Διαφορικός Εξελικτικός αλγόριθμος, που συνδυάζει τα οφέλη των εξελικτικών αλγορίθμων με ταχεία σύγκλιση στο βέλτιστο. Όπως άλλωστε κάθε εξελικτικός αλγόριθμος ούτε και ο ΔΕ εγγυάται την εύρεση ολικού βέλτιστου, αλλά η ταχύτητα σύγκλισης και η ευκολία εφαρμογής σε προβλήματα ακέραιου προγραμματισμού συνηγορούν υπέρ της χρήσης του. Με μία μόνο εφαρμογή ενός ΔΕ αλγορίθμου μπορούν να υπολογιστούν βέλτιστες τιμές για τον αριθμό των κόμβων στα κρυφά επίπεδα του νευρωνικού δικτύου, καθώς και ο αριθμός των εποχών εκπαίδευσης.

Το τελικό στάδιο της μεθοδολογίας προτείνει τρόπους υπολογισμού των διαστημάτων εμπιστοσύνης της εξόδου για ένα επιθυμητό επίπεδο βεβαιότητας. Η μέθοδος bootstrap επιλέχθηκε ως η καταλληλότερη εξ αιτίας της ευκολίας εφαρμογής και της έλλειψης υποθέσεων ότι το σφάλμα ή η έξοδος ακολουθούν κάποια γνωστή κατανομή. Η μόνη παραδοχή της μεθόδου είναι ότι το μοντέλο θα μπορούσε να προσομοιώσει με απόλυτη ακρίβεια κάθε παρατηρημένη τιμή. Η παραδοχή αυτή δεν ικανοποιείται απόλυτα, λόγω της ύπαρξης ακραίων σημείων, που οφείλονται σε αντλήσεις εντός του πηγαδιού παρατήρησης και στην πιθανή έλλειψη δεδομένων εισόδου. Σε κάθε περίπτωση πρέπει να επισημαίνεται ότι η ακρίβεια των συγκεκριμένων διαστημάτων εμπιστοσύνης εξαρτάται από την ικανότητα του μοντέλου.

3.1 Προτεινόμενη Δομή Νευρωνικού Δικτύου

Για τη δημιουργία ενός νευρωνικού δικτύου για προσομοίωση υπογείων υδάτων απαιτείται να καθοριστούν οι παράμετροι εισόδου, ο αριθμός των κρυφών επιπέδων, ο αριθμός των κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο, οι συναρτήσεις ενεργοποίησης κάθε κόμβου του νευρωνικού δικτύου και οι παράμετροι εξόδου. Μετά από την αρχική διάταξη της δομής του νευρωνικού δικτύου πρέπει επίσης να οριστεί και η μέθοδος εκπαίδευσης, δηλαδή ο αλγόριθμος που θα χρησιμοποιηθεί για την ενημέρωση των βαρών του δικτύου με σκοπό τον καθορισμό των βέλτιστων βαρών που ελαχιστοποιούν το σφάλμα του νευρωνικού δικτύου.

Δεδομένης της μεγάλης ποικιλίας συναρτήσεων ενεργοποίησης και αλγορίθμων εκπαίδευσης υπάρχουν πολλές δυνατότητες ανάπτυξης νευρωνικών δικτύων ανάλογα με τα χαρακτηριστικά που κρίνονται επιθυμητά από τον ερευνητή. Οι περισσότερες βελτιώσεις αφορούν συνήθως στη μείωση του υπολογιστικού φόρτου ή/και του χρόνου που απαιτεί μια πλήρης εκτέλεση του αλγορίθμου, παρά στην εύρεση μιας καλύτερης λύσης. Οπότε εάν ο υπολογιστικός χρόνος δεν αποτελεί περιορισμό, δεν κρίνεται απαραίτητη η υλοποίηση εξεζητημένων αλγορίθμων εκπαίδευσης.

Εάν όμως η συνάρτηση του σφάλματος έχει πολλά τοπικά ελάχιστα και ο αλγόριθμος εκπαίδευσης εγκλωβίζεται σε κάποιο τοπικό ελάχιστο, η αξιοποίηση αλγορίθμων που έχουν την ικανότητα εξερεύνησης του χώρου εφικτών λύσεων, μπορεί να παρέχει λύση με αρκετά καλύτερη ακρίβεια σε σχέση με παραδοσιακά χρησιμοποιούμενες μεθόδους, όπως η back-

propagation, οι οποίες αν και συγκλίνουν σε σύντομο χρονικό διάστημα, έχουν αυξημένη τάση εγκλωβισμού σε τοπικά ελάχιστα. Το τίμημα βέβαια για την ικανότητα εξερεύνησης είναι μια αλματώδης αύξηση του χρόνου που απαιτείται για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου.

Μεταβλητές Εισόδου και Εξόδου

Στην προσπάθεια για δημιουργία ενός μοντέλου με όσο το δυνατόν μεγαλύτερο φυσικό νόημα, και με δεδομένο ότι κάθε νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιείται για υδρολογικές εφαρμογές, προσομοιώνει το υδατικό ισοζύγιο, αναλύθηκαν οι παράγοντες του ισοζυγίου για να προκύψουν οι παράμετροι εισόδου και εξόδου του νευρωνικού δικτύου. Ανάλογα με το πρόβλημα μπορεί κάποιες παράμετροι να είναι σημαντικότερες από άλλες, αλλά σε κάθε περίπτωση όλες οι διαθέσιμες παράμετροι που σχετίζονται με το υδατικό ισοζύγιο, θεωρείται ότι πρέπει να εισάγονται στο μοντέλο, για να επιτευχθεί η βέλτιστη εκπαίδευση – βαθμονόμηση των συναπτικών βαρών.

Σημαντικό είναι να σημειωθεί ότι οι παράμετροι εισόδου και εξόδου του νευρωνικού δικτύου είναι οι χρονικά μεταβαλλόμενες παράμετροι που συνδέονται με το ισοζύγιο και όχι τα σταθερά χαρακτηριστικά του υδροφορέα ή της λεκάνης απορροής. Εάν η χρονοσειρά των δεδομένων εκπαίδευσης είναι αρκετά μεγάλη, ώστε να περιλαμβάνει ένα ικανό πλήθος από αντιπροσωπευτικά δεδομένα, τότε η διαδικασία εκπαίδευσης θα ενσωματώσει τις σταθερές επιδράσεις των σταθερών παραμέτρων μέσα στις τιμές των συναπτικών βαρών του νευρωνικού δικτύου. Με τον τρόπο αυτόν αποφεύγεται και η πολύ συχνή παραδοχή που γίνεται στα αριθμητικά μοντέλα ότι ο υδροφορέας αποτελείται από ένα ή περισσότερα ομοιογενή πετρώματα, η οποία τις περισσότερες φορές δεν ικανοποιείται ακόμα και σε περιπτώσεις που ο υδροφορέας είναι πορώδης. Ειδικά δε στις περιπτώσεις καρστικών υδροφορέων η εξαιρετικά μεγάλη δυσκολία επακριβούς προσδιορισμού των υδραυλικών παραμέτρων τόσο του πετρώματος όσο και των διακλάσεων του υδροφορέα προσδίδει ιδιαίτερη αξία στην ιδιότητα των νευρωνικών δικτύων να μην απαιτούν στοιχεία υδραυλικής αγωγιμότητας ή πορώδους.

Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, όλες οι μεταβλητές που προτείνονται ως παράμετροι εισόδου και εξόδου είναι συνδεδεμένες με παράγοντες του υδατικού ισοζυγίου. Το υδατικό ισοζύγιο μπορεί να γραφεί ως:

$$I - O + P - EPT \pm Q = \Delta S \tag{3.1}$$

όπου,

Ι: η εισροή στη λεκάνη απορροής
Ο: η εκροή από τη λεκάνη απορροής προς άλλες λεκάνες ή τη θάλασσα
Ρ: η κατακρήμνιση στη λεκάνη απορροής
ΕΡΤ: η εξατμισοδιαπνοή που λαμβάνει χώρα μέσα στη λεκάνη
Q: ο ρυθμός άντλησης/εμπλουτισμού και
ΔS: η αλλαγή στην αποθήκευση του υδροφορέα.

Η εισροή στη λεκάνη απορροής γίνεται είτε επιφανειακά είτε υπόγεια. Οι χρονικά μεταβαλλόμενες παράμετροι που μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως παράμετροι εισόδου για να περιγράψουν την εισροή είναι η παροχή που εισρέει επιφανειακά από άλλες λεκάνες απορροής και η παροχή που εισέρχεται υπόγεια, η οποία είναι συνδεδεμένη με το υδραυλικό ύψος του υδροφορέα. Στην περίπτωση ιδιαίτερα καρστικοποιημένων περιοχών

που δεν παρουσιάζουν επιφανειακή απορροή, ή σε περιπτώσεις που η λεκάνη απορροής δε δέχεται εισροή από τα ανάντη, η παράμετρος της επιφανειακής παροχής εισροής μπορεί να παραλειφθεί από το σύνολο παραμέτρων εισόδου. Το ιδανικό σε περίπτωση που υπάρχει εξακριβωμένα υπόγεια εισροή από τα ανάντη είναι να εισαχθεί ως παράμετρος η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου στην ανάντη λεκάνη απορροής και ενός στην μελετώμενη. Σε περίπτωση που δεν υπάρχει υπόγεια παροχή από τα ανάντη η παράμετρος αυτή μπορεί να παραληφθεί.

Η εκροή από τη λεκάνη απορροής χωρίζεται επίσης σε επιφανειακή και υπόγεια. Η επιφανειακή εκροή μπορεί να μετρηθεί στο σημείο εκροής από τη λεκάνη και η παροχή να εισαχθεί ως παράμετρος εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο. Το αρνητικό πρόσημο θα ενσωματωθεί στα βάρη κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης και δεν είναι απαραίτητο να εισαχθεί μαζί με τις τιμές της εκροής. Εάν δεν παρουσιάζεται επιφανειακή εκροή, η παράμετρος αυτή δε χρειάζεται να συμπεριληφθεί στις παραμέτρους εισόδου. Η υπόγεια εκροή όπως και η εισροή έχει ως μεταβαλλόμενη χρονικά παράμετρο την υδραυλική κλίση στην περιοχή. Η μεταβολή της υδραυλικής κλίσης οφείλεται στην μεταβολή της διαφοράς υδραυλικού ύψους μεταξύ δύο σημείων. Σε περίπτωση που η υπόγεια παροχή εκρέει προς τη θάλασσα, η στάθμη της θάλασσας μπορεί να θεωρηθεί σταθερή και αντί για τη διαφορά μεταξύ δύο σημείων να εισαχθεί το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο του υδροφορέα. Η στάθμη στη συγκεκριμένη περίπτωση θα είναι σε μια χρονική στιγμή πριν από την μελετώμενη, καθώς οι παράμετροι εισόδου μιας χρονικής στιγμής δίνουν την παράμετρο εξόδου στην επόμενη χρονική στιγμή. Οι λόγοι θα αναλυθούν περισσότερο στις επόμενες παραγράφους. Η περίπτωση να μην υπάρχει υπόγεια εκροή θεωρείται απίθανη, αλλά αν όντως ισχύει, μπορεί να απαλειφθεί η αντίστοιχη παράμετρος εισόδου όπως και σε κάθε άλλη περίπτωση.

Η κατακρήμνιση στην λεκάνη απορροής είναι συνήθως η πλέον άμεσα διαθέσιμη παράμετρος, η οποία μετράται σε μετεωρολογικούς σταθμούς. Το ζήτημα που θα αναπτυχθεί σε επόμενη παράγραφο, είναι η χρονική υστέρηση μεταξύ ενός γεγονότος βροχόπτωσης και της εμφάνισης της επίπτωσής του στα υπόγεια ύδατα. Σε κάθε περίπτωση ως παράμετροι εισόδου θα είναι τιμές κατακρήμνισης από όλους του διαθέσιμους σταθμούς στην περιοχή μελέτης. Το στοιχείο που πρέπει να διευκρινιστεί είναι οι τιμές ποιας ή ποιων ημερών πρέπει να εισαχθούν.

Η εξάτμιση και η διαπνοή μπορεί να είναι σημαντικά τμήματα του υδατικού ισοζυγίου και επηρεάζονται από πολλές χρονικά μεταβαλλόμενες παραμέτρους όπως η υγρασία του εδάφους, η θερμοκρασία, η ταχύτητα του ανέμου, η σχετική υγρασία του αέρα και η ηλιακή ακτινοβολία. Δυστυχώς σε πολλές περιπτώσεις δεν υπάρχουν στοιχεία για όλες αυτές τις παραμέτρους. Ίσως η πιο συχνά διαθέσιμη είναι η θερμοκρασία, ενώ η πιο σπάνια διαθέσιμη είναι η υγρασία του υδατικού ισοζυγίου εισάγεις δεν υπάρχουν στοιχεία τα οποία σχετίζονται με παράγοντες του υδατικού ισοζυγίου εισάγει ένα σφάλμα στο μοντέλο το οποίο δεν μπορεί να διορθωθεί. Στην περίπτωση όμως που η επίδραση του συγκεκριμένου παράγοντα δεν είναι ιδιαίτερα σημαντική, το σφάλμα μπορεί να είναι επίσης αρκετά μικρό και να μην καθιστά αδύνατη την εφαρμογή της μεθόδου. Σε κάθε περίπτωση είναι στο μόγεθος του σφάλματος πριν προτείνει το μοντέλο για χρήση κατά τη διάρκεια λήψης αποφάσεων.

Ο ρυθμός άντλησης ή εμπλουτισμού είναι μια παράμετρος που μπορεί να μετρηθεί άμεσα σε κάθε πηγάδι άντλησης ή εμπλουτισμού μέσα στην περιοχή μελέτης. Σε πολλές περιπτώσεις όμως υπάρχουν και μη αδειοδοτημένες απολήψεις νερού από τον υδροφορέα, οι οποίες είναι αδύνατον να καταγραφούν και να συνυπολογιστούν. Επίσης δύσκολο μπορεί να καταστεί το έργο της συλλογής στοιχείων από τα νόμιμα πηγάδια σχετικά με την ημερήσια άντληση, καθώς σε πολλές περιπτώσεις δεν υπάρχει καταγραφέας της παροχής σε κάθε πηγάδι. Για την επίτευξη της βέλτιστης βαθμονόμησης, ειδικά μάλιστα όταν το πρόβλημα είναι για προσομοίωση στάθμης σε πηγάδια παρατήρησης που βρίσκονται εντός της ακτίνας επιρροής πηγαδιών άντλησης, η εισαγωγή ως παραμέτρων εισόδου των παροχών άντλησης είναι εκ των ων ουκ άνευ για την επίτευξη ενός αξιόπιστου μοντέλου που να περιγράφει το φυσικό σύστημα.

Η αλλαγή στην αποθήκευση του υδροφορέα αποτυπώνεται στην μεταβολή της στάθμης του υδροφόρου ορίζοντα, όπως αυτή μετράται ως μεταβολή υδραυλικού ύψους σε ένα πηγάδι παρατήρησης (δηλαδή η διαφορά της παρατηρημένης στάθμης μιας συγκεκριμένης ημέρας σε ένα σημείο μείον την παρατηρημένη στάθμη την προηγούμενη ημέρα στο ίδιο σημείο). Για το λόγο αυτόν προτείνεται η χρήση της μεταβολής υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου του νευρωνικού δικτύου. Σε αρκετές παλαιότερες εργασίες (Arndt et al., 2005[.] Coppola et al., 2005^{b.} Daliakopoulos et al., 2005[.] Feng et al., 2008[.] Krishna et al., 2008[.] Lallahem et al., 2005[.] Nayak et al., 2006) έχει χρησιμοποιηθεί το υδραυλικό ύψος ως παράμετρος εξόδου αλλά η επιλογή αυτή μπορεί να δώσει υποδεέστερα αποτελέσματα.

Η χρήση του υδραυλικού ύψους της προηγούμενης ημέρας ως παραμέτρου εισόδου και του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου εγείρει κάποια ερωτήματα. Οι δύο αυτές παράμετροι έχουν υψηλό βαθμό συσχέτισης (ο συντελεστής συσχέτισης σε περιπτώσεις ξεπερνά το 0,998) και το γεγονός αυτό μπορεί να δώσει στο νευρωνικό δίκτυο μια ανεπιθύμητη προκατάληψη και να οδηγήσει στην υποτίμηση της σημασίας των υπολοίπων παραμέτρων εισόδου. Αναλυτικότερα, όταν χρησιμοποιείται ως παράμετρος εισόδου το υδραυλικό ύψος της προηγούμενης ημέρας και ως παράμετρος εξόδου το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο παρατήρησης, επειδή ο συντελεστής συσχέτισης των δύο αυτών παραμέτρων είναι εξαιρετικά υψηλός το νευρωνικό δίκτυο θα εστιάσει περισσότερο στην συγκεκριμένη παράμετρο εισόδου. Συνεπώς τα συναπτικά βάρη της παραμέτρου αυτής θα αυξηθούν δυσανάλογα με τα υπόλοιπα, και υπάρχει πιθανότητα το δίκτυο να αγνοήσει ή να μην καταφέρει να προσδιορίσει με ακρίβεια την επίδραση των υπολοίπων μεταβλητών εισόδου στην παράμετρο εξόδου. Φυσικά στην ιδανική περίπτωση που υπάρχουν πολλά διαθέσιμα δεδομένα το εισαγόμενο σφάλμα από την επιλογή του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου θα είναι αρκετά μικρό και πιθανόν αμελητέο, όμως στις περισσότερες περιπτώσεις εφαρμογών με πραγματικά δεδομένα πεδίου αναμένεται να πλεονεκτεί η επιλογή της μεταβολής υδραυλικού ύψους.

Η ιδιαιτερότητα αυτής της επιλογής είναι ότι ουσιαστικά περιπλέκει το υπό επίλυση πρόβλημα αφού καμία από τις παραμέτρους εισόδου δεν έχει εξαιρετικά μεγάλο συντελεστή συσχέτισης με την παράμετρο εξόδου, οπότε το δίκτυο πρέπει να αναζητήσει και να περιγράψει τις βαθύτερες σχέσεις που υπάρχουν μεταξύ των μεταβλητών. Εξαιτίας αυτού του αυξημένου βαθμού δυσκολίας, η τιμή του κανονικοποιημένου σφάλματος αναμένεται να αυξηθεί, ενώ παράλληλα λόγω της καλύτερης προσέγγισης του αντικειμενικού προβλήματος αναμένεται να μειωθεί η απόκλιση της τιμής του προσομοιωμένου υδραυλικού ύψους (το οποίο προκύπτει από την πρόσθεση της προσομοιωμένης μεταβολής της στάθμης στην πραγματική τιμή υδραυλικού ύψους της προηγούμενης ημέρας) από το παρατηρημένο. Για την επιβεβαίωση των παραπάνω ισχυρισμών δοκιμάστηκε πάντως και η χρήση του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου, καθώς αποτελεί μέχρι σήμερα κοινή πρακτική σε προβλήματα προσομοίωσης στάθμης υπογείων υδάτων με ΤΝΔ.

Με βάση την παραπάνω ανάλυση, οι παράμετροι που προτείνεται να εξετάζονται ως πιθανές παράμετροι εισόδου σύμφωνα με την παρούσα μεθοδολογία είναι:

- 1. Η παροχή που εισρέει επιφανειακά από άλλες λεκάνες απορροής
- 2. Η παροχή που εκρέει επιφανειακά από τη λεκάνη
- Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου στην ανάντη λεκάνη απορροής και ενός στην μελετώμενη (ή το υδραυλικό ύψος του υδροφορέα)
- 4. Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου της μελετώμενης λεκάνης και ενός της κατάντη (σε περίπτωση που εκρέει προς τη θάλασσα, το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο του υδροφορέα)
- 5. Η κατακρήμνιση στην λεκάνη απορροής
- 6. Η θερμοκρασία
- 7. Η υγρασία του εδάφους
- 8. Η ταχύτητα του ανέμου
- 9. Η σχετική υγρασία του αέρα
- 10. Η ηλιακή ακτινοβολία
- 11. Ο ρυθμός άντλησης ή εμπλουτισμού

Σε περίπτωση που είναι γνωστή και δικαιολογημένη η απουσία ενός παράγοντα του υδατικού ισοζυγίου μπορεί εξ αρχής να παραλειφθούν από το σύνολο δεδομένων εισόδου οι αντίστοιχες χρονικά μεταβαλλόμενες παράμετροι. Σε περίπτωση που υπάρχουν ενδοιασμοί, προτείνεται η χρήση των περισσότερων παραμέτρων, καθώς έχει τη δυνατότητα το νευρωνικό δίκτυο να σταθμίσει τις σημαντικές παραμέτρους και να αγνοήσει εκείνες που δεν έχουν επίδραση στις παραμέτρους εξόδου. Εναλλακτικά μπορεί να αξιοποιηθεί μια μέθοδος βελτιστοποίησης που να προσθέτει ή να αφαιρεί παραμέτρους εισόδου από το δίκτυο με σκοπό την ελαχιστοποίηση του σφάλματος.

Στην περίπτωση που κάποια δεδομένα δεν είναι διαθέσιμα, ενώ είναι γνωστό ότι επηρεάζουν την τιμή των παραμέτρων εξόδου, η εφαρμογή της μεθόδου πρέπει να γίνεται με ιδιαίτερη προσοχή και τα αποτελέσματά της πρέπει να επανελέγχονται για την ορθότητά τους. Είναι βέβαιο ότι στις συγκεκριμένες περιπτώσεις εισάγεται ένα σφάλμα στο τελικό αποτέλεσμα το οποίο είναι απίθανο να μπορέσει να εξαλειφθεί από το νευρωνικό δίκτυο με την διαδικασία της εκπαίδευσης. Το σημαντικό σε τέτοιες περιπτώσεις είναι να αξιολογηθεί η σημασία των μη διαθέσιμων παραμέτρων και να επιβεβαιωθεί ότι το σφάλμα που εισάγει η απουσία αυτών, είναι αμελητέο ή έστω ανεκτό για τη συγκεκριμένη εφαρμογή.

Ως παράμετροι εξόδου προτείνεται αντίστοιχα να χρησιμοποιούνται οι μεταβολές των υδραυλικών υψών σε πηγάδια παρατήρησης, χωρίς να απορρίπτεται και η χρήση των υδραυλικών υψών ως παραμέτρων εξόδου. Στις περισσότερες περιπτώσεις αναμένεται να

έχει καλύτερη συμπεριφορά ένα δίκτυο με τις μεταβολές του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρους εξόδου.

Δομή του Δικτύου

Το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι ένα τυπικό πλήρως διασυνδεδεμένο Perceptron πολλών επιπέδων. Αποτελείται από το επίπεδο εισόδου, το επίπεδο εξόδου και δύο κρυφά επίπεδα. Πρέπει να σημειωθεί ότι με την εισαγωγή ενός δεύτερου κρυφού επιπέδου, τα τοπικά χαρακτηριστικά της συνάρτησης προσαρμογής εξάγονται στο πρώτο κρυφό επίπεδο και τα γενικά χαρακτηριστικά εξάγονται στο δεύτερο κρυφό επίπεδο (Chester, 1990⁻ Funahashi, 1989⁻ Haykin, 1999). Η προσθήκη επιπλέον των δύο κρυφών επιπέδων θα αύξανε τον υπολογιστικό φόρτο ενώ δεν έχει αποδειχθεί στο παρελθόν ότι θα προσέφερε καλύτερα αποτελέσματα. Η συνάρτηση ενεργοποίησης είναι η ευρέως χρησιμοποιούμενη λογιστική συνάρτηση, ενώ τα συναπτικά βάρη προσδιορίζονται από τη διαδικασία εκπαίδευσης μέσω διαδοχικών προσαρμογών των βαρών. Ο αριθμός των κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο ήταν αποτέλεσμα μιας διαδικασίας βελτιστοποίησης που έκανε χρήση ενός ΔΕ αλγορίθμου όπως περιγράφεται σε επόμενη παράγραφο.

Με γνωστή πλέον τη δομή του νευρωνικού δικτύου, ξεκινά η εκπαίδευση με τα διαθέσιμα δεδομένα. Είναι συνήθης πρακτική να μην εκπαιδεύεται το νευρωνικό με ολόκληρο το πλήθος των διαθεσίμων δεδομένων, αλλά να παρακρατείται ένα τμήμα για έλεγχο. Τα διαθέσιμα δεδομένα αρχικά διαιρέθηκαν σε τμήμα εκπαίδευσης και τμήμα ελέγχου. Το αρχικό 80% των διαθέσιμων δεδομένων χρησιμοποιήθηκε ως τμήμα βαθμονόμησης και το υπόλοιπο 20% χρησιμοποιήθηκε για τον έλεγχο του δικτύου. Επιπλέον το τμήμα βαθμονόμησης διαιρέθηκε εσωτερικά από το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο περαιτέρω σε δύο μη συνεκτικά υποσύνολα: το υποσύνολο εκπαίδευσης (70% των δεδομένων βαθμονόμησης) που χρησιμοποιήθηκε στην εκπαίδευση του δικτύου και το υποσύνολο αξιολόγησης (30% των δεδομένων βαθμονόμησης) που χρησιμοποιήθηκε στην εκπαίδευση του δικτύου και το υποσύνολο αξιολόγησης (30% των δεδομένων βαθμονόμησης) που χρησιμοποιήθηκε στην εκπαίδευση του δικτύου και το υποσύνολο αξιολόγησης του ΤΝΔ. Το μοντέλο υπολογίζει το σφάλμα εκπαίδευσης την προσομοίωση, σύμφωνα με τον τύπο:

$$E = \sum_{p} E^{p} = \sum_{p} \frac{1}{2} \sum_{o=1}^{N_{o}} (d_{o}^{p} - y_{o}^{p})^{2}$$
(3.2)

όπου,

Ε: το σφάλμα της ρύθμισης

p: το πλήθος των διαθέσιμων χρονικών σημείων δεδομένων

 E^p : το σφάλμα ρύθμισης του χρονικού σημείου p

Ν_o: ο αριθμός των μεταβλητών εξόδου

 d_o^p : η παρατηρημένη τιμή

 y_o^p : η προσομοιωμένη τιμή

Το σφάλμα εκπαίδευσης και το σφάλμα αξιολόγησης είναι οι δείκτες που χρησιμοποιούνται για να προσδιοριστεί εάν η εκπαίδευση ήταν ικανοποιητική και κατά πόσο το εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο έχει ικανότητα γενίκευσης. Συγκεκριμένα, το σφάλμα εκπαίδευσης δείχνει πόσο καλά μπορεί το νευρωνικό να προσομοιώσει τις τιμές με τις οποίες εκπαιδεύεται, ενώ το σφάλμα αξιολόγησης δείχνει πόσο καλά μπορεί να προσομοιώσει παρατηρημένες τιμές, για τις οποίες δεν έχει εκπαιδευτεί. Κατά τη διάρκεια της διαδικασίας βελτιστοποίησης είναι σημαντικό να γίνεται προσπάθεια ταυτόχρονης μείωσης και των δύο αυτών σφαλμάτων, καθώς διαφορετικά το νευρωνικό δίκτυο δε θα έχει σίγουρα την ικανότητα να προσομοιώνει όσο το δυνατόν καλύτερα την απόκριση του φυσικού συστήματος.

Για να είναι συγκρίσιμες οι τιμές του σφάλματος, για όλα τα νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιήθηκαν, τα σφάλματα υπολογίστηκαν για τις κανονικοποιημένες (από μηδέν έως ένα) τιμές των επιθυμητών και προσομοιωμένων παραμέτρων εξόδου.

Αλγόριθμοι Εκπαίδευσης

Για το τμήμα της εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου μπορούν να εφαρμοστούν διαφορετικές μέθοδοι, ανάλογα με τις ανάγκες του προβλήματος. Το νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιείται σε αυτή την εργασία είναι ένα Multi Layer Perceptron (MLP) που χρησιμοποιεί τη μέθοδο εκμάθησης back-propagation. Η μέθοδος αυτή είναι η πλέον ευρέως χρησιμοποιούμενη και παρέχει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε σχετικά σύντομο χρονικό διάστημα, αλλά υπάρχει η πιθανότητα να εγκλωβιστεί σε τοπικό βέλτιστο. Εναλλακτικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν μέθοδοι, όπως ο αλγόριθμος συζυγούς κλίσης (Conjugate Gradient). Οι αλγόριθμοι αυτοί έχουν ταχεία σύγκλιση αλλά ούτε αυτοί εξασφαλίζουν την εύρεση ενός ολικού βέλτιστου. Αντίθετα αλγόριθμοι βασισμένοι στη μέθοδο τυχαίου περιπάτου (Random Walk) είναι πιο αποτελεσματικοί στην εξερεύνηση της εφικτής περιοχής λύσεων αλλά απαιτούν μεγάλο υπολογιστικό κόστος.

Ο αλγόριθμος back propagation που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία είχε αναπτυχθεί σε γλώσσα προγραμματισμού Visual Basic 6 και χρησιμοποιηθεί στο παρελθόν σε εργασίες τόσο για προβλήματα σχεδιασμού αεροδυναμικών σχημάτων (Nikolos, 2004) όσο και για περιβαλλοντική διαχείριση υπογείων υδάτων (Nikolos et al., 2008). Οι μικρές μετατροπές στον κώδικα επέτρεψαν μεγαλύτερο αριθμό και εύρος παραμέτρων εισόδου και η μετέπειτα μεταγλώττισή του σε γλώσσα προγραμματισμού Visual Basic 2008, βελτίωσε τον απαιτούμενο χρόνο εκπαίδευσης.

Ο αλγόριθμος εκπαίδευσης ανάστροφης-διάδοσης εφαρμόστηκε με διαδοχικό τρόπο, όπου η ενημέρωση των βαρών γίνεται μετά από την τροφοδότηση του δικτύου με κάθε παράδειγμα εκπαίδευσης. Η παράμετρος του ρυθμού εκμάθησης ορίστηκε στο 0,01 και η παράμετρος κεκτημένης ταχύτητας (momentum) στο 0,9 καθ' όλο το εύρος της παρούσας εργασίας.

Ο μεγαλύτερος αριθμός παραμέτρων εισόδου που απαιτείτο σε σχέση με την αρχική πρόβλεψη του κώδικα, οφείλεται στον μεγάλο αριθμό παραμέτρων που μπορούν να επιλεγούν ως παράμετροι εισόδου του νευρωνικού. Η αύξηση του εύρους κατά τη διαδικασία αρχικοποίησης των τιμών είχε ως σκοπό τη βελτίωση της ικανότητας επέκτασης των προβλέψεων του νευρωνικού δικτύου σε περιοχές δεδομένων, για τις οποίες δεν έχει εκπαιδευτεί. Η συνήθης τακτική κατά τη διάρκεια αρχικοποίησης περιορίζει τις τιμές των παραμέτρων εισόδου και εξόδου μεταξύ των μέγιστων και ελάχιστων τιμών του διαθέσιμου συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης. Η δυνατότητα υπέρβασης των ορίων αυτών θεωρείται απαραίτητη για τη δημιουργία ενός αξιόπιστου μοντέλου με ισχυρή ικανότητα γενίκευσης.

Μια εναλλακτική μέθοδος που υλοποιήθηκε σε γλώσσα προγραμματισμού Visual Basic 2008, χρησιμοποιεί τη μέθοδο συζυγούς κλίσης. Η μέθοδος αυτή έχει την ιδιότητα της ταχύτατης σύγκλισης αλλά δεν εξασφαλίζει, όπως άλλωστε ούτε και η back propagation, ότι η τιμή στην οποία συγκλίνει είναι ολικό βέλτιστο. Ο αλγόριθμος που αξιοποιείται στη συγκεκριμένη εφαρμογή, επιτυγχάνει ταχύτατη σύγκλιση χωρίς την απαίτηση υπολογισμού του πίνακα Hessian την οποία έχουν άλλοι προηγμένοι αλγόριθμοι και η οποία έχει υψηλό υπολογιστικό κόστος. Ο αλγόριθμος είναι ταχύτατος και συγκλίνει συνήθως μετά από πολύ μικρό αριθμό βημάτων. Εκτός όμως από τα πλεονεκτήματά του μπορεί να αποδειχθεί εξαιρετικά ευαίσθητος στην επιλογή του αρχικού σημείου και είναι αρκετά πιο πολύπλοκος κατά τη φάση της ανάπτυξης του κώδικα. Υπάρχουν επίσης διαφορετικές μέθοδοι για τον υπολογισμό των παραμέτρων του αλγορίθμου, οι οποίες επηρεάζουν το ρυθμό σύγκλισης και κατά περιπτώσεις την επιτυχία της διαδικασίας. Παρά το γεγονός ότι ο αλγόριθμος μπορεί να συγορίθμος είναι ταχύτατος και συγκλισης του είναι οι ολογοισμο οι οποίος έχουν οι οποίος επαι τη φάση της ανάπτυξης του κώδικα. Υπάρχουν επίσης διαφορετικές μέθοδοι για τον υπολογισμό των παραμέτρων του αλγορίθμου, οι οποίες επηρεάζουν το ρυθμό σύγκλισης και κατά περιπτώσεις την επιτυχία της διαδικασίας. Παρά το γεγονός ότι ο αλγόριθμος και τον οποίο έχει βρει πολλές εφαρμογές.

Η εφαρμογή της συγκεκριμένης μεθόδου εκπαίδευσης προτείνεται για περιπτώσεις κατά τις οποίες απαιτείται μεγάλο χρονικό διάστημα για την εκπαίδευση του νευρωνικού, αλλά όχι για περιπτώσεις που υπάρχουν πολλά τοπικά βέλτιστα και το αποτέλεσμα της εκπαίδευσης είναι πολύ ευαίσθητο σε σχέση με τις τυχαίες αρχικές τιμές των βαρών του νευρωνικού δικτύου.

Για να αξιολογηθεί η σημασία που θα είχε η ικανότητα της μεθόδου εκπαίδευσης να εξερευνά καλύτερα το χώρο και να μην εγκλωβίζεται σε τοπικά βέλτιστα αναπτύχθηκε ένας αλγόριθμος, ο οποίος στηρίχτηκε στην ιδέα που αναλύεται σε μια δημοσίευση των Tan και Gu (Tan & Gu, 2004). Ο αλγόριθμος αυτός στηρίζεται στη μέθοδο τυχαίου περιπάτου (random walk), την οποία τροποποιεί ώστε να μπορεί να αξιοποιήσει την ιδιαίτερα καλή ικανότητα εξερεύνησης του χώρου των εφικτών λύσεων και παράλληλα να της προσδώσει την ικανότητα εκμετάλλευσης μιας ήδη υπολογισθείσας λύσης.

Η μέθοδος αυτή ξεκινάει από τυχαίες τιμές των βαρών του νευρωνικού και μεταβάλλει ένα βάρος σε κάθε επανάληψη με τελικό σκοπό τη βελτίωση του σφάλματος. Αρχικά προσπαθεί να εκμεταλλευτεί την υπάρχουσα λύση και εξετάζει τη γειτονιά της για τιμές που θα βελτίωναν το σφάλμα. Σε περίπτωση αποτυχίας εξετάζει τυχαία στο χώρο για πεπερασμένο αριθμό δοκιμών και τελικά, αν δεν καταφέρει να πετύχει καλύτερη τιμή της συνάρτησης σφάλματος, επιστρέφει για μια τελική προσπάθεια να ρυθμίσει έστω και κατ' ελάχιστο την τιμή, εξετάζοντας αν η πρόσθεση ή αφαίρεση μιας πολύ μικρής τιμής θα μπορούσε να βελτιώσει έστω και κατά μικρό βαθμό το σφάλμα.

Ένα διάγραμμα ροής της συγκεκριμένης μεθόδου, όπως αυτή τροποποιήθηκε για να μειωθεί κατά το δυνατόν ο χρόνος που απαιτείται για την εκπαίδευση του δικτύου χωρίς να περιοριστεί η ικανότητα εξερεύνησης, εμφανίζεται στην Εικόνα 17.

Η τροποποίηση που αναπτύχθηκε ξεκινά από τυχαία συναπτικά βάρη και τροποποιεί ένα βάρος σε κάθε επανάληψη όπως και στην αρχική πρόταση. Η διαδικασία μπορεί να θεωρηθεί ότι αποτελείται από τρία βήματα.



Εικόνα 17. Διάγραμμα Ροής Τροποποιημένου Τυχαίου Περιπάτου όπως υλοποιήθηκε.

Αρχικά γίνεται μια προσπάθεια βελτίωσης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης μέσα από την αύξηση της τιμής του βάρους κατά μία τιμή περίπου κατά ένα δέκατο του εύρους τιμών της. Αν αποτύχει εξετάζεται η μείωση κατά την ίδια τιμή ως πιθανός τρόπος βελτίωσης της τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης.

Εάν αποτύχει το παραπάνω βήμα τότε ο αλγόριθμος δίνει τυχαίες τιμές στο βάρος και εξετάζει εάν κάποια από αυτές βελτιώνει την αντικειμενική συνάρτηση. Ο αριθμός των τυχαίων δοκιμών είναι μία επιπλέον παράμετρος που καθορίζεται από το χρήστη, και ωθεί τον αλγόριθμο σε καλύτερη εξερεύνηση (αύξηση τυχαίων δοκιμών) ή σε επιτάχυνση της διαδικασίας (μείωση τυχαίων δοκιμών).

Το τελευταίο βήμα που εξετάζεται εάν οι τυχαίες δοκιμές δεν είναι επιτυχείς, είναι παρόμοιο με το πρώτο, όμως η τιμή που χρησιμοποιείται για την αυξομείωση του κάθε συναπτικού βάρους είναι το ένα δέκατο της τιμής του αρχικού βήματος και σε περίπτωση αποτυχίας, το ένα εκατοστό της τιμής του αρχικού βήματος. Αν όλες οι παραπάνω προσπάθειες αποτύχουν, ο αλγόριθμος παραλείπει το βάρος, θεωρώντας ότι η τιμή που έχει είναι η βέλτιστη δυνατή και προχωράει στο επόμενο.

Με την τροποποίηση αυτή επιτυγχάνεται αρχικά μια εκμετάλλευση της υπάρχουσας λύσης με μεγάλο ρυθμό βελτιστοποίησης, διαφορετικά εξετάζεται εάν η εξερεύνηση σε ολόκληρο τον εφικτό χώρο λύσεων θα μπορούσε να δώσει καλύτερη λύση και τελικά καταλήγει σε εκμετάλλευση της υπάρχουσας λύσης με μικρότερο και εξαιρετικά μικρό ρυθμό βελτιστοποίησης.

Παρά την εξέταση εναλλακτικών μεθόδων εκπαίδευσης, ο βασικός αλγόριθμος που χρησιμοποιείται σε όλο το εύρος της εργασίας, είναι ο αλγόριθμος back propagation κυρίως λόγω των ευρύτατων εφαρμογών που έχει σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση υδρολογικών παραμέτρων. Η χρήση του ως αλγορίθμου αναφοράς για κάθε διαφορετική μέθοδο τον καθιστά απαραίτητο για να παραμείνουν τα αποτελέσματα συγκρίσιμα με εκείνα των προηγούμενων εφαρμογών.

3.2 Αρχεία Εισόδου και Αρχεία Εξόδου

Μετά από τον προσδιορισμό των επιθυμητών παραμέτρων εισόδου το νευρωνικό δίκτυο απαιτεί την οργάνωση των πληροφοριών με συγκεκριμένη μορφή σε αρχεία εισόδου, τα οποία καλεί κατά τη διαδικασία εκτέλεσης και από τα οποία εισάγει τις διαθέσιμες πληροφορίες. Ανάλογα με τη λειτουργία στην οποία βρίσκεται το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο, εκπαίδευσης ή εκτίμησης, απαιτούνται διαφορετικές πληροφορίες, οι οποίες οργανώνονται σε αρχεία εισόδου με προκαθορισμένα ονόματα και δομή, ούτως ώστε να εισαχθούν με αυτόματο τρόπο στο νευρωνικό δίκτυο και να ανατεθούν στις κατάλληλες μεταβλητές.

Το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία, κατά τη λειτουργία εκπαίδευσης διαβάζει πληροφορίες από τρία αρχεία εισόδου τα «initialize.txt», «neural_init.txt» και «neural_data.txt». Τα τρία αυτά αρχεία εισόδου μπορούν να δημιουργηθούν από τον χρήστη για κάθε εφαρμογή/εκτέλεση της εκπαίδευσης ή μπορούν να δημιουργούνται αυτόματα από ένα λογισμικό, σε περιπτώσεις όπου απαιτείται δημιουργία πολλών ελαφρώς τροποποιημένων αρχείων (π.χ. κατά την εκτέλεση ενός διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου). Τα αποτελέσματα της διαδικασίας εκπαίδευσης αποτελούνται από τρία αρχεία τα οποία περιέχουν πληροφορίες: α) για τις μέγιστες και ελάχιστες τιμές που μπορούν να λάβουν οι παράμετροι εξόδου, οι οποίες καταχωρούνται στο αρχείο «out_minmax.txt», β) τις βέλτιστες τιμές των συναπτικών βαρών, που αποθηκεύονται στο αρχείο «neural_weights.txt» και γ) τις τιμές των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης, που εγγράφονται στο αρχείο «neuralerror.txt».

Από αυτά τα αρχεία το «out_minmax.txt» και το «neural_weights.txt» απαιτούνται ως αρχεία εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο κατά τη διαδικασία της εκτίμησης. Επίσης απαιτείται το αρχείο «neural_init.txt» που περιέχει πληροφορίες για τη δομή του νευρωνικού δικτύου, καθώς και το αρχείο «chromosome.txt» που περιέχει τις παραμέτρους εισόδου για όλα τα υπό εκτίμηση σημεία. Τα αποτελέσματα της διαδικασίας εκτίμησης είναι οι τιμές των παραμέτρων εξόδου του νευρωνικού δικτύου για τις δεδομένες τιμές δεδομένων εισόδου.

Αρχείο «neural_init.txt»

Το αρχείο αυτό είναι το πρώτο αρχείο που διαβάζει ο κώδικας, διότι περιέχει την πληροφορία για το εάν ο κώδικας πρέπει να εκτελεστεί σε λειτουργία εκπαίδευσης ή εκτίμησης, πληροφορίες για τη δομή του νευρωνικού δικτύου, δηλαδή τον αριθμό των κόμβων εισόδου και εξόδου, τον αριθμό των κρυφών επιπέδων και τους κόμβους που υπάρχουν σε κάθε κρυφό επίπεδο, καθώς και τον αριθμό των γενεών για τις οποίες εκπαιδεύεται το δίκτυο (εάν αυτό βρίσκεται σε λειτουργία εκπαίδευσης). Ένα παράδειγμα τυπικού αρχείου φαίνεται στην Εικόνα 18.

📄 neural_init.txt - Σημειωματάριο			
<u>Αρχείο Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή Πρ <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια			
1 <1 για εκπαίδευση, διαφορετικά εκτίμηση 4 <αριθμός επιπέδων συμεριλαμβανομένων των επιπέδων εισόδου και εξόδου (έως 43 41 10 <αριθμοί κόμβων για το πρώτο, δεύτερο και τρίτο κρυφό επίπεδο 23 <αριθμός κόμβων επιπέδου εισόδου 2 <αριθμός κόμβων επιπέδου εξόδου 1000 <αριθμός γενεών εκπαίδευσης	5)	4	
	Þ		
Ln 6, Col 41			

Εικόνα 18. Τυπική μορφή αρχείου «neural_init.txt».

Η πρώτη πληροφορία που διαβάζει ο κώδικας από το αρχείο είναι η λειτουργία στην οποία πρέπει να εκτελεστεί το νευρωνικό. Εάν στην πρώτη θέση βρίσκεται ο αριθμός ένα (1) τότε θα ξεκινήσει η λειτουργία εκπαίδευσης, διαφορετικά θα γίνει εκτίμηση. Στη δεύτερη γραμμή εισάγεται ο αριθμός των επιπέδων του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Στον αριθμό αυτόν περιλαμβάνονται τα επίπεδα εισόδου και εξόδου του νευρωνικού δικτύου. Έτσι για ένα νευρωνικό δίκτυο με ένα επίπεδο εισόδου, δύο κρυφά επίπεδα και ένα επίπεδο εξόδου, εισάγεται ο αριθμός τέσσερα (4). Ο αριθμός των επιπέδων μπορεί να κυμαίνεται από δύο όταν δεν υπάρχουν κρυφά επίπεδα, έως πέντε όταν υπάρχουν τρία κρυφά επίπεδα.

Στην τρίτη γραμμή εμφανίζονται οι αριθμοί κόμβων στα τρία κρυφά επίπεδα. Η δομή του κώδικα επιβάλλει την εισαγωγή τριών αριθμών ακόμα και σε περίπτωση που το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο έχει λιγότερα κρυφά επίπεδα. Όταν τα κρυφά επίπεδα είναι λιγότερα από τρία ο αριθμός των κόμβων των επιπλέον κρυφών επιπέδων δε χρησιμοποιείται μέσα στον κώδικα και δεν επηρεάζει πουθενά τη διαδικασία αλλά δεν μπορεί να παραλειφθεί.

Στην τέταρτη γραμμή εισάγεται ο αριθμός των κόμβων εισόδου, και στην επόμενη ο αριθμός των κόμβων εξόδου, ενώ στην τελευταία γραμμή του αρχείου εισάγεται ο αριθμός των γενεών για τις οποίες πρόκειται να εκπαιδευτεί το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο. Ανεξάρτητα αν το νευρωνικό εκτελείται σε λειτουργία εκπαίδευσης ή όχι η τιμή αυτή δεν μπορεί να παραλειφθεί. Όταν βρίσκεται σε λειτουργία εκτίμησης όμως η τιμή αυτή δεν εισάγεται σε κανένα σημείο στη διαδικασία και δεν επηρεάζει καθόλου τα αποτελέσματα.

Αρχείο «neural_data.txt»

Το αρχείο αυτό περιέχει όλα τα διαθέσιμα δεδομένα εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου. Είναι δομημένο με τμήματα, καθένα από τα οποία αντιστοιχεί σε μία σειρά δεδομένων εκπαίδευσης. Το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης είναι εύκολο να δημιουργηθεί είτε χειροκίνητα για μία μοναδική εκτέλεση είτε να δημιουργείται με αυτόματο τρόπο από ένα λογισμικό, που να μπορεί να τροποποιεί το αρχείο ανάλογα με τις διαφορετικές επιλογές. Ένα παράδειγμα τυπικού αρχείου εμφανίζεται στην Εικόνα 19.

📄 neural_data.txt - Σημειωματάρι	0	_ D X
<u>Α</u> ρχείο <u>Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή	Πρ <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια	
<u>Abjeto</u> <u>Entecepydod</u> <u>Mopor</u> 335 1 6 6.65466 15 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	Τμορολη συίνεω <αριθμός συνολικών σειρών δεδομένων εκπαιδευσης <αυξοντας αριθμός σειρας δεδομένων εκπαιδευσης <τιμή πρωτης μεταβλητής εισόδου	
50		-
<		Þ
	Ln 30, Col 81	зł

Εικόνα 19. Τυπική μορφή αρχείου «neural_data.txt».

Η πρώτη τιμή στο αρχείο είναι ο συνολικός αριθμός σειρών δεδομένων εκπαίδευσης που περιλαμβάνει. Τα δεδομένα χωρίζονται σε τμήματα και κάθε τμήμα αντιστοιχεί σε μια σειρά δεδομένων εισόδου και εξόδου. Ξεκινά με τον αύξοντα αριθμό της σειράς και μετά περιλαμβάνει τις τιμές για κάθε παράμετρο εισόδου μια διαχωριστική γραμμή, η οποία μένει κενή και τις τιμές των παραμέτρων εξόδου. Μεταξύ των τμημάτων υπάρχει μια διαχωριστική γραμμή που μένει κενή πριν το επόμενο τμήμα.

Ο αριθμός των μεταβλητών εισόδου και εξόδου, τις οποίες διαβάζει το πρόγραμμα από το συγκεκριμένο αρχείο, είναι εκείνες που έχουν εισαχθεί από το αρχείο «neural_init.txt». Είναι απαραίτητο ο αριθμός των τιμών μεταβλητών εισόδου και εξόδου να είναι

αντίστοιχος με εκείνον που έχει εισαχθεί στο «neural_init.txt» διαφορετικά θα υπάρξει πρόβλημα κατά την εισαγωγή των τιμών στις μεταβλητές εισόδου και εξόδου.

Αρχείο «initialize.txt»

Στο αρχείο αυτό εισάγονται οι τιμές που χρησιμοποιούνται από τον αλγόριθμο κατά τη διαδικασία αρχικοποίησης των τιμών των δεδομένων εισόδου. Η αρχικοποίηση γίνεται με σκοπό την κανονικοποίηση των τιμών εισόδου στο διάστημα [0, 1], το οποίο είναι απαραίτητο για τη λειτουργία του δικτύου, λόγω της μορφής της συνάρτησης ενεργοποίησης, αλλά και της ανάγκης τα συναπτικά βάρη να παίρνουν τιμές εξαρτώμενες από τη βαρύτητα των παραμέτρων και όχι από το μέγεθος των τιμών τους. Ένα παράδειγμα τυπικού αρχείου εμφανίζεται στην Εικόνα 20.





Η πρώτη γραμμή του αρχείου μπορεί να περιλαμβάνει το όνομα της δοκιμής και αγνοείται κατά τη διαδικασία εισαγωγής δεδομένων. Στη δεύτερη γραμμή βρίσκεται ο αριθμός των μεταβλητών εισόδου του νευρωνικού δικτύου. Ο αριθμός αυτός πρέπει να είναι ο ίδιος με τον αριθμό που υπάρχει ως αριθμός μεταβλητών εισόδου στο αρχείο «neural_init.txt». Από την τρίτη γραμμή και εξής εισάγονται η ελάχιστη και η μέγιστη τιμή για κάθε μεταβλητή εισόδου, οι οποίες πρέπει να διαχωρίζονται από κόμμα ή κενό διάστημα.

Οι τιμές που πρέπει να εισαχθούν στο αρχείο αυτό, είναι πολύ εύκολο να υπολογιστούν από το διαθέσιμο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Όμως μπορεί να υπάρξουν τιμές στα δεδομένα ελέγχου ή σε δεδομένα που μπορεί να παρατηρηθούν στο μέλλον, οι οποίες να μην περικλείονται μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης τιμή της κάθε παραμέτρου στο σύνολο δεδομένων εισόδου. Για το λόγο αυτόν προτιμάται να δίδεται όπου είναι δυνατόν μια εκτίμηση για τη μέγιστη και ελάχιστη τιμή που μπορεί να λάβει η κάθε παράμετρος εισόδου, αντί για τις ίδιες τις ελάχιστες και μέγιστες τιμές που υπάρχουν μέσα στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης.

Ακόμα όμως και εάν εισαχθούν τιμές δεδομένων εισόδου οι οποίες να βρίσκονται εκτός των ορίων του συγκεκριμένου αρχείου, δεν αναμένεται να εισαχθεί σημαντικό σφάλμα στα αποτελέσματα του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Οι μεταβλητές του δικτύου είναι επιθυμητό να βρίσκονται μεταξύ των τιμών μηδέν και ένα αλλά παραμένουν πραγματικοί αριθμοί.

Αρχείο «out_minmax.txt»

Το αρχείο αυτό είναι αρχείο εξόδου κατά τη διαδικασία εκπαίδευσης και αρχείο εισόδου κατά τη διαδικασία της εκτίμησης. Είναι αντίστοιχο του αρχείου «initialize.txt» για τις παραμέτρους εξόδου του νευρωνικού δικτύου. Για την εύρεση των μέγιστων και ελάχιστων τιμών, τις οποίες μπορούν να πάρουν οι παράμετροι εξόδου, αρχικά ελέγχεται το διαθέσιμο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης και από εκείνο υπολογίζονται η ελάχιστη και η μέγιστη τιμή για κάθε παράμετρο εξόδου. Στη συνέχεια, για να έχει το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο ικανότητα γενίκευσης ακόμα και σε περιοχές δεδομένων εξόδου στις οποίες δεν έχει εκπαιδευτεί, διευρύνονται τα όρια των μέγιστων και ελάχιστων τιμών των παραμέτρων εξόδου.

Συγκεκριμένα, το κατώτατο όριο που εισάγεται στο αρχείο και χρησιμοποιείται και κατά τη διαδικασία αρχικοποίησης, είναι η ελάχιστη τιμή στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης, από την οποία έχει αφαιρεθεί η διαφορά μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης τιμής της συγκεκριμένης παραμέτρου στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Αντίστοιχα το ανώτατο όριο είναι η μέγιστη τιμή στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης στην οποία έχει προστεθεί η διαφορά μεταξύ της μέγιστης και της ελάχιστης τιμής της συγκεκριμένης παραμέτρου στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης.

🔲 out_minmax.txt - Σημειωματάριο			
<u>Α</u> ρχείο <u>Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή	Πρ <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια		
2 -2.23637 2.14738 -1.42313 1.62658	<αριθμός παραμέτρων εξόδου <ελάχιστη και μέγιστη τιμή πρώτης παραμέτρου εξόδου <ελάχιστη και μέγιστη τιμή τελευταίας παραμέτρου εξόδου	* *	
4		Þ	
	Ln 3, Col 82	.41	

Εικόνα 21. Τυπική μορφή αρχείου «out_minmax.txt».

Όπως φαίνεται και στην Εικόνα 21, σε ένα τυπικό αρχείο εμφανίζεται στη πρώτη γραμμή ο αριθμός των παραμέτρων εξόδου, ο οποίος πρέπει να συμφωνεί με τον αριθμό που αναφέρεται στο αρχείο «neural_init.txt». Στις επόμενες γραμμές καταγράφονται οι ελάχιστες και οι μέγιστες τιμές που μπορεί να λάβει κάθε παράμετρος εξόδου του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Στην περίπτωση των μεταβλητών εξόδου, δεδομένου του ότι η συνάρτηση των κόμβων εξόδου δεν μπορεί να λάβει τιμές πέραν του διαστήματος [0, 1], οι τιμές των παραμέτρων εξόδου είναι απόλυτα φραγμένες μεταξύ των ορίων που βρίσκονται μέσα στο αρχείο "out_minmax.txt". Έτσι σε περίπτωση που το διάστημα που επιλεγεί δεν περιέχει επιθυμητές τιμές των μεταβλητών εξόδου, οι τιμές αυτές δεν είναι δυνατόν να προσομοιωθούν από το νευρωνικό δίκτυο. Στην περίπτωση αυτή θα εισαχθεί ένα σφάλμα, το οποίο δεν μπορεί να αντιμετωπιστεί διαφορετικά.

Εξ αιτίας της συγκεκριμένης ιδιαιτερότητας προτείνεται όταν υπάρχει επιλογή μεταξύ ενός στενότερου και ενός ευρύτερου διαστήματος να χρησιμοποιείται το κατά το δυνατόν ευρύτερο διάστημα το οποίο να συνεχίζει όμως να έχει φυσικό νόημα. Είναι εύκολα αντιληπτό ότι η επιλογή ενός διαστήματος υπερβολικά μεγάλου θα στερείτο φυσικού νοήματος και θα δημιουργούσε πρόβλημα στη διαδικασία αρχικοποίησης, καθώς οι τιμές των παραμέτρων εξόδου θα ήταν υπερβολικά κοντά η μία στην άλλη. Αυτό θα οδηγούσε σε αυξημένη επίδραση των σφαλμάτων αποκοπής και θα μείωνε την ικανότητα του νευρωνικού να διαχωρίζει τις τιμές εξόδου, οδηγώντας πιθανότατα σε μία υποδεέστερη βαθμονόμηση του μοντέλου.

Αρχείο «neuralerror.txt»

Το αρχείο αυτό είναι αρχείο εξόδου κατά τη διαδικασία της εκπαίδευσης. Σε αυτό αποθηκεύονται οι τιμές των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης για κάθε μεταβλητή εξόδου. Ένα τυπικό αρχείο για ένα νευρωνικό δίκτυο με δύο μεταβλητές εξόδου φαίνεται στην Εικόνα 22.

	📄 neuralerror.txt - Σημειωματάριο	x
	<u>Αρχείο Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή Πρ <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια	
	1 0.000386787747330974 0.000651781319960131 <σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης 1 2 0.000110737628143823 0.000340105062260711 <σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης 2	× +
		Þ.
l	Ln 2, Col 87	зđ

Εικόνα 22. Τυπική μορφή αρχείου «neuralerror.txt».

Σε κάθε γραμμή περιέχει τις τιμές του αύξοντα αριθμού κάθε παραμέτρου εξόδου, του σφάλματος εκπαίδευσης και του σφάλματος αξιολόγησης. Οι πληροφορίες αυτές χρησιμοποιούνται για την εκτίμηση της αξίας της εκπαίδευσης και αποτελούν ενδείξεις για το εάν απαιτούνται περαιτέρω βήματα για τη βελτίωσή της.

Η τιμή του σφάλματος εκπαίδευσης δείχνει εάν το νευρωνικό έχει καταφέρει να προσομοιώσει επαρκώς τις τιμές με τις οποίες έχει εκπαιδευτεί. Όμως επειδή κατά την εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου ελλοχεύει ο κίνδυνος υπερεκπαίδευσης, δεν αρκεί απλά η ελαχιστοποίηση της τιμής του σφάλματος εκπαίδευσης για να θεωρηθεί επιτυχημένη μία διαδικασία εκπαίδευσης.

Προς αποφυγή της υπερεκπαίδευσης ο κύριος δείκτης που χρησιμοποιείται για την αποτύπωση της αξίας μιας διαδικασίας εκπαίδευσης, είναι το σφάλμα αξιολόγησης. Το σφάλμα αυτό δείχνει πόσο καλά μπορεί να προσομοιώσει το νευρωνικό δίκτυο μετά την εκπαίδευση, τιμές για τις οποίες δεν έχει εκπαιδευτεί. Αυτή είναι η καλύτερη ένδειξη ότι το νευρωνικό δίκτυο έχει χαρτογραφήσει τις υφιστάμενες διεργασίες και είναι ένα ικανοποιητικό μαθηματικό ανάλογο του φυσικού συστήματος.

Ένας κίνδυνος που μπορεί να προκύψει όμως σε περίπτωση που γίνεται βελτιστοποίηση ενός νευρωνικού δικτύου και επιλέγεται ως αντικειμενική συνάρτηση προς ελαχιστοποίηση το σφάλμα αξιολόγησης, είναι μία μορφή υπερεκπαίδευσης όχι με την κλασσική έννοιά της

αλλά με μία σχεδόν αντίστροφη. Το νευρωνικό μπορεί να προσομοιώσει τις τιμές για τις οποίες δεν εκπαιδεύεται ενώ δεν μπορεί να προσομοιώσει άλλες τιμές, μεταξύ των οποίων και εκείνες με τις οποίες εκπαιδεύεται. Μια τέτοια συμπεριφορά γίνεται ευτυχώς εύκολα αντιληπτή, καθώς αυξάνει την τιμή του σφάλματος εκπαίδευσης.

Για τον παραπάνω λόγο σε περιπτώσεις βελτιστοποίησης δεν πρέπει να παραβλέπεται και η παράμετρος του σφάλματος εκπαίδευσης. Μια συνάρτηση, η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως αντικειμενική συνάρτηση σε μια διαδικασία βελτιστοποίησης, είναι ένας γραμμικός συνδυασμός των δύο σφαλμάτων, όπως παραδείγματος χάριν το ημιάθροισμα των δύο τιμών. Εάν υπάρχει κάποιος ιδιαίτερος λόγος μπορεί να δοθεί μεγαλύτερο βάρος στη μείωση του ενός από τα δύο σφάλματα με κατάλληλη προσαρμογή των συντελεστών του γραμμικού συνδυασμού τους.

Αρχείο «chromosome.txt»

Τα δεδομένα εισόδου τα οποία μέσω της διέλευσης από το εκπαιδευμένο νευρωνικό δίκτυο παρέχουν προσομοιωμένες τιμές παραμέτρων εξόδου, εισάγονται στο αρχείο «chromosome.txt». Το αρχείο αυτό είναι αρχείο εισόδου κατά τη λειτουργία εκτίμησης. Κατασκευάζεται με παρόμοιο τρόπο με εκείνον του αρχείου «neural_data.txt», δεν συμπεριλαμβάνει όμως τιμές για τις παραμέτρους εξόδου και κενές διαχωριστικές γραμμές. Μια τυπική μορφή του αρχείου για ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο με 23 παραμέτρους εισόδου φαίνεται στην Εικόνα 23.





Στην πρώτη γραμμή καταχωρείται ο αριθμός των σειρών δεδομένων εισόδου, οι οποίες πρέπει να διέλθουν μέσω του εκπαιδευμένου τεχνητού νευρωνικού δικτύου, ούτως ώστε να προκύψουν οι προσομοιωμένες τιμές των παραμέτρων εξόδου. Κατόπιν εισάγονται οι σειρές δεδομένων εισόδου σε τμήματα συνεχόμενα μεταξύ τους.

Κάθε σειρά δεδομένων ξεκινά έχοντας στην πρώτη γραμμή τον αύξοντα αριθμό της σειράς. Έπειτα ακολουθούν οι τιμές των παραμέτρων εισόδου, οι οποίες πρέπει να εισάγονται με την ίδια σειρά με την οποία είχαν εισαχθεί κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης στο αρχείο «neural_data.txt». Ο αριθμός των μεταβλητών εισόδου τις οποίες αναμένει ο κώδικας, είναι εκείνος που έχει εισαχθεί στην προβλεπόμενη γραμμή του αρχείου «neural_init.txt».

Εξ αιτίας του γεγονότος ότι ο αλγόριθμος δεν είναι δυνατόν να κατανοήσει αυτόματα τη μετάβαση από τη μία σειρά δεδομένων στην επόμενη, είναι ιδιαίτερα σημαντικό κατά τη δημιουργία του συγκεκριμένου αρχείου να εξασφαλιστεί ότι ο αριθμός των παραμέτρων εισόδου και ο αριθμός των σειρών δεδομένων είναι σωστοί και ότι οι αύξοντες αριθμοί των σειρών δεδομένων είσα. Σημειώνεται ότι οι αύξοντες αριθμοί των σειρών δεδομένων στους υπολογισμούς του κώδικα, οπότε και δεν επηρεάζουν τα αποτελέσματα. Ο βασικός λόγος ύπαρξής τους είναι η διευκόλυνση του χρήστη να ξεχωρίσει τα σύνολα δεδομένων.

Αρχείο «fitness.txt»

Το τελικό αρχείο εξόδου κατά τη λειτουργία εκτίμησης του τεχνητού νευρωνικού δικτύου, που περιέχει τα αποτελέσματα των προσομοιωμένων τιμών των μεταβλητών εξόδου είναι το αρχείο «fitness.txt». Μπορεί να χρησιμοποιηθεί μετέπειτα για την κατασκευή των διαγραμμάτων των προσομοιωμένων από το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο τιμών των παραμέτρων εξόδου. Μια τυπική μορφή του αρχείου για ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο με 2 παραμέτρους εξόδου φαίνεται στην Εικόνα 24.

🧾 fitness.txt - Σημειωματάριο		
<u>Α</u> ρχείο <u>Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή	Πρ <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια	
419 1 5.78803485266899E-02 6.99616806118067E-02 2 1.61365186977945E-02 0.041857033148264	<αριθμός συνολικών σειρών δεδομένων <αύξοντας αριθμός σειρας δεδομένων <τιμή πρωτης μεταβλητής εξόδου <τιμή τελευταίας μεταβλητής εξόδου <αύξοντας αριθμός σειράς δεδομένων κ.ο.κ.	
3		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·
-		1 5 0 170
		Ln 5, Col /0

Εικόνα 24. Τυπική μορφή αρχείου «fitness.txt».

Στην πρώτη γραμμή του αρχείου καταχωρείται ο αριθμός των συνολικών σειρών δεδομένων, των οποίων τις προσομοιωμένες τιμές παραμέτρων εξόδου κλήθηκε να εκτιμήσει το δίκτυο. Ο αριθμός αυτός είναι ο ίδιος με εκείνον που βρίσκεται στην πρώτη γραμμή του αρχείου «chromosome.txt». Η αντιστοιχία των δύο αρχείων συνεχίζεται, καθώς οι τιμές των παραμέτρων εξόδου στο αρχείο «fitness.txt» διατάσσονται σε τμήματα, όπως αντίστοιχα γίνεται με τις τιμές των παραμέτρων εισόδου στο αρχείο «chromosome.txt».

Κάθε τμήμα ξεκινά με μία γραμμή που περιέχει τον αύξοντα αριθμό, ενώ στις επόμενες γραμμές καταχωρούνται οι προσομοιωμένες τιμές των παραμέτρων εξόδου, που αποτελούν την εκτίμηση του δικτύου για τις δεδομένες τιμές των παραμέτρων εισόδου. Ο αύξων αριθμός είναι χρήσιμος κατά την μετέπειτα επεξεργασία και αποτύπωση των αποτελεσμάτων, καθώς εκτός του ότι διαχωρίζει τις τιμές των παραμέτρων εξόδου σε τμήματα, δείχνει επίσης και την αντιστοιχία των προσομοιωμένων παραμέτρων εξόδου με τις τιμές παραμέτρων εισόδου οι οποίες είχαν εισαχθεί στο δίκτυο.
Ο αριθμός των παραμέτρων εξόδου είναι εκείνος που έχει εισαχθεί από το αρχείο «neural_init.txt». Η σειρά με την οποία εγγράφονται οι παράμετροι εξόδου εξαρτάται από τη σειρά με την οποία είχαν εισαχθεί οι παρατηρημένες τιμές των παραμέτρων εξόδου κατά τη διάρκεια της διαδικασίας εκπαίδευσης στο αρχείο «neural_data.txt».

Στην περίπτωση που είναι γνωστές και οι παρατηρημένες τιμές των παραμέτρων εξόδου είναι συνήθως επιθυμητή η σύγκριση των προσομοιωμένων με τις παρατηρημένες τιμές. Είναι αρκετά εύκολο να βρεθούν χρησιμοποιώντας τους αύξοντες αριθμούς οι σωστές αντιστοιχίες και να κατασκευαστούν τα διαγράμματα σύγκρισης. Από τα διαγράμματα αυτά είναι συνήθως πιο άμεσα αντιληπτό εάν η διαδικασία εκπαίδευσης ήταν ικανοποιητική και εάν το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο έχει αναπτύξει μια ικανότητα προσομοίωσης του φυσικού φαινομένου.

Αρχείο «neural_weights.txt»

Ένα πολύ σημαντικό αρχείο, το οποίο παράγεται ως αρχείο εξόδου κατά τη λειτουργία εκπαίδευσης, είναι το αρχείο στο οποίο αποθηκεύονται οι τιμές των συναπτικών βαρών, οι οποίες προκύπτουν από τη διαδικασία εκπαίδευσης. Επειδή το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο είναι μια αδιαφανής διαδικασία σαν μαύρο κουτί, τα συναπτικά βάρη δεν έχουν κάποιο φυσικό νόημα και δεν αναπαριστούν κάποια σταθερά του φυσικού συστήματος. Αποθηκεύονται στο αρχείο «neural_weights.txt» από το οποίο και καλούνται στην Εικόνα 25.

📄 neural_weights.txt - Σημειωματάρ	lo	
<u>Α</u> ρχείο <u>Ε</u> πεξεργασία <u>Μ</u> ορφή Π	ο <u>ο</u> βολή <u>Β</u> οήθεια	
-0.283960163593292 0.309672396336266 -0.425687431950412 -0.140365468676037 -0.355826149430908 0.394954553019554 -0.164057638069694 0.11177039875372 -0.360475850101563 0.168672320561753 0.293435183943914 0.429396668380445 0.3029959517399 -0.158933596206287 -0.465756248760238 -0.17735242833378 0.247040034185415 -0.384051941560682 0.159641978371735 -0.172982248389218 0.464712781010466 0.315680229280639 -7.60064442157396E-02 -0.323672859523068 0.164473831653595 -0.154611190770567 0.37499508356292 -9.81729400110441E-02 -0.19085988522571 1.15501694579954E-02		
<		4
		Ln 30, Col 23

Εικόνα 25. Τυπική μορφή αρχείου «neural_weights.txt».

Ανάλογα με τον αριθμό των παραμέτρων σε κάθε επίπεδο του νευρωνικού δικτύου και τον αριθμό των επιπέδων ο αριθμός των συναπτικών βαρών μπορεί να αυξηθεί αρκετά. Δυστυχώς οι τιμές των βαρών δεν μπορούν να ερμηνευτούν ούτε είναι δυνατόν να αξιοποιηθούν περαιτέρω. Είναι όμως προφανώς απαραίτητες κατά τη διαδικασία εκτίμησης του νευρωνικού δικτύου.

Οι τιμές των συναπτικών βαρών καταχωρούνται στο αρχείο μία ανά γραμμή σε συνεχή διάταξη χωρίς διαχωρισμό π.χ. ανά επίπεδο. Δεν υπάρχει λόγος για πιο φιλική προς το χρήστη διάταξη του αρχείου, καθώς δεν θα χρησιμοποιηθούν παρά μόνο από το ίδιο το νευρωνικό δίκτυο, το οποίο θα τα ανακαλέσει με την ίδια σειρά με την οποία τα καταχωρεί. Οι τιμές μπορεί να είναι είτε θετικές είτε αρνητικές, ανάλογα με την επίδραση που έχει η κάθε μεταβλητή στην τιμή των μεταβλητών εξόδου. Εξ αιτίας της πολυπλοκότητας του συστήματος ούτε καν το πρόσημο ενός συναπτικού βάρους δεν μπορεί να ερμηνευτεί και να εξεταστεί εάν μία παράμετρος εισόδου σχετίζεται θετικά ή αρνητικά με μία παράμετρο εξόδου.

3.3 Χρονική Υστέρηση Παραμέτρων

Η βροχόπτωση που κατεισδύει μέσω του εδάφους, χρειάζεται ένα χρονικό διάστημα προτού φτάσει στον υδροφόρο ορίζοντα. Η χρονική αυτή υστέρηση μεταξύ βροχόπτωσης και μεταβολής στάθμης είναι σημαντική για την εισαγωγή της σωστής παραμέτρου εισόδου. Για τον καθορισμό της όμως δεν υπάρχει διαθέσιμη μεθοδολογία ανεπτυγμένη για εφαρμογή σε υπόγεια ύδατα. Για το λόγο αυτό η αρχική σκέψη ήταν ο καθορισμός της με τρόπο αντίστοιχο με εκείνον του χρόνου συγκέντρωσης σε επιφανειακές λεκάνες απορροής. Η συνήθης πρακτική στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι η αντιπαραβολή της χρονοσειράς της βροχόπτωσης και του υδρογραφήματος και ο προσδιορισμός του χρόνου μεταξύ της στιγμής που ξεκινά η βροχόπτωση μέχρι τη στιγμή που εμφανίζεται επίδραση στην απορροή.

Με σκοπό την μετατροπή της συγκεκριμένης μεθοδολογίας σε μια πλήρως αυτοματοποιημένη διαδικασία, για την αποφυγή εισαγωγής υποκειμενικής κρίσης, εξετάστηκε η δυνατότητα εφαρμογής των συντελεστών συσχέτισης για την εύρεση της χρονικής υστέρησης. Ο συντελεστής συσχέτισης μεταξύ της χρονοσειράς της βροχόπτωσης και της χρονοσειράς των διαφορών στάθμης αναμένεται να είναι μεγαλύτερος για την τιμή της χρονικής υστέρησης που απαιτείται για να φανεί η επίδραση της βροχόπτωσης στη στάθμη των υπογείων υδάτων. Όπως συμβαίνει και με το υδρογράφημα στα επιφανειακά ύδατα, όπου η επίδραση μιας ωριαίας βροχόπτωσης φαίνεται για μεγαλύτερο χρονικό διάστημα, έτσι και στα υπόγεια ύδατα υπάρχει περίπτωση η επίδραση ενός περιστατικού βροχόπτωσης να είναι εμφανής για περισσότερες της μίας ημέρες. Στην περίπτωση αυτή ο συντελεστής συσχέτισης μεταξύ των δύο χρονοσειρών θα παραμένει υψηλός για δύο ή και περισσότερες μέρες.

Μια εξίσου αυτοματοποιημένη εναλλακτική προσέγγιση για τον προσδιορισμό της παραμέτρου της χρονικής υστέρησης, που μπορεί να δώσει πιθανώς καλύτερα αποτελέσματα από την ανάλυση συντελεστή συσχέτισης, είναι ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης όπως ο διαφορικός εξελικτικός. Η μέθοδος αυτή υπολείπεται της προηγούμενης στον τομέα του φυσικού νοήματος, καθώς τα αποτελέσματα μπορεί να είναι δύσκολο να εξηγηθούν. Λαμβάνοντας υπ' όψιν όμως την πολυπλοκότητα του προβλήματος και το γεγονός ότι η μεταβολή της στάθμης του υδροφόρου ορίζοντα εξαρτάται από πολλές παραμέτρους, γίνεται σαφές ότι η ανάλυση συντελεστών συσχέτισης μπορεί να παραπλανήσει εάν κάποιος παράγοντας, ο οποίος μάλιστα είναι αδύνατον να ταυτοποιηθεί, παρεμβαίνει επηρεάζοντας τα αποτελέσματα.

Αντίθετα, ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος με την καθαρά μαθηματική οπτική του, μένει ανεπηρέαστος και ψάχνει τις τιμές εκείνες της χρονικής υστέρησης που ελαχιστοποιούν το σφάλμα του νευρωνικού δικτύου. Δεν είναι αβάσιμη παραδοχή ότι η τιμή που μειώνει περισσότερο το σφάλμα είναι πιθανότατα η τιμή που όντως απαιτείται για την εμφάνιση της επίδρασης της βροχόπτωσης. Σε κάθε περίπτωση όμως τα όρια μεταξύ των οποίων κινείται ο διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος, καθορίζονται από τον χρήστη και σε αυτά υπάρχει μεγάλη πιθανότητα να εμφανιστούν σφάλματα, εάν βασιζόμενος σε υποκειμενική κρίση ο ερευνητής περιορίσει την εφικτή περιοχή και ωθήσει τον αλγόριθμο προς μία συγκεκριμένη λύση.

Ανάλυση Συντελεστή Συσχέτισης

Η πρώτη μέθοδος που εξετάστηκε στην προσπάθεια εύρεσης των βέλτιστων τιμών χρονικής υστέρησης, ήταν η ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης μεταξύ των χρονοσειρών των παραμέτρων εκείνων που αναμένεται να παρουσιάζουν το φαινόμενο, δηλαδή της κατακρήμνισης και της άντλησης. Οι συντελεστές συσχέτισης αυτών των χρονοσειρών με τη μεταβολή της στάθμης του υδροφορέα υπολογίζονται για διάφορες πιθανές τιμές χρονικής υστέρησης και αναμένεται να εμφανιστεί μια αύξηση στην απόλυτη τιμή του συντελεστή συσχέτισης για την τιμή της βέλτιστης χρονικής υστέρησης.

Για την εκτίμηση της χρονικής υστέρησης υπολογίστηκαν οι συντελεστές συσχέτισης για διαφορετικές τιμές της χρονικής υστέρησης. Ο συντελεστής συσχέτισης μεταξύ δύο χρονοσειρών Α και Β δίνεται από τον τύπο:

$$Correl(A,B) = \frac{\sum (a-\bar{a})(b-\bar{b})}{\sqrt{\sum (a-\bar{a})^2 \sum (b-\bar{b})^2}}$$
(3.3)

όπου a και b είναι τα στοιχεία και \overline{a} και \overline{b} οι μέσοι όροι των χρονοσειρών A και B αντίστοιχα.

Για καλύτερη παρουσίαση των αποτελεσμάτων καταρτίζεται ένας πίνακας, στον οποίο σημειώνονται οι τιμές των συντελεστών συσχέτισης για κάθε πιθανή τιμή χρονικής υστέρησης. Επειδή η βροχόπτωση επηρεάζει θετικά τη μεταβολή της στάθμης η μεγαλύτερη θετική τιμή του συντελεστή συσχέτισης επιλέγεται ως καταλληλότερη και η αντίστοιχη τιμή χρονικής υστέρησης χρησιμοποιείται για την εισαγωγή των παραμέτρων στο νευρωνικό δίκτυο. Αντίθετα, οι αντλήσεις επηρεάζουν αρνητικά τη μεταβολή της στάθμης, οπότε η χρονική υστέρηση η οποία δίνει τη μεγαλύτερη, κατά απόλυτη τιμή, αρνητική τιμή του συντελεστή συσχέτισης, επιλέγεται για την εισαγωγή των παροχών άντλησης στο νευρωνικό δίκτυο.

Ένα πρόβλημα ενδέχεται να παρουσιαστεί κατά την εφαρμογή αυτής της μεθόδου όταν οι χρονοσειρές δεν είναι πλήρεις. Η ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης θα μπορούσε να δώσει τιμές για την χρονική υστέρηση, οι οποίες να απέχουν από τις πραγματικές με συνέπεια και τα αποτελέσματα να μην είναι τα βέλτιστα. Η απώλεια της βασικής ιδιότητας για την οποία προτιμήθηκε η συγκεκριμένη μέθοδος, δηλαδή της συμβολής στη δημιουργία ενός μοντέλου με φυσικό νόημα, το οποίο να στηρίζεται στη θεωρία της υδρολογίας και να προσομοιώνει με τον καλύτερο δυνατό τρόπο το υδατικό ισοζύγιο, όπως αυτό γράφεται για ένα υπόγειο υδατικό σύστημα, ωθεί στην απόρριψη της χρήσης της.

Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος

Για την αποφυγή οποιασδήποτε παρεμβολής και την πλήρη αυτοματοποίηση της διαδικασίας μπορεί να αξιοποιείται ένας διαφορικός εξελικτικός αλγόριθμος βελτιστοποίησης. Σε αυτόν μπορούν να εισαχθούν ως παράμετροι απόφασης οι τιμές της χρονικής υστέρησης παραμέτρων εισόδου όπως η βροχόπτωση. Στις δυνατότητες όμως του αλγορίθμου συμπεριλαμβάνεται και η δυνατότητα εύρεσης της βέλτιστης δομής του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Αρχικά αυθαίρετα επιλεγμένες παράμετροι, όπως ο αριθμός των κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο, αλλά και ο αριθμός των γενεών για τις οποίες εκπαιδεύεται ο αλγόριθμος, μπορούν να εισαχθούν επίσης ως μεταβλητές απόφασης του διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου.

Ο ΔΕ αλγόριθμος που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα εργασία, έχει εφαρμοστεί και στο παρελθόν για βελτιστοποίηση προβλημάτων υπογείων υδάτων (Karterakis et al., 2007). Η βελτιστοποίηση της χρονικής υστέρησης (παράμετροι με φυσικό νόημα) συνδυάστηκε με τη βελτιστοποίηση των παραμέτρων του ίδιου του ΤΝΔ (αριθμός κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο και αριθμός εποχών) σε μία κοινή διαδικασία βελτιστοποίησης. Η αντικειμενική συνάρτηση προς ελαχιστοποίηση από τον αλγόριθμο είναι το ημιάθροισμα των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης.

Επειδή υπήρχε επίσης προβληματισμός σχετικά με την εισαγωγή του αριθμού της ημέρας, το μόνο φυσικό νόημα της παραμέτρου αυτής συνδέεται με την εποχική μεταβολή της προσπίπτουσας ακτινοβολίας καθώς και της αντίστοιχης μεταβολής της εξατμισοδιαπνοής. Δεν είναι όμως βέβαιο ότι επηρεάζει θετικά την προσπάθεια του νευρωνικού δικτύου να προσομοιώσει το φυσικό μοντέλο. Για το λόγο αυτόν συμπεριελήφθη στις μεταβλητές απόφασης του νευρωνικού δικτύου το αν θα χρησιμοποιηθεί ή όχι η παράμετρος αυτή ως είσοδος.

Για να εκτελεστεί η διαδικασία βελτιστοποίησης με αυτόματο τρόπο υπήρχε ανάγκη δημιουργίας διαφορετικών αρχείων με δεδομένα εκπαίδευσης για κάθε διαφορετική τιμή της χρονικής υστέρησης. Για το λόγο αυτόν αναπτύχθηκε ένα απλό λογισμικό, που μετατρέπει τα αρχικά δεδομένα και παράγει τα κατάλληλα αρχεία εισόδου του ΤΝΔ ανάλογα με την τιμή της χρονικής υστέρησης για κάθε βροχόπτωση και τη χρήση ή μη του αριθμού ημέρας ως παραμέτρου εισόδου. Όταν τα δεδομένα εισόδου ή εξόδου για ένα σημείο δεδομένων (ημέρα) ήταν ελλιπή, το σημείο αυτό εξαιρείτο από το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Στην περίπτωση δε που οι χρονοσειρές μετακινούνται ανάλογα με την χρονική υστέρηση, τα σημεία δεδομένων που εξαιρούνται βρίσκονται σε διαφορετικές θέσεις μέσα στις χρονοσειρές και συνεκδοχικά για διαφορετικές τιμές χρονικής υστέρησης χρησιμοποιούνται ελαφρώς διαφοροποιημένες χρονοσειρές δεδομένων.

3.4 Μεσοπρόθεσμη Πρόβλεψη

Σε πολλές περιπτώσεις η ικανότητα πρόβλεψης για χρονικό διάστημα μεγαλύτερο της μίας ημέρας είναι επιθυμητή για ένα περιβαλλοντικό μοντέλο. Επίσης σημαντικά συμπεράσματα προκύπτουν από τα αποτελέσματα μιας μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης σχετικά με την συσσώρευση του σφάλματος. Για να πραγματοποιηθεί η μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη όταν το μοντέλο είναι ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο, αναπτύχθηκε ο αλγόριθμος ο οποίος απεικονίζεται στην Εικόνα 26.

Ανάλογα με το εάν η παράμετρος εξόδου ήταν το υδραυλικό ύψος στα πηγάδια παρατήρησης ή η ημερήσια μεταβολή του, υπάρχει μία μικρή τροποποίηση του αλγορίθμου. Η βασική πάντως ιδέα είναι ότι μετά από τη διαδικασία εκπαίδευσης εκτελείται το νευρωνικό δίκτυο σε λειτουργία εκτίμησης και η προσομοιωμένη στάθμη του υδροφορέα αντικαθιστά την παρατηρημένη τιμή στο αρχείο εισόδου, που εισάγεται για το επόμενο χρονικό σημείο δεδομένων. Ένα σημαντικό πρόβλημα παρουσιάζεται κατά την εφαρμογή της μεθόδου σε μη πλήρεις χρονοσειρές. Σε κάθε σημείο που η χρονοσειρά διακόπτεται για οποιονδήποτε λόγο, δεν μπορεί να βρεθεί προσομοιωμένη στάθμη και αναγκαστικά γίνεται επανεκκίνηση της διαδικασίας με την εισαγωγή της παρατηρημένης τιμής της στάθμης στο αρχείο εισόδου.



Εικόνα 26. Διάγραμμα Ροής του Αλγορίθμου για Μεσοπρόθεσμη Πρόβλεψη.

Η διαφορά όταν έξοδος είναι η μεταβολή της στάθμης, έγκειται στην ανάγκη μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής στάθμης σε προσομοιωμένη στάθμη. Η μεταβλητή εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο υπενθυμίζεται ότι είναι η στάθμη του προηγούμενου χρονικού σημείου δεδομένων. Η μετατροπή γίνεται με την πρόσθεση στην τιμή της μεταβολής της προηγουμένως υπολογισμένης τιμής της προσομοιωμένης στάθμης, όπως αυτή υπήρχε στο αρχείο εισόδου.

Η μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη είναι ίσως ο ιδανικός τρόπος να αποδειχθεί εάν ένα μοντέλο έχει καταφέρει να περιγράψει το φυσικό σύστημα με τέτοιο τρόπο ώστε ακόμα και το σφάλμα που είναι αναμενόμενο να υπάρχει, να μη συσσωρεύεται. Εάν εμφανίζεται συσσώρευση του σφάλματος τότε το δίκτυο έχει την τάση να υποεκτιμά ή να υπερεκτιμά τις παρατηρημένες τιμές, εμφανίζει δηλαδή μια μεροληπτική τάση (bias).

3.4 Εύρεση Διαστημάτων Εμπιστοσύνης

Για την ποσοτικοποίηση της αβεβαιότητας του μοντέλου, το σύνολο των δεδομένων (που χρησιμοποιήθηκε για την εκπαίδευση και τον έλεγχο αξιοπιστίας του ΤΝΔ) διαχωρίζεται, όπως και στη διαδικασία εκπαίδευσης, σε ένα σύνολο δεδομένων βαθμονόμησης και ένα σύνολο δεδομένων ελέγχου. Το πρώτο σύνολο διαχωρίζεται περαιτέρω από τον αλγόριθμο του ΤΝΔ κατά τη διάρκεια της βαθμονόμησης σε ένα σύνολο εκπαίδευσης και ένα σύνολο αξιολόγησης. Το πρώτο 80% των αρχικών δεδομένων χρησιμοποιούνται ως σύνολο βαθμονόμησης και κάθε στοιχείο δεδομένων έχει 0,7 πιθανότητα να επιλεγεί για το σύνολο εκπαίδευσης. Αυτό σημαίνει ότι τελικά περίπου 56% των μετρήσεων πεδίου αποτελούν το σύνολο εκπαίδευσης, 24% το σύνολο αξιολόγησης και 20% το σύνολο ελέγχου.



Εικόνα 27. Διάγραμμα ροής για την εφαρμογή της μεθόδου bootstrap σε τεχνητά νευρωνικά δίκτυα.

Η διαδικασία που ακολουθείται για την κατασκευή των διαστημάτων εμπιστοσύνης του TNΔ, απεικονίζεται στην Error! Reference source not found.. Με μια διαδικασία τυχαίας επιλογής 2000 διαφορετικά αυτοδύναμα σύνολα εκπαίδευσης παράγονται από το αρχικό σύνολο δεδομένων. Τα αρχικά δεδομένα βαθμονόμησης αποτελούνται από σημεία δεδομένων με γνωστές εισόδους που δίνουν γνωστές τιμές εξόδου. Όλα τα bootstrap (αυτοδύναμα) σύνολα βαθμονόμησης έχουν το ίδιο μήκος με το αρχικό σύνολο. Για τη δημιουργία κάθε bootstrap συνόλου δεδομένων, σημεία δεδομένων επιλέγονται με αντικατάσταση από το αρχικό σύνολο δεδομένων βαθμονόμησης και κάθε σημείο δεδομένων έχει την ίδια πιθανότητα να επιλεγεί (1/n, όπου n ο αριθμός των διαθέσιμων σημείων δεδομένων βαθμονόμησης). Η διαδικασία αυτή συνεχίζεται μέχρι να υπάρχουν n σημεία δεδομένων σε κάθε bootstrap σύνολο δεδομένων. Κάθε bootstrap σύνολο δεδομένων χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση του δικτύου. Μετά από κάθε διαδικασία εκπαίδευσης τα bootstrap βάρη του νευρωνικού δικτύου χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό των αυτοδύναμων τιμών εξόδου.

Με δεδομένο το γεγονός ότι κάθε σημείο δεδομένων στην αρχική χρονοσειρά αντιμετωπίζεται ανεξάρτητα από τα υπόλοιπα, το bootstrap σύνολο δεδομένων

βαθμονόμησης έχει ένα φυσικό νόημα. Με την υπόθεση ότι τα δεδομένα από μία χρονική στιγμή θα μπορούσαν να εμφανιστούν για περισσότερες της μίας ημέρες δηλαδή ότι η ίδια είσοδος θα έδινε την ίδια έξοδο, αυτά τα σύνολα δεδομένων εκπαίδευσης είναι πιθανά πρότυπα που θα μπορούσαν να έχουν παρατηρηθεί στο πεδίο.

Ίσως το πιο ενδιαφέρον θέμα στην όλη διαδικασία ήταν η επιλογή των ακραίων σημείων, που ορίζουν το διάστημα εμπιστοσύνης. Για την αποφυγή υποθέσεων ότι η έξοδος ακολουθεί μια συγκεκριμένη κατανομή, η ποσοστιαία μέθοδος ήταν η πρώτη που εφαρμόστηκε στην παρούσα εργασία. Για τον καθορισμό των διαστημάτων εμπιστοσύνης οι 2000 bootstrap τιμές εξόδου ταξινομούνται σε αύξουσα σειρά και η ανώτερη και κατώτερη τιμή για ένα συγκεκριμένο επίπεδο βεβαιότητας είναι εύκολο να βρεθούν. Για παράδειγμα εάν η ονομαστική κάλυψη είναι 95% ($\alpha = 0.025$) η κατώτερη τιμή θα είναι η τιμή που βρίσκεται στην ταξινομημένη λίστα στη θέση (αB) = (0.025 2000) = 50. Παρομοίως η ανώτερη τιμή του διαστήματος εμπιστοσύνης θα ήταν η 1950η ταξινομημένη σε αύξουσα σειρά τιμή.

Η αμερόληπτη επιταχυμένη μέθοδος χρησιμοποιήθηκε επίσης για την παραγωγή βελτιωμένων διαστημάτων εμπιστοσύνης. Η διόρθωση μεροληπτικής τάσης και η επιτάχυνση υπολογίστηκαν όπως περιγράφηκε στην παράγραφο 2.4. Η πρώτη δε χρειάζεται επιπλέον υπολογισμούς, ενώ η δεύτερη απαιτεί έναν αριθμό βαθμονομήσεων για την απόκτηση των τιμών της εξόδου που προκύπτουν εάν βαθμονομηθεί το δίκτυο, αποκλείοντας μια τιμή κάθε φορά από τα αρχικά δεδομένα.

Αξιοσημείωτο είναι το γεγονός ότι κατά τη διάρκεια της όλης διαδικασίας προτιμήθηκε η διαδικασία με ζευγάρια αντί για την διαδικασία υπολοίπων. Η κύρια υπόθεση της δεύτερης τεχνικής είναι ότι τα υπόλοιπα είναι λευκός θόρυβος (ακολουθούν κανονική κατανομή). Η παραδοχή αυτή δεν ικανοποιείτο στη συγκεκριμένη περίπτωση, εξ αιτίας των ακραίων σημείων, τα οποία δεν περιγράφονται από το μοντέλο και αφήνουν μεγάλες τιμές υπολοίπων.

Η μεθοδολογία που εφαρμόστηκε έχει όμως και κάποια μειονεκτήματα. Τα παραγόμενα διαστήματα εμπιστοσύνης δε λαμβάνουν υπ' όψιν την αβεβαιότητα που παράγεται από την αδυναμία του μοντέλου να περιγράψει κάποιες παρατηρημένες τιμές. Αυτό συμβαίνει επειδή η τεχνική εξετάζει μόνο τις εξόδους που θα μπορούσαν να εμφανιστούν εξ αιτίας διαφορετικών τιμών εισόδου που θα μπορούσαν να είχαν παρατηρηθεί. Υπάρχουν όμως κάποιες παρατηρημένες παρατηρημένες τιμές τις οποίες το μοντέλο δεν θα μπορούσε ποτέ να προσομοιώσει, κυρίως λόγω της έλλειψης επιπλέον δεδομένων που επηρεάζουν την έξοδο αλλά δεν έχουν ληφθεί υπ' όψιν ή απλά δεν είναι διαθέσιμα.

Για να υπάρχει ξεκάθαρη εικόνα του πόσο καλά είναι τα αυτοδύναμα επίπεδα εμπιστοσύνης, η πραγματική κάλυψη υπολογίστηκε και συγκρίθηκε με την ονομαστική. Η πραγματική κάλυψη είναι η πιθανότητα μιας παρατηρημένης (μετρημένης) τιμής να είναι εντός των διαστημάτων εμπιστοσύνης.

Τα αποτελέσματα της πραγματικής κάλυψης θα δείξουν πόσο επιτυχημένη ήταν η εφαρμογή της αυτοδύναμης μεθοδολογίας. Με βάση τη διαθέσιμη βιβλιογραφία η πραγματική κάλυψη είναι σπάνια ίση με την επιθυμητή (ονομαστική) και συχνά είναι σημαντικά διαφορετική (Efron and Tibshirani, 1993).

Σε περίπλοκες καταστάσεις για τις οποίες δεν υπάρχει εναλλακτική μέθοδος, κάθε μέτρο της αβεβαιότητας που είναι στη σωστή τάξη μεγέθους πρέπει να θεωρηθεί ικανοποιητικό. Εάν η ονομαστική κάλυψη είναι 0,95 και η πραγματική 0,90 το αποτέλεσμα είναι ικανοποιητικό για πολλές εφαρμογές. Εάν η πραγματική κάλυψη είναι 0,80 η ανάλυση ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας ξεκινά να γίνεται παραπλανητική. Σε απλές περιπτώσεις, όπου τα όρια εμπιστοσύνης είναι εύκολο να υπολογιστούν αλγεβρικά, οι απαιτήσεις για ακρίβεια είναι μεγαλύτερες. Πάντως για υψηλό επίπεδο βεβαιότητας 0,99 ή και μεγαλύτερο είναι απίθανο να προσεγγιστούν σε ικανοποιητικό βαθμό τα όρια εμπιστοσύνης εκτός και εάν τα δείγματα είναι πολύ μεγάλα. (Urban Hjorth, 1994)

Είναι λοιπόν σαφής η ανάγκη δημιουργίας ενός μοντέλου που να μπορεί να προσομοιώνει όσο το δυνατόν καλύτερα τις αποκρίσεις του φυσικού συστήματος ανεξάρτητα από τη διαδικασία ποσοτικοποίησης της αβεβαιότητας για δύο λόγους. Ο πρώτος είναι ότι ένα ικανό μοντέλο δε θα παρουσιάζει μεγάλη ευαισθησία στις μικρές διαταραχές που εισάγει η μέθοδος bootstrap στα σύνολα εκπαίδευσης, συνεπώς το εύρος των διαστημάτων εμπιστοσύνης θα είναι μικρότερο. Ο δεύτερος λόγος είναι η αδυναμία της μεθόδου bootstrap να εκτιμήσει την αβεβαιότητα που εισάγεται λόγω της αδυναμίας του μοντέλου να περιγράψει το φυσικό σύστημα. Ένα μοντέλο που δεν είναι ικανό να προσομοιώσει τον υδροφορέα θα έχει κατά συνέπεια μία επιπλέον αβεβαιότητα, η οποία δε θα εμφανίζεται μέσα στα όρια εμπιστοσύνης και μπορεί να οδηγήσει σε λανθασμένες αποφάσεις.

Κεφάλαιο 4ο

Περιπτώσεις Εφαρμογής

Για την επιβεβαίωση της δυνατότητας εφαρμογής της μεθοδολογίας σε πραγματικά προβλήματα επιλέχθηκαν δύο περιοχές, στις οποίες υπήρχαν διαθέσιμες χρονοσειρές δεδομένων με ημερήσιο βήμα. Η πρώτη βρίσκεται στην Ελλάδα, στη βόρεια περιοχή της Αττικής, ενώ η δεύτερη βρίσκεται στις Ηνωμένες Πολιτείες της Αμερικής, στην Πολιτεία του Τέξας. Στις περιοχές αυτές ανάλογα με τα διαθέσιμα δεδομένα και τις ιδιαιτερότητες της κάθε περιοχής έγινε προσαρμογή της μεθόδου, με τον καθορισμό των παραμέτρων εισόδου και της δομής του νευρωνικού, καθώς και των τιμών χρονικής υστέρησης των παραμέτρων εισόδου.

Η μεθοδολογία δεν απαιτεί συγκεκριμένα ημερήσιο χρονικό βήμα, αλλά η βαθμονόμηση με ημερήσια δεδομένα προτιμήθηκε εξ αιτίας της αυξημένης δυσκολίας και της πρόκλησης που αυτή παρουσίαζε. Με ημερήσιο χρονικό βήμα υπάρχει η αίσθηση της μεταβολής αρκετά πιο έντονα και τα αποτελέσματα επηρεάζονται από φαινόμενα, όπως η άντληση, η επίδραση των οποίων δεν είναι εξίσου εμφανής σε μηνιαίο χρονικό βήμα. Ένας επιπλέον λόγος για τη χρήση του ημερήσιου χρονικού βήματος ήταν και η αύξηση του αριθμού των χρονικών βημάτων στα οποία υπήρχαν διαθέσιμα δεδομένα. Η εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου αναμένεται να είναι καλύτερη όταν υπάρχουν για παράδειγμα ημερήσια χρονικά βήματα στο σύνολο εκπαίδευσης αντί για μηνιαία.

Στην περιοχή της Αττικής η μέθοδος εφαρμόστηκε στην υδρολογική λεκάνη Μαλακάσας-Μαυροσουβάλας, όπου υπήρχαν ημερήσιες τιμές δεδομένων από το αντλιοστάσιο της ΕΥΔΑΠ. Ο υδροφορέας στην περιοχή είναι καρστικός και απαντάται σε μεγάλο βάθος από την επιφάνεια. Διαθέσιμα δεδομένα με ημερήσιο βήμα υπήρχαν τόσο για υδρολογικές όσο και για υδρογεωλογικές παραμέτρους. Τα δεδομένα κάλυπταν ένα διάστημα δεκαοκτώ μηνών.

Στην περιοχή του Τέξας υπήρχε διαθέσιμη μια πολύ μεγάλη βάση δεδομένων με τιμές βροχόπτωσης, θερμοκρασίας, στάθμης σε ένα πηγάδι παρατήρησης (που αποτελεί το πηγάδι αναφοράς του καρστικού υδροφορέα Έντουαρντς) και παροχών άντλησης στην ευρύτερη περιοχή. Δυστυχώς δεν υπήρχαν διαθέσιμες ξεχωριστές τιμές για τις παροχές άντλησης των πηγαδιών που βρίσκονται εγγύτερα στο πηγάδι παρατήρησης και αναμένεται να επηρεάζουν περισσότερο τη μεταβολή της στάθμης σε αυτό.

Εκτός από τα διαθέσιμα δεδομένα σε κάθε περιοχή και πληροφορίες για τη γεωλογία στην κάθε εφαρμογή της προτεινόμενης μεθοδολογίας γίνονται μικρές τροποποιήσεις στο είδος και τον αριθμό των μεταβλητών εισόδου, καθώς και στη δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Οι επιλογές που γίνονται υπαγορεύονται από τα διαθέσιμα δεδομένα και τις ιδιαιτερότητες της κάθε περιοχής.

Όταν υπάρχει έλλειψη δεδομένων εισόδου, παραλείπονται συγκεκριμένες μεταβλητές, ενώ ανάλογα με το πλήθος των παραμέτρων εισόδου καθορίζεται και ο αριθμός των κόμβων σε κάθε κρυφό επίπεδο του νευρωνικού δικτύου. Επίσης, μπορεί να εισάγεται ή όχι ο αριθμός της ημέρας ως παραμέτρου εισόδου του ΤΝΔ, που κατά περίπτωση ενδέχεται να βελτιώνει ή να επιδεινώνει τις τιμές των σφαλμάτων. Ο αριθμός αυτός μπορεί να θεωρηθεί ότι σχετίζεται με την ηλιακή ακτινοβολία σε μια περιοχή και κατ' επέκταση με την εξάτμιση και διαπνοή. Η συσχέτιση δεν είναι τόσο ισχυρή, που να επιτρέπει τη θεώρησή της ως μεταβλητής άρρηκτα συνδεδεμένης με το υδατικό ισοζύγιο. Εξ ου και κρίνεται απαραίτητη η εξέταση κατά περίπτωση της σκοπιμότητας εισαγωγής της ως παραμέτρου εισόδου.

4.1 Αττική

Τα πηγάδια παρατήρησης και άντλησης βρίσκονται στο αντλιοστάσιο της Μαυροσουβάλας στο βορειοδυτικό τμήμα του νομού Αττικής. Εκτός από την κάλυψη των υδρευτικών αναγκών των παρακείμενων οικισμών, η εγκατάσταση χρησιμοποιείται και για την τροφοδοσία του κεντρικού δικτύου της πρωτεύουσας με πόσιμο ύδωρ σε καιρούς που οι κύριες επιφανειακές πηγές εξαντλούνται.



Εικόνα 28. Χάρτης της ΒΑ Αττικής με σημειωμένη τη θέση του αντλιοστασίου.

Στην Εικόνα 28 παρουσιάζεται σημειωμένη η θέση του αντλιοστασίου όσο και των οικισμών της περιοχής. Στο αντλιοστάσιο υπάρχουν είκοσι εγκατεστημένες αντλίες συνολικής παροχής 5800 m³/h. Η επιφανειακή λεκάνη απορροής Μαλακάσας-Μαυροσουβάλας περιλαμβάνει τον οικισμό της Μαλακάσας και τμήμα του οικισμού του Μαρκοπούλου Ωρωπού. Τα ρέματα που φαίνονται στο χάρτη, δεν έχουν παροχή και έχουν δημιουργηθεί με αυτόματο τρόπο από εφαρμογή συστήματος γεωγραφικών πληροφοριών με βάση το ανάγλυφο.

Στην Εικόνα 29 παρουσιάζεται μια πανοραμική άποψη της ευρύτερης περιοχής μελέτης και η θέση του αντλιοστασίου. Το ανάγλυφο της περιοχής, είναι αρκετά πολύπλοκο και ειδικά στην παραλιακή περιοχή δημιουργούνται πολλές μικρές λεκάνες απορροής. Η γεωλογία όμως της περιοχής δεν επιτρέπει την επιφανειακή απορροή στα μικρά ρέματα της περιοχής.



Εικόνα 29. Πανοραμική εικόνα της περιοχής όπως φαίνεται στην εφαρμογή Google Earth.

Γεωλογία της Περιοχής

Η γεωλογία του υδροφορέα αποτελείται κυρίως από καρστικοποιημένο ασβεστόλιθο. Ο εμπλουτισμός του έρχεται από τους ορεινούς όγκους στα νότια της περιοχής (Όρος Πάρνηθα). Ο υδροφόρος ορίζοντας είναι σχετικά χαμηλός, περίπου 100 m κάτω από την επιφάνεια του εδάφους και 15-20 m πάνω από τη μέση στάθμη της θάλασσας (ΜΣΘ). Εξ αιτίας της γειτνίασης με την ακτή (λιγότερο από 6 km), υπάρχει κίνδυνος υφαλμύρινσης σε περίπτωση ταπείνωσης του υδροφόρου ορίζοντα (Trichakis et al., 2009).

Συγκεκριμένα, έχει παρατηρηθεί αύξηση στην ηλεκτρική αγωγιμότητα του υπόγειου ύδατος όταν η στάθμη των πηγαδιών παρατήρησης βρεθεί κάτω από τα 12 μέτρα από τη μέση στάθμη της θάλασσας. Αυτό είναι εν δυνάμει πρόβλημα, αφού ο υδροφορέας παρέχει πόσιμο ύδωρ και είναι ιδιαίτερης σημασίας να διατηρηθεί η ποιότητα σε υψηλό επίπεδο.

Το καρστικό σύστημα της περιοχής δεν περιγράφεται λεπτομερώς από μια γεωφυσική ανάλυση, έτσι είναι αδύνατη η δημιουργία ενός μοντέλου υπογείων υδάτων, όπως το διπλού πορώδους (dual porosity), ή ροής σε αγωγούς (pipe flow), ωστόσο τα νευρωνικά δίκτυα αναμένεται να δώσουν μια προσέγγιση της απόκρισης του υδροφορέα.

Λόγω του υψηλού βαθμού καρστικοποίησης στην περιοχή μελέτης και του ότι δεν εμφανίζονται σε αυτή επιφανειακά ποτάμια (Demopoulos, 2000), μπορεί να υποτεθεί ότι δεν υπάρχει επιφανειακή εισροή ή εκροή, έτσι οι όροι επιφανειακής εισροής και εκροής του υδατικού ισοζυγίου δεν συνυπολογίζονται στο παρόν μοντέλο. Σε περίπτωση που υπάρχει επιφανειακή απορροή, η παροχή αυτών των ποταμών επιβάλλεται να προστεθεί στις παραμέτρους εισόδου.



Εικόνα 30. Υδρογεωλογικός χάρτης της επιφανειακής λεκάνης απορροής Μαλακάσας Μαυροσουβάλας.

Διαθέσιμα Δεδομένα

Τα διαθέσιμα δεδομένα από την περιοχή αποτελούνται από ημερήσιες τιμές θερμοκρασίας, βροχόπτωσης (από τρεις διαφορετικούς βροχομετρικούς σταθμούς στην περιοχή), διάρκεια άντλησης (από 16 πηγάδια που βρίσκονται εντός του αντλιοστασίου) και υδραυλικά ύψη από δύο πηγάδια παρατήρησης (AS1 και N4). Το πρώτο πηγάδι (AS1) χρησιμοποιείται και για άντληση. Δεδομένου του ότι η άντληση δεν είναι σταθερή αλλά διακόπτεται συχνά, το γεγονός ότι άντληση λαμβάνει χώρα εντός του AS1 και κοντά στο N4 είναι ο λόγος των απότομων πτώσεων στο υδραυλικό ύψος και των επακόλουθων επανόδων.

Αξίζει να σημειωθεί ότι η μέτρηση της στάθμης στο πηγάδι παρατήρησης είναι στιγμιαία κάθε ημέρα και δεν είναι η μέση στάθμη. Η μέτρηση επηρεάζεται σημαντικά από το εάν η

άντληση έχει διακοπεί αμέσως πριν από τη λήψη της τιμής ή έχει σταματήσει για μεγάλο χρονικό διάστημα. Η περιγραφή φαινομένων που μεταβάλλονται ταχύτατα με το χρόνο απαιτεί μείωση του χρονικού βήματος.

Αναλύοντας τα διαθέσιμα δεδομένα, εξετάζεται ποιες από τις προτεινόμενες στη μεθοδολογία μεταβλητές θα εισαχθούν τελικά ως παράμετροι εισόδου και συζητείται το κατά πόσο οι μεταβλητές που δεν είναι διαθέσιμες, αναμένεται να εισάγουν ένα σημαντικό σφάλμα στο μοντέλο.

1. Η παροχή που εισρέει επιφανειακά από άλλες λεκάνες απορροής: Σύμφωνα με προηγούμενες μελέτες δεν υπάρχει επιφανειακή απορροή στη λεκάνη λόγω της υψηλής καρστικοποίησης των ασβεστολίθων. Μετά από γεγονότα βροχόπτωσης υψηλής έντασης ωστόσο θα ήταν πιθανό να παρουσιαστεί επιφανειακή απορροή. Δεν αναμένεται πάντως λόγω της μικρής συνεισφοράς της ενδεχόμενης απορροής στο υδατικό ισοζύγιο η έλλειψη αυτής της παραμέτρου να εισάγει σημαντικό σφάλμα στα αποτελέσματα.

2. Η παροχή που εκρέει επιφανειακά από τη λεκάνη: Αντίστοιχα με την επιφανειακή εισροή δεν υπήρχαν διαθέσιμα δεδομένα, αλλά για τους λόγους που αναλύθηκαν παραπάνω δεν αναμένεται σημαντικό σφάλμα, λόγω της απουσίας αυτής της μεταβλητής από το σύνολο παραμέτρων εισόδου.

3. Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου στην ανάντη λεκάνη απορροής και ενός στην μελετώμενη (ή το υδραυλικό ύψος του υδροφορέα): Υπήρχε διαθέσιμο το υδραυλικό ύψος της προηγούμενης ημέρας στα σημεία παρατήρησης και χαρακτηρίστηκε ως παράμετρος εισόδου. Έτσι ως παράμετροι εισόδου χρησιμοποιούνται οι τιμές σε κάθε σημείο παρατήρησης (2 παράμετροι εισόδου). Η παρουσία σημείων παρατήρησης ανάντη των υπό προσομοίωση σημείων ίσως να παρείχε περισσότερες πληροφορίες σχετικά με την ημερήσια υπόγεια εισροή. Ειδικά σε καρστικούς υδροφορείς, όπου η υδραυλική κλίση είναι σχετικά μικρή και η ροή έχει περισσότερο χαρακτηριστικά ροής μέσα σε αγωγούς παρά διαμέσου πορώδους μέσου, δεν αναμένεται να δημιουργήσει σημαντικό πρόβλημα στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

4. Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου της μελετώμενης λεκάνης και ενός της κατάντη (σε περίπτωση που εκρέει προς τη θάλασσα, το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο του υδροφορέα): Επειδή ο υδροφορέας όντως καταλήγει στη θάλασσα, δεν απαιτείται κάποια επιπλέον μεταβλητή πλην του υδραυλικού ύψους της προηγούμενης ημέρας, η οποία επιλέχθηκε προηγουμένως ως παράμετρος εισόδου.

5. Η κατακρήμνιση στην λεκάνη απορροής: Η παράμετρος αυτή έχει πολύ μεγάλη επίδραση και είναι διαθέσιμη από τρεις σταθμούς. Οι τρεις τιμές εισάγονται με μια χρονική υστέρηση, όπως αυτή προκύπτει από τη μεθοδολογία (**3 παράμετροι εισόδου**). Αρχικά γίνεται ανάλυση συντελεστών συσχέτισης και επιλέγονται οι τιμές χρονικής υστέρησης που αντιστοιχούν στο μεγαλύτερο συντελεστή συσχέτισης. Μία δεύτερη μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για σύγκριση ήταν εκείνη του διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου. Με τη ελαχιστοποίηση των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης προκύπτουν διαφορετικές τιμές για τη χρονική υστέρηση, οι οποίες αναμένεται να δώσουν πιο σωστά αποτελέσματα.

6. Η θερμοκρασία είναι μία παράμετρος από την οποία εξαρτάται η εξάτμιση και η διαπνοή: Στη συγκεκριμένη εφαρμογή υπήρχαν τιμές διαθέσιμες από ένα μετεωρολογικό

σταθμό που βρίσκεται εντός του αντλιοστασίου και αποτέλεσε μία από τις μεταβλητές εισόδου στο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο (**1 παράμετρος εισόδου**). Η παράμετρος δεν αναμένεται να παρουσιάζει χρονική υστέρηση.

7. Η υγρασία του εδάφους: Η παράμετρος αυτή επηρεάζει την εξάτμιση και τη διαπνοή. Το γεγονός ότι δεν ήταν διαθέσιμη ίσως να εισάγει ένα μικρό σφάλμα στο μοντέλο. Η συμβολή της εξάτμισης και της διαπνοής όμως δεν αναμένεται να είναι μεγάλη, λόγω του μεγάλου βάθους από την επιφάνεια στο οποίο βρίσκεται ο υδροφόρος ορίζοντας.

8. Η ταχύτητα του ανέμου είναι μία ακόμα παράμετρος που σχετίζεται με την εξάτμιση και τη διαπνοή: Η απουσία δεδομένων για την παράμετρο αυτή την απέκλεισε από το σύνολο παραμέτρων εισόδου. Για τους λόγους που προαναφέρθηκαν η έλλειψη είναι πιθανό να εισάγει ένα μικρό σφάλμα, αλλά δεν αναμένεται να επηρεάσει σημαντικά την ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

9. Η σχετική υγρασία του αέρα όπως και οι προηγούμενες δυο παράμετροι δεν ήταν διαθέσιμη, και δεν περιελήφθη στις παραμέτρους εισόδου. Ούτε όμως η συγκεκριμένη έλλειψη αναμένεται να έχει μεγάλη επίπτωση στα αποτελέσματα του μοντέλου.

10. Η ηλιακή ακτινοβολία δεν είχε μετρηθεί άμεσα. Επειδή όμως σχετίζεται με τον αριθμό ημέρας εξετάστηκε το ενδεχόμενο να εισαχθεί ως μεταβλητή εισόδου ο αριθμός ημέρας, δηλαδή ο αύξων αριθμός της ημέρας ξεκινώντας από 1 για την 1η Ιανουαρίου και καταλήγοντας σε 365 για την 31η Δεκεμβρίου (**1 μεταβλητή εισόδου**). Σε ευρέως χρησιμοποιούμενα εμπειρικά μοντέλα όπως οι εξισώσεις Penman ή Penman – Montieth χρειάζονται η μέση ημερήσια θερμοκρασία, η ταχύτητα ανέμου και η ηλιακή ακτινοβολία. Η ακτινοβολία επηρεάζεται όμως και από το εάν υπάρχει νέφωση, στοιχείο μη διαθέσιμο. Για το λόγο αυτό υπήρχε μια επιφύλαξη και όλα τα σενάρια εξετάστηκαν αρχικά με και χωρίς τον αριθμό ημέρας. Τα αποτελέσματα του διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου συμπεριλαμβάνουν την απόφαση για χρήση ή όχι της συγκεκριμένης παραμέτρου εισόδου. Σε κάθε περίπτωση πάντως ούτε η ηλιακή ακτινοβολία αναμένεται να έχει καθοριστικό ρόλο στα αποτελέσματα.

11. Ο ρυθμός άντλησης ή εμπλουτισμού είναι μια πολύ σημαντική παράμετρος και επηρεάζει σημαντικά το υδραυλικό ύψος ενός υδροφορέα: Στην περιοχή υπάρχουν δεκαέξι πηγάδια άντλησης, οι παροχές των οποίων αναγνωρίστηκαν ως απαραίτητες μεταβλητές εισόδου (**16 μεταβλητές εισόδου**). Σημαντικό να σημειωθεί είναι ότι ίσως να υπάρχουν και άλλα πηγάδια άντλησης στην περιοχή τα οποία να μην είναι καταγεγραμμένα. Αυτό θα μπορούσε να εισάγει ένα μικρότερο ή μεγαλύτερο σφάλμα ανάλογα με τις παροχές άντλησης και τη σχετική τους θέση ως προς τα πηγάδια παρατήρησης. Το σφάλμα θα αυξανόταν για μεγάλους ρυθμούς άντλησης και μικρή απόσταση από τα σημεία παρατήρησης.

Τα διαθέσιμα δεδομένα για όλες τις μεταβλητές εισόδου είναι ημερήσια για ένα διάστημα δεκαοκτώ μηνών. Οι χρονοσειρές όμως δεν είναι πλήρεις αλλά παρουσιάζουν κενά, τα οποία επιλέχθηκε να μη συμπληρωθούν με μεθόδους συμπλήρωσης χρονοσειρών. Ο βασικός λόγος είναι επειδή κάτι τέτοιο θα εισήγαγε στο νευρωνικό δίκτυο δεδομένα με αβεβαιότητα και ίσως το ωθούσε να περιγράψει αποκρίσεις του υδροφορέα που να μην ανταποκρίνονται στην πραγματικότητα. Ένα επιπλέον πρόβλημα που παρουσιάστηκε ήταν ότι οι διαφορετικές τιμές στη χρονική υστέρηση μετακινούν και τα κενά των χρονοσειρών. Τα δεδομένα που πρέπει να εισαχθούν στο αρχείο «neural_data.txt» προσαρμόζονται ανάλογα με την περίπτωση. Πέρα από τις διαφορετικές τιμές βροχόπτωσης αφαιρούνται και τα χρονικά σημεία δεδομένων που παρουσιάζουν έλλειψη σε μία ή περισσότερες παραμέτρους εισόδου.

Δομή του Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου

Συνοψίζοντας, οι παράμετροι εισόδου του νευρωνικού δικτύου που αποτελούν και τους κόμβους του νευρωνικού δικτύου ήταν εικοσιδύο με εικοσιτρείς ανάλογα με το αν χρησιμοποιείται ή όχι ο αριθμός της ημέρας. Τους υπόλοιπους κόμβους απαρτίζουν η θερμοκρασία, η βροχόπτωση από 3 σημεία, ο ρυθμός άντλησης 16 πηγαδιών και η στάθμη κατά την προηγούμενη χρονική στιγμή των 2 πηγαδιών. Οι συγκεκριμένες παράμετροι επιλέχθηκαν να έχουν άμεση σχέση με τη στάθμη του υπόγειου νερού, και να καλύπτουν όσο το δυνατόν περισσότερους από τους μη σταθερούς παράγοντες του υδατικού ισοζυγίου που το επηρεάζουν. Φυσικά η επιλογή περιορίζεται και από τη διαθεσιμότητα υδρολογικών και υδρογεωλογικών δεδομένων στην περιοχή.

Η αρχική τιμή που επιλέχθηκε για τον αριθμό των κόμβων στα κρυφά επίπεδα ήταν τριάντα σε κάθε κρυφό επίπεδο. Επειδή ο αριθμός των κόμβων εισόδου είναι μεγάλος ίσως να χρειάζονται ακόμα περισσότεροι κρυφοί κόμβοι. Για την αποφυγή μίας διαδικασίας δοκιμής και σφάλματος οι αριθμοί αυτοί εισήχθησαν ως μεταβλητές απόφασης στη διαδικασία βελτιστοποίησης με το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.

Ως παράμετροι εξόδου εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις. Στην πρώτη το νευρωνικό δίκτυο είχε ως παραμέτρους εξόδου τα υδραυλικά ύψη σε δύο σημεία παρατήρησης. Όπως αναλύθηκε στα προηγούμενα κεφάλαια η ιδέα αυτή έχει βρει πολλές εφαρμογές στην προσομοίωση υπόγειων υδροφορέων. Στην παρούσα διατριβή η περίπτωση αυτή χρησιμοποιείται για να είναι συγκρίσιμα τα αποτελέσματα με παλαιότερες εργασίες, καθώς επίσης και ως βάση για την εξέταση της υπόθεσης που αναλύθηκε σε προηγούμενα κεφάλαια ότι η επιλογή της μεταβολής στάθμης έχει μεγαλύτερο φυσικό νόημα και αναμένεται να δώσει καλύτερα αποτελέσματα.

Σχηματική αναπαράσταση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου αποτυπώνεται στην Εικόνα 31. Ως παράμετρος εισόδου εμφανίζεται και ο αριθμός ημέρας. Σε περίπτωση που αφαιρεθεί, αφαιρούνται και οι συνδέσεις του με τους κόμβους του πρώτου κρυφού επιπέδου. Ως κόμβοι εξόδου φαίνονται τα υδραυλικά ύψη ή εναλλακτικά οι διαφορές στάθμης στα δύο πηγάδια παρατήρησης.

Η τελευταία παράμετρος που πρέπει να καθοριστεί σχετικά με το νευρωνικό δίκτυο είναι ο αριθμός των γενιών για τις οποίες θα εκπαιδευτεί. Αρχικά ο αριθμός αυτός τέθηκε ίσος με χίλιες γενιές. Ο αριθμός αυτός είναι υπερδιπλάσιος από τον αριθμό των διαθέσιμων χρονικών σημείων δεδομένων.

Θεωρητικά είναι ικανός να συγκλίνει σε μια τιμή για τα συναπτικά βάρη, αλλά είναι υπαρκτός ο κίνδυνος, επειδή ο αλγόριθμος εκπαίδευσης δεν είναι ελιτιστικός, το σφάλμα να αρχίσει να αυξάνει μετά από έναν αριθμό γενιών. Ο αλγόριθμος δεν έχει έλεγχο για πρώιμη διακοπή σε περίπτωση που το σφάλμα αυξηθεί. Για να αποφευχθεί η εισαγωγή



σφάλματος λόγω υπερβολικά πολλών γενεών εκπαίδευσης ο αριθμός γενιών αποτέλεσε μία επιπλέον παράμετρο της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Εικόνα 31. Δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου όπως αυτό εφαρμόστηκε στην περιοχή της Αττικής.

Βελτιστοποίηση με Διαφορικό Εξελικτικό Αλγόριθμο

Ο στόχος της βελτιστοποίησης με τον ΔΕ ήταν η βελτίωση των αρχικών ΤΝΔ όπως αναλύθηκε προηγουμένως, χρησιμοποιώντας ως παραμέτρους απόφασης της βελτιστοποίησης: α) τους χρόνους υστέρησης των κόμβων της βροχόπτωσης (3 παράμετροι), β) τον αριθμό των κόμβων σε καθένα από τα δύο κρυφά επίπεδα (2 παράμετροι), γ) τον αριθμό των εποχών που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση του ΤΝΔ (1 παράμετρος) και δ) η χρήση ή μη του αριθμού ημέρας ως παραμέτρου εισόδου του ΤΝΔ (1 παράμετρος). Ο Πίνακας 2 συνοψίζει τα άνω και κάτω όρια των μεταβλητών απόφασης της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Μεταβλητή απόφασης	Κάτω όριο	Άνω όριο	Βήμα
Χρήση ή μη του αριθμού ημέρας	0	1	1
Χρονική υστέρηση βροχομετρικού σταθμού 1	1	15	1
Χρονική υστέρηση βροχομετρικού σταθμού 2	1	15	1
Χρονική υστέρηση βροχομετρικού σταθμού 3	1	15	1
Αριθμός κόμβων στο πρώτο κρυφό επίπεδο	5	50	1
Αριθμός κόμβων στο δεύτερο κρυφό επίπεδο	5	50	1
Αριθμός εποχών του ΤΝΔ	500	1000	50

Πίνακας 2. Κάτω και άνω όρια των μεταβλητών απόφασης της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Ιωάννης Χ. Τριχάκης

Κριτήριο για την αξία του αποτελέσματος της διαδικασίας είναι τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης του νευρωνικού δικτύου. Η αντικειμενική συνάρτηση της διαδικασίας βελτιστοποίησης τέθηκε ίση με το ημιάθροισμα των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης του ΤΝΔ.

 $A \nu \tau \iota \kappa \varepsilon \iota \mu \varepsilon \nu \iota \kappa \eta \Sigma \upsilon \nu \dot{\alpha} \rho \tau \eta \sigma \eta = \frac{\Sigma \varphi \dot{\alpha} \lambda \mu \alpha E \kappa \pi \alpha (\delta \varepsilon \upsilon \sigma \eta \varsigma + \Sigma \varphi \dot{\alpha} \lambda \mu \alpha A \xi \iota \sigma \lambda \dot{\alpha} \eta \sigma \eta \varsigma}{2}$

Το σφάλμα εκπαίδευσης είναι ένας δείκτης του πόσο καλά προσομοιώνει το δίκτυο τα δεδομένα με τα οποία έχει εκπαιδευτεί. Τυχόν παράλειψή του από την αντικειμενική συνάρτηση θα μπορούσε να οδηγήσει στην επιλογή ως βέλτιστης μιας εκπαίδευσης που απλά βελτιστοποιεί το σφάλμα αξιολόγησης. Αυτό θα σήμαινε υπερεκπαίδευση του δικτύου αλλά ως προς τα δεδομένα αξιολόγησης.

Το σφάλμα αξιολόγησης είναι ένας δείκτης της ικανότητας του δικτύου να παρεμβάλει εντός της περιοχής εκπαίδευσης ή να συνάγει εκτός αυτής σε περιοχές του υπερχώρου παραμέτρων εισόδου στις οποίες δεν έχει εκπαιδευτεί. Η ενσωμάτωσή του σφάλματος αξιολόγησης στην αντικειμενική συνάρτηση εξασφαλίζει την αποφυγή υπερεκπαίδευσης, ενώ διατηρεί την ικανότητα γενίκευσης του ΤΝΔ όσο το δυνατόν υψηλότερα.

Για την πλήρη αυτοματοποίηση της διαδικασίας αναπτύχθηκαν αλγόριθμοι διαχείρισης δεδομένων οι οποίοι διάβαζαν από αρχεία εισόδου τις τιμές των μεταβλητών απόφασης και δημιουργούσαν ως αρχεία εξόδου, τα προβλεπόμενα αρχεία εισόδου του νευρωνικού δικτύου. Μετά από την εκτέλεση του αλγορίθμου εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου λάμβαναν τις τιμές των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης και αποθήκευαν την αντίστοιχη τιμή της αντικειμενικής συνάρτησης στο κατάλληλο αρχείο εξόδου από το οποίο και εισαγόταν στον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.

Από τη διαδικασία βελτιστοποίησης προέκυψαν ένα βελτιστοποιημένο τεχνητό νευρωνικό δίκτυο με υδραυλικά ύψη ως παραμέτρους εξόδου, και ένα δεύτερο με διαφορές στάθμης ως παραμέτρους εξόδου. Στη συνέχεια τα βελτιστοποιημένα τεχνητά νευρωνικά δίκτυα υποβλήθηκαν στη διαδικασία μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης, όπως αυτή περιγράφηκε στη μεθοδολογία, για να ελεγχθεί η ικανότητά τους να προσομοιώνουν την απόκριση του υδροφορέα για περισσότερες από μία ημέρες. Τα αποτελέσματα θα αποτελέσουν μία ακόμα απόδειξη για το αν πρέπει να προτιμάται η μία από τις επιλογές μεταβλητών εξόδου.

4.2 Τέξας

Στην παρούσα εργασία έγινε χρήση διαθέσιμων δεδομένων από μετρήσεις πεδίου στον υδροφορέα Έντουαρντς στο Τέξας των ΗΠΑ για την εκπαίδευση και αξιολόγηση του προτεινόμενου ΤΝΔ. Ο υδροφορέας Έντουαρντς στο τμήμα Σαν Αντόνιο της ζώνης του ρήγματος Μπαλκόουνς (Balcones) στο νότιο και κεντρικό Τέξας είναι ένα από τα μεγαλύτερα καρστικά συστήματα υπογείων υδάτων των Ηνωμένων Πολιτειών. Γενικά η ποιότητα του νερού στον υδροφορέα είναι υψηλή.

Ο υδροφορέας καλύπτει μια επιφάνεια με μήκος περίπου 300 km και πλάτος 10 με 80 km και αποτελεί τη βασική πηγή ύδατος για τις υδρευτικές ανάγκες της περιοχής συμπεριλαμβανομένης και της πόλης του Σαν Αντόνιο, της 7ης μεγαλύτερης σε πληθυσμό πόλης των ΗΠΑ. Η πόλη έχει κλίμα ξηρό με βροχοπτώσεις 25 με 50 mm ανά έτος γεγονός

που αυξάνει τη σημασία του νερού από τον υδροφορέα Έντουαρντς. Στην Εικόνα 32 σημειώνεται η θέση του πηγαδιού παρατήρησης και δίνεται μια γενικότερη αποτύπωση της έκτασης του υδροφορέα.



Υδροφορέας Έντουαρντς, Τέξας

Εικόνα 32. Θέση του πηγαδιού παρατήρησης J-17 στον χάρτη του υδροφορέα Έντουαρντς.

Πολλές πόλεις έχουν ιδρυθεί σε τοποθεσίες γύρω από πηγές στις οποίες εκφορτίζεται ο υδροφορέας. Καθώς οι ανάγκες αυξάνονταν, διανοίχθηκαν πολλά πηγάδια στην περιοχή για να συμβάλλουν στην διαθέσιμη παροχή ύδατος από τις πηγές. Εκτός από την εξασφάλιση των υδρευτικών αναγκών των πόλεων στην περιοχή ο υδροφορέας Έντουαρντς είναι η κύρια πηγή ύδατος για άρδευση και βιομηχανική χρήση και εφοδιάζει τις πηγές με την απαραίτητη παροχή για τη διατήρηση του ενδιαιτήματος απειλουμένων ειδών, καθώς επίσης και για ψυχαγωγικούς σκοπούς και χρήσεις στα κατάντη.

Γεωλογία της Περιοχής

Ο υδροφορέας Έντουαρντς περικλείεται μέσα σε ομάδες ασβεστολίθου Έντουαρντς Κρητιδικής εποχής (ασβεστολίθου Έντουαρντς) και συναφή στρώματα. Ο υδροφορέας καλύπτεται σε μεγάλο τμήμα του από άργιλο Del Rio (Ντελ Ρίο) και υπόκειται του στρώματος Upper Glen Rose (Άπερ Γκλεν Ρόουζ), ανώτερου στρώματος του υδροφορέα Τρίνιτι (Trinity Aquifer). Ο ασβεστόλιθος Έντουαρντς και τα συναφή στρώματα κυμαίνονται από 450 έως και πλέον των 600 ft σε πάχος στην περιοχή. Μία σειρά από ρήγματα στη ζώνη ρηγμάτων Μπαλκόουνς (Balcones Fault Zone) έχει εκθέσει τον ασβεστόλιθο Έντουαρντς στην επιφάνεια κατά μήκος του νοτίου ορίου της Κομητείας Τέξας Χιλ (Texas Hill Country). Τεκτονικές διεργασίες έχουν μετακινήσει τον ασβεστόλιθο Έντουαρντς σε μεγάλο βάθος από την επιφάνεια στο νότιο και το ανατολικό όριο. Σε ορισμένες περιοχές μπορεί να βρεθεί γλυκό νερό στον ασβεστόλιθο Έντουάρντς ακόμα και σε βάθη 1200 μέτρων κάτω από την επιφάνεια του εδάφους. (Schindel et al., 2007) Ακολουθώντας τον υδρολογικό κύκλο, το νερό κινείται μέσω του υδροφορέα από τις περιοχές εμπλουτισμού προς τα σημεία εκφόρτισης (πηγές και πηγάδια). Περίπου 1 250 τετραγωνικά μίλια ασβεστόλιθου Έντουαρντς είναι εκτεθειμένο επιφανειακά και αποτελεί τη ζώνη εμπλουτισμού του υδροφορέα. Ρυάκια που ρέουν νότια από την περιοχή απορροής χάνουν όλη ή το μεγαλύτερο τμήμα της βασικής τους ροής, καθώς διασταυρώνονται με τη ζώνη εμπλουτισμού. Επιπλέον, τμήμα των κατακρημνίσεων εντός της ζώνης εμπλουτισμού κατεισδύει επίσης στον υδροφορέα. Η ροή των υπογείων υδάτων μέσω του υδροφορέα καταλήγει τελικά σε ένα μεγάλο αριθμό σημείων εκφόρτισης. Ο χρόνος παραμονής μέσα στον υδροφορέα και άλλες παραμέτρους του υδροφορέα.(Schindel et al., 2007)



Εικόνα 33. Χάρτης της Κομητείας Μπέξαρ (Bexar County) με σημειωμένη τη θέση του πηγαδιού παρακολούθησης J-17 (AY-68-37-203). (Schindel et al. 2007)

Ο υδροφορέας Έντουαρντς είναι καρστικός και χαρακτηρίζεται από την ύπαρξη καταβοθρών, βυθιζόμενων ρεμάτων, σπηλαίων, μεγάλων πηγών και ενός ολοκληρωμένου

συστήματος υποεπιφανειακής διοχέτευσης των υδάτων. Είναι ένα από πιο παραγωγικά συστήματα υπογείων υδάτων στις Ηνωμένες Πολιτείες και χαρακτηρίζεται από εξαιρετικά υψηλή δυναμικότητα για πηγάδια άντλησης και υψηλές εκφορτίσεις σε πηγές. Ο υδροφορέας παρουσιάζει εξαιρετικά μεγάλο (σπηλαιώδες) πορώδες και υψηλή διαπερατότητα χαρακτηριστικό πολλών καρστικών υδροφορέων. Αντίθετα, υδροφορείς που εμφανίζονται σε άμμο, κροκάλες ή άλλα είδη πετρωμάτων όπως οι ψαμμίτες έχουν αρκετά μικρότερη διαπερατότητα. Επειδή ο υδροφορέας Έντουαρντς είναι γνωστό ότι έχει περιοχές με υψηλή διαπερατότητα επιτρέπει τη μεταφορά μεγάλων όγκων νερού, συνεπώς καθιστά δυνατή τη γρήγορη απόκριση της στάθμης πηγαδιών παρατήρησης σε γεγονότα βροχόπτωσης-εμπλουτισμού.(Schindel et al., 2007)

Ιστορικά η ποιότητα του νερού στον υδροφορέα προστατεύεται από το μεγάλο του βάθος κάτω από πληθυσμιακά κέντρα και μη αξιοποιημένες εκτάσεις γης στη ζώνη εμπλουτισμού και την περιοχή απορροής. Πιθανές απειλές για την ποιότητα του νερού είναι υπαρκτές από διάφορες πηγές συμπεριλαμβανομένων των μεταφορών και της χρήσης επικινδύνων ουσιών και άλλων χημικών στη ζώνη εμπλουτισμού, εγκαταλελειμμένων ή ημιτελών πηγαδιών και αστικών μη σημειακών απορροών. Το υψηλό πορώδες και η υψηλή υδραυλική αγωγιμότητα του υδροφορέα Έντουαρντς επιτρέπουν την εισροή ρύπων από το από την επιφάνεια του εδάφους με μικρή ή και καθόλου κατακράτηση.

Το πηγάδι παρατήρησης J-17 στην κομητεία Μπέξαρ (Εικόνα 33) είναι ένα σημείο για το οποίο είναι καταγεγραμμένη η τιμή της στάθμης σε ημερήσιο χρονικό βήμα από τις 12 Νοεμβρίου 1932. Είναι το σημείο αναφοράς για τη στάθμη του υδροφορέα και βρίσκεται πολύ κοντά στην πόλη του Σαν Αντόνιο.

Διαθέσιμα Δεδομένα

Για την ευρύτερη περιοχή υπήρχαν καταγεγραμμένες τιμές υδρολογικών και υδρογεωλογικών παραμέτρων για μεγάλα χρονικά διαστήματα και με ημερήσιο χρονικό βήμα. Ο Πίνακας 3 συνοψίζει τις διαθέσιμες παραμέτρους και τον αριθμών των ημερήσιων τιμών για κάθε μία από αυτές. (Schindel et al., 2007)

Παράμετρος	Ημερήσιες Τιμές			
Μέγιστη Θερμοκρασία	45 093			
Βροχόπτωση	45 100			
Συνολική Άντληση	11 561			
Μέγιστη Ωριαία Άντληση	7 135			
Υδραυλικό Ύψος	26 883			

	-		,		,			-10
Πινακας	з.	Λιαθεσιμε	ς ημεοησιες	ספעודי	παραμετρών	ι στην περιογr	I TOU	152000
· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	<u> </u>	Lacocothe	, . Inch. 10103	, comes	/ cop of p co r	ould reprove	1	

1. Η παροχή που εισρέει επιφανειακά από άλλες λεκάνες απορροής: Εάν το υδατικό ισοζύγιο εφαρμοστεί στο σύνολο της έκτασης που καλύπτει ο υδροφορέας, δεν υπάρχει ανάντη λεκάνη απορροής. Συνεκδοχικά δεν είναι δυνατόν να εμπλουτίζεται ο υδροφορέας από επιφανειακές εισροές.

2. Η παροχή που εκρέει επιφανειακά από τη λεκάνη: Ακόμα και τα ρυάκια εντός της περιοχής απορροής λόγω της υψηλής καρστικοποίησης των ασβεστολίθων χάνονται όταν

συναντήσουν τη ζώνη εμπλουτισμού. Το εξαιρετικά μεγάλο βάθος του υδροφορέα από την επιφάνεια του εδάφους συνδυάζεται με το μεγάλο πορώδες και την υψηλή υδραυλική αγωγιμότητα, παράλληλα μάλιστα με το ξηρό κλίμα της περιοχής. Τα παραπάνω δεδομένα συνηγορούν στην παραδοχή ότι η απουσία αυτής της παραμέτρου από το σύνολο μεταβλητών εισόδου δε θα εισάγει σημαντικό σφάλμα στο μοντέλο.

3. Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου στην ανάντη λεκάνη απορροής και ενός στην μελετώμενη (ή το υδραυλικό ύψος του υδροφορέα): Δεν υπήρχαν διαθέσιμα δεδομένα για κάποιο πηγάδι ανάντη του πηγαδιού παρατήρησης, συνεπώς επιλέχθηκε ως παράμετρος εισόδου το υδραυλικό ύψος στο πηγάδι παρατήρησης την προηγούμενη ημέρα (1 παράμετρος εισόδου).

4. Η διαφορά υδραυλικού ύψους μεταξύ ενός σημείου της μελετώμενης λεκάνης απορροής και ενός της κατάντη (σε περίπτωση που εκρέει προς τη θάλασσα, το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο του υδροφορέα): Το υδραυλικό ύψος σε ένα σημείο παρατήρησης έχει ήδη εισαχθεί ως παράμετρος εισόδου. Δεν υπήρχαν στοιχεία για σημεία στην κατάντη λεκάνη απορροής, οπότε υπάρχει πιθανότητα να επηρεάζεται η ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Επειδή ο υδροφορέας είναι καρστικός, η έλλειψη στοιχείων για την κατάντη λεκάνη απορροής δεν αναμένεται να δημιουργήσει μεγάλο σφάλμα στα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Η κατακρήμνιση στην λεκάνη απορροής είναι διαθέσιμη από ένα μόνο σημείο και 5. εισήχθη ως παράμετρος εισόδου (1 παράμετρος εισόδου): Κρίνοντας από την έκταση της περιοχής θα ήταν επιθυμητή η ύπαρξη ενός δικτύου σταθμών που να περιγράφουν καλύτερα την κατανομή της βροχόπτωσης στην περιοχή. Είναι πολύ πιθανό η θέση του σταθμού να μην είναι αντιπροσωπευτική ολόκληρης της λεκάνης απορροής, συνεπώς να υπάρχουν τιμές βροχόπτωσης που να επηρεάζουν το υπόγειο σύστημα, οι οποίες να μην καταγράφονται. Σε κάθε εφαρμογή τεχνητού νευρωνικού δικτύου κρίνεται ιδιαίτερα σημαντική η σωστή εισαγωγή της κατακρήμνισης, καθώς είναι και η βασική συνεισφέρουσα παράμετρος του υδατικού ισοζυγίου. Για τον προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης της συγκεκριμένης παραμέτρου έγινε ανάλυση συντελεστών συσχέτισης. Εξ αιτίας της μεγάλης έκτασης του υδροφορέα υπήρχε η εκτίμηση από παλαιότερες μελέτες (βλ. Γεωλογία της Περιοχής) ότι ο χρόνος παραμονής του νερού μέσα στον υδροφορέα διαφέρει ανάλογα με την περιοχή και μπορεί να κυμαίνεται από λίγες ώρες μέχρι πολλές ημέρες ή ακόμα και χρόνια. Αυτό οδήγησε στην υιοθέτηση περισσότερων της μίας ημέρας ως παραμέτρων εισόδου. Ανάλογα με την ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης επιλέγονται τόσες ημέρες όσες φαίνεται να έχουν επίδραση στη διαφορά της στάθμης. Η επιλογή του ορίου, για το έως ποια τιμή του συντελεστή συσχέτισης η επίδραση θεωρείται εμφανής, είναι αυθαίρετη. Ευτυχώς η θεωρία επιτρέπει την εισαγωγή περισσότερων παραμέτρων εισόδου στο νευρωνικό δίκτυο από τις απαιτούμενες. Αυτό μπορεί μεν να έχει αρνητική επίδραση στο χρόνο που χρειάζεται για μια πλήρη εκτέλεση του αλγορίθμου του νευρωνικού δικτύου, αλλά δεν αναμένεται να αυξήσει το σφάλμα του. Εάν δεν υπάρχει καμία συσχέτιση κάποιας μεταβλητής εισόδου με τις εξόδους, το νευρωνικό έχει δυνητικά την ικανότητα να μηδενίσει τα συναπτικά βάρη εκείνα που συνδέουν τη μη συσχετισμένη παράμετρο με τις εξόδους, ουσιαστικά αφαιρώντας την από το δίκτυο.

6. Η θερμοκρασία είναι επίσης μια σημαντική παράμετρος η οποία ενδέχεται να παρουσιάζει σημαντική χωρική μεταβλητότητα. Η επίδρασή της όμως, η οποία γίνεται εμφανής μέσω της εξάτμισης και της διαπνοής είναι λιγότερο σημαντική σε συστήματα υπογείων υδάτων τα οποία εμφανίζονται σε μεγάλα βάθη από την επιφάνεια του εδάφους. Έτσι και στη συγκεκριμένη εφαρμογή δεν αναμένεται να υπάρξει σημαντική επίπτωση στο σφάλμα του μοντέλου.

7. Η υγρασία του εδάφους δεν ήταν διαθέσιμη στη συγκεκριμένη περιοχή. Με δεδομένη την χωρική μεταβλητότητα και της συγκεκριμένης παραμέτρου, σε περίπτωση κατά την οποία κρινόταν απαραίτητο να καταγραφεί για να χρησιμοποιηθεί ως παράμετρος εισόδου θα απαιτούσε ένα δίκτυο σταθμών μέτρησης όπως και οι υπόλοιπες χωρικά μεταβαλλόμενες παράμετροι. Η απουσία της όμως από το σύνολο δεδομένων εισόδου δεν αναμένεται να επηρεάσει σημαντικά τα αποτελέσματα για λόγους που αναλύθηκαν παραπάνω και σχετίζονται με την γενικότερη επίδραση της εξάτμισης και της διαπνοής σε ένα σύστημα όπως το μελετώμενο.

8. Στοιχεία για την ταχύτητα του ανέμου δεν ήταν καταγεγραμμένα, αλλά καθώς η ταχύτητα του ανέμου είναι μία ακόμα παράμετρος που σχετίζεται με την εξάτμιση και τη διαπνοή, δεν αναμένεται η έλλειψη των στοιχείων αυτών να επιφέρει σημαντική υποβάθμιση της ποιότητας της προκύπτουσας λύσης.

9. Η σχετική υγρασία του αέρα, όπως και οι προηγούμενες δυο παράμετροι, δεν ήταν διαθέσιμη και δεν περιελήφθη στις παραμέτρους εισόδου. Ούτε όμως η συγκεκριμένη έλλειψη αναμένεται να έχει μεγάλη επίπτωση στα αποτελέσματα του μοντέλου.

10. Δεν υπήρχαν πληροφορίες για την τιμή της ηλιακής ακτινοβολίας. Σύμφωνα όμως με το συλλογισμό της προηγούμενης εφαρμογής στην περιοχή της Αττικής εξετάστηκε το ενδεχόμενο να εισαχθεί ως μεταβλητή εισόδου ο αριθμός ημέρας, δηλαδή ο αύξων αριθμός της ημέρας ξεκινώντας από 1 για την 1η Ιανουαρίου και καταλήγοντας σε 365 για την 31η Δεκεμβρίου (1 μεταβλητή εισόδου). Η επιφύλαξη που υπήρχε για τη χρήση αυτής της μεταβλητής οδήγησε στην υιοθέτηση μίας διαδικασίας δοκιμής και σφάλματος, η οποία καθόρισε τη χρήση ή μη του αριθμού ημέρας. Ανεξάρτητα από τα αποτελέσματα της διαδικασίας η ηλιακή ακτινοβολία δεν αναμένεται να έχει καθοριστικό ρόλο στα αποτελέσματα.

11. Ο ρυθμός άντλησης ή εμπλουτισμού είναι μία από τις πλέον σημαντικές παραμέτρους, όταν πρόκειται για καρστικούς υδροφορείς. Διαθέσιμες παράμετροι ήταν η συνολική παροχή άντλησης από όλα τα πηγάδια της περιοχής, καθώς και η ωριαία μέγιστη παροχή άντλησης. Δυστυχώς δεν υπήρχαν πληροφορίες για την άντληση κάθε πηγαδιού ξεχωριστά, ούτε καν ανά ομάδες γειτονικών πηγαδιών. Αυτό δημιουργεί ένα σημαντικό πρόβλημα, καθώς το πηγάδι παρατήρησης επηρεάζεται διαφορετικά από κάθε πηγάδι άντλησης ανάλογα με την μεταξύ τους απόσταση και το παρεμβαλλόμενο γεωλογικό υπόβαθρο. Η έλλειψη αυτής της πληροφορίας ενδέχεται να εισάγει σημαντικό σφάλμα στην προσομοίωση. Με την ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης εξετάστηκε εάν η παράμετρος της συνολικής παροχής παρουσιάζει χρονική υστέρηση και αν πρέπει να εισαχθεί για περισσότερες από μία ημέρες. Η ωριαία μέγιστη άντλησης, αλλά και πάλι θα ήταν επιθυμητός ένας καταμερισμός της ανά πηγάδι ή ομάδα γειτονικών πηγαδιών κουτός κατλησης.

Οι χρονοσειρές των δεδομένων είχαν μερικές ελλείψεις, οπότε ήταν απαραίτητη μια προεργασία για την διαγραφή των χρονικών σημείων δεδομένων (ημερών) όπου παρουσιάζονταν κενά στα δεδομένα. Λόγω και την διαφοράς στο μήκος των χρονοσειρών επιλέχθηκαν μόνο τα χρονικά σημεία εκείνα που είχαν πλήρες σύνολο τιμών δεδομένων για τις παραμέτρους εισόδου.

Δομή του Τεχνητού Νευρωνικού Δικτύου

Συνοψίζοντας, οι παράμετροι εισόδου του νευρωνικού δικτύου που αποτελούν και τους κόμβους του νευρωνικού δικτύου απαρτίζουν η θερμοκρασία, η βροχόπτωση για περισσότερες από μία ημέρες, ο ρυθμός άντλησης για περισσότερες από μία ημέρες, η μέγιστη ωριαία άντληση, η στάθμη κατά την προηγούμενη χρονική στιγμή στο πηγάδι παρατήρησης και ενδεχομένως ο αριθμός ημέρας, εάν οι δοκιμές συνηγορούν στη χρήση του. Οι συγκεκριμένες παράμετροι επιλέχθηκαν για την άμεση σχέση που έχουν με τη στάθμη του υπόγειου νερού και διότι καλύπτουν όσο το δυνατόν περισσότερους από τους μη σταθερούς παράγοντες του υδατικού ισοζυγίου που το επηρεάζουν. Λόγω των ελλείψεων σε υδρολογικά και υδρογεωλογικά δεδομένα στην περιοχή μεταβλητές οι οποίες θα είχαν επιλεγεί, απουσιάζουν από το σύνολο παραμέτρων εισόδου.



Εικόνα 34. Δομή του τεχνητού νευρωνικού δικτύου όπως αυτό εφαρμόστηκε στην περιοχή του Τέξας.

Η αρχική τιμή που επιλέχθηκε για τον αριθμό των κόμβων στα κρυφά επίπεδα ήταν τριάντα σε κάθε κρυφό επίπεδο. Είναι υπερδιπλάσιος του αριθμού των κόμβων εισόδου και επιλέχθηκε σύμφωνα με τον εμπειρικό κανόνα ότι εάν οι κόμβοι στα κρυφά επίπεδα είναι διπλάσιοι ή τριπλάσιοι από εκείνους του επιπέδου εισόδου είναι πιθανότατα αρκετοί για να προσομοιώσουν ακόμα και μη γραμμικές συναρτήσεις. Εξ αιτίας του αρκετά μεγαλύτερου συνόλου δεδομένων εκπαίδευσης σε αυτή την εφαρμογή σε σχέση με την εφαρμογή στην Αττική ο χρόνος που απαιτήθηκε για μία εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου ήταν κατά πολύ μεγαλύτερος. Αυτό κατέστησε απαγορευτική της χρήση μίας διαδικασίας βελτιστοποίησης. Έπρεπε συνεπώς, βάσει της προηγούμενης εμπειρίας και των αποτελεσμάτων της εφαρμογής στην Αττική να γίνουν οι επιλογές εκείνες για το νευρωνικό δίκτυο οι οποίες δεν ήταν δυνατόν να προκύψουν ως αποτελέσματα της διαδικασίας βελτιστοποίησης.

Η πιο εύκολη επιλογή ήταν εκείνη της παραμέτρου εξόδου. Εκτός από το μεγαλύτερο φυσικό νόημα, η επιλογή της μεταβολής στάθμης έδωσε και καλύτερα αποτελέσματα κατά την εφαρμογή στην περιοχή της Αττικής. Έτσι ως μοναδική παράμετρος εξόδου επιλέχθηκε η διαφορά στάθμης στο πηγάδι παρατήρησης μεταξύ δύο διαδοχικών ημερών.

Σχηματική αναπαράσταση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου αποτυπώνεται στην Εικόνα 34. Ως παράμετρος εισόδου εμφανίζεται και ο αριθμός ημέρας. Σε περίπτωση που αφαιρεθεί, αφαιρούνται και οι συνδέσεις του με τους κόμβους του πρώτου κρυφού επιπέδου.

Η επιλογή του αριθμού των γενεών για τις οποίες εκπαιδεύεται το μοντέλο, καθορίστηκε μετά από δοκιμές. Η τιμή που προέκυψε ήταν χίλιες γενιές ενώ πέρα από αυτή τα σφάλματα δεν μεταβάλλονταν σημαντικά.

Κεφάλαιο 5ο

Αποτελέσματα - Συζήτηση

Η προτεινόμενη μεθοδολογία, όπως τροποποιήθηκε για να καλυφθούν οι ανάγκες που δημιουργούσαν οι ιδιαιτερότητες της κάθε περιοχής, κατέληξε σε αποτελέσματα τα οποία δείχνουν την αξία της εφαρμογής της για προσομοίωση της απόκρισης καρστικών υδροφορέων. Τα αποτελέσματα περιλαμβάνουν τόσο πληροφορίες για τη βέλτιστη δομή του νευρωνικού δικτύου όπως αυτή προέκυψε από δοκιμές ή διαδικασία βελτιστοποίησης όσο και καθαυτά τα αποτελέσματα προσομοίωσης της απόκρισης.

Στην περιοχή της Αττικής όπου ο χρόνος για κάθε εκπαίδευση του δικτύου ήταν μικρότερος, υπήρχε η δυνατότητα πλήρους εφαρμογής όλων των τμημάτων της μεθοδολογίας που απαιτούν πολλαπλές εκτελέσεις του αλγορίθμου εκπαίδευσης όπως η βελτιστοποίηση με διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο και η εύρεση διαστημάτων εμπιστοσύνης με την μέθοδο bootstrap. Αρχικά παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την ανάλυση συντελεστών συσχέτισης και έπειτα τα αποτελέσματα που προέκυψαν από τη διαδικασία βελτιστοποίησης. Παρουσιάζονται τα προκύπτοντα από την εφαρμογή των δύο μεθόδων διαστήματα εμπιστοσύνης, καθώς και ανάλυση των αποτελεσμάτων σχετικά με τις πληροφορίες που θα μπορούσαν να φανούν χρήσιμες για μελλοντικές εφαρμογές της μεθοδολογίας. Τέλος παρουσιάζονται και αναλύονται συ νευρωνικού δικτύου.

Στην περιοχή του Τέξας υπήρχαν διαθέσιμες σειρές δεδομένων για μεγάλα χρονικά διαστήματα αλλά με ελλείψεις σε βασικές παραμέτρους όπως η άντληση από κάθε πηγάδι ξεχωριστά. Η έλλειψη πληροφορίας που δεν μπορούσε να συμπληρωθεί με άλλον τρόπο, οδήγησε σε αποτελέσματα κατώτερης ποιότητας σε σύγκριση με εκείνα της εφαρμογής στην Αττική. Ο δε εξαιρετικά μεγάλος χρόνος εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου απέτρεψε την εφαρμογή μεθόδων όπως ο διαφορικός εξελικτικός και η μέθοδος bootstrap. Για την επιλογή παραμέτρων σχετικών με τη δομή έγιναν δοκιμές σε μια προσπάθεια να μειωθεί το σφάλμα, πλην όμως σε καμία περίπτωση δεν μπορεί να επιτευχθεί με λίγες δοκιμές η ελαχιστοποίηση του σφάλματος που είναι σε θέση να δώσει μία διαδικασία βελτιστοποίησης. Σχολιασμός των αποτελεσμάτων σε σύγκριση και με την προηγούμενη εφαρμογή αναζητά τρόπους που θα μπορούσαν να βελτιώσουν τα αποτελέσματα. Και στη συγκεκριμένη εφαρμογή παρέχονται και αναλύονται τα αποτελέσματα εφαρμογής διαφορετικών αλγορίθμων για την εκπαίδευση του τεχνητού νευρωνικού δικτύου.

Αττική

Με βάση τις παλαιότερες εργασίες που έχουν αναφερθεί στον τομέα της προσομοίωσης υπογείων υδάτων σε συνδυασμό με την προσπάθεια για επιλογή παραμέτρων σύμφωνα με το υδατικό ισοζύγιο προκύπτει μία αρχική κατάσταση αναφοράς των αποτελεσμάτων που θα έδινε η εφαρμογή ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου στην περιοχή. Τα αποτελέσματα αυτά προέρχονται από ένα δίκτυο το οποίο δεν υπολογίζει τη χρονική υστέρηση και δεν έχει βελτιστοποιημένη δομή (αριθμό κόμβων στα κρυφά επίπεδα, αριθμό εποχών). Ο



αριθμός των κόμβων επιλέχθηκε ίσος με 30 σε κάθε κρυφό επίπεδο και ο αριθμός των εποχών για τις οποίες εκπαιδεύεται το νευρωνικό δίκτυο ίσος με 1000.

Εικόνα 35. Αρχική κατάσταση αναφοράς των αποτελεσμάτων προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού.



Εικόνα 36. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι στην αρχική κατάσταση αναφοράς.

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα η αρχική κατάσταση αναφοράς παρουσιάζει αδυναμίες στο τμήμα των δεδομένων ελέγχου (σημεία δεδομένων 335-473) τόσο στην Εικόνα 35 όσο και στην Εικόνα 37. Συγκεκριμένα το μοντέλο αδυνατεί να αναπαράγει τις υψηλές κορυφές και υποεκτιμά στα περισσότερα σημεία την παρατηρημένη τιμή. Η τιμή του σφάλματος εκπαίδευσης είναι 6,3Ε-04 ενώ του σφάλματος αξιολόγησης είναι 1,1Ε-03. Το γεγονός ότι το σφάλμα αξιολόγησης είναι σχεδόν διπλάσιο από το σφάλμα εκπαίδευσης αποτελεί ένδειξη ότι το δίκτυο μπορεί να έχει υπερεκπαιδευτεί.





Τα διαγράμματα των παρατηρημένων ως προς τις προσομοιωμένες τιμές (Εικόνα 36 και Εικόνα 38) παρουσιάζουν σχετικά καλή γραμμική συσχέτιση, ωστόσο ενώ ιδανικά ο σταθερός όρος θα έτεινε στο μηδέν και η κλίση της ευθείας στη μονάδα, οι τιμές των παραμέτρων αυτών απέχουν από τις ιδανικά επιθυμητές. Με βάση αυτό το νευρωνικό δίκτυο και τα αποτελέσματα που προκύπτουν από αυτό μπορούν να συγκριθούν οι μετέπειτα προτεινόμενες βελτιώσεις και να ελεγχθεί η αξία τους. Κατά τη διάρκεια των προσπαθειών για βελτίωση του νευρωνικού δικτύου και ελαχιστοποίηση του σφάλματος ελέγχθηκαν αρκετές ιδέες, από τις οποίες πολλές βελτίωσαν το αποτέλεσμα και συμπεριλαμβάνονται στο τελικά προτεινόμενο νευρωνικό δίκτυο ενώ άλλες δοκιμές δεν βελτίωσαν την τιμή του σφάλματος και απορρίφθηκαν.

Υπήρξαν αρκετές προσπάθειες που δεν βελτίωσαν το σφάλμα. Σε αυτές συμπεριλαμβάνεται η δημιουργία ξεχωριστών νευρωνικών δικτύων για κάθε έξοδο του νευρωνικού. Μία άλλη ιδέα που δε μείωσε το σφάλμα ήταν η χρήση της συνολικής παροχής ως επιπλέον μεταβλητής εξόδου. Σε μία προσπάθεια να επιτευχθεί καλύτερη προσομοίωση των ακραίων σημείων εξετάστηκε η διάσπαση κάθε μεταβλητής εξόδου σε δύο μεταβλητές. Στην πρώτη μεταβλητή αντιστοιχούσε η ομαλή τάση της μεταβλητής εξόδου και στην δεύτερη οι απότομες αλλαγές (απότομη πτώση ή άνοδος) οι οποίες σχετίζονται με το εάν η

μεταβολή της στάθμης στο σημείο δεδομένων επηρεάζεται από άντληση σε γειτονικό σημείο. Η μη βελτίωση του σφάλματος αποτελεί απόδειξη ότι ένα νευρωνικό δίκτυο δεν έχει ανάγκη από μαθηματικές παρεμβάσεις στις παραμέτρους εισόδου και εξόδου, αρκεί να υπάρχουν όλα τα συσχετισμένα δεδομένα.



Εικόνα 38. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι στην αρχική κατάσταση αναφοράς.

Ανάλυση συντελεστών συσχέτισης

Ο Πίνακας 4 περιέχει τις τιμές των συντελεστών συσχέτισης μεταξύ βροχόπτωσης και διαφοράς υδραυλικού ύψους για διαφορετικές τιμές χρονικής υστέρησης. Με βάση τα αποτελέσματα αυτά η καλύτερη επιλογή για την χρονική υστέρηση είναι 2 ημέρες για τον βροχομετρικό σταθμό 1, 11 ημέρες για τον βροχομετρικό σταθμό 2 και 2 ημέρες για τον βροχομετρικό σταθμό 3. Το πρόβλημα της επιλογής μιας χρονικής υστέρησης για τους βροχομετρικούς σταθμούς 1 και 3 ήταν ότι ο μέγιστος συντελεστής συσχέτισης για κάθε πηγάδι εμφανιζόταν για διαφορετική τιμή της χρονικής υστέρησης (11 και 2 αντίστοιχα). Η απόσταση μεταξύ του βροχομετρικού σταθμού και καθενός από τα δύο πηγάδια είναι περίπου η ίδια και δεν υπάρχουν αλλαγές στα γεωλογικά χαρακτηριστικά που να εξηγούν μια διαφορά 9 ημερών μεταξύ των δύο πηγαδιών[•] συνεπώς η σκέψη για εκπαίδευση δύο διαφορετικών δικτύων εγκαταλείφθηκε αφού στερείτο φυσικού νοήματος.

Στο πρώτο πηγάδι η επίδραση της άντλησης είναι αρκετά μεγαλύτερη, γεγονός που οδηγεί σε μικρότερους συντελεστές συσχέτισης μεταξύ βροχόπτωσης και διαφοράς στάθμης. Οι συντελεστές συσχέτισης για το δεύτερο πηγάδι δεν είναι κατά πολύ υψηλότεροι, αλλά οι τιμές τους είναι σχεδόν διπλάσιες από εκείνες του πρώτου πηγαδιού. Για την επιλογή λοιπόν ενιαίων τιμών χρονικής υστέρησης και για τα δύο πηγάδια χρησιμοποιήθηκαν οι συντελεστές συσχέτισης του δευτέρου πηγαδιού, καθώς έχουν υψηλότερες τιμές σε σύγκριση με εκείνους του πρώτου πηγαδιού.

Χρονική υστέρηση (ημέρες)	B1-Π1	В1-П2	В2-П1	В2-П2	В3-П1	В3-П2
0	0,0993	0,1948	0,0743	0,1386	0,0913	0,1628
1	0,0871	0,2088	0,0609	0,1576	0,0629	0,1939
2	0,1262	0,2517	0,0933	0,1838	0,1303	0,2374
3	0,0945	0,2375	0,0720	0,1811	0,0924	0,2152
4	0,1329	0,2350	-0,0189	0,1713	0,1221	0,2232
5	0,1089	0,2146	0,2052	0,1736	0,1110	0,2143
6	0,0927	0,1975	0,0729	0,1479	0,0926	0,1976
7	0,0806	0,1741	0,0453	0,1214	0,0747	0,1799
8	0,0812	0,1719	0,0303	0,1247	0,0786	0,1771
9	0,0852	0,1816	0,0834	0,0809	0,0873	0,1736
10	0,0627	0,1882	-0,0796	0,1487	0,0556	0,1727
11	0,1372	0,2153	0,2182	0,2231	0,1385	0,2013
12	0,0978	0,2140	0,0883	0,2203	0,0838	0,2034
13	0,0664	0,2034	0,0553	0,1334	0,0849	0,2169
14	0,1145	0,1935	0,0143	0,1230	0,1103	0,2075
15	0,0957	0,1794	0,1074	0,1165	0,1006	0,2051
16	0,0680	0,1635	0,0477	0,1098	0,0861	0,1964
17	0,0733	0,1592	0,0502	0,1059	0,0916	0,1905
18	0,0697	0,1480	0,0506	0,1019	0,0854	0,1806
19	0,0563	0,1493	0,0321	0,1038	0,1054	0,1820
20	0,0610	0,1565	0,0438	0,1731	0,0594	0,1810

Πίνακας 4. Συντελεστές συσχέτισης μεταξύ βροχόπτωσης (από 3 βροχομετρικούς σταθμούς - B1, B2, B3) και διαφοράς υδραυλικού ύψους (σε 2 πηγάδια - Π1, Π2) για διαφορετικές τιμές χρονικής υστέρησης.

Υδραυλικά ύψη ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ

Με τη χρονική υστέρηση που επιλέχθηκε προηγουμένως, το ΤΝΔ εκπαιδεύτηκε για 1000 εποχές με 30 κόμβους σε καθένα από τα δύο κρυφά επίπεδα και έχοντας ως παραμέτρους εξόδου τα υδραυλικά ύψη στα δύο πηγάδια παρατήρησης. Τα σχετικά αποτελέσματα του πρώτου ΤΝΔ που περιέχουν τόσο την περίοδο εκπαίδευσης/αξιολόγησης όσο και την περίοδο ελέγχου (για κάθε χρονοσειρά υδραυλικού ύψους) παρουσιάζονται στην Εικόνα 39 και στην Εικόνα 41για τα δύο πηγάδια αντίστοιχα.

Οι προσομοιωμένες τιμές του υδραυλικού ύψους ως προς τις παρατηρημένες τιμές εμφανίζονται στην Εικόνα 40 για το πρώτο πηγάδι και στην Εικόνα 42 για το δεύτερο. Στις εικόνες αυτές αποτυπώνεται επίσης η καλύτερη ευθεία (μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων) και η επιθυμητή ευθεία y = x.

Τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης βρέθηκαν ίσα με 6,4Ε-04 και 9,2Ε-04 αντίστοιχα. Το γεγονός ότι το σφάλμα αξιολόγησης είναι μεγαλύτερο από το σφάλμα εκπαίδευσης υποδηλώνει ότι η γενίκευση που επιτεύχθηκε από το TNΔ δεν είναι αρκετά ικανοποιητική, γεγονός που υποστηρίζεται και από την υποεκτίμηση των δεδομένων ελέγχου κατά περίπου 1 μέτρο. Το RMSE του συγκεκριμένου TNΔ ήταν 0,832 m για την περίοδο εκπαίδευσης και αξιολόγησης και 1,467 m για την περίοδο ελέγχου.



Εικόνα 39. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από την ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 40. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 41. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από την ανάλυση των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 42. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.

Όπως είναι εμφανές, οι προσομοιωμένες τιμές τείνουν να υποεκτιμούν τις πραγματικές ανεξάρτητα από την παρατηρημένη τιμή, ειδικά μετά το χρονικό σημείο δεδομένων 337 οπότε ξεκινά το σύνολο δεδομένων ελέγχου. Εκτός όμως από τη γενικότερη τάση υποεκτίμησης είναι ενθαρρυντικό το γεγονός ότι το νευρωνικό δίκτυο έχει τη δυνατότητα να υπερβεί το μέγιστο υδραυλικό ύψος το οποίο υπήρχε στο σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης. Αυτό είναι μία πρώτη ένδειξη ότι το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο έχει ικανότητα γενίκευσης.

Διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ

Με την ίδια διαδικασία εκπαιδεύτηκε, αξιολογήθηκε και ελέγχθηκε και ένα δεύτερο ΤΝΔ το οποίο είχε τις διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα στα δύο πηγάδια ως παραμέτρους εξόδου. Τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης βρέθηκαν 7,6Ε-04 και 4,2Ε-04 αντίστοιχα. Το RMSE του συγκεκριμένου ΤΝΔ ήταν 0,094 m για την περίοδο εκπαίδευσης και αξιολόγησης και 0,142 m για την περίοδο ελέγχου, που είναι μια τάξη μεγέθους μικρότερο από ότι του προηγούμενου ΤΝΔ. Η διαφορά στάθμης έχει πολύ μικρότερο εύρος από το υδραυλικό ύψος και στις περισσότερες περιπτώσεις η απόλυτη τιμή δεν ξεπερνά το μισό μέτρο. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συγκρίνονται με τα πραγματικά δεδομένα στην Εικόνα 43 και την Εικόνα 45 για τα δύο πηγάδια αντίστοιχα.



Εικόνα 43. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.

Όπως φαίνεται η γενική τάση των δεδομένων περιγράφεται αρκετά καλά από το νευρωνικό αν και υπάρχουν κάποιες επίμονες υπερεκτιμήσεις και υποεκτιμήσεις. Η υψηλή κορυφή γύρω από το χρονικό βήμα 265 στην Εικόνα 43 και την Εικόνα 45 που δεν μπορεί να προσομοιωθεί από το ΤΝΔ, πιθανώς σχετίζεται με ένα μη καταγεγραμμένο συμβάν βροχόπτωσης. Ένα κενό υπάρχει στα διαθέσιμα δεδομένα λίγες μέρες πριν το περιστατικό που θα μπορούσε να εξηγήσει αυτή την παρατήρηση. Οι απότομες πτώσεις που μπορούν να παρατηρηθούν ειδικά στο πρώτο πηγάδι και ακολουθούνται από απότομες ανόδους (όπως στα σημεία 147-148, 151-152 και 157-158) δεν μπορούν να περιγραφούν από το ΤΝΔ. Αυτές σχετίζονται με το γεγονός ότι το πρώτο πηγάδι είναι πηγάδι άντλησης και αυτές οι απότομες διακυμάνσεις συνδέονται με την έναρξη και τον τερματισμό της άντλησης.



Εικόνα 44. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών μεταβολής στάθμης ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.

Το δεύτερο πηγάδι δεν είναι το ίδιο πηγάδι άντλησης αλλά βρίσκεται κοντά σε πηγάδια άντλησης. Το ΤΝΔ αδυνατεί να προσομοιώσει τόσο τοπικά όσο και μεταβατικά φαινόμενα που λαμβάνουν χώρα για διαστήματα αρκετά μικρότερα από το χρονικό βήμα που χρησιμοποιήθηκε κατά την εκπαίδευση του ΤΝΔ (μία ημέρα στη συγκεκριμένη περίπτωση – βάσει των διαθέσιμων δεδομένων). Παρά όμως όλες αυτές τις ασυμφωνίες όταν τα αποτελέσματα της διαφοράς στάθμης μετατραπούν σε υδραυλικό ύψος με την πρόσθεση του υδραυλικού ύψους της προηγούμενης ημέρας (Εικόνα 47 και Εικόνα 48) είναι προφανής η σημαντική βελτίωση που επιτυγχάνεται σε σχέση με την προηγούμενη προσπάθεια προσομοίωσης (Εικόνα 39 και Εικόνα 41).

Οι προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής στάθμης (Εικόνα 44 και Εικόνα 46) εμφανίζουν σαφώς χειρότερη συμπεριφορά από ότι οι αντίστοιχες τιμές υδραυλικού ύψους (Εικόνα 40 και Εικόνα 42). Αυτό οφείλεται στην αυξημένη δυσκολία της προσέγγισης και την ιδιαίτερα μεγάλη επίδραση που έχουν οι απότομες μεταβολές της στάθμης, τις οποίες είναι αδύνατο να περιγράψει το μοντέλο. Ειδικά στο πρώτο πηγάδι όπου οι μεταβολές αυτές είναι πιο εμφανείς, το μοντέλο τείνει να υπερεκτιμά τις πολύ χαμηλές τιμές και να υποεκτιμά τις πολύ υψηλές. Στο δεύτερο πηγάδι τα αποτελέσματα είναι αρκετά καλύτερα και η καλύτερη ευθεία βρίσκεται πιο κοντά στη διχοτόμο, ενώ είναι εμφανές ότι τα σημεία που δεν περιγράφονται, όπως εκείνα της κορυφής γύρω από το



σημείο δεδομένων 265, επηρεάζουν και οι δύο απότομες πτώσεις στα σημεία 97 και 135. Τα υπόλοιπα σημεία εμφανίζονται πολύ κοντά στην ευθεία y = x.

Εικόνα 45. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 46. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών μεταβολής στάθμης ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης με τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 47. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.



Εικόνα 48. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τη μέθοδο των συντελεστών συσχέτισης.

Ιωάννης Χ. Τριχάκης

Με δεδομένο ότι και οι δύο προσπάθειες προσομοίωσης είχαν κοινή διαμόρφωση του TNΔ και ίδιες παραμέτρους εισόδου, φαίνεται ότι είναι προτιμότερη η χρήση της διαφοράς στάθμης αντί για το υδραυλικό ύψος ως παραμέτρου εξόδου του TNΔ. Σε αυτό συνηγορεί και το γεγονός ότι η διαφορά στάθμης ανά χρονικό βήμα είναι το πραγματικό αποτέλεσμα της διαφοράς της εισροής και της εκροής του υδροφορέα που περιγράφονται από τις παραμέτρους εισόδου του TNΔ. Ακόμα και χωρίς μια διαδικασία βελτιστοποίησης για τη χρονική υστέρηση και την διαμόρφωση του TNΔ τα αποτελέσματα που προέκυψαν ήταν ιδιαιτέρως καλά, αν αναλογιστεί κανείς την πολυπλοκότητα του προβλήματος και το γεγονός ότι οι χρονοσειρές ήταν ελλιπείς. Μολαταύτα και με σκοπό την εκμετάλλευση μιας πιθανής βελτίωσης της πρόβλεψης και της ικανότητας γενίκευσης του TNΔ, εφαρμόστηκε ένας Διαφορικός Εξελικτικός Αλγόριθμος για τον βέλτιστο προσδιορισμό της διαμόρφωσης του TNΔ καθώς επίσης και της χρονικής υστέρησης της βροχόπτωσης.

Βελτιστοποίηση του ΤΝΔ με χρήση ενός ΔΕ αλγορίθμου

Η εκτέλεση της διαδικασίας βελτιστοποίησης είναι χρονοβόρα και χρειάστηκε περίπου 14 ημέρες για να ολοκληρωθεί σε έναν ηλεκτρονικό υπολογιστή με επεξεργαστή Pentium D 3GHz, χρησιμοποιώντας 100 γενιές και έναν πληθυσμό 35 ατόμων (5 φορές τον αριθμό των παραμέτρων απόφασης του προβλήματος βελτιστοποίησης). Οι τιμές του συντελεστή στάθμισης F και της σταθεράς διασταύρωσης Cr του ΔΕ αλγορίθμου τέθηκαν ίσες με 0,6 και 0,45 αντίστοιχα.

Υδραυλικά ύψη ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ

Για το πρώτο ΤΝΔ, που είχε τα υδραυλικά ύψη ως παραμέτρους εξόδου, οι βέλτιστες τιμές των παραμέτρων απόφασης της βελτιστοποίησης είναι: α) 2, 12 και 11 ημέρες χρονική υστέρηση για τις τρεις μετρήσεις βροχόπτωσης, β) 37 και 39 κόμβοι στα δύο κρυφά επίπεδα, γ) 900 εποχές εκπαίδευσης και δ) μη χρήση του αριθμού ημέρας των χρονοσειρών ως παραμέτρου εισόδου του ΤΝΔ.



Εικόνα 49. Πορεία σύγκλισης της διαδικασίας βελτιστοποίησης με διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο για το πρώτο ΤΝΔ.
Η διαδικασία βελτιστοποίησης κατέληξε σε ένα σφάλμα εκπαίδευσης ίσο με 1,1E-05, και σε ένα σφάλμα αξιολόγησης ίσο με 6,9E-06, που είναι μια βελτίωση περίπου 2 τάξεων μεγέθους σε σύγκριση με τις αντίστοιχες τιμές για το ίδιο δίκτυο χωρίς βελτιστοποίηση. Το RMSE βελτιώθηκε κατά περίπου μία τάξη μεγέθους στα 0,093 m για την περίοδο εκπαίδευσης και αξιολόγησης και 0,206 m για την περίοδο ελέγχου.

Ένα γράφημα που περιέχει την πορεία σύγκλισης του αντίστοιχου ΔΕ αλγορίθμου παρουσιάζεται στην Εικόνα 49. Τα αποτελέσματα του βελτιστοποιημένου ΤΝΔ για τα δύο πηγάδια φαίνονται στην Εικόνα 50 και στην Εικόνα 52 αντίστοιχα. Σε σύγκριση με τα αποτελέσματα του δικτύου πριν τη βελτιστοποίηση (Εικόνα 39 και Εικόνα 41), μια σημαντική βελτίωση είναι φανερή και για τα δύο πηγάδια.





Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως, το πηγάδι 1 χρησιμοποιείται και για άντληση, γεγονός που συντελεί στην εμφάνιση απότομων πτώσεων στο υδραυλικό ύψος κατά τη διάρκεια της άντλησης' οι πτώσεις αυτές δεν προσομοιώνονται από το ΤΝΔ επειδή είναι τοπικές και μεταβατικές επιδράσεις. Τέτοιες πτώσεις δεν εμφανίζονται σε μεγάλο βαθμό στο πηγάδι 2, καθώς εκείνο δε χρησιμοποιείται για άντληση (αν και ένα πηγάδι άντλησης βρίσκεται πολύ κοντά).

Κατά τη διάρκεια της περιόδου ελέγχου για το πηγάδι 1 το ΤΝΔ υποεκτιμά την υψηλότερη τιμή των 24,01 μέτρων την ημέρα 349 κατά περίπου 0,35 μέτρα. Για το δεύτερο πηγάδι η υποεκτίμηση της υψηλότερης τιμής της περιόδου ελέγχου (26,03 μέτρα) είναι περίπου 0,33 μέτρα. Αυτές οι τιμές δεν είναι καθόλου αμελητέες όταν λαμβάνονται αποφάσεις διαχείρισης υδατικών πόρων.



Εικόνα 51. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Εικόνα 52. Αποτελέσματα προσομοίωσης του υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Εικόνα 53. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από τον διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.

Η βελτίωση των αποτελεσμάτων σε αυτήν την προσπάθεια είναι μεγάλη και οι προσομοιωμένες βρίσκονται πολύ κοντά στις παρατηρημένες τιμές υδραυλικού ύψους, όπως είναι εμφανές στην Εικόνα 51 και στην Εικόνα 53. Τα σημεία κατά το μεγαλύτερο πλήθος τους ταυτίζονται με την ευθεία *y* = *x*. Τα αποτελέσματα για το δεύτερο πηγάδι υστερούν κατά ελάχιστο, λόγω κυρίως της αδυναμίας περιγραφής της υψηλής κορυφής του συνόλου δεδομένων ελέγχου. Η ικανότητα να υπερβαίνει το δίκτυο κατά πολύ τις τιμές με τις οποίες έχει εκπαιδευτεί είναι εξαιρετικά σημαντική, ενώ γενικότερα τα αποτελέσματα για το σύνολο δεδομένων ελέγχου καταδεικνύουν ότι το δίκτυο έχει ικανότητα προσομοίωσης της απόκρισης του υδροφορέα χωρίς να προκύπτουν υπόνοιες για πιθανότητα υπερεκπαίδευσης.

Διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παράμετροι εξόδου του ΤΝΔ

Για το δεύτερο ΤΝΔ, που είχε τις διαφορές στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παραμέτρους εξόδου, οι βέλτιστες τιμές των παραμέτρων απόφασης της βελτιστοποίησης είναι: α) 7, 4 και 3 ημέρες χρονική υστέρηση για τις τρεις μετρήσεις βροχόπτωσης, β) 43 και 41 κόμβοι στα δύο κρυφά επίπεδα, γ) 1000 εποχές εκπαίδευσης και δ) χρήση του αριθμού ημέρας των χρονοσειρών ως παραμέτρου εισόδου του ΤΝΔ.

Η διαδικασία βελτιστοποίησης κατέληξε σε ένα σφάλμα εκπαίδευσης ίσο με 6,9Ε-04, και σε ένα σφάλμα αξιολόγησης ίσο με 3,0Ε-04, που αποτελούν μια βελτίωση περίπου 9% και 28% αντίστοιχα, σε σύγκριση με τις τιμές του ίδιου δικτύου χωρίς βελτιστοποίηση. Η βελτίωση του RMSE ήταν ακόμα μικρότερη 2,8% για την περίοδο εκπαίδευσης και αξιολόγησης και 2,2% για την περίοδο ελέγχου. Ένα γράφημα που περιέχει την πορεία σύγκλισης του αντίστοιχου ΔΕ αλγορίθμου, παρουσιάζεται στην Εικόνα 54. Η μείωση της



τιμής της αντικειμενικής συνάρτησης είναι μικρότερη σε σχέση με την προηγούμενη διαδικασία βελτιστοποίησης εξ αιτίας της μικρότερης αρχικής τιμής της συνάρτησης.

Εικόνα 54. Πορεία σύγκλισης της διαδικασίας βελτιστοποίησης με διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο για το δεύτερο ΤΝΔ.

Η μικρή βελτίωση σε σχέση με το μη βελτιστοποιημένο ΤΝΔ ήταν αναμενόμενη, καθώς το τελευταίο είχε ήδη δώσει πολύ καλά αποτελέσματα. Τα αποτελέσματα του βελτιστοποιημένου ΤΝΔ για τη διαφορά στάθμης στα δύο πηγάδια φαίνονται στην Εικόνα 55 και στην Εικόνα 57 αντίστοιχα.



Εικόνα 55. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Στην Εικόνα 56 και στην Εικόνα 58 απεικονίζονται οι προσομοιωμένες τιμές διαφοράς στάθμης ως προς τις παρατηρημένες.

Εικόνα 56. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το πρώτο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Εικόνα 57. Αποτελέσματα προσομοίωσης της μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Εικόνα 58. Διάγραμμα προσομοιωμένων τιμών ως προς τις παρατηρημένες για το δεύτερο πηγάδι και προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Στην Εικόνα 59 και στην Εικόνα 60 απεικονίζονται τα αποτελέσματα μετά τη μετατροπή τους σε υδραυλικά ύψη με την προσθήκη της στάθμης της προηγούμενης ημέρας.

Εικόνα 59. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους του πρώτου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.



Εικόνα 60. Αποτελέσματα μετατροπής της προσομοιωμένης μεταβολής υδραυλικού ύψους του δευτέρου πηγαδιού σε υδραυλικό ύψος με χρήση της χρονικής υστέρησης που προέκυψε από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο.

Υπάρχει βελτίωση στα αποτελέσματα, όμως οι προσομοιωμένες τιμές ειδικά για το πρώτο πηγάδι συνεχίζουν να διαφοροποιούνται από τις παρατηρημένες σε αρκετά προβληματικά σημεία. Για το μεγαλύτερο πλήθος των δεδομένων και ειδικά για το δεύτερο πηγάδι, όπου τα σημεία με απότομες ανόδους και πτώσεις είναι πολύ λιγότερα, τα αποτελέσματα του βελτιστοποιημένου ΤΝΔ που βασίζεται στις διαφορές στάθμης είναι εξαιρετικά κοντά στα παρατηρημένα δεδομένα και είναι σαφώς καλύτερα από τα αποτελέσματα του ΤΝΔ που χρησιμοποιεί τα υδραυλικά ύψη ως παραμέτρους εξόδου. Η διαφορά όμως είναι αρκετά μικρότερη στην περίπτωση των βελτιστοποιημένων από τον ΔΕ δίκτυα σε σχέση με τα μη βελτιστοποιημένα.

Ο Πίνακας 5 συνοψίζει τα στοιχεία για το σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης κάθε TNΔ, όπως επίσης και το μέσο τετραγωνικό σφάλμα (root mean square error – RMSE) για τις περιόδους βαθμονόμησης (εκπαίδευσης και αξιολόγησης) και ελέγχου. Τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης είναι κανονικοποιημένα, δηλαδή έχουν προκύψει από παρατηρημένες και προσομοιωμένες τιμές, οι οποίες είχαν μετατραπεί με κατάλληλο τρόπο ώστε να βρίσκονται στο σύνολό τους εντός του διαστήματος (0,1). Τα σφάλματα με τον τρόπο αυτόν είναι συγκρίσιμα ως προς το πόσο καλά έχει εκπαιδευτεί το νευρωνικό, και ποιο είναι το σφάλμα του σε κανονικοποιημένη κλίμακα. Αντίθετα το μέσο τετραγωνικό σφάλμα δείχνει σε πραγματικούς αριθμούς το πόσο κοντά βρίσκονται οι προσομοιωμένες τιμές στις παρατηρημένες. Έχει μονάδες ίδιες με εκείνες των παραμέτρων εξόδου και παρέχει πληροφόρηση για την αξία του μοντέλου πολύ χρήσιμη για ένα μηχανικό. Διότι ανεξάρτητα από το σφάλμα σαν ποσοστό σε πολλές εφαρμογές έχει μεγάλη σημασία ο καθαρός αριθμός του μέτρου του σφάλματος.

ΤΝΔ	Σφάλμα εκπαίδευσης	Σφάλμα αξιολόγησης	RMSE εκπαίδευση & αξιολόγηση [m]	RMSE έλεγχος [m]
Υδραυλικό Ύψος – χωρίς βελτιστοποίηση	$6,4 \cdot 10^{-4}$	$9,2 \cdot 10^{-4}$	0,832	1,467
Διαφορά Στάθμης – χωρίς βελτιστοποίηση	$7,6 \cdot 10^{-4}$	$4,2 \cdot 10^{-4}$	0,094	0,142
Υδραυλικό Ύψος – με βελτιστοποίηση	$1,1 \cdot 10^{-5}$	$6,9 \cdot 10^{-6}$	0,093	0,206
Διαφορά Στάθμης – με βελτιστοποίηση	$6,9 \cdot 10^{-4}$	$3,0 \cdot 10^{-4}$	0,091	0,139

Πίνακας 5. Σφάλμα εκπαίδευσης, αξιολόγησης (κανονικοποιημένα), RMSE της περιόδου εκπαίδευσης και αξιολόγησης και RMSE της περιόδου ελέγχου κάθε TNΔ με και χωρίς βελτιστοποίηση.

Από τον πίνακα φαίνεται ότι καλύτερη εκπαίδευση επιτυγχάνεται με το υδραυλικό ύψος ως παράμετρο εξόδου. Αυτό είναι λογικό καθώς το υδραυλικό ύψος είναι μία με δύο τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο από τη διαφορά στάθμης. Έτσι είναι πολύ πιο εύκολο να μειωθεί το κανονικοποιημένο σφάλμα. Αντίθετα στο μέσο τετραγωνικό σφάλμα τα αποτελέσματα με τη διαφορά στάθμης ως παράμετρο εξόδου είναι μία τάξη μεγέθους καλύτερα στην περίπτωση που δεν υπάρχει βελτιστοποίηση της δομής του δικτύου, ενώ το βελτιστοποιημένο δίκτυο μειώνει, αλλά σε μικρότερο βαθμό, τα σφάλματα σε όλα τα σύνολα δεδομένων.

Χρησιμοποιώντας τα δύο ΤΝΔ για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη

Για την αξιολόγηση της ικανότητας του βελτιστοποιημένου προηγουμένως ΤΝΔ να προβλέψει τα υδραυλικά ύψη για περισσότερες της μίας μέρας (μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη, στη συγκεκριμένη περίπτωση 30 με 90 ημέρες μετά), το προσομοιωμένο υδραυλικό ύψος της προηγούμενης ημέρας αντί του παρατηρημένου χρησιμοποιήθηκε ως είσοδος στα ΤΝΔ (οι υπόλοιπες παράμετροι ήταν οι παρατηρημένες). Λόγω όμως των κενών στις διαθέσιμες χρονοσειρές, η διαδικασία υπολογισμού πρέπει να επανεκκινήσει μετά από κάθε κενό χρησιμοποιώντας παρατηρημένες τιμές υδραυλικού ύψους της προηγούμενης ημέρας, καθώς δεν υπάρχουν διαθέσιμες προσομοιωμένες τιμές. Το γεγονός αυτό δεν επέτρεψε να ελεγχθεί το ΤΝΔ για περισσότερες των 45 ημερών.

Για το πρώτο ΤΝΔ, που ήταν βελτιστοποιημένο από ΔΕ, τα δεδομένα ελέγχου για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη είναι τα τμήματα εκείνα του τμήματος δεδομένων ελέγχου που δεν περιέχουν κενά, δηλαδή από αριθμό ημέρας 120 (363) έως 161 (404) και από 164 (406) έως 180 (422). Οι αριθμοί στις παρενθέσεις αντιστοιχούν στη θέση που έχουν στη χρονοσειρά, όπως φαίνονται στον οριζόντιο άξονα στην Εικόνα 50 και στην Εικόνα 52.

Το πρώτο ΤΝΔ (που έχει υδραυλικά ύψη ως εξόδους) χρησιμοποιήθηκε για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη και τα σχετικά αποτελέσματα για τις δύο περιόδους και τα δύο πηγάδια παρουσιάζονται στην Εικόνα 61 και στην Εικόνα 62. Το συσσωρευμένο σφάλμα στο τέλος της πρώτης περιόδου (40 ημέρες) ήταν 0,9 m και 1,16 m αντίστοιχα για τα δύο πηγάδια. Το συσσωρευμένο σφάλμα στο τέλος της δεύτερης περιόδου ελέγχου (15 ημέρες) ήταν 0,56 m και 0,72 m αντίστοιχα. Στον τομέα της διαχείρισης υπογείων υδάτων τέτοια σφάλματα δεν είναι αμελητέα και για πρακτικές εφαρμογές χρειάζεται καλύτερη προσέγγιση.



Εικόνα 61. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη του υδραυλικού ύψους χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του πρώτου ΤΝΔ (πηγάδι 1 – 1η και 2η χρονική περίοδος).



Εικόνα 62. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη του υδραυλικού ύψους χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του πρώτου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η χρονική περίοδος).

Για το δεύτερο ΤΝΔ (βελτιστοποιημένο από ΔΕ), που έχει τις διαφορές στάθμης ως παραμέτρους εξόδου, τα δεδομένα ελέγχου για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη ήταν από αριθμό ημέρας 117 (335) έως 162 (401) και από 165 (403) έως 181 (419). Οι αριθμοί στις παρενθέσεις αντιστοιχούν στη θέση που έχουν μέσα στη χρονοσειρά, όπως φαίνονται στον οριζόντιο άξονα στην Εικόνα 55 και στην Εικόνα 57. Η Εικόνα 63 και η Εικόνα 65 περιέχουν τις συγκρίσεις των διαφορών στάθμης ανά χρονικό βήμα για τα πηγάδια 1 και 2 για την πρώτη περίοδο ελέγχου των 45 ημερών και τη δεύτερη περίοδο ελέγχου των 16 ημερών. Με αυτά τα αποτελέσματα δημιουργήθηκαν και τα γραφήματα τα οποία εμφανίζονται στην Εικόνα 64 και στην Εικόνα 66 που δείχνουν τα σχετικά υδραυλικά ύψη για κάθε πηγάδι.



Εικόνα 63. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 1 – 1η και 2η χρονική περίοδος).



Εικόνα 64. Μετατροπή σε υδραυλικό ύψος της μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 1 – 1η και 2η χρονική περίοδος).

Τα σφάλματα στο τέλος της πρώτης περιόδου (45 ημέρες) είναι σαφώς χαμηλότερα από εκείνα που υπολογίστηκαν για το πρώτο ΤΝΔ, δηλαδή -0,01 m και 0,03 m για το πρώτο και

το δεύτερο πηγάδι αντίστοιχα. Τα σφάλματα στο τέλος της δεύτερης περιόδου ελέγχου (16 ημέρες) είναι -0,001 m και 0,01 m αντίστοιχα.



Εικόνα 65. Μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η χρονική περίοδος).



Εικόνα 66. Μετατροπή σε υδραυλικό ύψος της μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης της μεταβολής της στάθμης χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα του δευτέρου ΤΝΔ (πηγάδι 2 – 1η και 2η χρονική περίοδος).

Τα αποτελέσματα της μεσοπρόθεσμης πρόβλεψης παρέχουν επιπλέον αποδείξεις για την ανωτερότητα της επιλογής των διαφορών στάθμης ως παραμέτρων εξόδου του ΤΝΔ. Εξάλλου καταδείχτηκε η ικανότητα του δεύτερου ΤΝΔ να παράσχει ακριβή αποτελέσματα για μεσοπρόθεσμες προβλέψεις. Αυτό προκύπτει από το γεγονός ότι αντίθετα με την περίπτωση όπου τα υδραυλικά ύψη είναι οι παράμετροι εξόδου και εμφανίζεται συσσώρευση σφάλματος, το νευρωνικό δίκτυο με τις διαφορές στάθμης δεν εμφανίζει συσσώρευση του σφάλματος και παρέχει το ίδιο ακριβή αποτελέσματα ακόμα και για διαστήματα της τάξης των σαράντα ημερών.

Μέθοδος bootstrap

Πριν από την εφαρμογή της μεθόδου bootstrap εξετάστηκαν και διαφορετικές μέθοδοι υπολογισμού επιπέδων εμπιστοσύνης, οι οποίες όμως δεν έδωσαν ικανοποιητικά αποτελέσματα. Πιο χαρακτηριστική από αυτές είναι μία προσεγγιστική μέθοδος για υπολογισμό των διαστημάτων εμπιστοσύνης ενός απλού νευρωνικού δικτύου, όπως αυτή αναπτύχθηκε από τους Rivals και Personnaz το 2000 (Rivals & Personnaz, 2000). Στη δημοσίευση αυτή το νευρωνικό δίκτυο είχε μόνο ένα κρυφό επίπεδο και όλοι οι κόμβοι είχαν γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης. Το πρόβλημα που παρουσιάστηκε κατά την εφαρμογή της συγκεκριμένης μεθόδου σε ένα πολύπλοκο νευρωνικό δίκτυο με μη γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης πέρα από τη δυσκολία κατασκευής του πίνακα με τις δεύτερες παραγώγους ήταν ότι ο πίνακας αυτός κατέληγε να είναι εξαιρετικά κακής κατάστασης και ήταν αδύνατη η παραγωγή του αντιστρόφου του. Ως εκ τούτου η μέθοδος εγκαταλείφθηκε και δεν προτείνεται σε περιπτώσεις όπου χρησιμοποιούνται δίκτυα με δύο κρυφά επίπεδα και μη γραμμικές συναρτήσεις ενεργοποίησης. Σε περίπτωση που το νευρωνικό δίκτυο έχει ένα κρυφό επίπεδο και γραμμική συνάρτηση ενεργοποίησης υπάρχει πιθανότητα η συγκεκριμένη μέθοδος να μπορέσει να δώσει τα επιθυμητά αποτελέσματα με μικρές απαιτήσεις σε υπολογιστικό φόρτο και χρόνο και θα άξιζε να επανεξεταστεί.

Η μέθοδος bootstrap εφαρμόστηκε σε δύο πηγάδια ενός αντλιοστασίου στην Αττική. Διαθέσιμα δεδομένα υδραυλικού ύψους, αντλήσεων και μετεωρολογικών παραμέτρων χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση ενός ΤΝΔ για προσομοίωση της μεταβολής υδραυλικού ύψους. Η επιλογή της μεταβολής υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου έχει αποδειχθεί αρκετά δυσκολότερη, παρόλα αυτά έχει πολύ περισσότερο φυσικό νόημα. Τα γνωστά θέματα με την προηγούμενη εφαρμογή είναι: α) ότι το πρώτο πηγάδι παρατήρησης χρησιμοποιείται και για άντληση και β) ότι ένα συμβάν βροχόπτωσης δεν έχει κατά πάσα πιθανότητα καταγραφεί. Το πρώτο έχει αναγνωριστεί ως ο λόγος για τον οποίο το μοντέλο δεν μπορεί να προσομοιώσει τις απότομες πτώσεις και ανόδους ενώ το δεύτερο συντελεί στην απόλυτη αδυναμία του μοντέλου να προσομοιώσει μια άνοδο γύρω στο σημείο δεδομένων 260.

Η μέθοδος bootstrap απαίτησε πολλές διαδοχικές διαδικασίες εκπαίδευσης του ΤΝΔ γεγονός που ήταν χρονοβόρο. Μία πλήρης εκτέλεση του αλγορίθμου χρειάστηκε 44 ώρες σε έναν υπολογιστή με επεξεργαστή 2.1 GHz Intel[®] Core[™] 2 Duo με 3 GB μνήμης RAM. Η αμερόληπτη επιταχυμένη μέθοδος χρειάστηκε επιπλέον τον υπολογισμό της επιτάχυνσης, ο οποίος συνεπώς απαίτησε περισσότερες διαδικασίες εκπαίδευσης του ΤΝΔ. Η όλη διαδικασία αύξησε τον υπολογιστικό χρόνο κατά περίπου 12%. Ευτυχώς η μεθοδολογία μπορεί εύκολα να προγραμματιστεί με παράλληλο τρόπο ούτως ώστε να μειωθεί σημαντικά ο απαιτούμενος χρόνος.

Ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης για ονομαστική κάλυψη 95%

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, το πρώτο πηγάδι της παρούσας εργασίας είναι πηγάδι άντλησης και βρίσκεται κοντά και σε άλλα πηγάδια άντλησης. Αυτό δημιουργεί απότομες πτώσεις και ανόδους στη χρονοσειρά μεταβολής υδραυλικού ύψους και αν και το νευρωνικό είναι σε θέση να προσομοιώσει την θέση των πτώσεων αδυνατεί να αναπαράγει την τιμή.

Στην Εικόνα 67 και την Εικόνα 68 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των ποσοστιαίων διαστημάτων εμπιστοσύνης μαζί με τις παρατηρημένες αλλά και τις προσομοιωμένες τιμές από το ΤΝΔ. Τα σημεία δεδομένων 1 έως 335 χρησιμοποιήθηκαν για βαθμονόμηση και τα υπόλοιπα κρατήθηκαν για έλεγχο. Εξ αιτίας της τυχαίας επιλογής σημείων για εκπαίδευση και αξιολόγηση εντός του αλγορίθμου του ΤΝΔ είναι δύσκολο τα δύο αυτά σύνολα να παρουσιαστούν ξεχωριστά.

Η διαφορά της μεθόδου bootstrap με τα τυπικά διαστήματα εμπιστοσύνης που παράγονται από ένα τυπικό σφάλμα με την υπόθεση μιας κανονικής κατανομής είναι ότι τα πρώτα έχουν μεταβλητό εύρος ανάλογα με τις τιμές των δεδομένων εισόδου. Όταν πρόκειται για απότομες πτώσεις και ανόδους τα διαστήματα εμπιστοσύνης αποδεικνύεται ότι δεν μπορούν να τις περιγράψουν. Δεδομένου του ότι το TNΔ (μοντέλο) είναι πρακτικά αδύνατον να προσομοιώσει αυτά τα πρότυπα, είναι βέβαιο ότι οι αυτοδύναμες τιμές εξόδου θα είναι αδύνατον να περιέχουν τις παρατηρημένες. Εκτός από τα σημεία που μπορούν να θεωρηθούν ακραία, τα διαστήματα εμπιστοσύνης περικλείουν την τάση των παρατηρημένων χρονοσειρών αρκετά ικανοποιητικά. Για την ποσοτικοποίηση της επιτυχίας υπολογίζονται σε επόμενη παράγραφο οι τιμές την πραγματικής κάλυψης και συγκρίνονται με τις ονομαστικές τιμές.



Εικόνα 67. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης 95% για το πρώτο πηγάδι.

Ακόμα και στο σύνολο δεδομένων ελέγχου (σημεία δεδομένων 336-419), τα διαστήματα περικλείουν τις παρατηρημένες τιμές εκτός από τις επτά ακραίες. Μπορεί να υπάρχει ένα θέμα με τα διαστήματα τα οποία έχουν αρκετό εύρος για σημεία με παρατηρημένη τιμή κοντά στο μηδέν. Αυτό είναι αποτέλεσμα του ότι διαφορετικά αυτοδύναμα σύνολα δεδομένων εισόδου μπορεί να δώσουν σημαντικά διαφορετικές τιμές εξόδου για τις συγκεκριμένες τιμές εισόδου. Όταν κάποιες τιμές εισόδου είναι μηδενικές η εκπαίδευση θα αυξήσει τα βάρη των μη μηδενικών εισόδων για εξισορρόπηση. Αυτό οδηγεί σε αυξημένη διακύμανση της εξόδου εξ ου και το μεγαλύτερο εύρος των διαστημάτων εμπιστοσύνης.



Εικόνα 68. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και ποσοστιαία διαστήματα εμπιστοσύνης 95% για το δεύτερο πηγάδι.

Η εφαρμογή της ποσοστιαίας μεθόδου στο δεύτερο πηγάδι απέδωσε αρκετά στενότερα διαστήματα από εκείνα του πρώτου πηγαδιού. Αυτό είναι φυσικό επειδή δε λαμβάνει χώρα άντληση μέσα ή παραπλεύρως στο δεύτερο πηγάδι. Έτσι οι προσομοιωμένες τιμές ήταν εξαρχής πολύ κοντά στις παρατηρημένες. Η πιο προβληματική περιοχή στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι η άνοδος γύρω από το σημείο δεδομένων 260 όπου η προφανής έλλειψη δεδομένων εισόδου που επηρεάζουν το μοντέλο δεν μπορεί να ξεπεραστεί με την επαναλαμβανόμενη δειγματοληψία της μεθόδου bootstrap. Η επίδραση της κορυφής αυτής μπορεί να θεωρηθεί ο κύριος λόγος για την ασυμφωνία μεταξύ ονομαστικής και πραγματικής κάλυψης τόσο για το σύνολο δεδομένων εκπαίδευσης όσο και για το σύνολο δεδομένων αξιολόγησης, καθώς η κορυφή έχει κατανεμηθεί με τυχαίο τρόπο μεταξύ των δύο. Αντίθετα το σύνολο δεδομένων ελέγχου (336-419) δε φαίνεται να περιλαμβάνει προβληματικά σημεία και οι προσομοιωμένες τιμές ήταν ήδη σε υψηλή συμφωνία με τις παρατηρημένες.

Αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης για ονομαστική κάλυψη 95%

Τα αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης ήταν κοντά στα αντίστοιχα ποσοστιαία και πολύ μικρές διαφορές μπορούν να βρεθούν. Τα αποτελέσματα για το πρώτο πηγάδι ακολουθούν τις προσομοιωμένες τιμές λίγο καλύτερα και τα διαστήματα είναι μικρότερα από τα ποσοστιαία (Εικόνα 69). Αυτό είναι ένα αρκετά επιθυμητό χαρακτηριστικό αρκεί να μη δημιουργεί προβλήματα στην πραγματική κάλυψη.



Εικόνα 69. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης 95% για το πρώτο πηγάδι.



Εικόνα 70. Παρατηρημένη, προσομοιωμένη τιμή και αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης 95% για το δεύτερο πηγάδι.

Δυστυχώς ούτε τα αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης ήταν ικανά να περιγράψουν τις απότομες πτώσεις και ανόδους, καθώς αυτό είναι ένα πρόβλημα που δεν μπορεί να αντιμετωπίσει η τεχνική επαναλαμβανόμενης δειγματοληψίας. Μόνο ένα μοντέλο που θα μπορούσε κάτω από συγκεκριμένες περιστάσεις να προσομοιώσει επακριβώς κάθε τέτοιο πρότυπο, θα ήταν δυνατόν να λύσει το συγκεκριμένο πρόβλημα. Το δεύτερο πηγάδι (Εικόνα 70), όντας μια πολύ πιο απλή περίπτωση, είχε παρόμοια αποτελέσματα με την ποσοστιαία μέθοδο. Στα περισσότερα σημεία δεδομένων δεν υπάρχουν σημαντικές διαφορές ούτε στο εύρος των διαστημάτων ούτε στις οριακές τιμές. Οι πολύ πιο συνεπείς με τις παρατηρημένες προσομοιωμένες τιμές οδήγησαν σε αρκετά στενότερα διαστήματα σε σχέση με εκείνα του πρώτου πηγαδιού. Ωστόσο η προβληματική κορυφή γύρω από το σημείο δεδομένων 260 παραμένει όπως αναμενόταν εκτός των διαστημάτων εμπιστοσύνης.

Υπήρξαν σκέψεις για πιθανή βελτίωση των αποτελεσμάτων μετά από αφαίρεση της προβληματικής κορυφής και των απότομων πτώσεων και ανόδων του πρώτου πηγαδιού από το σύνολο των παρατηρημένων δεδομένων. Ο λόγος που τελικά δεν πραγματοποιήθηκε κάτι τέτοιο ήταν επειδή απαιτούσε μια υποκειμενική απόφαση του τι μπορεί να θεωρηθεί ακραία ή προβληματική τιμή. Αυτό αντιτίθετο ευθέως στην πλήρως αυτοματοποιημένη προσέγγιση που υπάρχει στο υπόλοιπο της παρούσας εργασίας. Μπορεί να ισχύει ότι τα συγκεκριμένα πρότυπα απαιτούν επιπλέον μη διαθέσιμα δεδομένα για να περιγραφούν και σε μερικές περιπτώσεις ο ερευνητής δεν μπορεί να γνωρίζει το ακριβές είδος των συγκεκριμένων δεδομένων. Εν τούτοις, η επέμβαση στο παρατηρημένο σύνολο δεδομένων εκτός από πιθανή αφαίρεση σημείων δεδομένων που μπορούν να προσομοιωθούν, θα μείωνε το μέγεθος του συνόλου βαθμονόμησης και θα αφαιρούσε ακραίες τιμές εισόδου και εξόδου από το σύνολο εκπαίδευσης. Αυτό μπορεί συνεκδοχικά να ελαττώσει την ικανότητα παρεμβολής και εξαγωγής του ΤΝΔ.

Πραγματική κάλυψη για διαφορετικά επίπεδα βεβαιότητας

Την διαφορετική κάλυψη για κάθε πηγάδι και καθένα από τα τρία υποσύνολα δεδομένων (εκπαίδευσης, αξιολόγησης και ελέγχου) για τα ποσοστιαία διαστήματα παρουσιάζει ο Πίνακας 6 (και η Εικόνα 71) και για τα αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα εμπιστοσύνης ο Πίνακας 7 (και η Εικόνα 72). Ο αριθμός των σημείων δεδομένων σε κάθε υποσύνολο δεδομένων είναι αντίστοιχα 244, 91 και 84. Αυτό δείχνει ότι μια διαφορά ακόμα και της τάξης του 5% (που θα μπορούσε να θεωρηθεί σημαντική) μεταξύ θεωρητικής και πραγματικής κάλυψης στο υποσύνολο ελέγχου θα μπορούσε να οφείλεται σε 4 μόνο σημεία, δηλαδή θα μπορούσε να είναι ένα τυχαίο γεγονός.

Θεωρητική κάλυψη	Εκπαίδευση Πηγάδι 1	Αξιολόγηση Πηγάδι 1	Έλεγχος Πηγάδι 1	Εκπαίδευση Πηγάδι 2	Αξιολόγηση Πηγάδι 2	Έλεγχος Πηγάδι 2
10%	7.8%	7.7%	25.0%	9.4%	6.6%	9.5%
20%	17.2%	14.3%	35.7%	13.1%	12.1%	17.9%
30%	25.8%	22.0%	48.8%	20.9%	14.3%	28.6%
40%	34.4%	30.8%	60.7%	25.8%	16.5%	40.5%
50%	39.3%	37.4%	69.0%	32.0%	20.9%	58.3%
60%	50.0%	42.9%	72.6%	42.2%	34.1%	71.4%
70%	57.0%	51.6%	78.6%	48.8%	40.7%	77.4%
80%	63.9%	59.3%	84.5%	59.8%	51.6%	88.1%
90%	74.6%	69.2%	89.3%	73.4%	64.8%	92.9%
95%	77.9%	80.2%	89.3%	83.2%	75.8%	94.0%

Πίνακας 6. Θεωρητική και πραγματική κάλυψη των ποσοστιαίων διαστημάτων εμπιστοσύνης.



Ποσοστιαία Μέθοδος

Εικόνα 71. Ποσοστά πραγματικής κάλυψης των ποσοστιαίων διαστημάτων εμπιστοσύνης ως προς τα ονομαστικά.

Η πραγματική κάλυψη της ποσοστιαίας μεθόδου για κάθε υποσύνολο δεν ήταν ίση με τη θεωρητική αλλά την ακολουθούσε με σχετική συνέπεια, ακόμα και εάν σε μερικές περιπτώσεις υπερεκτιμά, ενώ σε άλλες υποεκτιμά, τα διαστήματα εμπιστοσύνης. Και τα δύο υποσύνολα βαθμονόμησης του πρώτου πηγαδιού παρουσιάζουν πραγματική κάλυψη πάντα χαμηλότερη από την αντίστοιχη ονομαστική. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στη διακύμανση των παρατηρημένων τιμών ακόμα και σε μικρή κλίμακα ενώ η αύξηση της διαφοράς μεταξύ ονομαστικής και πραγματικής κάλυψης, το έλλειμμα κάλυψης, μπορεί να θεωρηθεί αποτέλεσμα των απότομων πτώσεων και ανόδων.

Το υποσύνολο ελέγχου του πρώτου πηγαδιού είχε μόνο λίγες απότομες πτώσεις και ανόδους (για την ακρίβεια επτά) και αυτές είναι πιθανότατα ο λόγος που δεν μπορεί να φτάσει μια πραγματική κάλυψη 95%, που θα απαιτούσε μόνο τέσσερα σημεία να μείνουν εκτός των διαστημάτων εμπιστοσύνης. Η πραγματική κάλυψη του συγκεκριμένου υποσυνόλου είναι για το μεγαλύτερο μέρος του αρκετά πάνω από την ονομαστική ως αποτέλεσμα της ομαλότερης τάσης του υποσυνόλου και της έλλειψης απότομων διακυμάνσεων. Ωστόσο ο ρυθμός αύξησης της πραγματικής κάλυψης είναι κοντά στον θεωρητικό.

Το δεύτερο πηγάδι είναι αρκετά διαφορετικό. Όπως αναφέρθηκε προηγουμένως υπάρχουν πολύ λιγότερα προβληματικά σημεία, τα οποία στο σύνολό τους εμφανίζονται στα δύο υποσύνολα βαθμονόμησης. Η γενικότερη επιτυχία είναι κοντά σε εκείνη του πρώτου πηγαδιού, με την πραγματική κάλυψη να είναι αρκετά μικρότερη από την ονομαστική, αλλά να ακολουθεί με συνέπεια την αύξηση της δεύτερης. Η σίγουρη έλλειψη δεδομένων βροχόπτωσης για την μεγάλη κορυφή έχει αναγνωριστεί ως η κύρια αιτία του ελλείμματος κάλυψης και δεν μπορεί να αντιμετωπιστεί με άλλα μέσα εκτός από την παροχή των επιπλέον δεδομένων που λείπουν ή τη διαγραφή των προβληματικών σημείων από το σύνολο δεδομένων.

Θεωρητική κάλυψη	Εκπαίδευση Πηγάδι 1	Αξιολόγηση Πηγάδι 1	Έλεγχος Πηγάδι 1	Εκπαίδευση Πηγάδι 2	Αξιολόγηση Πηγάδι 2	Έλεγχος Πηγάδι 2
10%	8.2%	6.6%	10.7%	6.6%	6.6%	17.9%
20%	16.0%	14.3%	27.4%	13.1%	11.0%	28.6%
30%	24.6%	19.8%	36.9%	20.1%	13.2%	38.1%
40%	29.1%	30.8%	54.8%	27.9%	23.1%	47.6%
50%	39.8%	35.2%	67.9%	34.0%	27.5%	61.9%
60%	45.5%	42.9%	73.8%	39.3%	30.8%	66.7%
70%	52.5%	53.8%	81.0%	46.3%	39.6%	76.2%
80%	65.2%	61.5%	84.5%	54.9%	50.5%	84.5%
90%	73.8%	74.7%	88.1%	70.9%	64.8%	91.7%
95%	77.9%	78.0%	89.3%	84.0%	73.6%	96.4%

Πίνακας 7. Θεωρητική και πραγματική	κάλυψη των	αμερόληπτων	διαστημάτων ε	εμπιστοσύνης
-------------------------------------	------------	-------------	---------------	--------------

Το πιο επιτυχημένο υποσύνολο της προσομοίωσης υπό την έννοια ότι παρέχει τη βέλτιστη συμφωνία της πραγματικής με την ονομαστική κάλυψη ήταν το σύνολο δεδομένων ελέγχου του δευτέρου πηγαδιού. Από την αρχή μέχρι το τέλος της διαδικασίας η κάλυψη είναι εξαιρετικά κοντά στη θεωρητική όχι μόνο για χαμηλές τιμές ονομαστικής κάλυψης αλλά και για υψηλές. Αυτά μπορεί να θεωρηθούν τα επιθυμητά αποτελέσματα για μια διαδικασία υπολογισμού διαστημάτων εμπιστοσύνης και είναι εξαιρετικά σημαντικό ότι το μόνο υποσύνολο της προσομοίωσης που δεν περιείχε προβληματικά σημεία δεδομένων απέδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα.



Αμερόληπτη Επιταχυμένη

Εικόνα 72. Ποσοστά πραγματικής κάλυψης των αμερόληπτων επιταχυμένων διαστημάτων εμπιστοσύνης ως προς τα ονομαστικά.

Ελάχιστα διαφορετική από της ποσοστιαίας, η πραγματική κάλυψη της αμερόληπτης επιταχυμένης μεθόδου παραμένει στις περισσότερες περιπτώσεις μακριά από την

ονομαστική Ωστόσο τα διαστήματα είναι στενότερα και αυτό πρέπει να συνυπολογιστεί κατά την επιλογή μίας μεθόδου bootstrap υπολογισμού διαστημάτων εμπιστοσύνης. Και πάλι ο ρυθμός αύξησης της πραγματικής κάλυψης ακολουθεί τον θεωρητικό και για μία ακόμη φορά τα υποσύνολα ελέγχου και για τα δύο πηγάδια τείνουν να έχουν υψηλότερη κάλυψη από την επιθυμητή.

Για την ακρίβεια η πραγματική κάλυψη του πρώτου πηγαδιού ενώ ξεκινά από ένα τέλειο 10,7% για θεωρητική κάλυψη 10% αρχίζει να μεγαλώνει τη διαφορά μέχρι τελικά να μειωθεί και να φτάσει στην οριακή τιμή 89,3% όπως και στην ποσοστιαία μέθοδο. Η πραγματική κάλυψη του δευτέρου πηγαδιού ήταν 4 με 11% υψηλότερη από την θεωρητική μέχρι που συνέκλινε με την ονομαστική κάλυψη στο 90 και 95%. Τα αμερόληπτα επιταχυμένα διαστήματα ωστόσο για το συγκεκριμένο υποσύνολο ήταν ελαφρώς ευρύτερα από τα ποσοστιαία πιθανότατα επειδή η τιμή της επιτάχυνσης που υπολογίστηκε από το σύνολο δεδομένων βαθμονόμησης ήταν υψηλότερη από την ονομαστική, εξ αιτίας των προβληματικών σημείων δεδομένων.

Διαφορετικές μέθοδοι εκπαίδευσης

Η χρήση διαφορετικών μεθόδων εκπαίδευσης του νευρωνικού δικτύου έγινε για να αναδειχθούν οι διαφορές ανάμεσα στους αλγορίθμους και να αξιολογηθεί υπό ποιες συνθήκες θα μπορούσε να προτιμηθεί ένας συγκεκριμένος αλγόριθμος αντί ενός άλλου. Ο Πίνακας 8 περιέχει τις τιμές των σφαλμάτων εκπαίδευσης και αξιολόγησης καθώς και το χρόνο που απαιτήθηκε για την εκτέλεση κάθε αλγορίθμου εκπαίδευσης. Το νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιήθηκε ήταν το βελτιστοποιημένο δίκτυο με τις μεταβολές στάθμης ως παραμέτρους εξόδου.

	Αλγόριθμος	Σφάλμα Εκπαίδευσης	Σφάλμα Αξιολόγησης	Χρόνος
1 000	Backpropagation (BP)	2.66E-04	1.73E-04	0.1 h
επαναλήψεις	Τυχαίος Περίπατος (RW)	1.49E-04	1.03E-04	1 h
10 000	Backpropagation (BP)	2.01E-04	1.34E-04	1 h
επαναλήψεις	Τυχαίος Περίπατος (RW)	1.35E-04	1.02E-04	9.4 h
100 βήματα	Συζυγών Κλίσεων (CG)	2.59E-04	1.68E-04	0.5 h

Πίνακας 8. Σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης και απαιτούμενος χρόνος για κάθε αλγόριθμο εκπαίδευσης στην περιοχή της Αττικής.

Ο τροποποιημένος τυχαίος περίπατος (RW) φαίνεται να καταλήγει σε καλύτερη λύση από ότι οι άλλοι δύο αλγόριθμοι και μάλιστα ακόμα και σε 1000 βήματα. Αυτό μπορεί να αποδοθεί στην ικανότητα εξερεύνησης που έχει. Αντίθετα, μεταξύ χιλιοστής και δεκάκις χιλιοστής γενιάς επιτυγχάνεται μικρή βελτίωση της τάξης του 9,4%. Αυτό φαίνεται κάπως περίεργο, καθώς υπονοεί ότι κάποια από τα τυχαία επιλεγμένα βάρη στην αρχή της διαδικασίας εκπαίδευσης και τα οποία δεν έχουν βελτιστοποιηθεί έχουν ασήμαντη επίδραση πάνω στην τιμή του σφάλματος.

Ο αλγόριθμος backpropagation μειώνει το σφάλμα κατά δύο τάξεις μεγέθους από τις πρώτες επτά επαναλήψεις, αλλά εξ αιτίας της κατασκευής του να μην είναι ελιτιστικός εμφανίζονται πολλές διακυμάνσεις. Η βελτίωση από τις χίλιες επαναλήψεις στις δέκα χιλιάδες είναι μεγαλύτερη από ότι στην περίπτωση του τυχαίου περιπάτου αλλά δεν είναι εντυπωσιακή εάν αναλογιστεί κανείς τη σημαντική αύξηση του υπολογιστικού χρόνου που απαιτείται.

Ειδικά για τον αλγόριθμο συζυγών κλίσεων μπορεί να ειπωθεί ότι οι αρχικές τιμές, οι οποίες είναι τυχαίες, δεν ήταν αρκετά κοντά στο ολικό ελάχιστο. Ο αλγόριθμος είχε μία ταχύτατη σύγκλιση σε μία λύση, όχι όμως στη βέλτιστη. Τη λύση αυτή στην οποία κατέληξε μετά από μόλις 28 βήματα, δεν ήταν δυνατόν να την βελτιώσει περαιτέρω. Αξιοσημείωτο είναι ότι σε μερικές δοκιμαστικές εκτελέσεις του, ο αλγόριθμος συζυγών κλίσεων έδειξε εξαιρετικά μεγάλη ευαισθησία σε οποιαδήποτε αλλαγή των αρχικών τιμών, γεγονός που υποδηλώνει ότι μία διαφορετική υλοποίηση του αλγορίθμου ίσως να έδινε καλύτερα αποτελέσματα. Όλοι οι αλγόριθμοι κατέληξαν σε μικρότερο σφάλμα αξιολόγησης από ότι εκπαίδευσης. Αυτό ήταν αναμενόμενο καθώς υπήρχαν περισσότερα ακραία σημεία στο σύνολο εκπαίδευσης.

Η βελτίωση του σφάλματος στον τροποποιημένο τυχαίο περίπατο συνοδεύεται από μία μεγάλη αύξηση, κατά μία τάξη μεγέθους, στον απαιτούμενο χρόνο υπολογισμού. Εντούτοις, χίλιες επαναλήψεις του τυχαίου περιπάτου απαιτούν τον ίδιο χρόνο με δέκα χιλιάδες επαναλήψεις backpropagation και το σφάλμα που προκύπτει είναι μικρότερο.

Στην Εικόνα 73 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης των τριών αλγορίθμων εκπαίδευσης. Πρέπει να σημειωθεί ότι στον οριζόντιο άξονα εμφανίζεται ο αριθμός βημάτων ή επαναλήψεων, όχι ο απαιτούμενος χρόνος. Όπως φαίνεται στις τιμές που παρουσιάζει ο Πίνακας 8, ο αλγόριθμος του τυχαίου περιπάτου χρειάστηκε περίπου δεκαπλάσιο χρόνο ανά επανάληψη σε σχέση με τον αλγόριθμο backpropagation.



Εικόνα 73. Ρυθμός σύγκλισης του σφάλματος αξιολόγησης για τις τρεις μεθόδους εκπαίδευσης στην περιοχή της Αττικής.



Εικόνα 74. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο πρώτο πηγάδι για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.



Εικόνα 75. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο δεύτερο πηγάδι για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.

Στην Εικόνα 74 παρουσιάζονται οι προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές του πρώτου πηγαδιού για το αποτέλεσμα του τροποποιημένου τυχαίου περιπάτου, ενώ στην Εικόνα 75 παρουσιάζονται τα αντίστοιχα αποτελέσματα για το δεύτερο πηγάδι.

Συγκρινόμενα με τα αποτελέσματα του βελτιστοποιημένου δικτύου από το διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο, το πρώτο πηγάδι παρουσιάζει μία μικρή βελτίωση ενώ τα αποτελέσματα για το δεύτερο πηγάδι επιδεινώνονται. Αυτό δημιουργεί σκέψεις για το κατά πόσο είναι πιο επιθυμητή μία λύση που δεν μπορεί να περιγράψει τόσο καλά το πηγάδι με τα λιγότερα ακραία σημεία.

Είναι πιθανό αν συνεχιστεί η εκπαίδευση με τον τροποποιημένο τυχαίο περίπατο να προκύψει μία ακόμα καλύτερη λύση, η οποία να αναπαράγει όσο το δυνατόν καλύτερα τις επιθυμητές εξόδους. Αλλά σε κάποιο σημείο τίθεται το ερώτημα εάν πλέον η μέθοδος μπορεί να προταθεί για πρακτικές εφαρμογές ή βρίσκεται και θα παραμείνει μέσα στη σφαίρα της ακαδημαϊκής έρευνας, χωρίς να έχει καμία αξία για έναν ερευνητή που αναζητά αξιόπιστα εργαλεία για την προσομοίωση των αναμενόμενων αποκρίσεων ενός φυσικού συστήματος.

Τέξας

Ανάλυση συντελεστών συσχέτισης

Οι συντελεστές συσχέτισης της βροχόπτωσης ή της άντλησης με τη μεταβολή του υδραυλικού ύψους για διαφορετικές τιμές χρονικής υστέρησης που περιέχει ο Πίνακας 9 υποδηλώνουν μια υψηλή συσχέτιση για περισσότερες από μία ημέρες μεταξύ βροχόπτωσης ή άντλησης και μεταβολής υδραυλικού ύψους. Το γεγονός αυτό έχει φυσικό νόημα, καθώς η επίδραση ενός συμβάντος βροχόπτωσης ή άντλησης μπορεί να είναι εμφανής στη διακύμανση της στάθμης του υδροφόρου ορίζοντα για περισσότερες από μία

Χρονική	Βροχόπτωση	Άντληση
υστέρηση	– Μεταβολή υδραυλικού ύψους	– Μεταβολή υδραυλικού ύψους
0	0.3225	-0.2870
1	0.4059	-0.2515
2	0.2451	-0.1278
3	0.1577	-0.0725
4	0.1000	-0.0409
5	0.0793	-0.0176
6	0.0489	-0.0131
7	0.0390	-0.0172
8	0.0268	-0.0071
9	0.0184	0.0123
10	0.0168	0.0171

Πίνακας 9. Συντελεστές συσχέτισης της βροχόπτωσης και της άντλησης με τη μεταβολή υδραυλικού ύψους για διάφορες τιμές χρονικής υστέρησης.

Εάν επιλεγεί ένα όριο συντελεστή συσχέτισης 0.05 τότε 6 ημέρες βροχόπτωσης και 4 ημέρες άντλησης προκρίνονται ως παράμετροι εισόδου. Στην περίπτωση που ο συντελεστής συσχέτισης είναι παραπλανητικός και ο αριθμός των ημερών που επηρεάζουν δεν είναι τόσο μεγάλος, το νευρωνικό δίκτυο πρέπει να είναι ικανό να το εντοπίσει κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης και να εξαλείψει την επίδραση των περιττών παραμέτρων κατά

την αλλαγή των βαρών. Ένα πρόβλημα που προκύπτει είναι η άσκοπη αύξηση του χρόνου που απαιτείται για την εκπαίδευση του νευρωνικού δικτύου.

Βαθμονόμηση και έλεγχος

Το νευρωνικό δίκτυο εκπαιδεύτηκε για 1000 εποχές και χρειάστηκε λιγότερο από δύο ώρες σε έναν υπολογιστή με επεξεργαστή Pentium D 3.00 GHz. Η διαδικασία βαθμονόμησης παρήγαγε τα βάρη καθώς και σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης 1.8Ε-04 και 2.0Ε-04 αντίστοιχα. Οι τιμές δεν υποδηλώνουν υπερεκπαίδευση και δείχνουν ότι έχει επιτευχθεί μία επαρκής εκπαίδευση.

Μετά την εκπαίδευση και την αξιολόγηση του νευρωνικού δικτύου τα βάρη που παρήχθησαν χρησιμοποιήθηκαν για τον υπολογισμό των προσομοιωμένων τιμών υδραυλικού ύψους για το σύνολο των διαθέσιμων δεδομένων (Εικόνα 76). Μια λεπτομέρεια παρουσιάζεται στην Εικόνα 77. Η μεταβολή του υδραυλικού ύψους μπορεί μετέπειτα να μετατραπεί σε υδραυλικό ύψος. Η γενική τάση των παρατηρημένων τιμών ακολουθείται από τις προσομοιωμένες. Όμως το νευρωνικό δίκτυο απέτυχε να περιγράψει κάποια ακραία σημεία που μπορούν να αποδοθούν σε αντλήσεις πλησίον του πηγαδιού παρατήρησης. Είναι ένα γνωστό θέμα των αρχικών δεδομένων ότι η τιμή της άντλησης ήταν συνολική για όλα τα πηγάδια της περιοχής αντί για κάθε πηγάδι ξεχωριστά. Αυτό αναμένεται να εισάγει ένα συγκεκριμένο σφάλμα στην προσομοίωση.



Εικόνα 76. Παρατηρημένες και προσομοιωμένες τιμές μεταβολής υδραυλικού ύψους στο πηγάδι παρατήρησης J-17 (AY-68-37-203).

Εξ αιτίας του μεγάλου πλήθους των δεδομένων και της δυσκολίας λήψης ξεκάθαρης εικόνας για την αξία της βαθμονόμησης μόνο από την Εικόνα 76 και την Εικόνα 77, μια στατιστική επεξεργασία των σφαλμάτων της προσομοίωσης κρίθηκε αναγκαία για τον έλεγχο της αξιοπιστίας της προσομοίωσης. Το σφάλμα της προσομοίωσης διαχωρίστηκε σε ζώνες του 1 ft και υπολογίστηκε η συχνότητα των ημερών με σφάλμα που να ανήκει σε κάθε αντίστοιχη ζώνη η οποία στη συνέχεια διαιρέθηκε με τον συνολικό αριθμό των ημερών. Τα αντίστοιχα αποτελέσματα, (Πίνακας 10) δείχνουν ότι το σφάλμα αυτό μπορεί να θεωρηθεί αποδεκτό, δεδομένης της υψηλής διακύμανσης του υδραυλικού ύψους του υδροφορέα.



Εικόνα 77. Λεπτομέρεια των παρατηρημένων και προσομοιωμένων τιμών μεταβολής υδραυλικού ύψους στο πηγάδι παρατήρησης J-17 (AY-68-37-203).

Τιμή σφάλματος	Συχνότητα [d]	Πιθανότητα
-2	1	0.01%
-1	48	0.68%
0	3008	42.31%
1	3730	52.47%
2	255	3.59%
3	44	0.62%
4	11	0.15%
5	7	0.10%
6	5	0.07%
Σύνολο	7109	100%

Πίνακας 10. Συχνότητα και πιθανότητα το σφάλμα να βρίσκεται εντός συγκεκριμένου εύρους.

Από το σφάλμα που προέκυψε και μετέπειτα υπολογισμούς των στατιστικών χαρακτηριστικών το νευρωνικό δίκτυο επέδειξε μία συνολική τάση πόλωσης (μέσο σφάλμα) 0,12 ft (3,7 cm), ένα μέσο απόλυτο σφάλμα 0,33 ft (10 cm) και μία ρίζα μέσου τετραγωνικού σφάλματος 0,53 ft (16 cm). Το μέσο σφάλμα υποδηλώνει ότι οι προσομοιωμένες τιμές τείνουν να υποεκτιμήσουν τις παρατηρημένες τιμές, γεγονός που μπορεί να εξηγηθεί από τις ακραίες τιμές που το μοντέλο ΤΝΔ αδυνατεί να προσομοιώσει. Το σφάλμα δεν είναι αμελητέο όταν πρόκειται για διαχείριση υδατικών πόρων, αλλά σε όρους προσομοίωσης υπογείων υδάτων δε θεωρείται υπερβολικό. Οι ακραίες τιμές που δεν προσομοιώνονται από το μοντέλο ΤΝΔ, αποδίδονται στο γεγονός ότι αντλήσεις λαμβάνουν χώρα πολύ κοντά στα σημεία παρατήρησης. Δεδομένου του μεγάλου πλήθους διαθέσιμων δεδομένων οι ακραίες τιμές είναι ένα μικρό τμήμα των διαθέσιμων δεδομένων γεγονός που υποστηρίζεται και από τα αποτελέσματα της στατιστικής ανάλυσης.

Διαφορετικές μέθοδοι εκπαίδευσης

Παρόμοια με τα αποτελέσματα της πρώτης περιοχής ήταν και εκείνα του υδροφορέα Έντουαρντς. Η βασική διαφορά είναι ότι και στους τρεις αλγορίθμους το σφάλμα αξιολόγησης είναι μεγαλύτερο από το σφάλμα εκπαίδευσης. Αυτό μπορεί να δικαιολογηθεί από το γεγονός ότι το σφάλμα εκπαίδευσης είναι η αντικειμενική συνάρτηση την τιμή της οποίας προσπαθούν να ελαχιστοποιήσουν οι αλγόριθμοι. Εάν όμως το σφάλμα αξιολόγησης είναι κατά πολύ μεγαλύτερο υπάρχει πιθανότητα να έχει υπερεκπαιδευτεί το νευρωνικό δίκτυο. Ο Πίνακας 11 συνοψίζει τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης για κάθε αλγόριθμο εκπαίδευσης, αλλά και το χρόνο που απαιτήθηκε για πλήρη εκτέλεση του κάθε αλγορίθμου.

	Αλγόριθμος	Σφάλμα Εκπαίδευσης	Σφάλμα Αξιολόγησης	Χρόνος
1 000	Backpropagation (BP)	6.29E-05	6.49E-05	1 h
επαναλήψεις	Τυχαίος Περίπατος (RW)	3.97E-05	4.33E-05	5.7 h
10 000	Backpropagation (BP)	4.20E-05	4.57E-05	10 h
επαναλήψεις	Τυχαίος Περίπατος (RW)	1.78E-05	2.09E-05	56.2 h
100 βήματα	Συζυγών Κλίσεων (CG)	6.98E-05	7.23E-05	0.3 h

Πίνακας 11. Σφάλμα εκπαίδευσης και αξιολόγησης και απαιτούμενος χρόνος για κάθε αλγόριθμο εκπαίδευσης στην περιοχή του Τέξας.

Ο βασισμένος στον τυχαίο περίπατο αλγόριθμος παράγει και πάλι το μικρότερο σφάλμα, αν και αυτή τη φορά η βελτίωση των εννέα χιλιάδων επιπλέων επαναλήψεων είναι πολύ μεγαλύτερη (55%) από εκείνη της εφαρμογής στην Αττική. Επίσης εντυπωσιακή φαντάζει η μείωση του σφάλματος σε σύγκριση με τους άλλους δύο αλγορίθμους, αλλά πρέπει να σημειωθεί ότι η προσομοίωση του συγκεκριμένου υδροφορέα δεν ήταν το ίδιο επιτυχημένη με την προσομοίωση του υδροφορέα στην Αττική. Αυτό σημαίνει ότι υπήρχε μεγαλύτερο περιθώριο βελτίωσης.

Ο αλγόριθμος συζυγών κλίσεων είχε και σε αυτή την εφαρμογή την ταχύτερη σύγκλιση, αλλά προς μία λύση αρκετά χειρότερη από εκείνη την οποία παρείχε ο βασισμένος στον τυχαίο περίπατο αλγόριθμος. Η σύγκλιση επετεύχθη μετά από 19 βήματα. Η απόσταση του αρχικού τυχαίου σημείου από το βέλτιστο είναι για μία ακόμα φορά η πιθανότερη αιτία για την περιορισμένη επιτυχία του αλγορίθμου. Η μέθοδος backpropagation παρουσιάζει διακυμάνσεις και στην παρούσα εφαρμογή, ενώ η βελτίωση των δέκα χιλιάδων επαναλήψεων απέναντι στις χίλιες ήταν μεγαλύτερη και άγγιξε το 33%. Αυτό οφείλεται πιθανότατα στα μεγαλύτερα περιθώρια βελτίωσης.

Ο τροποποιημένος τυχαίος περίπατος χρειάστηκε περισσότερο χρόνο από τον αλγόριθμο backpropagation (περίπου εξαπλάσιο). Αλλά τα αποτελέσματα του τυχαίου περιπάτου μετά από χίλιες επαναλήψεις, που πραγματοποιήθηκαν σε 5,7 ώρες, είναι καλύτερα από εκείνα μετά από δέκα χιλιάδες επαναλήψεις backpropagation, που πραγματοποιήθηκαν σε 10 ώρες.



Εικόνα 78. Ρυθμός σύγκλισης του σφάλματος αξιολόγησης για τις τρεις μεθόδους εκπαίδευσης στην περιοχή του Τέξας.

Στην Εικόνα 78 παρουσιάζεται η πορεία σύγκλισης των τριών αλγορίθμων εκπαίδευσης. Στον οριζόντιο άξονα εμφανίζεται ο αριθμός των βημάτων ή ο αριθμός των επαναλήψεων. Όπως και στην αντίστοιχη περίπτωση κατά την εφαρμογή στην περιοχή της Αττικής ο χρόνος που απαιτήθηκε κι εδώ για κάθε επανάληψη είναι διαφορετικός ανάλογα με τον αλγόριθμο εκπαίδευσης. Από το διάγραμμα γίνεται εύκολα αντιληπτό ότι ο αλγόριθμος του τροποποιημένου περιπάτου καταφέρνει να ανακαλύψει λύσεις μέσα στην εφικτή περιοχή με πολύ μικρότερη τιμή σφάλματος, ενώ και ο ρυθμός μείωσης του σφάλματος είναι αρκετά μεγάλος καθ' όλη τη διάρκεια των επαναλήψεων. Μόνο προς το τέλος εμφανίζονται σημάδια επιβράδυνσης του ρυθμού μείωσης του σφάλματος.

Με βάση τα αποτελέσματα της εκπαίδευσης με τον τροποποιημένο τυχαίο περίπατο υπολογίστηκαν και παρουσιάζονται στην Εικόνα 79 οι προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής στάθμης στον υδροφορέα Έντουαρντς. Σε σύγκριση με τα αποτελέσματα από την προσομοίωση με βάση τα αποτελέσματα της ανάλυσης συντελεστών συσχέτισης είναι εμφανής η βελτίωση της συμφωνίας μεταξύ παρατηρημένων και προσομοιωμένων. Ακόμα όμως και με αυτά τα αποτελέσματα η προσομοίωση δε μπορεί να θεωρηθεί ιδιαίτερα επιτυχημένη. Υπάρχουν οι περιορισμοί στα διαθέσιμα δεδομένα οι οποίοι δεν είναι δυνατόν να ξεπεραστούν από έναν αλγόριθμο εκπαίδευσης.



Εικόνα 79. Προσομοιωμένες ως προς τις παρατηρημένες τιμές μεταβολής της στάθμης στο πηγάδι παρατήρησης για το νευρωνικό δίκτυο με την ελάχιστη τιμή αντικειμενικής συνάρτησης.

Κεφάλαιο 6ο

Συμπεράσματα

Η προσομοίωση της στάθμης του υπόγειου ύδατος σε καρστικούς υδροφορείς με μοντέλα βασισμένα στη θεωρία των τεχνητών νευρωνικών δικτύων μπορεί να αποφέρει αξιόλογα αποτελέσματα σε περιπτώσεις με ανεπαρκείς πληροφορίες για τα γεωλογικά χαρακτηριστικά του καρστικού συστήματος, αρκεί να είναι διαθέσιμη μια λεπτομερής χρονοσειρά υδρογεωλογικών δεδομένων. Σε αντίθεση με τα αριθμητικά μοντέλα υπογείων υδάτων που απαιτούν λεπτομερή γνώση των γεωλογικών χαρακτηριστικών των πετρωμάτων και των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των διακλάσεων σε καρστικούς υδροφορείς, τα νευρωνικά δίκτυα χρησιμοποιούν μια προσέγγιση μαύρου κουτιού που λαμβάνει υπ' όψιν μόνο τα χρονικά μεταβαλλόμενα μέρη του υδατικού ισοζυγίου και ενσωματώνει τα σταθερά μέρη μέσα στα συναπτικά βάρη του δικτύου μέσα από μία διαδικασία εκπαίδευσης. Ωστόσο, ένας μεγάλος αριθμός διαφορετικών δεδομένων είναι αναγκαίος για να επιτευχθεί μία σωστή εκπαίδευση και κάθε έλλειψη μίας παραμέτρου που έχει επίδραση στο υδατικό ισοζύγιο εισάγει ένα σφάλμα στο μοντέλο που είναι αδύνατο να εξαλειφθεί με διαφορετικό τρόπο.

Όταν ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο πρόκειται να χρησιμοποιηθεί για διαχείριση υδατικών πόρων, προτείνεται οι παράμετροι εισόδου να επιλέγονται με τέτοιο τρόπο ώστε να περιγράφουν όσο το δυνατόν καλύτερα τους χρονικά μεταβαλλόμενους παράγοντες του υδατικού ισοζυγίου. Ενδεικτικά, ως παράμετροι εισόδου προτείνονται οι παροχές άντλησης αλλά και οι στάθμες πηγαδιών της περιοχής καθώς επίσης η βροχόπτωση και η θερμοκρασία από όσους περισσότερους διαθέσιμους σταθμούς στην ευρύτερη περιοχή, ενώ πρέπει να συμπεριλαμβάνεται (όταν υπάρχει διαθέσιμη) και η επιφανειακή απορροή. Όλα τα δεδομένα πρέπει να διατίθενται με το ίδιο χρονικό βήμα (ημερήσια, εβδομαδιαία κτλ.). Σε πολλές περιπτώσεις η πιο δύσκολη παράμετρος να βρεθεί είναι η άντληση από κάθε αντίστοιχο πηγάδι στην περιοχή. Η ακριβής γνώση της παραμέτρου ωστόσο είναι αποφασιστικής σημασίας για την εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου που περιγράφει τις επακόλουθες απότομες μεταβολές στο υδραυλικό ύψος που είναι ιδιαίτερα σημαντικές στους καρστικούς υδροφορείς.

Ενδεχομένως μερικές παράμετροι εισόδου να εμφανίζουν χρονική υστέρηση ως προς τις παραμέτρους εξόδου. Ένα τυπικό ζευγάρι παραμέτρων που εμφανίζεται το φαινόμενο, είναι η βροχόπτωση και η μεταβολή της στάθμης του υδροφορέα. Ένας σωστός προσδιορισμός της χρονικής υστέρησης αποδείχθηκε κρίσιμος στην προσπάθεια ορθής προσομοίωσης του υδατικού ισοζυγίου του υδροφορέα.

Στην προσπάθεια επιλογής των παραμέτρων εισόδου του νευρωνικού δικτύου μια ανάλυση συντελεστών συσχέτισης μπορεί να δώσει πληροφορίες για το ποιες παράμετροι είναι σημαντικές και πρέπει να εισαχθούν. Σε κάποιες περιπτώσεις, όταν η επίδραση μιας συγκεκριμένης παραμέτρου είναι εμφανής για περισσότερες από μία ημέρες, οι παράμετροι εισόδου μπορούν να περιλαμβάνουν περισσότερες ημέρες της συγκεκριμένης παραμέτρου. Εάν η εκπαίδευση είναι σωστή θα μηδενίσει τα βάρη οποιωνδήποτε περιττών

Συμπεράσματα 120

κόμβων εισόδου. Μία πιο εξελιγμένη μέθοδος περιλαμβάνει την αξιοποίηση ενός διαφορικού εξελικτικού αλγορίθμου για τον βέλτιστο προσδιορισμό της χρονικής υστέρησης των μεταβλητών εισόδου (π.χ. της βροχόπτωσης), καθώς και της δομής του ΤΝΔ και των παραμέτρων εκπαίδευσης.

Έγινε εφαρμογή της προτεινόμενης μεθοδολογίας σε δύο περιοχές, όπου υπήρχαν διαθέσιμα δεδομένα. Η πρώτη περιοχή βρίσκεται στην Αττική, όπου εξετάστηκαν δύο διαφορετικά ΤΝΔ με κοινές παραμέτρους εισόδου συνδεδεμένες ισχυρά με μεταβλητές του υδατικού ισοζυγίου, ούτως ώστε να αποδίδουν φυσικό νόημα στο σχεδιασμένο δίκτυο. Το πρώτο δίκτυο προέβλεπε το υδραυλικό ύψος σε δύο πηγάδια παρατήρησης, ενώ το δεύτερο τροποποιήθηκε ώστε να προβλέπει τη μεταβολή της στάθμης (διαφορά υδραυλικού ύψους) μεταξύ δύο διαδοχικών ημερών στις αντίστοιχες τοποθεσίες.

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης έδειξαν ότι το πρώτο δίκτυο απέτυχε να εξασφαλίσει μια καλή προσέγγιση του φυσικού φαινομένου, ενώ το δεύτερο έδειξε μια σημαντικά βελτιωμένη συμπεριφορά. Αυτό συνδέεται με το γεγονός ότι περισσότερο η διαφορά στάθμης ανά χρονικό βήμα παρά αυτό καθαυτό το υδραυλικό ύψος σχετίζεται με την παράμετρο ΔS του υδατικού ισοζυγίου και συνεπακόλουθα η διαφορά στάθμης είναι καλύτερα συσχετισμένη με όλες τις παραμέτρους εισόδου του ΤΝΔ, οι οποίες προσομοιώνουν την εισροή και την εκροή ύδατος στο φυσικό σύστημα, όπως δηλώνεται από την εξίσωση του υδατικού ισοζυγίου.

Μετά από βελτιστοποίηση με έναν διαφορικό εξελικτικό αλγόριθμο το πρώτο δίκτυο επέδειξε σημαντικά καλύτερη συμπεριφορά, ενώ για το δεύτερο δίκτυο η βελτίωση ήταν μικρότερη, αφού είχε καταλήξει ήδη σε ιδιαίτερα καλά αρχικά αποτελέσματα. Η διαδικασία βελτιστοποίησης ήταν χρονοβόρα και τίθεται ένα θέμα για το κατά πόσο μια τέτοια διαδικασία μπορεί να χρησιμοποιηθεί εύκολα σε πρακτικές εφαρμογές. Ακόμα, η βελτίωση που επιτεύχθηκε με το δεύτερο δίκτυο ήταν οριακή για τη δεδομένη περίπτωση (περίπου 9% και 28% για τα σφάλματα εκπαίδευσης και αξιολόγησης αντίστοιχα). Η βελτίωση όμως που επιτεύχθηκε από το πρώτο δίκτυο υποδηλώνει ότι ο εμπειρικός προσδιορισμός των παραμέτρων του ΤΝΔ και της δομής του δεν είναι πάντα αρκετός και μια διαδικασία βελτιστοποίησης.

Σε προηγούμενες ενότητες έγινε σαφές ότι η διαφορά στάθμης ανά χρονικό βήμα συνδέεται πιο φυσικά με τις παραμέτρους του υδατικού ισοζυγίου, που προσομοιώνουν την εισροή προς και την εκροή από τον υδροφορέα, σε σχέση με το υδραυλικό ύψος. Έτσι ένα μοντέλο ΤΝΔ μπορεί να αναπαραστήσει πιο εύκολα την πρώτη σχέση από ό,τι τη δεύτερη χωρίς την ανάγκη ειδικής μεταχείρισης της δομής και της διαδικασίας εκπαίδευσης του ΤΝΔ. Φαίνεται ότι απλά (μη βελτιστοποιημένα) ΤΝΔ μπορούν εύκολα να προσομοιώσουν αυτή τη σχέση. Ωστόσο στην περίπτωση χρήσης του υδραυλικού ύψους ως παραμέτρου εξόδου η σχέση μεταξύ παραμέτρων εισόδου και εξόδου φαίνεται να περιπλέκεται. Ως αποτέλεσμα, η περιοχή πιθανών δομών ΤΝΔ που είναι ικανές να καταλήξουν σε αποδεκτές προβλέψεις στενεύει και ένας αλγόριθμος βελτιστοποίησης χρειάζεται για να βρεθεί η βέλτιστη δομή στην περιοχή αυτή. Στην περίπτωση που χρησιμοποιείται η διαφορά στάθμης, η λύση πριν τη βελτιστοποίηση είναι ήδη αρκετά κοντά στη βέλτιστη, έτσι η χρήση της βελτιστοποίησης παρέχει σχετικά μικρή βελτίωση. Στην περίπτωση που χρησιμοποιείται το υδραυλικό ύψος η βελτιστοποίηση μπορεί να αποδώσει σημαντικές βελτιώσεις, καθώς το αρχικό ΤΝΔ μπορεί να είναι αρκετά μακριά από τη βέλτιστη περιοχή.

Τα αποτελέσματα του RMSE για την περίοδο ελέγχου επιβεβαιώνουν την υπεροχή της επιλογής της μεταβολής στάθμης ως παραμέτρου εξόδου. Δείχνουν ότι ακόμα και μετά τη διαδικασία βελτιστοποίησης το TNΔ με το υδραυλικό ύψος έχει υψηλότερο RMSE από ότι εκείνο που χρησιμοποιεί την διαφορά στάθμης ανά χρονικό βήμα ακόμα και πριν τη διαδικασία βελτιστοποίησης του τελευταίου. Συνεπώς μπορεί να επιτευχθεί μία βελτιωμένη σχέση μεταξύ παραμέτρων εισόδου και εξόδου και έτσι το δίκτυο αποκτά περισσότερο φυσικό νόημα. Προτείνεται λοιπόν στην περίπτωση προσομοίωσης υπογείων υδάτων με TNΔ, να χρησιμοποιείται η διαφορά στάθμης ανά χρονικό βήμα, αντί του υδραυλικού ύψους, καθώς έχει περισσότερο φυσικό νόημα.

Αν και η βελτιστοποίηση με ΔΕ είναι χρονοβόρα, μπορεί να αποδειχθεί αρκετά αποδοτική σε σύγκριση με εμπειρικές πρακτικές δοκιμής και σφάλματος. Επίσης η διαδικασία βελτιστοποίησης είναι πλήρως αυτοματοποιημένη και μπορεί να επιταχυνθεί αν υιοθετηθεί παράλληλος προγραμματισμός. Το υπολογιστικό κόστος της διαδικασίας βελτιστοποίησης μπορεί να μειωθεί εάν επιλεγεί μικρότερος αριθμός παραμέτρων απόφασης, αφαιρώντας τις παραμέτρους εκείνες που έχουν μικρή επίδραση στην αντικειμενική συνάρτηση. Ο ΔΕ αλγόριθμος δεν παρέχει τέτοια πληροφόρηση γι αυτό χρειάζεται να εκτελεστεί μια ξεχωριστή ανάλυση ευαισθησίας. Αυτό όμως διαφεύγει του σκοπού της παρούσας εργασίας και μπορεί να θεωρηθεί ιδέα για μελλοντική έρευνα.

Και τα δύο (βελτιστοποιημένα με ΔΕ) ΤΝΔ χρησιμοποιήθηκαν τέλος για μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη και ελέγχθηκαν για δύο περιόδους περίπου 45 και 16 ημερών. Για τις προβλέψεις αυτές τα προσομοιωμένα υδραυλικά ύψη χρησιμοποιούνταν ως παράμετροι εισόδου στα δίκτυα. Το σφάλμα μεταξύ των προσομοιωμένων και των παρατηρημένων τιμών υπολογίστηκε στο τέλος κάθε περιόδου ελέγχου, παρέχοντας επιπλέον αποδείξεις για την ανωτερότητα της επιλογής της διαφοράς στάθμης ανά χρονικό βήμα ως παραμέτρου εξόδου του ΤΝΔ για την επίτευξη ορθών αποτελεσμάτων πρόβλεψης για μεγαλύτερες χρονικές περιόδους.

Η δεύτερη περιοχή βρίσκεται στο Τέξας των Η.Π.Α. και το τεχνητό νευρωνικό δίκτυο που χρησιμοποιήθηκε είχε ως παράμετρο εξόδου τη μεταβολή της στάθμης σε ένα πηγάδι παρατήρησης. Τα διαθέσιμα στοιχεία απαρτίζονταν από ημερήσιες τιμές υδρολογικών και υδρογεωλογικών δεδομένων αλλά υπήρχε έλλειψη δεδομένων άντλησης ξεχωριστά για κάθε πηγάδι της περιοχής. Η συνολική άντληση από όλα τα πηγάδια στην περιοχή μπορεί σε μία τέτοια περίπτωση να χρησιμοποιηθεί για να περιγραφεί η τάση αλλά όχι και οι απότομες διακυμάνσεις της στάθμης του υπόγειου υδροφορέα. Αυτή η έλλειψη δεδομένων θεωρείται ως ο κύριος λόγος που εισήγαγε σφάλμα στα σημεία δεδομένων με υψηλές τιμές μεταβολής υδραυλικού ύψους. Το σφάλμα που προέκυψε μεταξύ παρατηρημένων και προσομοιωμένων τιμών μεταβολής υδραυλικού ύψους ήταν για το 95% των ημερών μεταξύ Ο και 1 ft (0 και 30 cm). Αυτό δεν είναι αμελητέο όταν πρόκειται για διαχείριση υδάτιων.

Εξ αιτίας της προσέγγισης ως μαύρο κουτί το TNΔ δεν παρέχει πληροφορίες για τη σημαντικότητα κάθε παραμέτρου εισόδου σε κάθε παράμετρο εξόδου. Αυτό μπορεί να

επιτευχθεί με μια μετέπειτα ανάλυση κύριων συστατικών (principal component analysis – PCA), που είναι ένα πολύ ενδιαφέρον πεδίο για μελλοντική έρευνα.

Ο αυξημένος αριθμός εφαρμογών που έχουν βρει τα ΤΝΔ στην υδρολογία σε συνδυασμό με την ανάγκη μετάβασης από προσδιοριστική έξοδο σε στοχαστική ήταν οι λόγοι για την αναζήτηση μιας μεθοδολογίας που θα μπορούσε να εφαρμοστεί για να κατασκευάσει διαστήματα εμπιστοσύνης για ένα συγκεκριμένο ΤΝΔ. Εξ αιτίας της πολυπλοκότητας των μαθηματικών αυτών μοντέλων οι εκτιμήσεις των ελαχίστων τετραγώνων μπορεί να μην είναι εφαρμόσιμες, ειδικά όταν το ΤΝΔ έχει πολλούς κόμβους κατανεμημένους σε περισσότερα από ένα κρυφά επίπεδα.

Στη διαχείριση υπογείων υδάτων ο καθορισμός της αβεβαιότητας ενός ΤΝΔ μπορεί να είναι ιδιαίτερα σημαντικός όταν εξετάζεται το σχέδιο άντλησης σε μια περιοχή επιρρεπή σε υφαλμύρινση από μια γειτονική ακτή. Σε αυτές τις περιπτώσεις μπορεί να είναι κρίσιμο για τη στάθμη σε συγκεκριμένα πηγάδια παρατήρησης να παραμείνει πάνω από μια συγκεκριμένη τιμή για την αποφυγή υποβάθμισης της ποιότητας.

Μια σχετικά εύκολη στην εφαρμογή μέθοδος είναι η μέθοδος bootstrap, η οποία είναι υπολογιστικά απαιτητική αλλά έχει ελάχιστα προαπαιτούμενα και οι υποθέσεις της καλύπτονται σε μεγάλο βαθμό. Η μόνη υπόθεση που γίνεται είναι ότι το ΤΝΔ έχει την ικανότητα να περιγράψει επακριβώς το φυσικό σύστημα. Αυτό μπορεί να παραβιάζεται σε κάποια ακραία σημεία δεδομένων αλλά γενικά η μέθοδος καταλήγει σε ικανοποιητικά αποτελέσματα.

Για να εξεταστεί η ορθότητα των αυτοδύναμων διαστημάτων εμπιστοσύνης, η πραγματική κάλυψη των παρατηρημένων σειρών δεδομένων συγκρίθηκε με την ονομαστική κάλυψη. Τα αποτελέσματα δείχνουν ότι όπως αναφέρεται στη βιβλιογραφία η ονομαστική κάλυψη δεν ισούται με την πραγματική. Αυτό δεν είναι πρόβλημα καθαυτής της μεθόδου αλλά αποτέλεσμα του μικρού αριθμού σημείων δεδομένων συγκριτικά με τον άπειρο θεωρητικό. Ένας άλλος παράγοντας που επηρεάζει την πραγματική κάλυψη είναι η ύπαρξη ακραίων τιμών στο σύνολο δεδομένων. Αυτές οι ακραίες τιμές μπορούν επίσης να αυξήσουν τη διακύμανση των τιμών εξόδου διευρύνοντας τα διαστήματα.

Η ποσοστιαία μέθοδος ήταν ευκολότερο να εφαρμοστεί και απέδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα. Η πραγματική κάλυψη αυξανόταν με συνέπεια και ρυθμό παρόμοιο με εκείνον της θεωρητικής και οποιοδήποτε έλλειμμα κάλυψης μπορεί να αποδοθεί στα προβληματικά σημεία δεδομένων συγκεκριμένων υποσυνόλων. Το σύνολο δεδομένων ελέγχου του δευτέρου πηγαδιού που δεν περιείχε προβληματικά σημεία έδωσε τα καλύτερα αποτελέσματα. Αυτό και μόνο το γεγονός αρκεί για να θεωρηθεί η μέθοδος πολλά υποσχόμενη.

Όντας πιο σύνθετη, καθώς απαιτεί την εκτίμηση της διόρθωσης μεροληπτικής τάσης και της επιτάχυνσης, η αμερόληπτη επιταχυμένη μέθοδος απέδωσε γενικά στενότερα διαστήματα χωρίς σημαντικές αλλαγές στις τιμές της πραγματικής κάλυψης. Το μόνο σύνολο δεδομένων στο οποίο διεύρυνε τα διαστήματα ήταν το υποσύνολο ελέγχου του δευτέρου πηγαδιού πιθανότατα λόγω της υψηλής τιμής της επιτάχυνσης που υπολογίστηκε από το σύνολο δεδομένων βαθμονόμησης. Συνολικά η αμερόληπτη επιταχυμένη είναι πιο προηγμένη μέθοδος και θεωρείται καλύτερη επιλογή όταν πρόκειται για δημιουργία διαστημάτων εμπιστοσύνης ωστόσο μπορεί να καταλήξει σε ευρύτερα από τα αναγκαία διαστήματα, εάν ο όρος της επιτάχυνσης επηρεάζεται από ακραίες τιμές. Σε αυτή την περίπτωση η ποσοστιαία μέθοδος μπορεί να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα χωρίς τον επιπλέον υπολογιστικό φόρτο της αμερόληπτης επιταχυμένης (περίπου 12% επιπλέον φόρτος, σε σύγκριση με την ποσοστιαία μέθοδο).

Ενώ η μέθοδος bootstrap είναι ένα δυνατό και αποτελεσματικό εργαλείο για δημιουργία διαστημάτων εμπιστοσύνης, η ύπαρξη σημείων δεδομένων τα οποία είναι αδύνατον να περιγραφούν από το μοντέλο ανεξάρτητα από τα βάρη του ΤΝΔ δε συνυπολογίζεται στη διαδικασία και τα σημεία δεν καλύπτονται από τα διαστήματα. Αυτός ο περιορισμός πρέπει να συνυπολογίζεται πάντα όταν απαιτείται υψηλή ακρίβεια. Άλλωστε αυτή δεν είναι μια μέθοδος για να καλύψει την ανεπάρκεια του μοντέλου παρά μόνο για να ποσοτικοποιήσει την αβεβαιότητα που εισάγεται στο συγκεκριμένο μοντέλο από τα δεδομένα εισόδου και τη συνδυασμένη τους επίδραση κατά τη διάρκεια της προσαρμογής των βαρών.

Παρά τα πλεονεκτήματά της η μέθοδος bootstrap αποδείχθηκε χρονοβόρα. Το συνολικό υπολογιστικό κόστος για μία πλήρη εκτέλεση του αλγορίθμου ήταν μάλλον υψηλό (44 ώρες). Ωστόσο η μεθοδολογία μπορεί εύκολα να υλοποιηθεί με παράλληλο τρόπο, ούτως ώστε να μειωθεί σημαντικά ο υπολογιστικός χρόνος. Παρ' όλα αυτά παραμένει αρκετά μεγάλος για πρακτικές εφαρμογές και έτσι η μέθοδος bootstrap δεν προτείνεται για καθημερινή χρήση, ειδικά εάν η ανάγκη για υπολογισμό διαστημάτων εμπιστοσύνης δε δικαιολογεί τον απαιτούμενο χρόνο και φόρτο.

Εφαρμογή της μεθόδου για άλλους τύπους προβλημάτων που επιλύονται με ΤΝΔ μπορεί να προταθεί αρκεί να ικανοποιείται μία προϋπόθεση. Το μοντέλο πρέπει να είναι ικανό να περιγράψει τις παρατηρημένες τιμές αρκετά καλά χωρίς να αγνοεί τα ακραία σημεία. Πέραν τούτου δεν γίνονται άλλες υποθέσεις από τις αυτοδύναμες μεθόδους.

Η μελλοντική έρευνα στον τομέα της εφαρμογής ΤΝΔ για προσομοίωση στάθμης υπογείων υδάτων πρέπει να επικεντρωθεί στην βελτιστοποίηση του προσδιοριστικού μοντέλου στον μέγιστο δυνατό βαθμό πριν από την εφαρμογή μιας μεθόδου bootstrap για τον υπολογισμό των διαστημάτων εμπιστοσύνης της εξόδου.

Απλοί αλγόριθμοι, βασισμένοι στον τυχαίο περίπατο μπορεί να καταλήξουν σε καλύτερες λύσεις στο πρόβλημα της βελτιστοποίησης των βαρών ενός νευρωνικού δικτύου (κατά τη διάρκεια της εκπαίδευσης) σε σύγκριση με ευρέως διαδεδομένους αλγορίθμους όπως ο αλγόριθμος backpropagation. Ως κύρια αιτία μπορεί να θεωρηθεί η πιθανότητα εγκλωβισμού του τελευταίου σε τοπικά ελάχιστα. Ειδικά όταν η συνάρτηση του σφάλματος είναι περίπλοκη και περιέχει πολλά τοπικά ελάχιστα, οι αλγόριθμοι ενδέχεται να καταλήξουν σε μία λύση πολύ υποδεέστερη της βέλτιστης. Αντιθέτως οι βασισμένοι στον τυχαίο περίπατο αλγόριθμοι έχουν εγγενή ικανότητα εξερεύνησης, η οποία τις περισσότερες φορές τους βοηθά στην εύρεση μίας καλύτερης λύσης. Τίμημα για την εξερευνητική ιδιότητα είναι ο υψηλός υπολογιστικός χρόνος και η αβεβαιότητα σύγκλισης. Όταν ένα τεχνητό νευρωνικό δίκτυο υποβάλλεται σε μία διαδικασία βελτιστοποίησης και πολλαπλές εκτελέσεις του αλγορίθμου εκπαίδευσης είναι απαραίτητες, ο αυξημένος χρόνος υπολογισμού είναι σαφώς ένα μειονέκτημα το οποίο θα μπορούσε να αποτρέψει

έναν ερευνητή από την επιλογή του συγκεκριμένου αλγορίθμου προς όφελος ενός ταχύτερου. Μόνο σε περιπτώσεις που και η μικρότερη δυνατή βελτίωση του σφάλματος θεωρείται σημαντική μπορούν να βρουν εφαρμογή αλγόριθμοι τυχαίου περιπάτου σε εκπαίδευση νευρωνικών δικτύων. Παραμένουν όμως ένα χρήσιμο εργαλείο για έναν ερευνητή που επιθυμεί να ελέγξει την επάρκεια αλγορίθμων όπως ο backpropagation να αντιμετωπίσουν ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Για παράδειγμα, εάν ένας ερευνητής επιθυμεί να επιβεβαιώσει ότι η λύση στην οποία κατέληξε ο αλγόριθμος backpropagation είναι κοντά στη βέλτιστη, ένας εύκολος τρόπος είναι μέσω της σύγκρισης με τα αποτελέσματα που προκύπτουν από την εφαρμογή ενός τροποποιημένου τυχαίου περιπάτου.

Κεφάλαιο 7ο

Προτάσεις για Μελλοντική Έρευνα

Πολλές είναι οι κατευθύνσεις στις οποίες μπορεί να κινηθεί η μελλοντική έρευνα πάνω στο αντικείμενο της προσομοίωσης υπογείων υδάτων με χρήση μεθόδων υπολογιστικής νοημοσύνης. Σημαντικά αποτελέσματα μπορεί να προκύψουν από την εξέταση διαφορετικών αρχιτεκτονικών δομών όπως τα δίκτυα με ακτινική συνάρτηση βάσης (radial basis function – RBF), ή και διαφορετικών μεθόδων εκπαίδευσης όπως η Levenberg – Marquardt. Εναλλακτικές μέθοδοι εκπαίδευσης θα μπορούσαν να χρησιμοποιήσουν συνδυαστικούς αλγορίθμους συζυγών κλίσεων και τυχαίου περιπάτου σε μία προσπάθεια να επωφεληθούν από την ταχύτατη σύγκλιση και από την καθολική εξερεύνηση.

Επίσης θα μπορούσαν να εξεταστούν μέθοδοι βελτιστοποίησης όπως οι εξελικτικοί αλγόριθμοι, ως αλγόριθμοι εκπαίδευσης ενός τεχνητού νευρωνικού δικτύου. Αν και μπορεί να αποδειχθεί αναποτελεσματικό σε μεγάλα δίκτυα με πολλούς κόμβους και κρυφά επίπεδα εξ αιτίας του αυξημένου χρόνου που θα απαιτήσει, σε μικρά δίκτυα μπορεί να αποδειχθεί ταχύτερη εναλλακτική μεθόδων τυχαίου περιπάτου.

Η ανάλυση των διαθέσιμων δεδομένων θα ήταν ενδιαφέρουσα για την καλύτερη κατανόηση των διαδικασιών που λαμβάνουν χώρα μέσα στο φυσικό σύστημα. Η φασματική ανάλυση μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διαπίστωση αν μία σειρά έχει εποχικότητα και τον καθορισμό της εποχικής συνιστώσας. Μία ανάλυση για τις ημέρες με μηδενική βροχόπτωση είναι δυνατόν να βοηθήσει στην κατανόηση της φυσικής τάσης του συστήματος.

Η χωρική συσχέτιση των χρονοσειρών με γεωστατιστικές μεθόδους μπορεί να δώσει πληροφορίες σχετικά με την κατανομή τους σε ολόκληρη την περιοχή μελέτης. Επιπλέον η σύνδεση των νευρωνικών δικτύων με γεωστατιστικές μεθόδους μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την κατασκευή πιεζομετρικών χαρτών και χαρτών αβεβαιότητας, ούτως ώστε να μεταφερθεί στον χώρο η μονοδιάστατη σημειακή πληροφορία της εξόδου ενός νευρωνικού δικτύου που αφορά στην απόκριση της στάθμης του υπογείου νερού σε ένα πηγάδι παρατήρησης.

Ιδιαίτερα σημαντική θα ήταν και η πρόγνωση της αβεβαιότητας του μοντέλου σε μεσοπρόθεσμη πρόβλεψη. Η μέθοδος bootstrap θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί εάν ο υπολογιστικός φόρτος της μεθόδου

Βιβλιογραφία

- Aqil, M., Kita, I., Yano, A. & Nishiyama, S., 2007. Neural Networks for Real Time Catchment Flow Modeling and Prediction. Water Resources Management, 21(10): 1781-1796.
- Arndt, O., Barth, T., Freisleben, B. & Grauer, M., 2005. Approximating a finite element model by neural network prediction for facility optimization in groundwater engineering. European Journal of Operational Research Advances in Complex Systems Modeling, 166(3): 769-781.
- Babu, G.J. & Feigelson, E.D., 1996. Astrostatistics. Chapman & Hall, New York, pp. xii, 221p.
- **Bayer, P., De Paly, M. & Buerger, C.M., 2009.** Optimization of high-reliability-based hydrological design problems by robust automatic sampling of critical model realizations. Water Resources Research, 46(5).
- Benning, R.M., Becker, T.M. & Delgado, A., 2001. Initial studies of predicting flow fields with an ANN hybrid. Advances in Engineering Software, 32(12): 895-901.
- **Berkowitz, B., 2002.** Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review. Advances in Water Resources, 25(8-12): 861-884.
- **Bickel, P.J. & Freedman, D.A., 1981.** Some Asymptotic Theory for the Bootstrap. Annals of Statistics, 9(6): 1196-1217.
- Bögli, A., 1980. Karst hydrology and physical speleology. Springer-Verlag, Berlin; New York.
- **Chen, J. & Adams, B.J., 2006.** Integration of artificial neural networks with conceptual models in rainfall-runoff modeling. Journal of Hydrology, 318(1-4): 232-249.
- **Chernick, M.R., 2008.** Bootstrap methods: a guide for practitioners and researchers. Wiley series in probability and statistics. Wiley-Interscience, Hoboken, N.J., pp. xviii, 369 p.
- **Christakos, G., 2002.** On the assimilation of uncertain physical knowledge bases: Bayesian and non-Bayesian techniques. Advances in Water Resources, 25(8-12): 1257-1274.
- Chrysikopoulos, C.V., Hsuan, P.-Y. & Fyrillas, M.M., 2002. Bootstrap estimation of the mass transfer coefficient of a dissolving nonaqueous phase liquid pool in porous media. Water Resour. Res., 38(3): 1026.
- Chryssolouris, G., Lee, M. & Ramsey, A., 1996. Confidence interval prediction for neural network models. Ieee Transactions on Neural Networks, 7(1): 229-232.
- **Clair, T.A. & Ehrman, J.M., 1998.** Using neural networks to assess the influence of changing seasonal climates in modifying discharge, dissolved organic carbon, and nitrogen export in eastern Canadian rivers. Water Resources Research, 34(3): 447-455.
- **Cooley, R.L., 1997.** Confidence intervals for ground-water models using linearization, likelihood, and bootstrap methods. Ground Water, 35(5): 869-880.
- Coppola, E.A., McLane, C.F., Poulton, M.M., Szidarovszky, F. & Magelky, R.D., 2005a. Predicting Conductance Due to Upconing Using Neural Networks. Ground Water, 43(6): 827-836.
- **Coppola, E.A., Rana, A.J., Poulton, M.M., Szidarovszky, F. & Uhl, V.W., 2005b.** A neural network model for predicting aquifer water level elevations. Ground Water, 43(2): 231-241.
- **Coulibaly, P., Anctil, F. & Bobee, B., 1999.** Hydrological forecasting with artificial neural networks: The state of the art. Canadian Journal of Civil Engineering, 26(3): 293-304.
- **Coulibaly, P., Anctil, F. & Bobee, B., 2001.** Multivariate Reservoir Inflow Forecasting Using Temporal Neural Networks. Journal of Hydrologic Engineering, 6(5): 367-376.
- **Cowan, J.D., 1967.** A mathematical theory of central nervous activity. Ph. D. Thesis, University of London, London.

- **Crespo, J.L. & Mora, E., 1993.** Drought estimation with neural networks. Advances in Engineering Software, 18(3): 167-170.
- da Silva, R.R., Siqueira, M.H.S., de Souza, M.P.V., Rebello, J.M.A. & Caloba, L.P., 2005. Estimated accuracy of classification of defects detected in welded joints by radiographic tests. Ndt & E International, 38(5): 335-343.
- Daliakopoulos, I.N., Coulibaly, P. & Tsanis, I.K., 2005. Groundwater level forecasting using artificial neural networks. Journal of Hydrology, 309(1-4): 229-240.
- Dash, N., Panda, S., Remesan, R. & Sahoo, N., In Press. Hybrid neural modeling for groundwater level prediction. Neural Computing & Applications: 1-13.
- **DeSilet, L., Golden, B., Wang, Q. & Kumar, R., 1992.** Predicting salinity in the chesapeake bay using backpropagation. Computers & Operations Research, 19(3-4): 277-285.
- Diaconis, P. & Efron, B., 1983. Computer-Intensive Methods in Statistics. Scientific American, 248(5): 116-130.
- Efron, B., 1979. 1977 Rietz Lecture Bootstrap Methods Another Look at the Jackknife. Annals of Statistics, 7(1): 1-26.
- **Efron, B., 1988.** Bootstrap Confidence-Intervals Good or Bad. Psychological Bulletin, 104(2): 293-296.
- Efron, B. & Tibshirani, R., 1993. An Introduction to the Bootstrap. Chapman & Hall, New York.
- **Eisenlohr, L., Bouzelboudjen, M., Kiraly, L. & Rossier, Y., 1997a.** Numerical versus statistical modelling of natural response of a karst hydrogeological system. Journal of Hydrology, 202(1-4): 244-262.
- **Eisenlohr, L., Kiraly, L., Bouzelboudjen, M. & Rossier, Y., 1997b.** Numerical simulation as a tool for checking the interpretation of karst spring hydrographs. Journal of Hydrology, 193(1-4): 306-315.
- Fletcher, R. & Reeves, C.M., 1964. Function Minimization by Conjugate Gradients. Computer Journal, 7: 149-154.
- French, M.N., Krajewski, W.F. & Cuykendall, R.R., 1992. Rainfall forecasting in space and time using a neural network. Journal of Hydrology, 137(1-4): 1-31.
- **Gabrovsek, F., Romanov, D. & Dreybrodt, W., 2004.** Early karstification in a dual-fracture aquifer: the role of exchange flow between prominent fractures and a dense net of fissures. Journal of Hydrology, 299(1-2): 45-66.
- Garcia, L.A. & Shigidi, A., 2006. Using neural networks for parameter estimation in ground water. Journal of Hydrology, 318(1-4): 215-231.
- Hani, A., Lallahem, S., Mania, J. & Djabri, L., 2006. On the use of finite-difference and neural-network models to evaluate the impact of underground water overexploitation. Hydrological Processes, 20(20): 4381-4390.
- Haykin, S., 1999. Neural Networks: A Comprehensive Foundation. Prentice Hall, New Jersey.
- Hebb, D.O., 1949. The Organization of Behavior. A neuropsychological theory. John Wiley & Sons, New York, pp. xix, 335.
- Jocson, J.M.U., Jenson, J.W. & Contractor, D.N., 2002. Recharge and aquifer response: Northern Guam Lens Aquifer, Guam, Mariana Islands. Journal of Hydrology, 260(1-4): 231-254.
- Karterakis, S.M., Karatzas, G.P., Nikolos, I.K. & Papadopoulou, M.P., 2007. Application of linear programming and differential evolutionary optimization methodologies for the solution of coastal subsurface water management problems subject to environmental criteria. Journal of Hydrology, 342(3-4): 270-282.
- **Kisi, O., 2010.** River suspended sediment concentration modeling using a neural differential evolution approach. Journal of Hydrology, 389(1-2): 227-235.
- Kourakos, G. & Mantoglou, A., 2009. Pumping optimization of coastal aquifers based on evolutionary algorithms and surrogate modular neural network models. Advances in Water Resources, 32(4): 507-521.
- Kovacs, A., Perrochet, P., Kiraly, L. & Jeannin, P.-Y., 2005. A quantitative method for the characterisation of karst aquifers based on spring hydrograph analysis. Journal of Hydrology, 303(1-4): 152-164.
- Kröse, B. & van der Smagt, P., 1996. An introduction to Neural Networks. The University of Amsterdam, pp. 135.
- Kuligowski, R.J. & Barros, A.P., 1998. Using artificial neural networks to estimate missing rainfall data. Journal of the American Water Resources Association, 34(6): 1437-1447.
- Kuo, Y.-M., Liu, C.-W. & Lin, K.-H., 2004. Evaluation of the ability of an artificial neural network model to assess the variation of groundwater quality in an area of blackfoot disease in Taiwan. Water Research, 38(1): 148-158.
- Lallahem, S. & Mania, J., 2003a. Evaluation and forecasting of daily groundwater outflow in a small chalky watershed. Hydrological Processes, 17(8): 1561-1577.
- Lallahem, S. & Mania, J., 2003b. A nonlinear rainfall-runoff model using neural network technique: example in fractured porous media. Mathematical and Computer Modelling, 37(9-10): 1047-1061.
- Lallahem, S., Mania, J., Hani, A. & Najjar, Y., 2005. On the use of neural networks to evaluate groundwater levels in fractured media. Journal of Hydrology, 307(1-4): 92-111.
- Long, A.J. & Derickson, R.G., 1999. Linear systems analysis in a karst aquifer. Journal of Hydrology, 219(3-4): 206-217.
- Maier, H.R. & Dandy, G.C., 2000. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications. Environmental Modelling and Software, 15(1): 101-124.
- Martin, J.B. & Dean, R.W., 2001. Exchange of water between conduits and matrix in the Floridan aquifer. Chemical Geology, 179(1-4): 145-165.
- Martin, V., Jaffre, J. & Roberts, J.E., 2005. Modeling Fractures and Barriers as Interfaces for Flow in Porous Media. SIAM Journal on Scientific Computing, 26(5): 1667-1691.
- Masumoto, K., 2003. Prediction error of groundwater behavior by inverse modeling with bootstrap re-sampling method. In: M. Komatsu, M. Nishigaki and I. Kono (Editors), Groundwater Engineering Recent Advances. Taylor & Francis, pp. 579-584.
- McCulloch, W.S. & Pitts, W., 1943. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. Bulletin of Mathematical Biophysics, 5: 115-133.
- Mougiakakou, S.G., Valavanis, I.K., Nikita, A. & Nikita, K.S., 2007. Differential diagnosis of CT focal liver lesions using texture features, feature selection and ensemble driven classifiers. Artificial Intelligence in Medicine, 41(1): 25-37.
- Nayak, P., Rao, Y. & Sudheer, K., 2006. Groundwater Level Forecasting in a Shallow Aquifer Using Artificial Neural Network Approach. Water Resources Management, 20(1): 77-90.
- Nayak, P.C., Sudheer, K.P., Rangan, D.M. & Ramasastri, K.S., 2004. A neuro-fuzzy computing technique for modeling hydrological time series. Journal of Hydrology, 291(1-2): 52-66.
- Nikolos, I.K., 2004. Inverse design of aerodynamic shapes using differential evolution coupled with artificial neural network, ERCOFTAC Conference in Design Optimization: Methods and Applications, Athens.
- Nikolos, I.K., Stergiadi, M., Papadopoulou, M.P. & Karatzas, G.P., 2008. Artificial neural networks as an alternative approach to groundwater numerical modelling and environmental design. Hydrological Processes, 22(17): 3337-3348.

- Papadopoulos, G., Edwards, P.J. & Murray, A.F., 2001. Confidence estimation methods for neural networks: A practical comparison. leee Transactions on Neural Networks, 12(6): 1278-1287.
- **Peterson, E.W. & Wicks, C.M., 2006.** Assessing the importance of conduit geometry and physical parameters in karst systems using the storm water management model (SWMM). Journal of Hydrology, 329(1-2): 294-305.
- Pinkus, A., 1999. Approximation theory of the MLP model in neural networks. 8: 143-195.
- **Price, K., Storn, R. & Lampinen, J., 2005.** Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization (Natural Computing Series). Springer-Verlag New York, Inc.
- Quinn, J.J., Tomasko, D. & Kuiper, J.A., 2006. Modeling complex flow in a karst aquifer. Sedimentary Geology Heterogeneity in Sedimentary Aquifers: Challenges for Characterization and Flow Modeling, 184(3-4): 343-351.
- Raman, H. & Sunilkumar, N., 1995. Multivariate Modeling of Water-Resources Time-Series Using Artificial Neural Networks. Hydrological Sciences Journal-Journal Des Sciences Hydrologiques, 40(2): 145-163.
- **Rivals, I. & Personnaz, L., 2000.** Construction of confidence intervals for neural networks based on least squares estimation. Neural Networks, 13(4-5): 463-484.
- **Rosenblatt, F., 1958.** The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain. Psychological Review, 65(6): 386-408.
- **Rozos, E. & Koutsoyiannis, D., 2006.** A multicell karstic aquifer model with alternative flow equations. Journal of Hydrology, 325(1-4): 340-355.
- Rumelhart, D.E., Hinton, G.E. & Williams, R.J., 1986. Learning representations by backpropagating errors. Nature, 323(6088): 533-536.
- Sahoo, G.B., Ray, C., Mehnert, E. & Keefer, D.A., 2006. Application of artificial neural networks to assess pesticide contamination in shallow groundwater. Science of The Total Environment, 367(1): 234-251.
- Sajikumar, N. & Thandaveswara, B.S., 1999. A non-linear rainfall-runoff model using an artificial neural network. Journal of Hydrology, 216(1-2): 32-55.
- Samani, N., Gohari-Moghadam, M. & Safavi, A.A., 2007. A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. Journal of Hydrology, 340(1-2): 1-11.
- Scanlon, B.R., Mace, R.E., Barrett, M.E. & Smith, B., 2003. Can we simulate regional groundwater flow in a karst system using equivalent porous media models? Case study, Barton Springs Edwards aquifer, USA. Journal of Hydrology, 276(1-4): 137-158.
- Schervish, M.J., 1995. Theory of statistics. Springer series in statistics. Springer-Verlag, New York, pp. xvi, 702 p.
- Schindel, G.M. et al., 2007. Hydrologic Data Report. 08-02, Edwards Aquifer Authority, San Antonio, Texas.
- **Shewchuk, J.R., 1994.** An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain. School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh.
- Shukla, M.B., Kok, R., Prasher, S.O., Clark, G. & Lacroix, R., 1996. Use of Artificial Neural Networks in Transient Drainage Design. Transactions of the ASABE, 39(1): 119-124.
- Silva, R.R. & Mery, D., 2007. Accuracy estimation of detection of casting defects in X-ray images using some statistical techniques. Insight, 49(10): 603-609.
- Singh, K., 1981. On the Asymptotic Accuracy of Efrons Bootstrap. Annals of Statistics, 9(6): 1187-1195.
- **Storn, R. & Price, K., 1995.** Differential Evolution A Simple and Efficient Adaptive Scheme for Global Optimization over Continuous Spaces. Technical Report TR-95-012, ICSI.
- Storn, R. & Price, K., 1997. Differential Evolution A Simple and Efficient Heuristic for global Optimization over Continuous Spaces. Journal of Global Optimization, 11(4): 341-359.

- Tan, S. & Gu, J., 2004. An Efficient Learning Algorithm for Feedforward Neural Network, Advances in Artificial Intelligence – IBERAMIA 2004. Lecture Notes in Computer Science. Springer Berlin/Heidelberg, pp. 767-777.
- **Thomas, S.H., Padilla-Crespo, E., Jardine, P.M., Sanford, R.A. & Loffler, F.E., 2009.** Diversity and Distribution of Anaeromyxobacter Strains in a Uranium-Contaminated Subsurface Environment with a Nonuniform Groundwater Flow. Applied and Environmental Microbiology, 75(11): 3679-3687.
- Trichakis, I., Nikolos, I. & Karatzas, G., In Press. Artificial Neural Network (ANN) Based Modeling for Karstic Groundwater Level Simulation. Water Resources Management, doi: 10.1007/s11269-010-9628-6.
- Trichakis, I.C., Nikolos, I.K. & Karatzas, G.P., 2009. Optimal selection of artificial neural network parameters for the prediction of a karstic aquifer's response. Hydrological Processes, 23(20): 2956-2969.
- **Tsujitani, M. & Sakon, M., 2009.** Analysis of Survival Data Having Time-Dependent Covariates. leee Transactions on Neural Networks, 20(3): 389-394.
- Wahrendorf, J. & Brown, C.C., 1980. Bootstrapping a Basic Inequality in the Analysis of Joint Action of 2 Drugs. Biometrics, 36(4): 653-657.
- White, H. & Racine, J., 2001. Statistical inference, the bootstrap, and neural-network modeling with application to foreign exchange rates. IEEE Transactions on Neural Networks, 12(4): 657-673.
- White, W.B., 2002. Karst hydrology: recent developments and open questions. Engineering Geology, 65(2-3): 85-105.
- Wosten, J.H.M., Pachepsky, Y.A. & Rawls, W.J., 2001. Pedotransfer functions: bridging the gap between available basic soil data and missing soil hydraulic characteristics. Journal of Hydrology, 251(3-4): 123-150.
- Zio, E., 1997. Approaching the inverse problem of parameter estimation in groundwater models by means of artificial neural networks. Progress in Nuclear Energy, 31(3): 303-315.
- Βλαχάβας, Ι., Κεφαλάς, Π., Βασιλειάδης, Ν., Ρεφανίδης, Ι., Κόκκορας, Φ., Σακελλαρίου, Η., 2002. Τεχνητή Νοημοσύνη. Εκδόσεις Γαρταγάνη, Θεσσαλονίκη.

Παραρτήματα



Διαθέσιμα Δεδομένα για την Περιοχή της Αττικής











Παραρτήματα 135





























Optimal selection of artificial neural network parameters for the prediction of a karstic aquifer's response

Ioannis C. Trichakis,¹ Ioannis K. Nikolos² and George P. Karatzas^{1*}

¹ Department of Environmental Engineering, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece ² Department of Production Engineering and Management, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece

Abstract:

The simulation of karstic aquifers is difficult using traditional groundwater numerical simulators, as the exact knowledge of the hydraulic characteristics of the physical system in small scale is rarely available and the numerical simulators produce results of limited reliability. In the present work, artificial neural networks (ANNs) are utilized to predict the response of a karstic aquifer, using the hydraulic head change per time step rather than the hydraulic head itself as output parameter of the network. As it will be demonstrated, in the first case a better approximation of the physical system's response is achieved as the change of the hydraulic head is more naturally connected to the input parameters of the network, which model the aquatic equilibrium of the system. The correlation of rainfall and hydraulic head change per time step was initially used to determine the time lag of the rainfall input data, which represents the time needed by the rainfall to percolate and reach the water table. In a second step, a differential evolution (DE) algorithm is utilized for the optimal selection of rainfall time lag as well as ANN's architecture and training parameters. Although a time consuming procedure, the improvement obtained suggests that the empirical determination of the ANN parameters and structure is not always sufficient and an optimization procedure, which minimizes the training and evaluation errors of the ANN, may provide substantially better simulation results. The optimized networks were finally used for midterm predictions (30 to 90 days ahead) of the hydraulic head, showing the ability of the ANN with hydraulic head change as output parameter to provide predictions with high accuracy at the end of the considered time period. Copyright © 2009 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS karstic aquifers; optimal parameters' selection; artificial neural networks; differential evolution

Received 30 January 2009; Accepted 16 June 2009

INTRODUCTION

In the recent past, artificial neural networks (ANNs) have found application in many different fields. The use of these universal approximators in hydrology in general or specifically in groundwater hydraulic head simulation is quite new, with a limited number of publications (Coppola et al., 2005b; Daliakopoulos et al., 2005; Lallahem et al., 2005; Nayak et al., 2006). The main objective of the present study is to examine the performance of ANN models in a groundwater flow simulation of a karstic aquifer. The simulation of a karstic aquifer is quite difficult using traditional methods due to the fact that there is an extremely high degree of spatial diversity of hydraulic characteristics, such as hydraulic conductivity, porosity, specific storage etc., that prevent the researcher from constructing a trustworthy model analogue to the physical system.

Karstic aquifers

The occurrence of karstic phenomena is always connected with the existence of certain types of bedrock, which have a high solubility in water and leave hardly any residual so that the gaps are enlarged with the dilution procedure and permit the water flow through. To those types of bedrock, which are known as karstic (Bögli, 1980), belong carbonate rocks, such as limestone and dolomite, which are quite widespread in Greece.

Carbonate karst aquifers have long been conceptualized as containing three types of porosity: matrix bedrock porosity, conduit porosity and fracture porosity. Very often, for simplification reasons it is considered that water flow occurs only in the conduits but there are cases where the intergranular porosity contributes a significant part of the flow depending on the rainfall period (wet–dry) (Martin and Dean, 2001). Observations of the water table show that the availability of freshwater in a coastal karst aquifer depends on the amount of water that arrives through the vadose zone rather than by the slow percolation through the small fissure network.

Simulation difficulty, regardless of the model, of the water table seems to be due to the significant variability of natural recharge rates and storage, or the presence of other variables (such as the exact location of the karstic channels or a complex unknown geological formation and also meteorological data that do not cover the area of study to its full extend) that are not accounted for in the model (Jocson *et al.*, 2002). For an accurate prediction two parameters are considered critical in groundwater simulation: (a) the ability to characterize

^{*} Correspondence to: George P. Karatzas, Department of Environmental Engineering, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece. E-mail: karatzas@mred.tuc.gr

precisely the geometrical and hydrological characteristics using geophysical methods for measurement, and (b) the increase of computational effort that will allow the view of flow and mass transport in three-dimensional flow systems and at large scales (Berkowitz, 2002).

Problems like the difficulty of simulating the exact mechanisms of the natural system and the need for more accurate measures of geometrical parameters can be overcome using a model based on neural network theory that is able to simulate the hydraulic head without thorough knowledge of the geological and hydrogeological properties of the natural system. Having a completely different approach than that of numerical models, where the aquifer is the simulation object, the use of an ANN model is focused on simulating the hydrologic cycle. This method has the advantage of applicability in any type of aquifer. The only requirement, yet not always easy to meet, is a variety of data (meteorological, groundwater levels) for long time periods that are not always available. These data time-series are all that is needed for training (calibrating) the neural network and for evaluating the reliability of the calibrated ANN model. ANNs can theoretically approximate complicated functions provided that sufficient training data and number of hidden nodes are used (Haykin, 1998). However, in real cases, limitations on their predictive and generalization capabilities are frequently observed, due to the lack of sufficient and trustworthy training data, the possible existence of other parameters that influence the physical system not taken into account, and the computational limitations that prevent the use of large networks and optimization procedures (Pinkus, 1999).

ANNs in hydrology

Among the fields of artificial intelligence (AI), the ANN modeling can be seen as a sophisticated data oriented modeling technique to find relationship between input and output patterns without using detailed process knowledge (Lallahem and Mania, 2003b). This is most convenient when the physical model is not explicitly known or extremely difficult to be described accurately, and/or when there are insufficient data to run a detailed model.

The artificial neural networks were initially formed as an oversimplified parallel to biological neural networks. The fact is that in both networks there are processing units (neurons), which communicate by sending signals to each other over a large number of weighted connections. In ANN each unit performs the relatively simple job of receiving input from neighbours or external sources and of using this to compute an output signal which is propagated to other units (Kröse and van der Smagt, 1996).

Several ANN applications in groundwater and surface water hydrology have been recently published. In groundwater hydrology these include simulation of a numerical model in order to obtain results in less time with smaller computational effort (Arndt *et al.*, 2005; Hani et al., 2006; Nikolos et al., 2008); estimation of aquifer parameters (hydraulic conductivity), using an inverse problem method where, using hydraulic head measurements, the aquifer parameters are calculated (Zio, 1997; Wosten et al., 2001; Garcia and Shigidi, 2006; Samani et al., 2007); forecasting spring outflow, combining a mathematical model that calculates input parameters of a neural network (Lallahem and Mania, 2003a); prediction of a flow field, which is still in initial level and combines a conventional numerical model with ANN in order to produce a map of the flow field (Benning et al., 2001); and prediction of contamination risk, based on conductance, precipitation, temperature, and pumping data (Kuo et al., 2004; Coppola et al., 2005a; Sahoo et al., 2006). In surface water hydrology the main implementation concerns catchment flow prediction for managing flood-risk or reservoir storage (Coulibaly et al., 2000; Aqil et al., 2007); rainfall runoff modeling, which can be either lumped or semi-distributed (Sajikumar and Thandaveswara, 1999; Lallahem and Mania, 2003b; Chen and Adams, 2006); and time series modeling, which in association with fuzzy logic has been applied for river flow modeling (Nayak et al., 2004).

In hydrology, the basic equation that all ANNs simulate is the aquatic equilibrium. Neural networks can simulate parameters like hydraulic head that are related to other parameters such as rainfall and evapotranspiration. During training with known input and output, the synaptic weights are adjusted so that the network yields, for a given input, an output as close as possible to the observed. This process incorporates within the weights any constant parameter of the aquatic equation. Because of the black box approach and the complicated structure of the network each constant parameter cannot be directly identified as a certain synaptic weight but the whole process is taking all the constant parameters into consideration through the training procedure, resulting in a non linear mapping between the input and output data. Regarding the karstic aquifers, the ANN model does not need to know all the complex parameters that affect the output, as it has an excellent ability to describe relations between parameters. Given the high correlation among aquatic equilibrium parameters, such as rainfall, groundwater storage change, runoff, evapotranspiration etc., all constant value factors can be omitted, as they will be incorporated in the weights that will be calculated by the ANN model.

Different ANN architectures can be used, such as feedforward, recurrent, or radial basis function networks, depending on the problem under consideration, as there is a possibility of one structure to respond better than the others. Moreover, the choice of the most suitable training algorithm can further improve the network's ability. Important work has been done in this field with the use and evaluation of different methods, in order to find the most suitable for the simulation of the study area (Daliakopoulos *et al.*, 2005). In the recent past there have been some attempts to apply ANN models for various aquifers. In northern France (Lallahem *et al.*, 2005), a multi layer perceptron (MLP) ANN model is used in order to simulate the response of the aquifer at a certain well location. For each data point (day) the input parameters are rainfall, effective rainfall, mean temperature, and evapotranspiration from two stations and twelve hydraulic heads from nearby wells. The authors also examined the case of using the hydraulic heads of more days as input parameters; however, there is a doubt whether there is a physical meaning in this.

The neural network that was applied in India (Nayak *et al.*, 2006) used as input the monthly rainfall, irrigation canal release, and the hydraulic heads, not only for the previous month, but for up to four months in advance. The output is the groundwater level at two well locations, and the results are reasonably accurate for up to four months prediction. However, the physical meaning has to be examined when it comes to a four month time lag either for rainfall or hydraulic head, since the water in karst aquifers flows with relatively high velocities.

A simpler network was used in New Jersey, USA (Coppola *et al.*, 2005b) that takes as input variables the 30-day mean temperature, rainfall, pumping rates from 3 wells, cumulative pumping rate, and the initial head at an observation well. The output is a 30 days ahead prediction of the head at the observation well. This is a case that can be used to get a rough picture of the system and its behaviour.

Many issues arise when ANN models are used to simulate a phenomenon subject to physical laws, due to their black box approach. There have been questions raised by researchers concerning the value of such models and the interpretation of their results (Christakos, 2002). It is true that when a model puts the emphasis on the mathematics and fails to incorporate some knowledge of the physical system, it will provide-more often than not-non interpretable results. With this fact in mind, the approach of this study focuses on the physical system as well as the ANN itself. The objective of this work is to support the construction of ANNs with the knowledge of the physical system and provide physical meaning to the parameters used as input and output parameters of the ANNs, in order to overcome their "black box approach". Calibrating with mathematical terms only is the problematic part of many ANN models, which may provide results that are in a poor agreement with the underlying physical laws. Two different multi layer perceptron ANNs were utilized; the first one was used to predict the hydraulic head at two observation wells, while the second one was modified to predict the change to the hydraulic head between two successive days, at the corresponding locations. A correlation analysis of the measured data was initially used to determine the time lag between the current day and the day used for input of the measured rainfall levels. A differential evolution algorithm was subsequently used to optimally define the time lag in the rainfall measurements as well as ANN's architecture and training parameters.

The proposed methodology suggests all input parameters to be directly or indirectly connected to the aquatic equilibrium and the ANN to be treated as a sophisticated analog to empirical models of the past. A major concern was to quantify the time lag of input parameters in order to retain a physical meaning, rather than just try to minimize the error in a mathematical way by adding or removing parameters as in (Lallahem *et al.*, 2005). The correlation coefficients of time series are thought to be a useful tool for time lag quantification without optimization, while the DE was used to further examine alternative possibilities and provide the optimal ones.

CASE STUDY

The area of study is found in the North West part of the prefecture of Attica in Greece at the pumping site of Mavrosouvala (Figure 1). The site provides water to some villages nearby, but is also connected to the main network of the capital (Athens), for times when surface sources can't cover the demand.

The geology of the aquifer consists mainly of limestone. The recharge of the aquifer comes from the mountains in the south. The water table is rather low, about 100 m below ground surface and 15–20 m above mean sea level (MSL). The wells of the pumping site are drilled so that the end is near MSL. Because of proximity to the coast, there is a fear of saltwater intrusion if the water table drops. When the water table gets below 12 m above MSL, an increase of the electrical conductivity has been observed (Demopoulos, 2000). This is a potential problem as the aquifer provides drinking water and it is of great importance to keep the quality high.

The karstic system of the region is not described accurately by a geophysical analysis; therefore, it is impossible to build a groundwater model such as dual porosity, or pipe flow, yet the neural networks can give an approximation on the aquifer response. A previous attempt to simulate this aquifer has used an equivalent porous medium (EPM) approach that gave moderate results (Trichakis and Baltas, 2006).

The available field data for the area consisted of daily values of temperature, rainfall (from three different stations in the region), pumping duration (of the 16



Figure 1. The map of the greater region

wells that are within the pumping site), and hydraulic heads from two observation wells (AS1 and N4). The first observation well (AS1) was also used for pumping. The fact that the pumping was not constant but frequently interrupted, and that pumping was taking place inside AS1 and close to N4 was the reason for the sudden drop of hydraulic heads and the consequent rise back.

THE ADOPTED METHODOLOGY

The equation that is actually simulated by a neural network in most hydrological applications is the water budget. The aquatic equilibrium is described by the following equation:

$$\Delta S = I - O + P - EPT \pm Q \tag{1}$$

where, ΔS is the change in the aquifer's storage, *I* is the inflow of the water basin, *O* is the outflow to other water basins, *P* is the precipitation in the basin, *EPT* is the evapotranspiration that takes place within the basin, and *Q* is the pumping/recharging. Naturally, having in mind the complexity of the physical system in most cases, there are no available data for all the time varying parameters. A selection of the most important is necessary when the input parameters of the network are chosen. In this case study rainfall, temperature, pumping rates, and previous day hydraulic heads were selected as input parameters.

Since the area of study is highly karstified and no surface streams exist within it (Demopoulos, 2000) it can be assumed that there is no surface inflow or outflow; therefore, I and O in (1) are not taken into account in this model. In case where surface streams are present, the flow rate of those streams should be added to the input parameters. P is a direct input to the ANN model (using three precipitation station measurements). The evapotranspiration is related to the temperature and probably the day number (i.e. the number of the day starting from 1 for January 1st to 365 for December 31st). The use or not of the day number as an input parameter will be decided by the optimization procedure, as it is later discussed. In empirical models widely used, such as the Penman or Penman-Montieth equation, data for daily mean temperature, wind speed, relative humidity, and solar radiation are needed. Data for wind speed and relative humidity were not available but would be desirable. The only available data connected to evapotranspiration were temperature and the day number, but since the latter's importance is questionable its use or not as an input was decided by the optimization process.

The initial thought of using the hydraulic head as an output parameter was due to this being a common practice (Arndt *et al.*, 2005; Coppola *et al.*, 2005b; Daliakopoulos *et al.*, 2005; Lallahem *et al.*, 2005; Nayak *et al.*, 2006; Feng *et al.*, 2008; Krishna *et al.*, 2008). However, the use of previous day hydraulic head as an input parameter

Copyright © 2009 John Wiley & Sons, Ltd.

and hydraulic head as an output parameter raises some questions. These two parameters were highly correlated (correlation coefficient >0.998) and this fact can give the ANN an undesirable bias and lead to underestimation of other input parameters' importance. In order to reduce the error, the option of having the hydraulic head change per time step (i.e. the difference of the hydraulic head at a certain day minus the one observed the previous day at the same location) rather than the actual hydraulic head as an output parameter was examined. The ANN training method had no modification other than the change of the output parameter in the training data set.

The artificial neural network

After the collection of field data, an ANN (Nikolos et al., 2008) was modified in order to describe the simulation of the aquifer's response at certain wells. The ANN adopted is a classic fully connected multilayer perceptron, trained in a supervised manner with the error back-propagation algorithm. Two hidden layers are used and a schematic representation of the network is presented in Figure 2. It should be noted that if a second hidden layer is introduced, the local features of the fitting function are extracted in the first hidden layer and the global features are extracted in the second hidden layer (Chester, 1990; Funahashi, 1989; Haykin, 1998). The activation function is the commonly used logistic function, while the synaptic weights are determined in the training procedure through successive weight adaptations. The number of nodes in each one of the hidden layers was initially set equal to 30; however, the final number of nodes in each hidden layer was the outcome of an optimization procedure, using a DE algorithm as it will be described in a following paragraph.

The back-propagation learning algorithm was applied in a sequential mode, where weight updating is performed after the presentation of each training example to the network. A learning-rate parameter equal to 0.01 and a momentum constant equal to 0.9 were used throughout this work. The available data set was initially partitioned into the training and testing parts. The first 80% of the available data was used for the training part and the rest 20% used to test the ANN (see for example Figures 3 and 4). Moreover, the training set was further partitioned into two disjoint subsets: the estimation subset used to train the ANN and the validation subset used to validate the ANN. The training and evaluation errors of the neural network are calculated as the summed squared error between desired and calculated output for the training and evaluation data sets respectively. In order to have comparable error values for all ANNs used in this work the errors are calculated for the normalized (from zero to one) values of the desired and calculated output:

$$E = \sum_{p} E^{p} \tag{2}$$

where

$$E^{p} = \frac{1}{2} \sum_{o=1}^{N_{o}} \left(d_{o}^{p} - y_{o}^{p} \right)^{2}$$
(3)



Figure 2. The neural network has 23 input parameters, 2 hidden layers, and 2 output parameters

and p refers to the input pattern (known input that yields known output), N_o is the number of output nodes, d_o^p the desired output of node o for input pattern p, and y_o^p is the calculated output (Kröse and van der Smagt, 1996).

Determination of the rainfall time lag

The rainfall that percolates through the ground needs some time before it reaches the water table. This time lag between rainfall and hydraulic head change is important in order to import the correct input parameter. For the time lag estimation, the correlation coefficients of rainfall and hydraulic head change for different time lags were calculated. The correlation coefficient of two time series A and B is given by:

$$\operatorname{Correl}(A, B) = \frac{\sum (a - \overline{a}) (b - \overline{b})}{\sqrt{\sum (a - \overline{a})^2 \sum (b - \overline{b})^2}}$$
(4)

where *a* and *b* are the elements and \overline{a} and \overline{b} their average of time series *A* and *B* respectively. The time lags with the highest correlations were selected in order to train two ANNs, the first having the hydraulic head as an output, and the second having the hydraulic head change per day as an output. In the latter case the results were also converted to hydraulic head, by adding the previous day hydraulic head, in order to be comparable to the results of the former case.

After the first simulation was completed, using time lags based on the correlation coefficients, a DE algorithm was implemented as an alternative method to search for the time lags that minimize the ANN training and evaluation errors. The DE algorithm used in this work has been employed in the past for the optimization of different groundwater management problems (Nikolos, 2004; Karterakis *et al.*, 2007). The optimization of time lags (parameters with physical meaning) was coupled with the optimization of the parameters of the ANN itself (number of nodes in each hidden layer and number of training epochs) in the same optimization procedure.

In order to perform such an optimization run in an automated manner, different data sets are needed for the ANN for different values of the rainfall time lag. For this reason a simple software was developed in order to automatically transform the initial data set and provide the appropriate input files to the ANN, given the different time lags and the use or not of the day number as an input parameter. Data points with incomplete set of input and output parameters were excluded from the data set. Moreover, when the data series are transposed for different time lags the excluded data points are placed in different values of time lag slightly different data series are used.

The differential evolution algorithm

DE (Price *et al.*, 2005; Storn and Price, 1995), being a recent development in the field of optimization algorithms, is a simply implemented evolutionary algorithm (EA) that has demonstrated better convergence performance than other EAs. The DE algorithm represents a type of evolutionary strategy, especially formed in such a way that it can effectively deal with the continuous optimization problems often encountered in engineering and environmental design. It can be easily modified to handle discrete and integer design variables, and multiple constraints. DE has been demonstrated to be one of the most promising novel EAs, in terms of efficiency, effectiveness, and robustness, and these are the reasons for its use in this work. The classic DE algorithm evolves a fixed



Figure 3. (a) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head (well 1). (b) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head change (well 1). (c) Computation of the hydraulic head using the results of the ANN for the hydraulic head change (well 1)

size population that is randomly initialized. After initializing the population, an iterative process is started and at each generation a new population is produced until a stopping condition is satisfied, which in our case is the maximum number of generations. At each generation, each member of the population can be replaced with a new generated one. The new element is a linear combination between a randomly selected element (which is called the donor) and the difference between two other randomly selected elements (members of the current population). The selection procedure is a deterministic one and each member of the population is compared, with respect to the cost function, with the corresponding new element. A detailed description of the algorithm used in this work is presented in Karterakis *et al.* (2007).

NUMERICAL RESULTS

Correlation coefficients analysis

The correlation coefficients of precipitation with hydraulic head change for different time lags are presented in Table I. Based on these results the best choice for the time lag is 2 days for rainfall station 1, 11 days for rainfall station 2, and 2 days for rainfall station 3. The problem of choosing a time lag for rainfall stations 1 and 3 was that the maximum correlation coefficient for each well appeared at different time lags (namely 11 and 2). The distance between the rainfall station and each one of the two wells is about the same and no differences in the geological characteristics (Demopoulos, 2000) exist that would explain a difference in time lag of 9 days



Figure 4. (a) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head (well 2). (b) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head change (well 2). (c) Computation of the hydraulic head using the results of the ANN for the hydraulic head change (well 2)

between the two wells; consequently, the initial thought of training separate neural networks for each well was abandoned as it lacked any physical meaning. In the first well the effect of pumping is much greater, leading to lower correlation coefficients of rainfall and hydraulic head change. For the second well, the corresponding correlation coefficients are not much higher, but have values almost twice as high as those for the first well. In order to select a unique time lag for both wells, the correlation coefficients for the second well were used, as they have higher values compared to those of the first well. The training and testing error of each ANN, as well as the root mean square error (RMSE) for the calibration (testing and evaluation) and the testing periods, is presented in Table II. Using hydraulic heads as ANN output parameters. Using the previously selected time lags, an ANN was trained for 1000 epochs with 30 nodes in each one of the two hidden layers (Haykin, 1998) and taking the hydraulic heads at the two wells as the output parameters. The corresponding results of the first ANN, containing both training/evaluation and testing periods (for each hydraulic head time series), are presented in Figures 3a and 4a for the two wells respectively. The training/evaluation and testing periods are separated by a vertical line in each graph. The training and evaluation errors were found to be equal to 6.4E-04 and 9.2E-04respectively. The fact that the evaluation error is larger than the training one suggests that the generalization achieved by the ANN is not adequate enough, which

Time lag (days)	R1-W1	R1-W2	R2-W1	R2-W2	R3-W1	R3-W2
0	0.0993	0.1948	0.0743	0.1386	0.0913	0.1628
1	0.0871	0.2088	0.0609	0.1576	0.0629	0.1939
2	0.1262	0.2517	0.0933	0.1838	0.1303	0.2374
3	0.0945	0.2375	0.0720	0.1811	0.0924	0.2152
4	0.1329	0.2350	-0.0189	0.1713	0.1221	0.2232
5	0.1089	0.2146	0.2052	0.1736	0.1110	0.2143
6	0.0927	0.1975	0.0729	0.1479	0.0926	0.1976
7	0.0806	0.1741	0.0453	0.1214	0.0747	0.1799
8	0.0812	0.1719	0.0303	0.1247	0.0786	0.1771
9	0.0852	0.1816	0.0834	0.0809	0.0873	0.1736
10	0.0627	0.1882	-0.0796	0.1487	0.0556	0.1727
11	0.1372	0.2153	0.2182	0.2231	0.1385	0.2013
12	0.0978	0.2140	0.0883	0.2203	0.0838	0.2034
13	0.0664	0.2034	0.0553	0.1334	0.0849	0.2169
14	0.1145	0.1935	0.0143	0.1230	0.1103	0.2075
15	0.0957	0.1794	0.1074	0.1165	0.1006	0.2051
16	0.0680	0.1635	0.0477	0.1098	0.0861	0.1964
17	0.0733	0.1592	0.0502	0.1059	0.0916	0.1905
18	0.0697	0.1480	0.0506	0.1019	0.0854	0.1806
19	0.0563	0.1493	0.0321	0.1038	0.1054	0.1820
20	0.0610	0.1565	0.0438	0.1731	0.0594	0.1810

Table I. Correlation coefficients of rainfall (from 3 rainfall stations—R1, R2, R3) and hydraulic head change (at 2 wells—W1, W2) for different time lags

Table II. Training, evaluation error (normalized), RMSE of the training and evaluation period, and RMSE of the testing period of each ANN with and without optimization

ANN	Training error	Evaluation error	RMSE training and evaluation [m]	RMSE testing [m]
Hydraulic head—w/o optimization	6-4E-04	9·2E-04	0.832	1.467
Hydraulic head change—w/o optimization	7.6E-04	4·2E-04	0.094	0.142
Hydraulic head—with optimization	1.1E-05	6.9E-06	0.093	0.206
Hydraulic head change—with optimization	6·9E-04	3.0E-04	0.091	0.139

is supported by the underestimation of the testing data by approximately 1 m. The RMSE for this ANN was 0.832 m for the training and evaluation period and 1.467 m for the testing period.

Using hydraulic head changes per time step as ANN output parameters. Using the same procedure a second ANN, having now hydraulic head change per time step at the two wells as output parameters, was trained, evaluated, and tested, with the training and evaluation errors being 7.6E-04 and 4.2E-04 respectively. The RMSE in this case is 0.094 m for the training and evaluation period and 0.142 m for the testing period which is an order of magnitude less than that of the previous ANN. The hydraulic head change has a much smaller range than the hydraulic head itself, and takes in most cases (absolute) values of less than 0.5 m. The simulation results are compared to the measured data in Figures 3b and 4b for the two wells respectively. As it can be observed, the general trend is described well enough by the ANN, although some over and underestimations are present, which have a more persistent character. The high peak around time step 265 in Figures 3b and 4b, which cannot be approximated by the ANN, may be related to a rainfall incident that was not recorded by the measurement devices. A

gap exists in the available data set a few days before this incident, which could explain this observation. Sudden drops, followed by sudden rises, especially for the first well, can be observed (e.g. data points 147-148, 151-152 and 157-158), which ANN fails to simulate. These are related to the fact that well 1 is also a pumping well and these sudden variations are connected to the starting and stopping of the pumping procedure. The second well is not a pumping well itself, but a pumping well is located in the near district. The ANN can not simulate such local and transient phenomena that take place for a time period that is much smaller than the time step used in ANN training (one day for this study - based on the available data). However, despite all these discrepancies, when the results of the hydraulic head change are converted to hydraulic head, by adding the hydraulic head of the previous day (Figures 3c and 4c), an obvious and significant improvement is accomplished compared to the former simulation attempt (Figures 3a and 4a, Table II).

Taking into account the fact that both simulations were obtained with the same topology in the ANNs and the same input variables, it seems that the use of the change to the hydraulic head rather than the hydraulic head itself should be used as the output parameter of the ANN procedure. This is supported by the fact that the change

Variable	Low bound	Up bound	Step
Use/no use of day number	0	1	1
Time lag of rainfall station 1	1	15	1
Time lag of rainfall station 2	1	15	1
Time lag of rainfall station 3	1	15	1
Number of nodes on the first hidden layer	5	50	1
Number of nodes on the second hidden layer	5	50	1
Number of epochs of the ANN	500	1000	50

Table III. Lower and upper bounds of the parameters under optimization

in the hydraulic head per time step is actually the result of the inflow minus the outflow of the aquifer, which is represented here by the input parameters of the ANN. Even without using an optimization procedure for the time lag and the ANN topology, the obtained results are very good, given the high complexity of the problem and the fractured input data-series. Nevertheless, in order to exploit the possibilities for further improving the prediction and generalization capabilities of the ANN, a differential evolution algorithm was applied to optimally determine the ANN's topology as well as the rainfall time lag.

Optimization of the ANN using the DE algorithm

The target of the DE optimization procedure was to optimize the previously presented ANNs with respect to their training and evaluation errors, using as free parameters of the optimization procedure (1) the time lag, used for the rainfall at the corresponding ANN input nodes (three parameters), (2) the number of nodes at each one of the two hidden layers (two parameters), (3) the number of epochs used for training the ANN (one parameter), and d) the use or not of the day number as an input parameter of the ANN (one parameter). The upper and lower bounds of the decision variables in the optimization procedure are shown in Table III.

The cost function of the optimization procedure was set equal to the average value of ANN's training and evaluation errors ((training error + evaluation error)/2). The training error is an indicator of how well an ANN simulates the data trained with. The evaluation error is an indicator of the ANN's ability to interpolate or extrapolate in other regions of the input parameters' hyperspace, not used in the training procedure. Incorporating the evaluation error in the cost function ensures the overtraining avoidance while keeping the generalization ability of the ANN as high as possible.

The optimization run was a time consuming operation, which needed approximately 14 days to complete in a Pentium D 3GHz processor, using 100 generations and a population size equal to 35 (five times the number of the free parameters of the optimization procedure). The values used for weighting factor F and crossover constant C_r of the DE optimizer (Storn and Price, 1995; Price *et al.*, 2005) were 0.6 and 0.45 respectively.

Using hydraulic heads as ANN output parameters. For the first ANN, which used hydraulic heads as output parameters, the optimal values of the free parameters of the optimization procedure are (1) 2, 12 and 11 days time lag for the three rainfall measurements, (2) 37 and 39 nodes at the two hidden layers, c) 900 epochs of training, and d) no use of the day number of the time series as an input parameter to the ANN.

The optimization procedure resulted in a value of the training error equal to 1.1E-05, and for the evaluation error equal to 6.9E-06, which is an improvement of approximately two orders of magnitude compared to the corresponding values for the same network without optimization, presented in section, Using hydraulic heads as ANN output parameters. The RMSE improved by approximately one order of magnitude to 0.093 m for the training and evaluation period and 0.206 m for the testing period. A graph containing the convergence history of the corresponding DE run is presented in Figure 5. The capabilities of the optimized ANN are presented for the two wells in Figures 6a and 7a respectively. Compared to the results of the non-optimized network (Figures 3a and 4a respectively), a substantial improvement is evident for both wells.

As it was previously mentioned well 1 is used for pumping also, which results in sudden drops of its hydraulic head when pumping is taking place; these drops cannot be predicted by the ANN as they are local and transient effects. Such drops are not as pronounced in well 2, as it is not used as a pumping well (although a pumping well is placed near by). During the testing period for well 1, the ANN under predicts the highest value of 24.01 m on day 349 by approximately 0.35 m. For the second well the under prediction of the highest value in the testing period (26.03 m) is about 0.33 m.



Figure 5. Convergence history of the DE optimization procedure for the first ANN



Figure 6. (a) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head (well 1) after DE optimization. (b) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head change (well 1) after DE optimization. (c) Computation of the hydraulic head using the results of the ANN for the hydraulic head change (well 1) after DE optimization

These values are by no means small when water management considerations are taking place.

Using hydraulic head changes per time step as ANN output parameters. For the second ANN, which used hydraulic head changes per time step as output parameters, the optimal values of the free parameters of the optimization procedure are (1) 7, 4, and 3 days time lag for the three rainfall measurements, (2) 43 and 41 nodes at the two hidden layers, (3) 1000 epochs of training, and d) use of the day number of the time series as an input parameter to the ANN.

The optimization procedure resulted in a value of the training error equal to 6.9E-04, and for the evaluation

error equal to 3.0E-04, which amount to an improvement of approximately 9% and 28% respectively, compared to the corresponding values for the same network without optimization, presented in section, Using hydraulic head changes per time step as ANN output parameters. The improvement of the RMSE was even smaller 2.8% for the training and evaluation period and 2.2% for the testing period. A graph containing the convergence history of the corresponding DE run is presented in Figure 8. The small improvement compared to the non-optimized ANN was expected as the latter already provided very good results. The capabilities of the optimized ANN are presented for the two wells in Figures 6b and 7b respectively, concerning the hydraulic head changes. Figures 6c and



Figure 7. (a) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head (well 2) after DE optimization. (b) Observed and simulated (using ANN) values of the hydraulic head change (well 2) after DE optimization. (c) Computation of the hydraulic head using the results of the ANN for the hydraulic head change (well 2) after DE optimization

7c contain the corresponding calculations of the resulting hydraulic heads after adding the hydraulic head changes to the hydraulic heads of the previous day. The results of the optimized ANN based on the hydraulic heads changes are extremely close to the measured data and obviously better than the results of the ANN that uses hydraulic heads as output parameters. However this difference is much less pronounced for the DE optimized networks than the non-optimized ones.

Using both ANNs for midterm prediction

In order to evaluate the ability of the previously optimized ANNs to predict the hydraulic heads for periods of time longer than just one day (midterm prediction, in our case 30 to 90 days ahead), the simulated rather than



Figure 8. Convergence history of the DE optimization procedure for the second ANN

the observed previous day hydraulic heads were used as input to the ANNs (the rest input parameters being



Figure 9. Midterm prediction of the hydraulic head using the results of the first ANN (well $1 - 1^{st}$ and 2^{nd} time periods)



Figure 10. Midterm prediction of the hydraulic head using the results of the first ANN (well $2 - 1^{st}$ and 2^{nd} time periods)

the measured ones). However, due to the gaps in the available data time series, the computation process must restart after a gap, using measured values of the previous day hydraulic heads, as there are no simulated values available. This prevented the testing of the ANN for longer than 45 days.

For the first ANN, optimized using DE, the testing data sets for mid term prediction were those parts of the testing data set that had no gaps, that is from day number 120 (363) to 161 (404) and from 164 (406) to 180 (422). The numbers in parentheses correspond to the time series position, as in the horizontal axis in Figures 6a and 7a.

The first ANN (having hydraulic heads as output) was used for midterm prediction and the corresponding results for the two time periods and the two wells are presented in Figures 9 and 10. The accumulated error at the end of the first testing period (40 days) was 0.9 m and 1.16 m for the two wells respectively. The accumulated error at the end of the second testing period (15 days) was 0.56 m and 0.72 m respectively. For groundwater management applications such errors are far from negligible and better approximation is needed for practical applications.

For the second ANN (DE optimized), which uses the hydraulic head changes as output parameters, the testing data sets for midterm prediction were from day number 117 (355) to 162 (401) and from 165 (403) to 181 (419). The numbers in parentheses correspond to the time series position, as in the horizontal axis in Figures 6b and 7b. Figures 11a and 12a contain the comparisons for the hydraulic head change per time step for wells 1 and 2, for the first testing period of 45 days and the second testing period of 16 days. Using these results, the graphs in Figures 11b and 12b were prepared, which show the corresponding hydraulic heads, for each well. The errors at the end of the first testing period (45 days) are much lower than those computed using the first ANN, namely -0.01 m and 0.03 m for the first and second well respectively. The errors at the end of the second testing period (16 days) are -0.001 m and 0.01 m respectively.

The midterm prediction results provide an additional evidence for the superiority of selecting the hydraulic head changes than the hydraulic heads as output parameters of the ANN. Additionally, the ability of the second ANN to provide accurate results for midterm predictions was demonstrated.

CONCLUDING REMARKS

The simulation of groundwater levels in karstic aquifers with ANN models can provide valuable results in cases with inadequate information on the geological characteristics of the karstic system, provided that a detailed data time series of the hydrometeorological parameters is available. In this work two different ANNs were proposed, both having input parameters highly associated with the aquatic equilibrium variables, in order to provide physical meaning to the constructed network. The first network predicted the hydraulic head at two observation wells, while the second one was modified in order to predict the change to the hydraulic head between two successive days, at the corresponding locations.

A correct determination of the time lag between the current day and the day used for input to the ANN of the measured rainfall levels was proved to be critical in the correct modeling of the aquifer's aquatic equilibrium. Because of the karstic nature of the aquifer this time lag should not be very long. A correlation analysis of the measured data was initially used to determine these time lags for both networks. The simulation results showed that the first network failed to provide good approximation of the physical phenomenon, while the second one showed a significantly improved behavior. This is connected to the fact that the hydraulic head change per time step rather than the hydraulic head itself is related to the aquatic equilibrium parameter ΔS (Equation (1)) and as a result the hydraulic head change is better related to all ANN's input parameters, which model the water inflow and outflow, as Equation (1) clearly states. The results of the RMSE for the testing period support this reasoning as they show that even after the optimization process, the ANN with hydraulic head has a higher RMSE than the one using hydraulic head change per time step even before the optimization of the latter. As a result, an improved association between input and output parameters can be achieved and the network obtains better physical meaning. It is therefore suggested that, when groundwater simulation is taking place using ANNs, the hydraulic head change per time step rather



Figure 11. a) Midterm prediction of the hydraulic head change using the results of the second ANN (well $1 - 1^{st}$ and 2^{nd} time periods) and b) Midterm prediction of the hydraulic head using the results of the second ANN (well $1 - 1^{st}$ and 2^{nd} time period)



Figure 12. a) Midterm prediction of the hydraulic head change using the results of the second ANN (well $2 - 1^{st}$ and 2^{nd} time period) and b) Midterm prediction of the hydraulic head using the results of the second ANN (well $2 - 1^{st}$ and 2^{nd} time period)

than the hydraulic head itself should be used as it has more physical meaning.

In a second stage, a Differential Evolution algorithm was used to optimally define the time lag in the rainfall measurements as well as ANN's architecture and training parameters. A significant improvement in the behavior of the first network was achieved, while for the second one the improvement was smaller as the initial results were already very good. The optimization procedure was time consuming and there is a question if such a procedure can be easily used for practical implementations. Moreover, the improvement obtained for the second network was marginal for the case considered (improvement of approximately 9% and 28% for the training and the evaluation errors respectively). However, the improvement obtained for the first network suggests that the empirical determination of the ANN parameters and structure is not always sufficient and an optimization procedure may provide substantially better simulation results.

In previous sections it was made clear that the hydraulic head change per time step is more physically connected to the aquatic equilibrium parameters which model the inflow/outflow to the aquifer, rather than the hydraulic head itself. As a result, an ANN model can more easily represent the first relationship rather than the second one, without needing special treatments for the ANN structure and training procedure. It seems that simple (non-optimized) ANNs can easily model this relationship. However, in the case of using the hydraulic head as an output parameter, the relationship between the input and output parameters seems to be more complicated; as a result the region of possible ANN structures that can provide acceptable predictions becomes narrow and an optimization algorithm is needed to find the optimal structure in this region. In the case where hydraulic head change is used, the solution without optimization is already very close to the optimal one, so the use of an optimizer provides relatively small improvements. In the case where hydraulic head is used, the optimizer can provide substantial improvements as the initial ANN may be far from the optimal region.

Although DE optimization was time consuming it may be proved time efficient if compared to empirical trial-and-error practices. Moreover, the optimization procedure is fully automated and can be accelerated if parallel implementation is adopted. The computational effort of the optimization procedure may be decreased if a smaller number of decision variables are used, by omitting those variables with a small impact on the cost function. The DE optimization algorithm can not provide such information and a separate sensitivity analysis should be performed. However, this is beyond the scope of the present work and may be considered for future work.

Both (DE optimized) ANNs were finally used for midterm prediction and they were tested for two time periods of about 45 and 16 days. For these predictions the simulated hydraulic heads of the previous day were used as inputs to the networks. The error between the predicted and the measured hydraulic heads at the end of each testing period was computed, providing an additional evidence for the superiority of selecting the hydraulic head change per time step as the output parameter to the ANN for achieving accurate prediction results for longer time periods.

Ongoing research includes the implementation and testing of the previously proposed methodology to other

case studies of karstic aquifers, although such experimental data series are very rare in the open literature.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to thank the water company of Athens (EYDAP) for providing the necessary data for this work. Special thanks to Mr Apostolos Nasikas and Mr Dimitris Kallis for their collaboration.

REFERENCES

- Aqil M, Kita I, Yano A, Nishiyama S. 2007. Neural networks for real time catchment flow modeling and prediction. *Water Resources Management* 21: 1781–1796.
- Arndt O, Barth T, Freisleben B, Grauer M. 2005. Approximating a finite element model by neural network prediction for facility optimization in groundwater engineering. *European Journal of Operational Research Advances in Complex Systems Modeling* **166**: 769–781.
- Benning RM, Becker TM, Delgado A. 2001. Initial studies of predicting flow fields with an ANN hybrid. *Advances in Engineering Software* **32**: 895–901.
- Berkowitz B. 2002. Characterizing flow and transport in fractured geological media: a review. Advances in Water Resources 25: 861–884.
- Bögli A. 1980. Karst Hydrology and Physical Speleology. Springer-Verlag: Berlin; New York.
- Chen J, Adams BJ. 2006. Integration of artificial neural networks with conceptual models in rainfall-runoff modeling. *Journal of Hydrology* **318**: 232–249.
- Chester DL. 1990. Why two hidden layers are better than one, International Joint Conference on Neural Networks, Washington, DC; 265–268.
- Christakos G. 2002. On the assimilation of uncertain physical knowledge bases: Bayesian and non-Bayesian techniques. Advances in Water Resources 25: 1257–1274.
- Coppola EA, McLane CF, Poulton MM, Szidarovszky F, Magelky RD. 2005a. Predicting conductance due to upconing using neural networks. *Ground Water* **43**: 827–836.
- Coppola EA, Rana AJ, Poulton MM, Szidarovszky F, Uhl VW. 2005b. A neural network model for predicting aquifer water level elevations. *Ground Water* **43**: 231–241.
- Coulibaly P, Anctil F, Bobee B. 2000. Daily reservoir inflow forecasting using artificial neural networks with stopped training approach. *Journal* of Hydrology 230: 244–257.
- Daliakopoulos IN, Coulibaly P, Tsanis IK. 2005. Groundwater level forecasting using artificial neural networks. *Journal of Hydrology* 309: 229–240.
- Demopoulos G. 2000. Hydrogeological Study of the Mavrosouvala Area in Attica (in Greek). Technical Report, Water Company of Athens.
- Feng S, Kang S, Huo Z, Chen S, Mao X. 2008. Neural networks to simulate regional ground water levels affected by human activities. *Ground Water* 46: 80–90.
- Funahashi K-I. 1989. On the approximate realization of continuous mappings by neural networks. *Neural Networks* 2: 183–192.
- Garcia LA, Shigidi A. 2006. Using neural networks for parameter estimation in ground water. *Journal of Hydrology* **318**: 215–231.
- Hani A, Lallahem S, Mania J, Djabri L. 2006. On the use of finitedifference and neural-network models to evaluate the impact of underground water overexploitation. *Hydrological Processes* 20: 4381–4390.
- Haykin S. 1998. Neural Networks: A Comprehensive Foundation, 2nd edn. Prentice Hall: New Jersey.
- Jocson JMU, Jenson JW, Contractor DN. 2002. Recharge and aquifer response: Northern Guam Lens Aquifer, Guam, Mariana Islands. *Journal of Hydrology* 260: 231–254.

- Karterakis SM, Karatzas GP, Nikolos IK, Papadopoulou MP. 2007. Application of linear programming and differential evolutionary optimization methodologies for the solution of coastal subsurface water management problems subject to environmental criteria. *Journal of Hydrology* 342: 270–282.
- Krishna B, Satyaji RYR, Vijaya T. 2008. Modelling groundwater levels in an urban coastal aquifer using artificial neural networks. *Hydrological Processes* 22: 1180–1188.
- Kröse B, van der Smagt P. 1996. *An Introduction to Neural Networks*. The University of Amsterdam: Amsterdam; 135.
- Kuo Y-M, Liu C-W, Lin K-H. 2004. Evaluation of the ability of an artificial neural network model to assess the variation of groundwater quality in an area of blackfoot disease in Taiwan. *Water Research* **38**: 148–158.
- Lallahem S, Mania J. 2003a. Evaluation and forecasting of daily groundwater outflow in a small chalky watershed. *Hydrological Processes* 17: 1561–1577.
- Lallahem S, Mania J. 2003b. A nonlinear rainfall-runoff model using neural network technique: example in fractured porous media. *Mathematical and Computer Modelling* 37: 1047–1061.
- Lallahem S, Mania J, Hani A, Najjar Y. 2005. On the use of neural networks to evaluate groundwater levels in fractured media. *Journal* of Hydrology **307**: 92–111.
- Martin JB, Dean RW. 2001. Exchange of water between conduits and matrix in the Floridan aquifer. *Chemical Geology* 179: 145–165.
- Nayak P, Rao Y, Sudheer K. 2006. Groundwater Level Forecasting in a Shallow Aquifer Using Artificial Neural Network Approach. Water Resources Management 20: 77–90.
- Nayak PC, Sudheer KP, Rangan DM, Ramasastri KS. 2004. A neurofuzzy computing technique for modeling hydrological time series. *Journal of Hydrology* **291**: 52–66.
- Nikolos IK. 2004. Inverse design of aerodynamic shapes using differential evolution coupled with artificial neural network, *ERCOFTAC Conference in Design Optimization: Methods and Applications*, Athens.
- Nikolos IK, Stergiadi M, Papadopoulou MP, Karatzas GP. 2008. Artificial neural networks as an alternative approach to groundwater numerical modelling and environmental design. *Hydrological Processes* **22**: 3337–3348.
- Pinkus A. 1999. Approximation theory of the MLP model in neural networks. Acta Numerica 8: 143–195, DOI:110.1017/ S0962492900002919.
- Price K, Storn R, Lampinen J. 2005. *Differential Evolution: A Practical Approach to Global Optimization (Natural Computing Series)*. Springer-Verlag, Inc: New York.
- Sahoo GB, Ray C, Mehnert E, Keefer DA. 2006. Application of artificial neural networks to assess pesticide contamination in shallow groundwater. *Science of The Total Environment* 367: 234–251.
- Sajikumar N, Thandaveswara BS. 1999. A non-linear rainfall-runoff model using an artificial neural network. *Journal of Hydrology* 216: 32–55.
- Samani N, Gohari-Moghadam M, Safavi AA. 2007. A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. *Journal of Hydrology* **340**: 1–11.
- Storn R, Price K. 1995. Differential evolution-a simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces, Technical Report TR-95-012. http://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/summary?doi= 10.1.1.1.9696.
- Trichakis I, Baltas E. 2006. The Application of the PTC model in the Mavrosouvala area, *Proceedings of the Protection and Restoration of the Environment VIII International Conference*, Chania, Greece.
- Wosten JHM, Pachepsky YA, Rawls WJ. 2001. Pedotransfer functions: bridging the gap between available basic soil data and missing soil hydraulic characteristics. *Journal of Hydrology* **251**: 123–150.
- Zio E. 1997. Approaching the inverse problem of parameter estimation in groundwater models by means of artificial neural networks. *Progress in Nuclear Energy* **31**: 303–315.

Artificial Neural Network (ANN) Based Modeling for Karstic Groundwater Level Simulation

Ioannis C. Trichakis · Ioannis K. Nikolos · G. P. Karatzas

Received: 4 November 2009 / Accepted: 2 March 2010 / Published online: 18 March 2010 © Springer Science+Business Media B.V. 2010

Abstract A relatively new method of addressing different hydrological problems is the use of artificial neural networks (ANN). In groundwater management ANNs are usually used to predict the hydraulic head at a well location. ANNs can prove to be very useful because, unlike numerical groundwater models, they are very easy to implement in karstic regions without the need of explicit knowledge of the exact flow conduit geometry and they avoid the creation of extremely complex models in the rare cases when all the necessary information is available. With hydrological parameters like rainfall and temperature, as well as with hydrogeological parameters like pumping rates from nearby wells as input, the ANN applies a black box approach and yields the simulated hydraulic head. During the calibration process the network is trained using a set of available field data and its performance is evaluated with a different set. Available measured data from Edward's aquifer in Texas, USA are used in this work to train and evaluate the proposed ANN. The Edwards Aquifer is a unique groundwater system and one of the most prolific artesian aquifers in the world. The present work focuses on simulation of hydraulic head change at an observation well in the area. The adopted ANN is a classic fully connected multilayer perceptron, with two hidden layers. All input parameters are directly or indirectly connected to the aquatic equilibrium and the ANN is treated as a sophisticated analogue to empirical models of the past. A correlation analysis of the measured data

Department of Environmental Engineering, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania, Greece e-mail: karatzas@mred.tuc.gr

I. C. Trichakis e-mail: ioannis.trichakis@enveng.tuc.gr

I. K. Nikolos

Department of Production Engineering and Management, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania, Greece e-mail: jnikolo@dpem.tuc.gr

I. C. Trichakis · G. P. Karatzas (⊠)

is used to determine the time lag between the current day and the day used for input of the measured rainfall levels. After the calibration process the testing data were used in order to check the ability of the ANN to interpolate or extrapolate in other regions, not used in the training procedure. The results show that there is a need for exact knowledge of pumping from each well in karstic aquifers as it is difficult to simulate the sudden drops and rises, which in this case can be more than 6 ft (approx. 2 m). That aside, the ANN is still a useful way to simulate karstic aquifers that are difficult to be simulated by numerical groundwater models.

Keywords Artificial neural networks · Hydraulic head simulation · Karstic aquifer

1 Introduction

The objective of this study is to examine whether the simulation of a karstic aquifer hydraulic head can be performed by the sole use of a model based on the neural network theory. The karstic aquifers are quite difficult to simulate with numerical methods due to the fact that there is an extremely high degree of spatial diversity of hydraulic characteristics, such as hydraulic conductivity, specific storage etc. that prevent the researcher of constructing a trustworthy model analogue to the physical aquifer.

With a completely different approach than that of numerical models, where the aquifer is the simulation object, the use of a neural network model is focused on simulating the hydrologic cycle. This approach has the advantage of applicability in any type of aquifer. The only requirement is a variety of data (meteorological, groundwater levels) in long periods of time that are not always available.

1.1 Karstic Aquifers

The occurrence of karstic phenomena is always connected with the existence of certain types of bedrock, which have a high solubility in water and leave hardly any residual so that the gaps are enlarged with the dilution procedure and permit the water flow through. To those bedrock, which are known as karstic (Boegli 1980) belong carbonate rocks such as limestone and dolomite. Karstic aquifers respond differently than porous because water can travel through the fractures of the rock with high velocities. In most cases the governing equations are these of flow in open channel rather than through porous medium. Given the complexity of the fracture network which makes it practically impossible to describe exactly and simulate an aquifer in large scale, scientists try to find ways to bypass this issue using conceptual models that simplify the problem such as equivalent porous medium (Scanlon et al. 2003). Another method that has been applied lately is the use of an artificial neural network to simulate water table fluctuation at observation well locations.

1.2 Artificial Neural Networks in Hydrology

In the recent past, artificial neural networks (ANN) have found application in many hydrological problems (Bhattacharjya and Datta 2005; Coulibaly et al. 2000; Garcia

and Shigidi 2006; Lallahem and Mania 2003; Maier and Dandy 2000; Mohanty et al. 2009; Safavi et al. 2009). In groundwater management ANNs are usually used to predict the hydraulic head at a well location (Coppola et al. 2005; Feng et al. 2008; Lallahem et al. 2005; Nayak et al. 2006; Trichakis et al. 2009). The reason behind using ANNs is that numerical groundwater modeling can be very difficult to implement in karstic regions as the exact geometry of the flow conduits is rarely available and even when it is available in detail the aquifer is still very difficult to be simulated.

The neural networks were initially formed as an oversimplified parallel to 'biological' models. The fact is that in both cases there are processing units (neurons), which communicate by sending signals to each other over a large number of weighted connections. In ANN each unit performs the relatively simple job of receiving input from neighbors or external sources and use of this to compute an output signal which is propagated to other units (Haykin 1999).

A black box approach is used by ANNs to simulate the hydraulic head, taking as input hydrological parameters such as rainfall and temperature, as well as hydrogeological parameters such as pumping rates from nearby wells. Available field data are used to train the network and evaluate the training process. The fact with neural network implementation in karstic aquifers is that the model does not need to know all the complex parameters that affect the output as it has an excellent ability to describe relations between parameters.

The reason why explicit knowledge of the complex hydrogeological parameters is not necessary is simple. The factors of the aquatic equilibrium can be divided into two categories: those that change over time such as rainfall, temperature etc, and the constant ones such as hydraulic conductivity. If during training of an ANN all timechanging parameters are given, the constants will be incorporated in the weights that will be calculated.

2 Area of Study

Available measured data from Edward's aquifer in Texas, USA are used in this work to train and evaluate the proposed ANN (Nikolos et al. 2008). The San Antonio Segment of the Balcones Fault Zone Edwards Aquifer in south central Texas is one of the largest karst aquifer systems in the USA. The aquifer covers an area approximately 180 miles long and 5 to 40 miles wide and is the primary water source for much of this area, including the City of San Antonio, America's seventh largest city. The city has a semi-arid climate, and this makes water from the Edwards aquifer very important. Besides providing drinking water for cities in the region, the Edwards Aquifer is the principal source of water for agriculture and industry and provides spring-flow required for endangered species habitat, as well as recreational purposes and downstream uses.

Approximately 1 250 miles² of Edwards Limestone is exposed at the ground surface and composes the recharge zone of the aquifer. Streams flow south from the drainage area (the Texas Hill Country) and lose all or most of their baseflow as they cross the recharge zone. In addition, part of the rain that falls directly on the recharge zone also enters the aquifer. Groundwater moves through the aquifer and ultimately discharges from a number of locations. The residence time of water in the aquifer ranges from a few hours or days to many years, depending on the depth of circulation, location, and other aquifer parameters (Schindel et al. 2007).

The Edwards Aquifer (Fig. 1) is a karst aquifer, characterized by the presence of sinkholes, sinking streams, caves, large springs, and a well-integrated subsurface drainage system. It is one of the most productive groundwater systems in the USA, characterized by extremely high capacity water wells and high spring discharges. The aquifer exhibits extremely high (cavernous) porosity and permeability, characteristic of many karst aquifers. In contrast, aquifers that occur in sand and gravel or in other rock types, such as sandstone, have a much lower permeability. Because the Edwards Aquifer is known for having areas of high permeability, it allows the transmission of large volumes of water, consequently enabling groundwater levels to respond quickly to rainfall (recharge) events (Schindel et al. 2007).



Fig. 1 Map of Bexar County showing location of monitoring well J-17 [AY-68-37-203](Schindel et al. 2007)

3 Methodology

The equation that is actually simulated by a neural network in most hydrological applications is the water budget. The present work focuses on simulation of hydraulic head change at an observation well. The adopted ANN is a classic fully connected multilayer perceptron, trained in a supervised manner with the error backpropagation algorithm. Two hidden layers are used, thus the local features of the fitting function are extracted in the first hidden layer and the global features are extracted in the second hidden layer (Chester 1990). The activation function is the commonly used logistic function, while the synaptic weights are determined in the training procedure through successive weight adaptations.

All input parameters are directly or indirectly connected to the aquatic equilibrium and the ANN is treated as a sophisticated analogue to empirical models of the past. More specifically, among the input parameters the precipitation and the pumping are parts of the water budget while day number and temperature are connected to evapotranspiration. The hydraulic head is associated with the inflow and outflow of the aquifer. A question arose when rainfall and pumping were concerned of whether the impact to hydraulic head change was instant or it delayed by a time lag. A major concern was to quantify the time lag of input parameters in order to retain a physical meaning. A correlation analysis of the measured data was used to determine the input parameters.

The output parameter that was selected is also highly connected with another aquatic equilibrium factor i.e. the change in the aquifer's storage. In similar works in the past, the output parameters have always been hydraulic head, yet the high correlation of the hydraulic head with the hydraulic head of the previous day that is an input parameter and the more focused training of an algorithm that the use of hydraulic head change provides, were the reasons for this choice.

After the correlation analysis the final neural network consisted of 14 input nodes namely (day number, temperature, rainfall from 6 days, cumulative pumping from 4 days, peak pumping and hydraulic head of the previous day. Each hidden layer consisted of 40 nodes and the output layer had the hydraulic head change of the observation well as a single output node (Fig 2). This is the structure of the ANN that was used henceforth.

Fig. 2 Architecture of a fully connected artificial neural network with fourteen input nodes, 40 nodes in each of the two hidden layers and a single output node



Using back-propagation the neural network modified the connecting weights in order to minimize the training error. During the training phase 80% of the available data were used to train the model, and the rest of the data were kept for further testing. Moreover, 10% of the training data are used for evaluation purposes, and the evaluation error is computed in order to avoid overtraining. The training and evaluation errors of the neural network are calculated as the summed squared error between desired and calculated output for the training and evaluation data sets respectively.

$$E = \sum_{p} \frac{1}{2} \sum_{o=1}^{N_{o}} (d_{o}^{p} - y_{o}^{p})^{2}, \qquad (1)$$

where p refers to the input pattern (known input that yield known output), No is the number of output nodes, d_o^p the desired output of node o for input pattern p, and y_o^p is the calculated output (Kroese and van der Smagt 1996). The testing, using the remaining 20% of the available data not used for training, provided useful information about the ability of the network to generalize its results can show if the network can expand knowledge of the system behaviour to unknown areas (interpolate and extrapolate). Testing is the final measure against overtraining and shows, if passed, that the model can be used with fictional scenarios about future condition of the system (e.g. climatic change models). In order to ensure that the training was successful, a testing data set (that was not used during calibration) is then processed through the trained ANN and the network produces simulated output. This is compared to the actually observed in order to establish the relevant error. In order to evaluate the calibration process and quantify the magnitude of the error, the bias, mean absolute error and root mean square error were subsequently calculated and conclusions were deduced.

It is important to note here that if new field data are collected and the researcher wants to update the ANN weights, the calibration process must be repeated.

4 Results

4.1 Correlation Analysis

The correlation coefficients of rainfall or pumping with hydraulic head change for different values of time lag shown in Table 1 suggest that there is high correlation for more than 1 day between rainfall or pumping and hydraulic head change. This has a physical meaning as the effect of a rainfall incident or pumping might be apparent in the water table fluctuation for more than 1 day.

If a threshold of a 0.05 correlation coefficient is chosen, 6 days of rainfall and 4 days of hydraulic head will qualify as input parameters. In case the correlation coefficient is misleading and the days are not so many the neural network should be able to detect this during training and eliminate the effect of the unnecessary parameters when changing the weights.

Table 1 Correlation coefficients of the rainfall	Time lag	Rainfall—Hydraulic	Pumping—Hydraulic		
and pumping with the		head change	head change		
hydraulic head change for	0	0.3225	-0.2870		
different values of time lag	1	0.4059	-0.2515		
	2	0.2451	-0.1278		
	3	0.1577	-0.0725		
	4	0.1000	-0.0409		
	5	0.0793	-0.0176		
	6	0.0489	-0.0131		
	7	0.0390	-0.0172		
	8	0.0268	-0.0071		
	9	0.0184	0.0123		
	10	0.0168	0.0171		

4.2 Calibration and Testing

The neural network was trained for 1 000 epochs and needed less than two hours on a computer with a 3.00 GHz Pentium D processor. The calibration procedure produced the weights as well as the training and evaluation error of 1.8E-04 and 2.0E-04 respectively. The values do not suggest overtraining and show that a fair training has been achieved.

After training and evaluation of the neural network the produced weights were used to obtain the simulated values of the hydraulic head change for the whole data set (Fig. 3). A detail of Fig. 3 is shown in Fig. 4. The hydraulic head change values were then converted to hydraulic head (Fig. 4). The general trend of the observed values is followed by the simulated ones. However, the neural network has



Fig. 3 Observed and simulated values of hydraulic head change at monitoring well J-17 (AY-68-37-203)



Fig. 4 Detail of observed and simulated values of hydraulic head at monitoring well J-17 (AY-68-37-203)

failed to describe some extreme points that can be attributed to pumping near the observation well. It was a known issue of the initial data set that the pumping value was cumulative for all wells in the region rather than separate for each well. This is expected to import a certain error to the simulation.

Because of the large amount of data and the difficulty to get a clear picture of the calibration's value just from Figs. 3 and 4, a statistical processing of the yielded error was considered necessary in order to check the reliability of the simulation. The error of the simulation was divided in zones of 1 ft and the frequency of days with error belonging to the corresponding zones was computed and then divided by the total number of days. The corresponding results, (Table 2) demonstrate that the error for about 95% of the days spans between 0 and 1 ft (0 and 30 cm). This error can be considered as acceptable, given the high fluctuation of the aquifer's hydraulic head.

From the error yielded and the subsequent calculations of its statistical characteristics, the neural network showed an overall bias (average error) of 0.12 ft (3.7 cm), a mean absolute error of 0.33 ft (10 cm) and a root mean square error of 0.53 ft (16 cm).

Table 2 Frequency and	Bin range	Frequency [d]	Probability
in a certain range	-2	1	0.01%
	-1	48	0.68%
	0	3 008	42.31%
	1	3 730	52.47%
	2	255	3.59%
	3	44	0.62%
	4	11	0.15%
	5	7	0.10%
	6	5	0.07%
	Total	7 109	100.00%
The bias suggests that the simulated values tend to underestimate the observed values and it can be explained by the extreme values which are not simulated by the ANN model. The error is not negligible when it comes to water resources management but in groundwater modeling terms it is not considered unreasonable. The extreme values that are not simulated by the ANN model are attributed to the fact that the pumping activities take place very close to observation locations. Considering the large amount of available data, the extreme values (in Figs. 3 and 4) are a small portion of the available data, which is supported by the results of the statistical analysis.

5 Conclusions

Artificial neural networks are considered as a promising tool for karstic groundwater simulation when detailed time series of hydrological and meteorological data are available. Unlike numerical groundwater models, which require thorough knowledge of the geological characteristics of the rocks and the geometrical characteristics of fractures in karstic aquifers, neural networks use a black box approach that considers only changing parts of the aquatic equilibrium and incorporates the stable parts in the networks weights through a training process. However, a large number of diverse data is needed in order to achieve a successful training and any lack of a parameter that has an effect in the water budget introduces an error in the model that cannot be eliminated otherwise.

When trying to decide the input parameters of the neural network a correlation coefficient analysis of the parameters can give hints of which parameters are important and should be included. In some cases when the effect of a certain parameter is obvious for more than 1 day, the input nodes can include multiple days of a certain parameter. If the training is successful it should nullify the weights of any unnecessary input nodes.

In many cases the most difficult parameter to find is pumping from each one of the corresponding wells in the region. The exact knowledge of this parameter however is critical in order to train the network to effectively describe resulting abrupt changes of hydraulic head, very significant in karstic aquifers. The cumulative pumping of all the wells in a region can be used to describe the trend but not the sudden fluctuations of the water table. This lack of data is thought to be the main reason that introduced the error in data points with high values of hydraulic head change.

The resulting error between observed and simulated hydraulic head change is in 95% of the days between 0 and 1 ft (0 and 30 cm). This is not negligible when water management is concerned, but is acceptable for groundwater simulation.

When an artificial neural network is going to be used for water resources management, data from each well in the region are needed as well as rainfall and temperature data from as many stations in the region are available, while when surface runoff occurs it should also be an input variable. All data must be available with the same frequency (daily, weekly etc.).

Due to the black box approach, the ANN does not provide information on the importance of each input to the output neuron. This can be achieved by a subsequent principal component analysis (PCA), which although beyond the scope of this work, is an interesting field for future research.

References

- Bhattacharjya RK, Datta B (2005) Optimal management of coastal aquifers using linked simulation optimization approach. Water Resour Manage 19:295–320
- Boegli A (1980) Karst hydrology and physical speleology. Springer-Verlag, Berlin
- Chester DL (1990) Why two hidden layers are better than one. In: Proceedings of the international joint conference on neural networks, vol I. Theory Track Neural and Cognitive Sciences Track, Washington, pp 265–268
- Coppola EA, Rana AJ, Poulton MM, Szidarovszky F, Uhl VW (2005) A neural network model for predicting aquifer water level elevations. Ground Water 43:231–241
- Coulibaly P, Anctil F, Bobee B (2000) Daily reservoir inflow forecasting using artificial neural networks with stopped training approach. J Hydrol 230:244–257
- Feng S, Kang S, Huo Z, Chen S, Mao X (2008) Neural networks to simulate regional ground water levels affected by human activities. Ground Water 46:80–90
- Garcia LA, Shigidi A (2006) Using neural networks for parameter estimation in ground water. J Hydrol 318:215–231
- Haykin S (1999) Neural networks: a comprehensive foundation. Prentice Hall, New Jersey
- Kroese B, van der Smagt P (1996) An introduction to neural networks. University of Amsterdam, Amsterdam
- Lallahem S, Mania J (2003) A nonlinear rainfall-runoff model using neural network technique: example in fractured porous media. Math Comput Model 37:1047–1061
- Lallahem S, Mania J, Hani A, Najjar Y (2005) On the use of neural networks to evaluate groundwater levels in fractured media. J Hydrol 307:92–111
- Maier HR, Dandy GC (2000) Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications. Environ Model Softw 15:101–124
- Mohanty S, Jha MK, Kumar A, Sudheer KP (2009) Artificial neural network modeling for groundwater level forecasting in a river island of Eastern India. Water Resour Manage. Online first doi:10.1007/s11269-009-9527-x
- Nayak P, Rao Y, Sudheer K (2006) Groundwater level forecasting in a shallow aquifer using artificial neural network approach. Water Resour Manage 20:77–90
- Nikolos IK, Stergiadi M, Papadopoulou MP, Karatzas GP (2008) Artificial neural networks as an alternative approach to groundwater numerical modelling and environmental design. Hydrol Process 22:3337–3348
- Safavi HR, Darzi F, Mariño MA (2009) Simulation–optimization modeling of conjunctive use of surface water and groundwater. Water Resour Manage. Online first doi:10.1007/s11269-009-9533-z
- Scanlon BR, Mace RE, Barrett ME, Smith B (2003) Can we simulate regional groundwater flow in a karst system using equivalent porous media models? Case study, Barton Springs Edwards aquifer, USA. J Hydrol 276:137–158
- Schindel GM, Hamilton JM, Johnson S, Mireles J, Esquilin R, Burgoon C, Luevano G, Gregory D, Gloyd R, Sterzenback J, Mendoza R (2007) Hydrologic data report. Edwards Aquifer Authority. http://www.edwardsaquifer.org. Accessed August 2008
- Trichakis IC, Nikolos IK, Karatzas GP (2009) Optimal selection of artificial neural network parameters for the prediction of a karstic aquifer's response. Hydrol Process 23:2956–2969

Comparison of bootstrap confidence intervals for an ANN model of a karstic aquifer response

Ioannis Trichakis,¹ Ioannis Nikolos² and George P. Karatzas^{1*}

¹ Department of Environmental Engineering, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece ² Department of Production Engineering and Management, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece

Abstract:

Following many applications artificial neural networks (ANNs) have found in hydrology, a question has been rising for quantification of the output uncertainty. A pre-optimized ANN simulated the hydraulic head change at two observation wells, having as input hydrological and meteorological parameters. In order to calculate confidence intervals (CI) for the ANN output two bootstrap methods were examined namely bootstrap percentile and BCa (Bias-Corrected and accelerated). The actual coverage of the CI was compared to the theoretical coverage for different certainty levels as a means of examining the method's reliability. The results of this work support the idea that the bootstrap methods provide a simple tool for confidence interval computation of ANNs. Comparing the two methods, the percentile requires fewer calculations and yields narrower intervals with similar actual coverage to that of BCa. Overall, the actual coverage was proved lower than desired when not modeled points were present in the data subset. Copyright © 2011 John Wiley & Sons, Ltd.

KEY WORDS confidence intervals; artificial neural networks; bootstrap; karstic aquifers

Received 9 June 2010; Accepted 28 January 2011

INTRODUCTION

The increasing use of artificial neural networks (ANNs) in hydrology (Aitkenhead and Cooper, 2008; Aqil *et al.*, 2007; Kisi, 2007; Kisi, 2008; Krishna *et al.*, 2008; Nikolos *et al.*, 2008; Samani *et al.*, 2007; Szidarovszky *et al.*, 2007; Terzic *et al.*, 2007; Trichakis *et al.*, 2009; Varol *et al.*, 2007) combined with a significant growth in available computational power over the years made it both interesting and possible to start considering the computation of ANN confidence intervals (CI).

Moving from a deterministic ANN output to a stochastic one has long been considered challenging (Maier and Dandy, 2000). Yet, in the past decade, a debate has started amongst hydrology researchers on whether it is preferred to quantify a model's uncertainty or not. This dispute is about whether uncertainty quantification is helpful or leads to undermining the hydrological models. The problem arises especially when large uncertainty intervals are calculated, that are neither accurate nor can be useful to a decision maker, thus diminishing the value of the model itself and any possibility for future use (Todini and Mantovan, 2007). In other words it could discard a useful model. On the other hand, an issue might come forth if the intervals are narrower than they should, and are underestimating the model's uncertainty, as this could lead to incorrect judgment. Despite issues though that will certainly come forth and which should be dealt with, it

is most likely that the future of hydrological modelling is heading towards stochastic outputs, rather than deterministic. Especially in environmental management it is often desired to have a quantification of the model's output uncertainty (Beven, 2008; Maier and Dandy, 2000). The supporters of the idea are mainly focusing on the quality of an environmental model and claim that if decision makers are to utilize a model they need to know not only the model's output but also the probability of that output. The fact that stakeholders and model users have always had to deal with uncertainties has been addressed in the past (Beven, 2006) as well as other often used arguments of the supporters of deterministic models.

The determination of an ANN uncertainty may be of great importance when the management of a dam or the pumping scheme of a region prone to saltwater intrusion from a neighbouring coast is concerned. For example, in groundwater management, it might be critical for the water level at certain observation wells to be above a certain value in order to prevent quality deterioration (Karterakis *et al.*, 2007; Nikolos *et al.*, 2008). With a deterministic model, the decision maker does not have a tool to help in the choice of a value according to the desired confidence level.

The major issue when it comes to ANNs is that if one avoids the black-box approach and tries to handle them as functions, in order for example to find their Hessian matrix, they have very complicated mathematical formulas and their partial derivatives over each synaptic weight are respectively quite complex. Therefore, since traditional methods used for CI generation

^{*} Correspondence to: George P. Karatzas, Department of Environmental Engineering, Technical University of Crete, Polytechneioupolis, Chania 73100, Greece. E-mail: karatzas@mred.tuc.gr

are practically inapplicable, a practical alternative is the use of resampling techniques such as the bootstrap. The method's scientific background is well documented (Efron and Tibshirani, 1993) and has been used in the past for CI calculation of ANNs or simpler models (Abel and Berger, 1986; Bolle *et al.*, 2004; Brey, 1990; Carpenter, 1999; Cawley *et al.*, 2007; Chernick *et al.*, 1985; Egmont-Petersen *et al.*, 2005; Ferrari and Cribari-Neto, 1998; Ferrari and Cribari-Neto, 1999).

This work focuses on different ways to create CI for an already optimized ANN used to forecast daily change of an aquifer's level. The bootstrap methodology has been chosen due to its ability to deal with the rather difficult task of CI generation of an ANN, as previous attempts to create CI with traditional statistical methods, treating the ANN as a function, have failed due to the complexity of the problem. An application of a least squares approximation proposed in a research article (Rivals and Personnaz, 2000) led to a very illconditioned matrix that was impossible to be inverted. The assumption of normally distributed error that is made in least squares methods (Chryssolouris et al., 1996) is not satisfied. Since the error distribution is non-Gaussian, least-squares estimation is not suitable and, regardless of what estimation procedure is used, it is difficult to determine confidence intervals for the parameters or to obtain prediction intervals for the response variable (Chernick, 2008).

METHODOLOGY

Deterministic ANN model

With a concept motivated by the human neural network, artificial neural networks are mathematical structures that can be used to simulate various functions. There are cases where datasets of dependent (output) and independent (input) parameters have been observed but a mathematical formula of the function is not known. The ANNs are able to map the underlying function that produces a specific output for a given input. When long time series of inputs-outputs are available, then a successful training of the ANN is possible, leading to a trustworthy analogue to the physical model. However the training's evaluation and the researcher's certainty about the ANN's results are disputable. The most widely applied method for estimating the training procedure value is testing with observed unused data. If the error of the testing phase is near that of the training one, the training is considered successful. The question of uncertainty estimation in ANNs was not asked in the early stages of the method's implementation in environmental modelling but has been arising frequently over the past years (Chryssolouris et al., 1996).

Due to their black-box approach and ability to approximate a wide variety of functional responses ANNs have found application both in surface and groundwater hydrology (Coppola *et al.*, 2005; Lallahem and Mania, 2003; Lallahem *et al.*, 2005; Nayak *et al.*, 2006). The input parameters are usually connected to the aquatic equilibrium and the output parameters can be runoff of a watershed, spring discharge, groundwater level or other hydrological parameters. During training the ANN is given observed data series of hydrological and meteorological data for input and output parameters and the weights of the network are adjusted in order to describe the pattern that connects the former with the latter. After training, the network is able to predict output of any set of input parameters in a deterministic way: the network produces always the same set of output data for a certain set of input data.

The main reason for ANN application in groundwater hydrology is that it can be used in regions where the exact geological characteristics are not available to the researcher or too complex to be described accurately with a numerical model. In that situation the ANN can give a simulation of the aquifer's response with the condition of available hydrologic data time-series.

In a previous work of the present authors (Trichakis *et al.*, 2009) different ANNs were compared for groundwater level simulation. The daily change of hydraulic head has been proven to be a better choice as an ANN output, compared to the hydraulic head itself. The network architecture was optimized by a differential evolutionary algorithm in order to minimize the error value. The optimized network architecture is illustrated in Figure 1.

The ANN is a fully connected Multi-Layer Perceptron trained in a supervised way using the error back propagation algorithm. The ANN consists of the input layer, two hidden layers and the output layer. The activation function of both hidden and output nodes is the commonly used logistic function.

Input parameters of the optimal ANN were the temperature, precipitation from three stations, pumping from 16 nearby wells, the hydraulic head at the observation wells the previous day and the day number. The use of day number as an input parameter was a result of the optimisation procedure. It is related with evapotranspiration in



Figure 1. The optimal ANN architecture as obtained from a previous work (Trichakis *et al.*, 2009)

a physical sense but the connection is rather faint compared to the high degree of correlation the other input variables have with the aquatic equilibrium.

The optimisation was also employed for the rainfall time lag determination. The time lag has the physical meaning that rainfall does not have an immediate effect on groundwater level, especially in large river basins, and the input parameters must be selected in a way that takes this into consideration. The three optimal time lags were 7, 4, and 3 days for the corresponding stations.

The hidden nodes number of the two hidden layers was also optimized so that the ANN is complex enough to describe the physical model, without the risk of overtraining. The optimized network has 43 nodes in the first and 41 nodes in the second hidden layer. The optimal number of epochs, that is, complete presentations of the entire training set, was 1000 and the optimisation procedure ensured that the ANN is not over-trained.

The observation and pumping wells are located at the pumping site of Mavrosouvala, placed in the northwest part of the prefecture of Attica in Greece. Besides covering for local water demand, the site is used for supplying the main network of the capital (Athens) with potable water, for times when the main surface sources are depleted.

The aquifer geology consists mainly of karstified limestone. The aquifer recharge comes from the mountains in the south (Mount Parnitha). The water table is rather low, about 100 m below ground surface and 15-20 m above mean sea level (MSL). Owing to its nearness to the coast (less than 6 km), there is a fear of saltwater intrusion if the water table drops (Trichakis *et al.*, 2009).

In this work, the previously optimized ANN for the observation wells of the specific region was selected as the deterministic model and confidence intervals of the output were estimated for different certainty levels.

Bootstrap methodology applied in ANNs

The complete dataset (used for ANN's training and validation) consisted of 419 data points, i.e. days with available data for all input and output parameters. It was divided to a calibration data-set and a testing one. The first set was further divided, by the ANN algorithm during the calibration process, to training and evaluation datasets. Though the evaluation data-set has practically the same function with the testing data-set, the existence of the latter is mandated since the former consists of randomly chosen data points from the calibration dataset. This makes it impossible to have a separate visual representation of the training and evaluation data-set results. The first 80% of the time-sorted original data were used for calibration and each data point had a 0.7 probability of being selected for the training dataset. This means that in the end, approximately 56% of the field measurements constituted the training, 24% the evaluation and 20% the testing data-set.

The bootstrap is a statistical method first introduced by Efron (Efron, 1979). It is a form of a larger class of methods that resample from the original data-set and thus are called resampling procedures. It is a method to determine the estimator of a particular parameter of interest and the accuracy of that estimator (Chernick, 2008). When there is a sample with size B of a certain parameter, this sample has an empirical distribution that has easy to obtain statistical characteristics. The bootstrap idea is simply to replace the unknown population distributiin with the known empirical distribution. Properties of the estimator, such as its standard error, are then determined based on the empirical distribution. Practical application of the technique requires the generation of bootstrap samples (i.e. samples obtained by independently sampling with replacement from the original sample). From the bootstrap sampling, a Monte Carlo approximation of the bootstrap estimate is obtained. The procedure is straightforward (Chernick, 2008):

- 1. Generate a sample with replacement from the original sample (a bootstrap sample),
- 2. Compute the value of the parameter of interest obtained by using the bootstrap sample in place of the original sample,
- 3. Repeat steps 1 and 2 for B times.

By replicating steps 1 and 2 for B times, a Monte Carlo approximation to the distribution of the parameter of interest is obtained. The key idea of bootstrap is that, for *B* sufficiently large, the Monte Carlo approximation is nearly the same as the actual distribution. Although this might seem odd at first glance, the accuracy of bootstrap has been demonstrated in many published articles (Bickel and Freedman, 1981; Schervish, 1995; Singh, 1981). The second order accuracy and the convergence of the method are also well documented (Singh, 1981).

The procedure that was followed in order to produce the ANN confidence intervals is illustrated in Figure 2. The original calibration data-set constituted of 335 data points (days) with observed inputs that produce observed output values. With a random selection procedure, 2000 discrete bootstrap calibration data-sets were produced from the original calibration data-set. All different bootstrap data-sets have the same length as the original one (i.e. 335 data points). For the generation of each bootstrap data-set, data points are chosen with replacement from the original calibration data-set and each data point has the same probability of being selected (1/335). This procedure continues until there are 335 data points in each bootstrap data-set.

Each dataset in the original training set consists of observed hydrological and hydrogeological data that yielded an observed response. It is reasonable to assume that if the same input pattern reoccurred, the same response would be expected. Therefore, the bootstrap calibration datasets that contain some datasets of the original training set more than once still retain a physical meaning. They still contain observed values of input parameters that yield observed values of the output parameters.



Figure 2. Illustration of the bootstrap methodology for artificial neural network confidence intervals calculation

Each of the 2000 bootstrap calibration datasets was used to train the network. After each training process, the bootstrap neural weights were used for bootstrap output values calculation for both calibration and testing datasets (419 data points). In the end of the process there were 2000 bootstrap output values for each of the 419 data points. The main objective of this work, and perhaps the most intriguing task in the whole process, was the selection of the endpoints that constitute the confidence intervals of the output values of the ANN.

In their book, Efron and Tibshirani (Efron and Tibshirani, 1993) propose four different ways to create confidence intervals utilising bootstrap. The simplest one includes an estimation of the standard error and the assumption that the output's random value is independent of the input value and follows a certain distribution (e.g. normal or Student). If $z^{(\alpha)}$ indicates the $(100 \cdot \alpha)$ th percentile point of a N(0,1) distribution, then the confidence intervals of a parameter $\hat{\theta}$ with standard error \hat{se} and confidence level $100 \cdot (1 - 2\alpha)\%$ are calculated as:

$$\hat{\theta}_{lo} = \hat{\theta} - z^{(1-\alpha)} \cdot \hat{se} \text{ and } \hat{\theta}_{up} = \hat{\theta} - z^{(\alpha)} \cdot \hat{se}$$
 (1)

A way to bypass the need for the assumption that the output follows a known distribution is the calculation of percentile confidence intervals. The percentile method is the most obvious way to construct a confidence interval for a parameter based on bootstrap estimates (Efron and Tibshirani, 1993). After the bootstrapping procedure, there are B bootstrap estimates of the output. If the population is large enough an interval that contains i.e. 90% of the bootstrap estimates can be considered to contain the actual value of the output with 90% certainty. The most sensible way to choose the intervals is to find the ones that exclude the lowest 5% and the highest 5%.

A bootstrap confidence interval generated in this way is called a percentile method confidence interval. In order to avoid assumptions that the output follows a certain distribution, the percentile method was the first to be deployed in this work. In order to calculate the percentile intervals, the 2000 bootstrap output values are sorted in ascending order and the upper and lower value for a specific confidence level can be found. For example, if the nominal coverage is 95% ($\alpha = 0.025$) the lower value would be the value that lies in the sorted list at the place (αB) = (0.025 2000) = 50. Likewise, the upper value of the confidence interval would be the 1950th sorted in ascending order value.

In order to remove the bias from the results, an improved methodology has been proposed (Efron and Tibshirani, 1993), called BCa (Bias-Corrected and Accelerated), which requires the calculation of the bias correction (\hat{z}_0) and the acceleration (α). The bias correction is easily estimated as the inverse standard normal cumulative probability of the percentage of bootstrap estimates that are less than the simulated (model) value.

$$\hat{z}_0 = \Phi^{-1} \left(\frac{\text{\# of bootstrap estimates less}}{B} \right)$$
(2)

 $\Phi^{-1}(\cdot)$ indicating the inverse function of a standard normal cumulative distribution function.

For the acceleration Efron proposes to be computed using the jackknife values of the statistic $\hat{\theta} = s(x)$. Let $x_{(i)}$ be the original sample with the *i*th point x_i deleted, let $\hat{\theta}_{(i)} = s(x_{(i)})$ and define $\hat{\theta}_{(\cdot)} = \sum_{i=1}^{n} \hat{\theta}_{(i)}/n$. Then

$$\widehat{a} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{\theta}_{(\cdot)}\widehat{\theta}_{(i)}\right)^{3}}{6\left[\sum_{i=1}^{n} \left(\widehat{\theta}_{(\cdot)} - \widehat{\theta}_{(i)}\right)^{2}\right]^{3/2}}$$
(3)

The bias correction moves the average of the empirical distribution to the opposite direction of the bias while the acceleration refers to the rate of change of the standard error of $\hat{\theta}$ with respect to the true parameter value θ .

The BCa interval for intended coverage $1-2\alpha$, is given by

$$BCa: \left(\widehat{\theta}_{lo}, \widehat{\theta}_{up}\right) = \left(\widehat{\theta}^{*(\alpha_1)}, \widehat{\theta}^{*(\alpha_2)}\right)$$
(4)

where

$$\alpha_1 = \Phi\left(\hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(\alpha)}}{1 - \hat{\alpha}(\hat{z}_0 + z^{(\alpha)})}\right)$$
(5)

$$\alpha_2 = \Phi\left(\hat{z}_0 + \frac{\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)}}{1 - \hat{\alpha}(\hat{z}_0 + z^{(1-\alpha)})}\right)$$
(6)

 $\Phi(\cdot)$ indicating the standard normal cumulative distribution function and $z^{(\alpha)}$ is the (100 α)th percentile point of a standard normal distribution (Efron and Tibshirani, 1993).

The BCa method was also used in order to produce theoretically more sophisticated CI. The bias correction and acceleration were calculated as previously described. The former needed no extra computations, while the latter demanded a number of calibrations in order to acquire the jackknife estimates.

Noteworthy is the fact that throughout the whole process, bootstrapping pairs was preferred since it is less sensitive to assumptions (Efron and Tibshirani, 1993).

The fourth way is referred to as ABC intervals, which stands for 'Approximate Bootstrap Confidence' intervals. The resampling vector that consists of the proportions of the initial data that are chosen in a bootstrap sample is calculated instead of the bootstrap samples and a mathematical expression of the parameter as a function of the resampling vector is required. Unfortunately, this cannot be applied in our problem since the ANN structure is too complex and such a mathematical expression is inexistent.

The bootstrap applications range among diverse scientific fields from medical research for the analysis of drug testing data (Wahrendorf and Brown, 1980) to geostatistics for variability determination of kriging contours (Diaconis and Efron, 1983), and from astronomy statistics, astrostatistics (Babu and Feigelson, 1996), to psychology, for confidence intervals generation (Efron, 1988). Nearly every field that utilizes statistical methods for data analysis might find a use for bootstrap. A bibliographical review about the bootstrap methodology (Chernick, 2008) revealed more than 2000 references in the subject.

Most commonly ANNs are used for classification or regression. The former includes pattern recognition and bootstrap can be applied to evaluate performance (da Silva et al., 2005; Mougiakakou et al., 2007; Silva and Mery, 2007), the latter has a wider range of applications, yet, bootstrapping in that case can be applied for the production of confidence intervals for the simulated value (Papadopoulos et al., 2001), selection of optimum number of hidden nodes (Tsujitani and Sakon, 2009) or for determining the relevance of network inputs (White and Racine, 2001). The use of bootstrap for CI generation in groundwater hydrology has also found applications during the past years for estimation of groundwater level (Cooley, 1997; Masumoto, 2003), mass transfer coefficients (Chrysikopoulos et al., 2002) or even microbial distribution (Thomas et al., 2009).

The adopted methodology however has its own disadvantages. The produced confidence intervals do not take into account the uncertainty that derives from the network's inability to exactly describe some of the observed values. This is because the technique only considers that the different output we might have obtained is due to the different input that might have occurred. Nevertheless there are some observed data points that the model would never be able to simulate mainly because of the lack of some additional data which affect the output but are unfortunately not taken into account or just unavailable.

In order to have a clear picture of how good the bootstrap confidence intervals are, the actual coverage was calculated and was compared to the nominal one. Actual coverage is the probability of an observed (measured) value to be within the confidence intervals. The results of actual coverage, i.e. the percentage of observed points that lie within the intervals, will show how successful the application of bootstrap methodology was. According to the available literature the actual coverage of a confidence procedure is rarely equal to the desired (nominal) one, and often is substantially different (Efron and Tibshirani, 1993). Especially in small-sample situations like ours, bootstrap intervals are not exact and can be far from perfect (Efron, 2003).

The confidence intervals can be used in order to ensure that when evaluating scenarios for groundwater management the groundwater level keeps above a certain threshold for a given confidence level.

RESULTS

The bootstrap methodology was applied to two wells at a pumping site in Attica, Greece. Available data of hydraulic head, pumping and meteorological parameters have been used to train an ANN for hydraulic head change simulation. The selection of hydraulic head change rather than hydraulic head as an output has proven to be a much more challenging task; nevertheless it has far more physical meaning. The known issues from the previous application are: (i) that the first observation well is also used for pumping, and (ii) that a rainfall incident is most probably not recorded. The former has been identified as the reason the model cannot simulate the sudden peaks and dips, while the latter results in the total inability of the model to simulate that certain peak around data point 260 (Trichakis *et al.*, 2009) (Figures 3, 4).



Figure 3. Observed, simulated value and percentile confidence intervals of hydraulic head change at the first well



Figure 4. Observed, simulated value and percentile confidence intervals of hydraulic head change at the second well

Table I. Minimum, average and maximum confidence intervals width of the two methods (in meters)

CI width [m]	min	average	max
Percentile Well 1	0.108	0.175	0.654
Percentile Well 2	0.056	0.082	0.132
BCa Well 1	0.108	0.176	0.680
BCa Well 2	0.057	0.087	0.136

The bootstrap methodology required many successive trainings of the ANN, which is a time consuming procedure. A complete run of the algorithm needed 44 hours in a 2·1 GHz Intel® CoreTM 2 Duo with 3 GB of RAM. The BCa method required the additional calculation of acceleration, which consequently required more ANN trainings. The whole process increased the computational time by approximately 12%. Luckily the methodology can be easily coded in a multi-threaded application that can considerably reduce the computational time.

Percentile confidence intervals for 95% nominal coverage

In Figures 3 and 4, the results of the percentile upper and lower confidence intervals are displayed along with the observed and simulated by the ANN using the original training dataset values. Data points from 1 to 335 were used for calibration and the rest were kept for testing. Owing to the random selection of data points for training or evaluation inside the ANN algorithm it is difficult for them to be displayed separately. The maximum, minimum and average values of the confidence intervals width are summarized in Table I.

As explained in a previous work, Trichakis *et al.*, (2009) also applied to the same site, the first well of this study is a pumping well, and is also very close to other pumping wells. This generates sharp peaks and dips in the hydraulic head change time series, and, even though the ANN is able to simulate the position of the dips, it is unable to reproduce their value.

From the results it is obvious that bootstrap confidence intervals have variable width depending on the range of output values that each set of input data yields. The narrowest interval was 0.108 m, the widest 0.654 m while the average width was 0.175 m. When it comes to sharp peaks and dips, considering the fact that the ANN (model) is practically unable to simulate these patterns, it is certain that the bootstrap output values will also be unable to contain the observed. Aside from the points that could have been considered not modelled points, the confidence intervals enclose the trend of the observed time series quite satisfactory.

Even in the testing dataset (data points 336–419), the intervals enclose the observed data apart from the seven un-modelled points. An increased uncertainty of the ANN output seems to appear for observed values close to zero, but it is also understood that the uncertainty can increase in data points where many of the input parameters have zero values. This comes as a result of the fact that different bootstrap input datasets may yield significantly different output for that kind of input values. When some input values are zero the training will increase the weights of the non-zero inputs to cover for that. This would lead to greater variance of the output, hence the wider intervals.

The application of the percentile method to the second well yielded far narrower intervals than those of the first well. The narrowest interval was 0.056 m, the widest 0.132 m while the average width was 0.082 m, less than half the average interval of the first well. This comes naturally due to the fact that pumping does not occur in or adjacently to the second well. Thus the simulated values were very close to the observed ones in the first place. The most problematic region in this case is the peak around data point 260, where the model is unable to simulate the response. The inherent model's inability cannot be overcome by the bootstrap resampling. The impact of this peak can be considered as the main reason for the discordance of nominal and actual coverage for both the training and evaluation datasets, as the peak has been distributed in a random manner between them. On the contrary, the testing dataset (336-419)seems to contain no problematic data points and the simulated values were already in high accordance with the observed.

BCa confidence intervals for 95% nominal coverage

The bias corrected and accelerated confidence intervals performed slightly worse than their percentile counterparts in terms of intervals width, as they yielded marginally wider intervals (Table I). This however has to be considered in conjunction with the agreement of nominal to actual coverage in order to conclude the supremacy of one method over the other.

The results for the first well are illustrated in Figure 5. Unfortunately neither the BCa confidence intervals were able to account for the sudden dips and peaks, since this is a problem, the resampling technique cannot manage. Only a model that could, under certain circumstances, explicitly simulate each of those patterns might be a solution to such problem. The confidence intervals were



Figure 5. Observed, simulated value and BCa confidence intervals of hydraulic head change at the first well



Figure 6. Observed, simulated value and BCa confidence intervals of hydraulic head change at the second well

wider than their percentile counterparts by only 0.001 m on average. The widest interval increased by 0.026 m yet this is not definitively a mistake, as it might have occurred in an attempt to better simulate the sudden peaks and dips.

The second well (Figure 6) yielded results marginally wider than those of the percentile method. The average increase was 0.005 m (about 6%), which is not a considerably high value. The much more consistent with the observed, simulated values lead to much narrower intervals than those of the first well. Still the problematic peak around data point 260 remains as expected out of the confidence intervals.

There were thoughts that it might be better to exclude those values completely from the observed dataset, along with the sudden peaks and dips of the first well. The reason that this did not happen is that is calls for a subjective decision of what can be considered as an unmodelled point. This contradicted the fully automated approach in the rest of this work. It might be true that those patterns require additional unavailable data in order to be described, and in some cases the researcher cannot know the exact kind of those data. Yet, the interference with the observation dataset, apart from the potential exclusion of data points that can be simulated, also might reduce the size of the calibration dataset and remove extreme input and output values from the training set. This might diminish the extrapolative and interpolative ability of the ANN.

Actual coverage for different certainty levels

The separate coverage for each well and each of the three data subsets (training, evaluation and testing) for the percentile intervals is shown in Table II, and for BCa confidence intervals in Table III. The number of data points in each data subset is 244, 91, and 84, respectively. This alone indicated that a difference of even 5% (which could be considered substantial) between theoretical and actual coverage in the testing subset might be due to 4 single points, so it can be just a random occurrence.

The percentile method actual coverage for every subset is not equal to the theoretical, nevertheless, it follows the theoretical rather consistently. Even though in some cases it underestimates and in other overestimates the confidence intervals. Both calibration subsets actual coverage values for the first well are always lower than their nominal counterparts. This can be attributed to the fluctuation of the observed values even in small scale, while the increase of the difference between nominal and actual coverage, this lack of coverage, can be thought as a result of the sudden peaks and dips.

The testing subset of the first well has only few sudden peaks and dips (namely 7), probably the reason it cannot reach an actual coverage of 95%, which would require only 4 points to be left out of the confidence intervals. The actual coverage of this subset is for the

Theoretical coverage%	Training Well 1%	Evaluation Well 1%	Testing Well 1%	Training Well 2%	Evaluation Well 2%	Testing Well 2%
10	7.8	7.7	25.0	9.4	6.6	9.5
20	17.2	14.3	35.7	13.1	12.1	17.9
30	25.8	22.0	48.8	20.9	14.3	28.6
40	34.4	30.8	60.7	25.8	16.5	40.5
50	39.3	37.4	69.0	32.0	20.9	58.3
60	50.0	42.9	72.6	42.2	34.1	71.4
70	57.0	51.6	78.6	48.8	40.7	77.4
80	63.9	59.3	84.5	59.8	51.6	88.1
90	74.6	69.2	89.3	73.4	64.8	92.9
95	77.9	80.2	89.3	83.2	75.8	94.0

Table II. Theoretical and actual coverage of the percentile bootstrap confidence intervals

Theoretical coverage%	Training Well 1%	Evaluation Well 1%	Testing Well 1%	Training Well 2%	Evaluation Well 2%	Testing Well 2%
10	8.2	6.6	10.7	6.6	6.6	17.9
20	16.0	14.3	27.4	13.1	11.0	28.6
30	24.6	19.8	36.9	20.1	13.2	38.1
40	29.1	30.8	54.8	27.9	23.1	47.6
50	39.8	35.2	67.9	34.0	27.5	61.9
60	45.5	42.9	73.8	39.3	30.8	66.7
70	52.5	53.8	81.0	46.3	39.6	76.2
80	65.2	61.5	84.5	54.9	50.5	84.5
90	73.8	74.7	88.1	70.9	64.8	91.7
95	77.9	78.0	89.3	84.0	73.6	96.4

Table III. Theoretical and actual coverage of the BCa bootstrap confidence intervals

most part way above the nominal as a result of the smoother trend of this subset and the lack of sudden fluctuations. Still, the rate of increase is close to that of the theoretical one.

The second well is quite different. As mentioned above, there are less problematic data points all of which are found in the two calibration subsets. The general success is close to that of the first well, the actual coverage being quite less than the nominal but following consistently its increase. The definite lack of rainfall data for the great peak is acknowledged as the main cause of the lack of coverage, and cannot be dealt with by means other than providing additional data or exclusion of the problematic data points from the dataset.

The most successful subset of the simulation in the sense that it provided the best accordance of actual to nominal coverage is the testing dataset of the second well. Throughout the process, the coverage is very close to the theoretical not only for low nominal coverage values but also for high. These could be considered to be the desired results for a confidence intervals calculation procedure, and it is really important that the only subset of this simulation that did not contain problematic data points yielded the best results.

Only slightly different than the percentile, the actual coverage of the BCa method is still in most cases far from the nominal. However the intervals are wider, and this is suggesting that the additional computational effort is not reflected in the actual coverage. Again, the actual coverage increase rate follows the rate of the theoretical, and again, the testing subsets for both wells tend to have greater coverage than the desired.

In fact, the actual coverage of the first well although starts from a perfect 10.7% for a 10% theoretical coverage, starts to widen the difference until finally diminishes it and reaches the 89.3% limit, same as the percentile method. The second well actual coverage was 411% higher than the theoretical until it closed in for nominal coverage of 90 and 95%. The BCa intervals for this subset were also slightly wider than the percentile intervals, probably because the method does not behave well with heavy tails.

SUMMARY AND CONCLUSIONS

The increased number of applications that ANNs have in hydrology combined with the need to move from the deterministic output to a stochastic one, were the reasons to search for a methodology that could be implemented to provide confidence intervals for a certain ANN. Owing to the complexity of these mathematical models, least squares estimations might not be applicable, especially when the ANN has many neurons distributed among more than one hidden layers.

In groundwater management, the determination of an ANN's uncertainty may be of great importance when the pumping scheme of a region prone to saltwater intrusion from a neighbouring coast is concerned. In those cases, it might be critical for the water level at certain observation wells to remain above a certain value in order to prevent quality deterioration.

A rather easy to implement this method is the bootstrap one, which is computer-intensive but demands little prerequisites and its assumptions are covered for the most part. The only assumption that is made is the ability of the ANN to describe exactly the physical model. This can be slightly violated in some un-modelled data points, but in general, the method yields satisfactory results.

In order to examine the accuracy of bootstrap confidence intervals, the actual coverage for observed data series has been compared to the nominal coverage. The results show that, as mentioned in the bibliography, the nominal coverage is not equal to the actual one. This is not a problem of the method *per se*, but a result of the small number of data points compared to the theoretical infinite. Another factor that affects the actual coverage is the existence of not modelled points in the dataset. These not modelled points also can increase the output value fluctuation, thus widening the intervals.

The percentile method was easier to implement and yielded satisfactory results. The actual coverage was consistently increasing with a rate similar to that of the theoretical one, and any lack of coverage can be attributed to the problematic data points of certain subsets. The second well's testing dataset that did not contain not modelled points or other problematic data points gave the best results. From this fact alone, the method can be considered promising. Being more complicated, as it requires the evaluation of bias and acceleration terms, the BCa method yielded generally wider intervals without significant improvements in the actual coverage values. Depending on the findings of this work, the BCa cannot be considered a better choice when it comes to confidence intervals generation for the output of an ANN model that has not modelled points. The percentile method gave better results without the extra computational effort of BCa (about 12% additional effort, compared to the percentile method).

While the bootstrap is a powerful and efficient tool for CI creation, data points that cannot be described by the model regardless of the ANN weights are not taken into account in the procedure and are not covered by the intervals. This limitation should always be taken into account when high accuracy is needed. After all, this is not a method to cover for a model's inefficiency, rather to quantify the uncertainty that is introduced in that specific model from the input data and their combined effect during the weight adjustment.

Besides its advantages, the bootstrap methodology was proved to be time consuming. The computational cost for a full run of the algorithm was rather high (44 h). However, the methodology can be easily coded in a multi-threaded application that can considerably reduce the computational time. This can also be combined with more time efficient ANN training algorithms. Nevertheless this is still quite long for practical applications, so the bootstrap methodology is not yet recommended for everyday use, especially if the need for CI calculation does not justify the required time and effort.

Application of the method for other types of problems solved using ANN can be recommended as long as a basic condition is met: The model should be able to describe the observed values quite well, without ignoring extreme points. Other than that there are no assumptions from the bootstrap methods.

Further research in the field of ANN application in groundwater level simulation should be focused on optimisation of the deterministic model to the greatest possible degree before the application of a bootstrap method to compute the output's confidence intervals.

REFERENCES

- Abel U, Berger J. 1986. Comparison of Resubstitution, Data Splitting, the Bootstrap, and the Jackknife as Methods for Estimating Validity Indexes of New Marker Tests—a Monte-Carlo Study. *Biometrical Journal* 28: 899–908.
- Aitkenhead MJ, Cooper RJ. 2008. Neural network time series prediction of environmental variables in a small upland headwater in NE Scotland. *Hydrological Processes* 22: 3091–3101.
- Aqil M, Kita I, Yano A, Nishiyama S. 2007. Neural Networks for Real Time Catchment Flow Modeling and Prediction. *Water Resources Management* 21: 1781–1796.
- Babu GJ, Feigelson ED. 1996. Astrostatistics. Chapman & Hall: New York; 12, p. 221.
- Beven K. 2006. On undermining the science? *Hydrological Processes* **20**: 3141–3146.
- Beven K. 2008. On doing better hydrological science. *Hydrological Processes* 22: 3549–3553.

- Bickel PJ, Freedman DA. 1981. Some Asymptotic Theory for the Bootstrap. Annals of Statistics 9: 1196–1217.
- Bolle RM, Ratha NK, Pankanti S. 2004. Error analysis of pattern recognition systems—the subsets bootstrap. *Computer Vision and Image Understanding* **93**: 1–33.
- Brey T. 1990. Confidence-Limits for Secondary Production Estimates— Application of the Bootstrap to the Increment Summation Method. *Marine Biology* **106**: 503–508.
- Carpenter J. 1999. Test inversion bootstrap confidence intervals. *Journal* of the Royal Statistical Society Series B-Statistical Methodology **61**: 159–172.
- Cawley GC, Janacek GJ, Haylock MR, Dorling SR. 2007. Predictive uncertainty in environmental modelling. *Neural Networks* **20**: 537–549.
- Chernick MR. 2008. Bootstrap methods: a guide for practitioners and researchers. Wiley-Interscience: Hoboken, N.J.; 18, p. 369.
- Chernick MR, Murthy VK, Nealy CD. 1985. Application of Bootstrap and Other Resampling Techniques—Evaluation of Classifier Performance. *Pattern Recognition Letters* 3: 167–178.
- Chrysikopoulos CV, Hsuan P-Y, Fyrillas MM. 2002. Bootstrap estimation of the mass transfer coefficient of a dissolving nonaqueous phase liquid pool in porous media. *Water Resources Research* **38**: 1026.
- Chryssolouris G, Lee M, Ramsey A. 1996. Confidence interval prediction for neural network models. *Ieee Transactions on Neural Networks* 7: 229–232.
- Cooley RL. 1997. Confidence intervals for ground-water models using linearization, likelihood, and bootstrap methods. *Ground Water* 35: 869–880.
- Coppola EA, Rana AJ, Poulton MM, Szidarovszky F, Uhl VW. 2005. A neural network model for predicting aquifer water level elevations. *Ground Water* **43**: 231–241.
- da Silva RR, Siqueira MHS, de Souza MPV, Rebello JMA, Caloba LP. 2005. Estimated accuracy of classification of defects detected in welded joints by radiographic tests. *Ndt & E International* 38: 335–343.
- Diaconis P, Efron B. 1983. Computer-Intensive Methods in Statistics. Scientific American 248: 116.
- Efron B. 1979. 1977 Rietz Lecture—Bootstrap Methods—Another Look at the Jackknife. *Annals of.*
- Efron B. 1988. Bootstrap Confidence-Intervals—Good or Bad. *Psychological Bulletin* **104**: 293–296.
- Efron B. 2003. Second thoughts on the bootstrap. *Statistical Science* 18: 135–140; *Statistics* 7: 1–26.
- Efron B, Tibshirani R. 1993. An Introduction to the Bootstrap. Chapman & Hall: New York.
- Egmont-Petersen M, Feelders A, Baesens B. 2005. Confidence intervals for probabilistic network classifiers. *Computational Statistics & Data Analysis* **49**: 998–1019.
- Ferrari SLP, Cribari-Neto F. 1998. On bootstrap and analytical bias corrections. *Economics Letters* 58: 7–15.
- Ferrari SLP, Cribari-Neto F. 1999. On the robustness of analytical and bootstrap corrections to score tests in regression models. *Journal of Statistical Computation and Simulation* 64: 177–191.
- Karterakis SM, Karatzas GP, Nikolos IK, Papadopoulou MP. 2007. Application of linear programming and differential evolutionary optimization methodologies for the solution of coastal subsurface water management problems subject to environmental criteria. *Journal of Hydrology* 342: 270–282.
- Kisi O. 2007. Evapotranspiration modelling from climatic data using a neural computing technique. *Hydrological Processes* 21: 1925–1934.

Kisi O. 2008. The potential of different ANN techniques in evapotranspiration modelling. *Hydrological Processes* 22: 2449–2460.

- Krishna B, Satyaji RYR, Vijaya T. 2008. Modelling groundwater levels in an urban coastal aquifer using artificial neural networks.
- *Hydrological Processes* **22**: 1180–1188. Lallahem S, Mania J. 2003. Evaluation and forecasting of daily groundwater outflow in a small chalky watershed. *Hydrological Processes* **17**: 1561–1577.
- Lallahem S, Mania J, Hani A, Najjar Y. 2005. On the use of neural networks to evaluate groundwater levels in fractured media. *Journal* of Hydrology **307**: 92–111.
- Maier HR, Dandy GC. 2000. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications. *Environmental Modelling and Software* 15: 101–124.
- Masumoto K. 2003. Prediction error of groundwater behavior by inverse modeling with bootstrap re-sampling method. In *Groundwater Engineering—Recent Advances*, Komatsu M, Nishigaki M, Kono I (eds). Taylor & Francis; 579–584.
- Mougiakakou SG, Valavanis IK, Nikita A, Nikita KS. 2007. Differential diagnosis of CT focal liver lesions using texture features, feature

selectéon and ensemble driven classifiers. *Artificial Intelligence in Medicine* **41**: 25–37.

- Nayak P, Rao Y, Sudheer K. 2006. Groundwater Level Forecasting in a Shallow Aquifer Using Artificial Neural Network Approach. Water Resources Management 20: 77–90.
- Nikolos IK, Stergiadi M, Papadopoulou MP, Karatzas GP. 2008. Artificial neural networks as an alternative approach to groundwater numerical modelling and environmental design. *Hydrological Processes* 22: 3337–3348.
- Papadopoõlos G, Edwards PJ, Murray AF. 2001. Confidence estimation methods for neural networks: A practical comparison. *Ieee Transactions on Neural Networks* 12: 1278–1287.
- Rivals I, Personnaz L. 2000. Construction of confidence intervals for neural networks based on least squares estimation. *Neural Networks* 13: 463–484.
- Samani N, Gohari-Moghadam M, Safavi AA. 2007. A simple neural network model for the determination of aquifer parameters. *Journal of Hydrology* **340**: 1–11.
- Schervish MJ. 1995. *Theory of statistics*. Springer-Verlag: New York; 16, p. 702.
- Silva RR, Mery D. 2007. Accuracy estimation of detection of casting defects in X-ray images using some statistical techniques. *Insight* **49**: 603–609.
- Singh K. 1981. On the Asymptotic Accuracy of Efrons Bootstrap. Annals of Statistics 9: 1187–1195.
- Szidarovszky F, Coppola Jr. EA, Long J, Hall AD, Poulton MM. 2007. A hybrid artificial neural network-numerical model for ground water problems. *Ground Water* 45: 590–600.

- Terzic J, Sumanovac F, Buljan R. 2007. An assessment of hydrogeological parameters on the karstic island of Dugi Otok, Croatia. *Journal of Hydrology* 343: 29–42.
- Thomas SH, Padilla-Crespo E, Jardine PM, Sanford RA, Loffler FE. 2009. Diversity and Distribution of Anaeromyxobacter Strains in a Uranium-Contaminated Subsurface Environment with a Nonuniform Groundwater Flow. Applied and Environmental Microbiology 75: 3679–3687.
- Todini E, Mantovan P. 2007. Comment on: 'On undermining the science?' by Keith Beven. *Hydrological Processes* 21: 1633–1638.
- Trichakis IC, Nikolos IK, Karatzas GP. 2009. Optimal selection of artificial neural network parameters for the prediction of a karstic aquifer's response. *Hydrological Processes* **23**: 2956–2969.
- Tsujitani M, Sakon M. 2009. Analysis of Survival Data Having Time-Dependent Covariates. *Ieee Transactions on Neural Networks* 20: 389–394.
- Varol Y, Avci E, Koca A, Oztop HF. 2007. Prediction of flow fields and temperature distributions due to natural convection in a triangular enclosure using Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System (ANFIS) and Artificial Neural Network (ANN). *International Communications in Heat and Mass Transfer* 34: 887–896.
- Wahrendorf J, Brown CC. 1980. Bootstrapping a Basic Inequality in the Analysis of Joint Action of 2 Drugs. *Biometrics* **36**: 653–657.
- White H, Racine J. 2001. Statistical inference, the bootstrap, and neuralnetwork modelling with application to foreign exchange rates. *IEEE Transactions on Neural Networks* **12**: 657–673.