

# 淺談深度學習在水文領域之發展

何紹維\*／國立成功大學水利及海洋工程學系 碩士生

蔡可安／國立成功大學水利及海洋工程學系 碩士生

蔡文柄／國立成功大學水利及海洋工程學系 助理教授

近年來，深度學習（Deep Learning, DL）在各個領域都取得了顯著進展，其多功能性改變了多個行業，同時在科學研究和模型建構方面呈現出新穎且獨特的潛力，儘管水文領域的發展逐漸趨於穩定，深度學習卻為該領域帶來了多項創新的可能性；本文認為，在水文領域中，深度學習可以開創全新的研究方向，在這個新途徑中，機器學習演算法首先預測與觀測數據一致的結果，接著使用可解釋性方法解析深度學習模型，以供科學家進一步評估；然而，深度學習在水文領域也面臨一些挑戰，包括數據限制、異質性和協同效益；同時，水文領域對深度學習應用的經驗相對不足，其進步需要科學家和相關群體的協同努力，結合基於過程的模型與深度學習模型有助於克服數據限制，而數據和基礎模型的開源則能提高整個領域的效率；此外，公開舉辦模型建置比賽也有助於推動水文數據科學教育的發展，需要眾人共同參與；總結來說，深度學習在水文領域中展現出豐富的潛力，同時也可能促使機器學習不斷取得進步。

## 前言

在過去的幾十年中，水文學領域已經經歷了多個機器學習（Machine Learning, ML）方法的發展，從正規化線性回歸方法<sup>[1]</sup>到支持向量回歸方法<sup>[2]</sup>，從遺傳演算法<sup>[3]</sup>到人工神經網路（Artificial Neural Networks, ANNs）<sup>[4-8]</sup>，再從決策樹到隨機森林<sup>[9]</sup>，以及從高斯過程<sup>[10]</sup>到幅狀基底函數網路<sup>[11]</sup>；人工神經網路在水文領域有著廣泛的應用，包括地表徑流、地下水、水質、鹽度、降雨量估計和土壤參數化的模型<sup>[12,13]</sup>；每種方法都為解決特定問題提供了有效的方案，然而，它們也各自存在一些限制。因此，隨著時間的推移，一些人可能對機器學習的發展感到失去興趣，同時另一些人可能對於新興名詞，如深度學習（Deep Learning, DL），是真正的技術進步還是只是炒作感到擔憂。

傳統上神經網路主要被用於模擬輸入與輸出之間的映射關係，其重點在於提高預測的準確性，然而就

神經網路在科學研究中的應用來說，最主要的問題來自於無法理解內容之黑匣子的特性，很難促進對於特定領域的理解，同時數據驅動的研究可能缺乏明確的假設，這與傳統的以假設驅動的科學方法產生了明顯的對比，因此深度學習方法內外都受到了要求解釋網路決策的巨大的壓力，像是歐洲數據隱私法規定（2018年1月），對演算法用戶具有重大影響的自動化個人決策必須提供「解釋權」，用戶可以要求演算法對其的決策做出解釋<sup>[14]</sup>；深度學習研究的一些最新進展集中在如何解決這些問題上，值得注意的是，一個新的領域被稱為「AI neuroscience」，已經產生了有用的解釋技術來幫助科學家解釋深度學習模型（Shen, 2018<sup>[15]</sup>）（後續將稱為Shen18），解釋方法的主要種類包括：(1)隱藏層的逆向工程，將深度網路的決策歸因於輸入特徵或輸入子集；(2)將知識從深度網路轉移到可解釋的階梯模型；(3)網路運作的可視化；許多科學家還設計了對個案使用的特別方法，例如研究輸入和神經元運作之間的相關性<sup>[15,16]</sup>。

\* 通訊作者，N86111108@gs.ncku.edu.tw

近年來以深度學習與傳統假設相輔的研究方法正在成長，該方法一共需要三個要素：大量水文數據、強大的機器學習算法和從訓練完成的網路中提取可解釋性的研究方法（如資料可視化的技術）；這個新方法從擁有多數據開始，使用深度學習產生假設，並使用具有可解釋性的方法，幫助我們理解水文系統的功能；深度學習（DL）是一個以大型人工神經網路為架構的一套工具，名稱中的「深度」是由於其具有多層的結構，而這有助於深度網路去呈現出數據中隱藏的抽象概念<sup>[17]</sup>，在給定與真實值相關的輸入資料後，深度學習模型可以對該真實值的變化或分類做出預測，無論該值是連續資料或分類資料，例如對於基本的電腦辨識問題，深度學習可以去識別圖片中的主題或是對象<sup>[18-20]</sup>，同時其也能運用在遙測圖像上<sup>[21]</sup>；對於序列資料，深度學習可以掌握自然語言中的順序<sup>[22,23]</sup>，甚至去預測出演員在影像下一幕的動作<sup>[24]</sup>；深度學習還可以生成或是合成出帶有某些藝術風格的圖像<sup>[25]</sup>，或是回答以自然語言表示的問題<sup>[26,27]</sup>；在其具有深度的結構下，深度學習可以從大數據中自動找出數據間的關聯與特徵，而不需要以人工的方式去對特徵做標記；作為現代人工智慧的基礎，深度學習近年來取得了許多進步與成果，並解決了幾十年來人工智慧所遇到的阻礙<sup>[28]</sup>。

雖然深度學習在許多領域中創造了亮眼的成績，並在部分領域中成為解決問題的首選方案，但目前為止在水文領域內對於深度學習的應用還十分有限<sup>[15]</sup>，儘管有許多使用深度學習得到的成果<sup>[29-34]</sup>，但大部分研究還尚未廣泛地採用這些新工具，在上述文章中展現了深度學習方法在水文科學領域中依然擁有很多機會，深度學習可以提供強大的預測能力並為科學研究提供額外的途徑；之後本文將探討在水文領域中使用深度學習和大數據將會遇到的各種挑戰，並研究如何強化應用於水文科學領域。

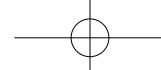
## 深度學習應用之介紹

隨著大量水文數據的累積，深度學習呈現出更廣泛的潛力與機會，這包括地表、地下、城市、基礎建設和生態系統的各種資料，在本文中，水文指的是完整的水循環，以及涉及生態系統和地球介質的相關過程，遙測所得的水文數據量也逐漸增加<sup>[35]</sup>；舉例來說，衛星觀測的數據集包括降水量、地表土壤濕度<sup>[36-38]</sup>、植

被狀態和指數<sup>[39]</sup>、推斷的蒸發散量資料<sup>[40]</sup>、地表水儲存<sup>[41]</sup>、覆雪量<sup>[42]</sup>，以及估算流量的研究<sup>[43]</sup>等等。在數據整合方面，現今已有地質<sup>[44]</sup>和土壤的數據集，其中包括了美國、歐洲、南美洲和亞洲部分地區的流量和地下水資料，還有全球一些大型河流<sup>[45]</sup>、水化學、地下水樣本和其他生態地球科學數據集；水文科學促進大學聯盟（CUAHSI, the Consortium of Universities for the Advancement of Hydrologic Science, Inc.）運營了兩個水數據的發現和歸檔系統：時間序列的水文資料系統 Hydrologic Information System<sup>[46]</sup> 和包含所有水數據類型的 HydroShare<sup>[47]</sup>。同時，水網路<sup>[48]</sup>的概念已被提出並正在發展，以改善對這些新興數據集的取得難度。

此外，還有許多創新的資料收集方式正在發展，如立方衛星（CubeSats）、無人機、氣球、攝影測量傳感器或其他能獲取高精細度資料的感測技術<sup>[49]</sup>；也有許多新方法提供許多以前未曾考慮到的測量形式和尺度，例如手機信號強度和手機拍攝的照片可用於監測降雨強度<sup>[50]</sup>；紅外攝影圖像可以探測城市中複雜水流的水位資料<sup>[51]</sup>；投放水中的物聯網（Internet of Things, IoT）傳感器可實時傳輸水中的狀態資料<sup>[52]</sup>；這些新數據源覆蓋了自然和建築環境中難以想像的範圍和數量；然而每種新的測量方式都具有其獨特的優勢和特性，特別是在混合使用不同數據時，如何有效地利用這些資料是一項巨大的挑戰；相對而言，深度學習模型能夠在不需要大量專業知識人員的情況下構建，並迅速從這些數據中獲取有用的資訊和分析結果。

深度學習在各個科學領域中被廣泛地利用，而深度學習也為某些領域帶來實質性的轉變，從文獻檢索中就可以清楚地看到此現象的快速增長；水文領域不能再忽視深度學習在各個行業或科學領域帶來的革命性發展（Shen18）。各大科技公司都已迅速地採用深度學習驅動的人工智能並將其商業化<sup>[52]</sup>，例如 Google 已將其研究重點從「移動裝置優先」改變為「人工智慧優先」<sup>[53]</sup>，其普通用戶已可感受到這些投資的成果，像是機器翻譯或是語音助理，它們已可以像人類一樣交談<sup>[26]</sup>；此外在 2012 年深度學習取得重大突破之後，人工智慧的專利在 2013 年到 2017 年間以 34% 的複合年增長率成長<sup>[54]</sup>；同時在 Columbus<sup>[54]</sup> 上報導，調查資料科學專業人士的回應中超過 65% 的人表示人工智慧是他們公司明年最重要的計畫。



從 2011 年以來，以深度學習為主題的投稿數量幾乎呈指數級增長，截至 2017 年複合增長率約為 100%（表 1）；深度學習在電腦科學（CS）中的占比從 2011 年的不到 1% 發展到 2017 年的 46%，這一變化表現了電腦科學中從傳統機器學習到深度學習的巨大變革，在其他領域雖相對緩慢，但也經歷了指數級增長，深度學習對機器學習的比率從 2011 年的 0% 成長至 2017 年的 33%；如 Shen<sup>18</sup> 所述，深度學習增強了物理數據的統計能力，實驗數據集中深度學習的使用者成長了 25%<sup>[55]</sup>，在生物學中深度學習已被用來預測基因序列中的潛在病理意義<sup>[56]</sup>，當深度學習模型在預測高難度的特徵（例如來自分子組成所擁有的毒性）時，使用原始數據輸入的深度學習模型優於部分經由專家辨別的結果<sup>[57]</sup>，深度學習正在各個領域取得許多進展。

ImageNetChallenge 是一種針對圖像分類和目標檢測的演算法競賽<sup>[58]</sup>；每次的比賽主題都會有所變化，大賽管理組織提供了方便的資料存取方式，而其數據集共累積了約 1,400 萬張圖像和影像。2010 年的冠軍由大尺度的支持向量機（SVM）贏得。2012 年則是首次由深度卷積神經網路獲得冠軍<sup>[59]</sup>。而這場勝利開始了深度學習的巨大成長，一直到 2017 年（最後一次比賽）為止，絕大多數的參賽者都是使用卷積神經網路參與比賽<sup>[17]</sup>。

IJCNN 交通標誌識別比賽是由 50,000 張圖像（48 像素 × 48 像素）組成，其見證了卷積神經網路的視覺識別能性能超過了人類能力的時刻<sup>[60]</sup>，同時卷積神經網路在醫學圖像中識別癌症的表現也優於人類<sup>[61]</sup>。

TIMIT 語音資料庫是一個保存了 630 名英語使用者錄音的數據集，長短期記憶模型（LSTM）的表現明顯優於隱藏式馬可夫模型（HMM）的結果，同樣地，利用長

短期記憶模型的方法在識別關鍵詞<sup>[62]</sup>、字符識別、語言識別、文本轉合成語音、社會信號分類、機器翻譯和手寫中文識別方面都顯著優於其他所有統計方法。

基於長短期記憶模型的語音識別系統在 Switchboard 語音資料庫中的會話語音識別已達到了「人類的水準」<sup>[63]</sup>，其併行版本在 MR BrainS13 數據集上也獲得了著名的像素級大腦圖像分割結果<sup>[64]</sup>。

在時間序列資料的預測競賽上，在長短期記憶模型出現之前的 2015 年，由模糊和指數的組合模型贏得冠軍，但長短期記憶模型馬上在 2016 年贏下了比賽<sup>[65]</sup>；相較之下，深度學習在水文領域的應用就沒有如此亮眼，但也已展現出巨大的潛力，深度電腦視覺模型已可用於從衛星圖像中推估降水量，並且也表現出比以往神經網路更優越的性能<sup>[66,67]</sup>，同時也有使用生成對抗網路（GAN）來模擬或生成地質圖像的研究<sup>[68]</sup>；專注於時間序列之深度學習模型則被應用於衛星感測土壤溼度之未來推估<sup>[29]</sup>，而該推估值相較以往的簡單模型更可靠，上述的深度學習模型也已成功創建了部分地區的區域降雨逕流模型<sup>[69]</sup>；同時也有應用深度學習在小數據集的研究，像是預測城市環境中的水流動和水利基礎設施中的水流動<sup>[34]</sup>；除了利用大數據，深度學習也能夠靠自己本身創建出原本難以收集的大數據集，例如利用深度學習可以通過跟蹤熱帶氣旋、大氣流動和天氣鋒面產生新的數據集<sup>[70,71]</sup>；同時機器學習也被用於解決氣候建模中對流參數化的話題<sup>[72]</sup>。

## 深度學習之技術發展

隨著軟、硬體技術的發展，深度學習的性能也越來越強大，深度學習具有下列幾項獨特的優勢：

1. 深度網路的架構具有反映極複雜之函數的能力；
2. 經過訓練後，隱藏層可以運行模組化的函數，這

表 1 從 Web of Science 搜尋得到的論文數量（來源：Shen et al.<sup>[73]</sup>）

year	DL-non-CS	DL-CS	ML-non-CS	ML-CS	DL/ML-CS	DL/ML-non-CS
2011	0	23	1068	1838	1 %	0 %
2012	15	25	1310	1899	1 %	1 %
2013	35	80	1677	2360	3 %	2 %
2014	84	238	2228	3050	8 %	4 %
2015	308	709	3074	4405	16 %	10 %
2016	841	1462	4414	5361	27 %	19 %
2017	2035	2723	6125	5860	46 %	33 %

\* DL-CS 的結果是通過以下方式搜尋而得「topic」(TS) = “deep learning”, “and”, “research area”(SU) = “computer science”；ML-CS 的搜尋方式幾乎與 DL-CS 相同，僅有 “deep learning” 項改為 “machine learning”；DL-non-CS 的搜尋方式為「TS = “deep learning” not SU = “computer science” not SU = education」，其中教育因為與本文對深度學習的定義無關而被刪除。DL / ML-CS 是 DL-CS 和 ML-CS 的比值，而 DL / ML-non-CS 以同樣原理取得。

些函數可以在被稱為遷移學習的過程中遷移到其他任務，並拓展訓練數據的價值；

3. 隱藏層結構可以自動提取數據的特徵，大大地減少了標記特徵所需的人工、專業知識和試誤時間；
4. 與像是分類樹的早期模型相比，大多數深度網路都是可微分的，這代表我們可以計算輸出相對於輸入或是網路中參數的導數，這使得利用這些導數的高效訓練算法成為可能；此外，由於神經網路具有可微性，因此可以進行 DL 模型輸入參數的敏感度分析，這在水文領域是一件非常重要的事情。

深度學習中的隱藏層可以被視為深度網路自身構建的工作空間，這些隱藏層經過訓練後從數據中萃取出某些特徵，然後由下游層使用這些特徵來預測應變量，例如 Yosinski<sup>[74]</sup> 表明了深度視覺識別網路中的一些隱藏層負責識別人類或是動物的面部的位置；Karpathy 等人<sup>[75]</sup> 表明文本預測網路中的一些隱藏神經元發揮了長度計數器的作用，而另一些則負責追蹤資料文本是否在引號之中，這些功能並不是由網路設計者所賦予，而是經過訓練後網路自己形成的；早期的網路結構不是沒有所需的深度，就是沒有經過巧妙的設計，以至於無法有效地訓練隱藏層，關於更多細節請參閱 Shen<sup>[15]</sup> 和 Schmidhuber<sup>[17]</sup>。

鑑於深度網路可以在沒有人指導的情況下識別特徵，他們可以提取出設計者不知道或沒有特意要讓網路去操作的特徵；若是水文系統中還有我們人類尚未發現的潛在關係，那麼這一特性將為我們提供一個發現潛在知識的新方向；例如，模仿哺乳動物進行導航的模型經過訓練後，網路隱藏層中自動出現了網格狀的神經元反映結構，這結果提供了獲得諾貝爾獎的關於這些結構功能的神經科學理論大力的支持<sup>[76]</sup>。

如果對深度網路進行適當的正規化 (Regularization) (正規化技術減少了模型的複雜性，使其穩健性提升)，並在兩階段方法中依照誤差來調整的話，增加模型規模的同時其穩健性也不會弱於簡單模型<sup>[77]</sup>；常見的正規化技術包括 (1) 提前停止 (early stopping)，在單獨的驗證集上監控訓練進度，一旦驗證指標開始惡化就停止訓練，或是 (2) 新穎的正規化技術像是 dropout<sup>[78]</sup>，深度學習架構同時解決了梯度消失等問題<sup>[79]</sup>。而在科學家們開始使用圖形處理單元 (GPUs) 進行處理之前，現在大型網路的訓練規模在以往的計算上是難以置信的，

在深度學習的架構仍然在不斷發展的同時，專門處理深度學習任務的專用集成電路也已然問世。

常見的深度學習架構包括用於圖像識別的卷積神經網路 (CNN)<sup>[59,80]</sup>、用於時間序列建模的長短期記憶 (LSTM)<sup>[81,82]</sup>、變分自編碼器 (VAE)<sup>[83]</sup> 以及用於識別模式和生成數據（通常是圖像，但也包括文本、聲音等其他數據）的深度信任網路 (Shen18)。除了上述架構以外，也有一種新的生成模型被稱為生成對抗網路 (Generative Adversarial Network, GAN)，其已在各個領域中活躍發展。GANs 的特性是它們擁有零和博弈框架<sup>[84]</sup>，框架內的「生成器」和「鑑別器」之間不斷競爭進而學習。與其他通用模型相比，GANs 在生成的模式中擁有更大的靈活性。GANs 的能力也在地球科學領域得到了認可，特別是在受物理學啟發的機器學習研究中，GANs 已被用於生成某些複雜的物理、環境或社會經濟系統<sup>[68,85]</sup>。

雖然深度學習模型展現出許多優點，但它也需要大量的電腦 / 程式專業知識。其中超參數的調整例如網格大小、學習率、批次大小等，通常需要先驗經驗和反覆地試誤，例如在圖形處理單元上的計算，這也與典型的水文學家的教育背景有很大的不同；而關於深度學習為何在各領域都能有所發展的基本理論也還未得到成熟的發展 (Shen18)，一些人認為深度學習的能力主要來自於記憶，而另一些人認為深度學習優先學習簡單的模式<sup>[86,87]</sup>，兩階段程序（訓練和測試）更有幫助<sup>[77]</sup>，儘管有這些解釋，但在視覺深度學習中已有深度網路可能會被小規模的對抗性樣本所欺騙，輸入圖像內無法察覺的干擾有時會使預測發生巨大的變化，從而導致不正確的結果<sup>[88,89]</sup>；水文領域的深度學習應用是否存在此類問題還有待觀察，若我們能夠再現對抗性樣本，並將其加入訓練數據集中，理論上能提高模型的穩健性<sup>[90]</sup>。

在醫學圖像診斷中，一些研究人員使用逆向工程方法，來顯示出圖像上的哪個像素導致網路對其解剖分類做出決定<sup>[91]</sup>，在最近的研究中，新的人工智慧網路不僅能對圖像進行分類，還能解釋其為何做出這個決策以及為何圖像是一個類別而非另一個類別（圖 1），研究者訓練了一個用於圖像的分類和解釋模型，其中紅字是解釋中的「類相關」屬性（不同類別間的區分屬性），分類網路提取出影響決策的視覺特徵（圖像上的某些區域），然後解釋網路將這些區域與字典中的區別詞連繫在一起形成解釋，解釋其分類的原因以及為何它不屬於

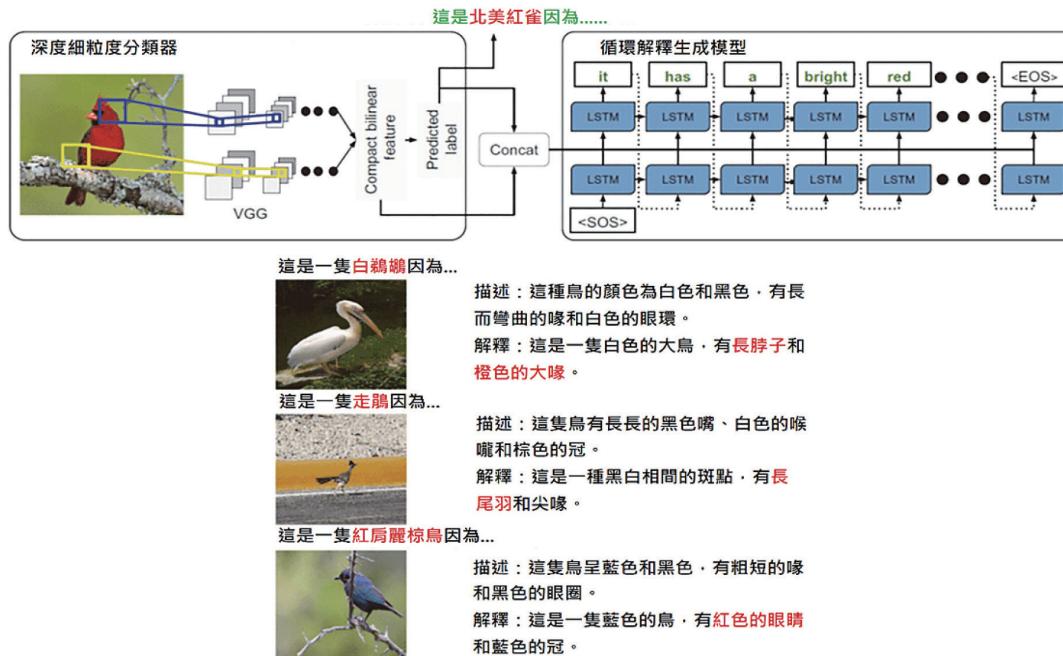
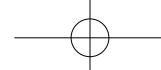


圖 1 用於圖像的分類和解釋模型（來源：Shen et al. [73]）

其他類別，受限於有限的監測數據，在水文問題上很難達成同樣的高辨識率，但將輸入數據中的特徵與一些描述性詞語連接是一個值得參考的想法<sup>[92]</sup>；將此概念拓展到水文領域中的精度檢索問題上<sup>[66,67]</sup>，我們可以讓深度學習告訴我們衛星雲圖上的哪些特徵有助於減少偏差。

## 近期於水文領域之發展

隨著具有解釋性的機器學習方法之發展，一種與傳統假設驅動的研究方法互補的嶄新研究方法產生，如圖 2 比較了兩種從數據中獲得知識的方式，傳統方法中科學家們編輯和解釋數據以形成假設，(建立模型) 描述數據和假設，然後模型的結果符合或是否定假設的數據和反饋（黃色路徑）將允許科學家修改模型和迭代；在數據驅動的方法中科學家收集數據並定義深度學習的目標變量（綠色路徑），然後調用解釋方法來提取數據一致性與人類能夠理解的假設（黃色路

徑），其中必須有一個驗證假設的步驟，訓練中保留的數據將應用於驗證；數據驅動的研究過程可以分為四個步驟：(1) 通過機器學習演算法產生假設；(2) 使用與訓練集內不同的數據作驗證，評估機器學習生成之假設；(3) 使用解釋方法來提取一致的數據和人類可理解的假設<sup>[93]</sup>；(4) 將保留的假設交給科學家進行分析和進一步的收集數據；之後上述步驟將反覆進行。

與傳統方法相比，數據驅動的方法能夠使我們更有效地探索更多假設，雖然機器學習算法並不能確定沒有人為偏見（因為輸入項是人為定義的，而一些超參數是由經驗作調整的），但在探索更多的假設時，至少會大大地降低人為偏見的風險；在此我們可以用一種基於分類和回歸樹（Classification And Regression Tree, CART）的數據驅動方法（Fang and Shen<sup>[94]</sup>；Tsai et al.<sup>[95]</sup>）作為例子，從研究地區的眾多地貌數據開始，包括地形、土壤類型或厚度等資料，我們可以使用對基於過程的水文物理模型產生之誤差進行建模，這將可以分離出更容易產生誤差的條件；這過程僅僅是讓模型從數據裡發掘並表現出來，並沒有執人類先入為主的任何設定或假設，在過程中也必須注意數據驅動時的穩健性，需要保留各數據集並執行交叉驗證來確認結果的普遍性，在過程中所有的假設一開始都是同樣有可能的而不會提早被排除，深度學習的這個優點可以用一句話來形容，「演算法沒有自我（個性）」，即其

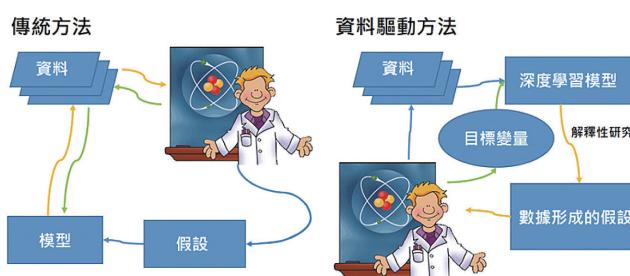


圖 2 比較兩種從數據中獲得知識的方式（來源：Shen et al. [73]）

不會因為喜好或其他原因而忽略掉了任何假設；在實際應用上，這種方法將可以更有效地同時檢驗多個相互競爭的假設<sup>[95]</sup>。

機器學習的方法使我們能夠在數據中發現到人類難以識別的聯繫或複雜的模式，藉著深度學習的強大性能，它可以更好地去擬合最佳可實現模型（Best Achievable Model, BAM）並以此來映射輸入與輸出之間的關係；Nearing 等人<sup>[96]</sup>就利用了高斯過程回歸來近似 BAM，建構深度學習模型的簡單性使得它成為了各種新想法的理想試驗方法，現在已可以將深度網路的輸出可視化，以深入瞭解網路在輸入數據上進行的轉換過程<sup>[97]</sup>，對於圖像識別任務，我們可以反轉深度學習模型以找出導致網路做出特定決策的輸入部分<sup>[98]</sup>；還有一些方可以將循環網路的輸出可視化，例如顯示某些神經元被運作的條件<sup>[99]</sup>，這些可視化的成果可以說明數據驅動的模型所識別出的資料間關係。

考慮到上述的潛力，數據驅動的方法在水文學領域中應有不少表現的機會，然而也並不是所有人都可以接受此種研究方法，在傳統方法中科學家們必須在建構模型前提出假設，而數據驅動的方法中，數據挖掘和知識發現的過程是在假設形成前的步驟，也就是在數據挖掘分析前並不會有假設生成（引用）；簡單來說，在研究的提議或初始階段時，並不能擁有一個可以清楚陳述的假設存在，當然可解釋性方法做為一個新的研究方法需要發展時間，近期已經取得初步的進展<sup>[100,101]</sup>，近期的研究以探索可微分模型作為一種途徑，以消除地球科學系統中基於過程的模型和機器學習之間的障礙，並透過水文模型的例子展示其潛力；「可微」是指準確有效地計算模型變數或參數的梯度，從而能夠發現高維度未知關係，可微分模型涉及將物理知識連接到神經網路，從而突破了基於物理性機器學習的邊界；與純粹的資料驅動機器學習相比，它提供了更好的可解釋性、泛化性和外推能力，在需要更少訓練資料的情況下展現了類似的準確性；此外可微分模型的效能和效率隨著資料量的增加而很好地擴展，在資料稀缺的情況下，由於時間空間的物理限制，可微分模式在產生短期動態趨勢方面優於機器學習模型；可微分模型方法旨在使地球科學家能夠提出問題、測試假設並發現未被識別的物理關係。

## 深度學習在水文領域面臨的挑戰

在水文領域有一系列獨特的挑戰，而這同時也是

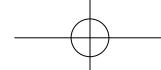
深度學習的表現機會，至今為止還有許多挑戰無法通過傳統方法有效地解決，接下來將介紹深度學習方法可能會面臨的一些挑戰。

水文學領域的觀測資料通常在區域和時間上都非常不平均，例如在美國的流量觀測數量相對密集，但世界上許多其他地區的流量數據卻十分稀少，甚至有些區域根本沒有觀測，而另一種困境則是無法對資料進行存取（資料不公開），導致部分區域缺乏深度學習算法的訓練資料；很少有水文模型擁有與其他人工智慧研究（如影像識別或自然語言處理）一樣多的數據，水文變量的遙測也具有侷限性，像是衛星影像具有的雲或是樹冠的遮蓋問題，衛星的軌道路徑也會導致觀測範圍與時間的密度問題，在不同地區研究此問題的大量研究可以被概括為「沒有資料的集水區推估」<sup>[102]</sup>；上述資料缺乏的問題即是數據驅動的研究方法面臨的一大挑戰；同時全球尺度的氣候變遷及水文變化也使得水文學家現在需要預測超出以往觀測資料範圍的變化<sup>[103]</sup>，世界上許多地區都觀測到更為頻繁的極端現象，而此種極端情況在未來將會更加頻繁地發生<sup>[104]</sup>，數據驅動的方法將需要證明其可以在訓練數據集的範圍外應用時可以做出合理預測的能力。

此外，對於水循環過程的觀測資料往往集中在水循環系統的某一部份，很少有完整循環的資料，例如我們可以通過多次多顆的衛星觀測估算地表水儲存的總量<sup>[105]</sup>或地表下 5 公分的地表土壤濕度，然而將水循環各個部分的觀測結果直接結合到水循環的整體中是相當困難的；深度學習在此方面的挑戰，主要為將不同的觀測結果與它們本身的時空不連續性結合起來，以幫助模型預測和驗證，並提供對於水循環整體的完整理解。

水文數據往往會伴隨著大量強烈異質性<sup>[106]</sup>的背景變量，例如土地利用、氣候、地質或土壤特性的聯繫，在自然系統中異質性的尺度是一個複雜的問題<sup>[107]</sup>，如水文模型中表示土壤水分和地質的微尺度非均勻特性，非常不容易藉由方程式描述，異質性的表現尺度會隨著水循環的環境和元素而變化<sup>[108]</sup>；另外，我們知道環境特徵中具有異質性，這些特徵如土壤性質和水文地質，在不同現象中也許並沒有表現出許多差異，但此兩個特徵在控制水運動的過程中發揮重要的作用，深度學習方法將需要在不使模型參數空間和數據需求過度膨脹的情況下，需要充分地表示研究區域之異質性。

整體來說，水文問題很難融入標準網路結構（Shen18）所設計的問題模板，即純粹的影像識別、時間



序列的預測問題又或是兩者的混和，例如集水區的水文問題同時擁有在空間上不均勻，但在時間上的呈現靜態（地形和水文地質）或是動態（氣象因子）的屬性，而傳統的神經網路模型無法有效地表示此類的輸入維度。

由於深度學習方法需要大量的數據集，因此完整蒐集、正確處理和格式化的數據集也是個重大的挑戰，數據的彙編、預處理和格式化步驟往往會占用研究人員大量的時間，有許多圖像的處理任務並不是單個研究團體能夠負擔的；與人工智慧領域或化學領域的深度學習研究群體相比，水文領域的深度學習群體還沒有得到充分的協調與合作，這將導致大量工作重複且時間浪費的議題。

而生成對抗網路（GANs）之類的深度生成模型可以用於自然紋理的隨機生成，此種方法促進了地下水文學的進展，其中有效地模擬具有統計特性的地質結構，對於地下水模型的不確定性量化至關重要；然而在未來研究的各種方向中還需要更多的工作來達成下列事項：

- (1) 生成地質層中所觀察到完整範圍的複雜性結構；
- (2) 有效地處理大型三維空間資料；
- (3) 在模擬中考慮各種類型的直接數據（例如研究區域觀察到的地質條件或屬性平均值）與間接數據（例如在反向建模過程中使用的觀測水文變量）。

## 結論與建議

儘管深度學習依然存在許多挑戰，但在這裡 Shen 等人<sup>[73]</sup>提出了一個通過深度學習推進水文科學的領域路線圖（圖 3），圖 3 主要說明通過收集和彙編已有數據，結合新的數據源例如科學家們所收集的數據、遙測和模型數據集，深度學習可以用於預測現在難以觀察的數據，並且強調基於過程的模型和深度學習模型之間的建模競

賽，將建立一個重要的共享計算和分析的方式，與分享數據源一同支持廣泛的水文應用，並嘗試使用迭代方法從經過訓練的深度學習模型提取知識（橘色箭頭），而這些活動將加強水文領域中的學習教育計劃（紫色箭頭），這些模型比賽可能又會反饋回到教育活動之中。

正如在其它科學領域中的工作一樣，一個協調良好的領域在解決問題方面將會更有效率，像是 Montanari 等人<sup>[109]</sup>所指出的：(1) 未來的科學必須建立在跨學科方法的基礎上；(2) 水文領域在未來十年的研究挑戰應該通過群體努力來解決；我們可以看到在這個路線圖中有幾個步驟是至關重要的：物理知識、基於過程的模型（Process-Based Model, PBM）和深度學習；使用深度學習來預測未知變量；公開透明的模式建置比賽；基礎模型和可視化元件；以及在各個階段引入數據驅動方法的教育計劃。

本文認為水文科學家應該考慮一種新的研究途徑與傳統的研究方法互補，其中深度學習驅動的數據挖掘可以用來產生假設、預測和見解，儘管黑盒的特性可能使人對其持保留意見，但最近在可解釋性方法和理解深度學習網路方面也取得了一些進展；水文領域中機器學習的黑盒特性或許是這個新興領域發展的困境，然而若因為這樣就拒絕此研究途徑，反而可能會危及其他透明演算法的發展，水文或其他領域的發展都表現出深度學習這項工具具有很大的發展性；唯數據的限制和模型的可變性等挑戰還是需要領域內研究者們一同努力；此外，本文也認為應建立開放式的水文模型競賽，並強調其模型表現和解釋性的能力，此種競賽將會非常有價值，包含演算法開發、模型評估和比較、可重複性測試、數據集彙編、資源共享和社群組織等領域內不同的面向都將匯聚到一起，並促進整個領域的成長。

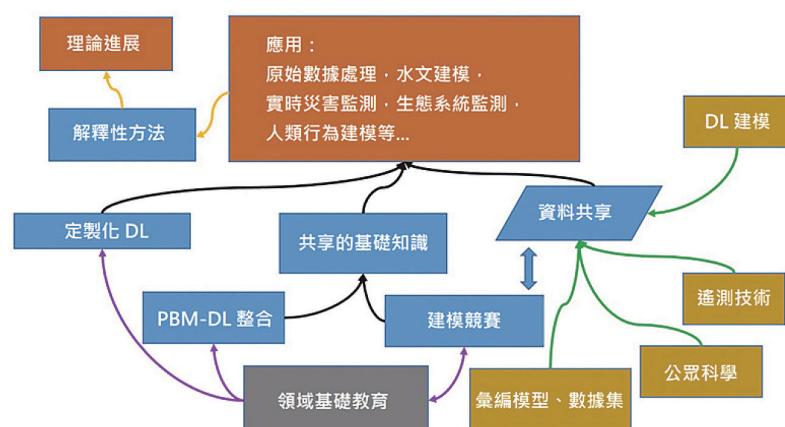
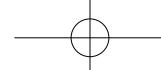


圖 3 深度學習驅動水文領域的發展圖（來源：Shen et al.<sup>[73]</sup>）

## 參考文獻

1. Tibshirani, R. (1994). Regression Shrinkage and Selection Via the Lasso, *J. R. Stat. Soc. Ser. B*, **58**, 267-288.
2. Drucker, H., Burges, C.J.C., Kaufman, L., Smola, A., and Vapnik, V. (1996). Support vector regression machines, *Proc. 9th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst.*, 155-161, available at: <https://dl.acm.org/citation.cfm?id=2999003> (last access: 5 January 2018).
3. Koza, J.R. (1992). Genetic Programming: on the Programming of Computers by Means of Natural Selection, MIT Press, Cambridge, MA, USA.
4. Chang, L.-C., Shen, H.-Y., and Chang, F.-J. (2014). Regional flood inundation nowcast using hybrid SOM and dynamic neural networks, *J. Hydrol.*, **519**, 476-489, <https://doi.org/10.1016/J.JHYDROL.2014.07.036>.
5. Chen, I.-T., Chang, L.-C., and Chang, F.-J. (2018). Exploring the spatiotemporal interrelation between groundwater and surface water by using the self-organizing maps, *J. Hydrol.*, **556**, 131-142, <https://doi.org/10.1016/J.JHYDROL.2017.10.015>.
6. Hsu, Kuo-lin, Hoshin Vijai Gupta, and Soroosh Sorooshian. (1995). "Artificial neural network modeling of the rainfall-runoff process." *Water resources research*, **31**(10), 2517-2530.
7. Hsu, Kuo-lin, et al. (1997). "Precipitation estimation from remotely sensed information using artificial neural networks." *Journal of Applied Meteorology and Climatology*, **36**(9), 1176-1190.
8. Hsu, Kuo-lin, et al. (2002). "Self-organizing linear output map (SOLO): An artificial neural network suitable for hydrologic modeling and analysis." *Water Resources Research*, **38**(12), 38-1.
9. Ho, T.K. (1995). Random decision forests, in Proceedings of 3rd International Conference on Document Analysis and Recognition, *IEEE Comput. Soc. Press*, **1**, 278-282.
10. Nelson, E. and Ghahramani, Z. (2006). Sparse Gaussian Processes using Pseudo-inputs, *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, **18**, 1257-1264.
11. Moradkhani, H., Hsu, K., Gupta, H.V., and Sorooshian, S. (2004). Improved streamflow forecasting using self-organizing radial basis function artificial neural networks, *J. Hydrol.*, **295**, 246-262, <https://doi.org/10.1016/J.JHYDROL.2004.03.027>.
12. Govindaraju, R.S. (2000). Artificial Neural Networks in Hydrology. II: Hydrologic Applications, *J. Hydrol. Eng.*, **5**, 124-137, [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)1084-0699\(2000\)5:2\(124\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)1084-0699(2000)5:2(124)).
13. Maier, Holger R., et al. (2010). "Methods used for the development of neural networks for the prediction of water resource variables in river systems: Current status and future directions." *Environmental modelling & software*, **25**(8), 891-909.
14. Goodman, B. and Flaxman, S. (2016). European Union regulations on algorithmic decision-making and a "right to explanation." arXiv:1606.08813, available at: <http://arxiv.org/abs/1606.08813> (last access: 7 February 2018).
15. Shen, C. (2018). A trans-disciplinary review of deep learning research and its relevance for water resources scientists, *Water Resour. Res.*, <https://doi.org/10.1029/2018WR022643>.
16. Voosen, P. (2017). The AI detectives, *Science*, **80**, 357, <https://doi.org/10.1126/science.357.6346.22>.
17. Schmidhuber, J. (2015). Deep learning in neural networks: An overview, *Neural Networks*, **61**, 85-117, <https://doi.org/10.1016/j.neunet.2014.09.003>.
18. Guo, Y., Liu, Y., Oerlemans, A., Lao, S., Wu, S., and Lew, M.S. (2016). Deep learning for visual understanding: A review, *Neurocomputing*, **187**, 27-48, <https://doi.org/10.1016/J.NEUCOM.2015.09.116>.
19. He, Kaiming, et al. (2016). "Deep residual learning for image recognition." *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*.
20. Simonyan, Karen, and Andrew Zisserman. (2014). "Two-stream convolutional networks for action recognition in videos." *Advances in neural information processing systems*, **27**.
21. Zhu, X.X., Tuia, D., Mou, L., Xia, G.-S., Zhang, L., Xu, F., and Fraundorfer, F. (2017). Deep Learning in Remote Sensing: A Comprehensive Review and List of Resources, *IEEE Geosci. Remote Sens. Mag.*, **5**, 8-36, <https://doi.org/10.1109/MGRS.2017.2762307>.
22. Baughman, Aaron K., et al. (2013). "Deepqa jeopardy! gamification: a machine-learning perspective." *IEEE transactions on computational intelligence and AI in games*, **6**(1), 55-66.
23. Hirschberg, Julia, and Christopher D. Manning. (2015). "Advances in natural language processing." *Science*, **349**.6245 (2015), 261-266, <https://doi.org/10.1126/science.aaa8685>.
24. Vondrick, C., Pirsiavash, H., and Torralba, A. (2016). Anticipating Visual Representations from Unlabeled Video, CVPR 2016, available at: <http://arxiv.org/abs/1504.08023> (last access: 20 August 2018).
25. Gatys, L.A., Ecker, A.S., and Bethge, M. (2016). Image Style Transfer Using Convolutional Neural Networks, 2016 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2414-2423.
26. Leviathan, Y. and Matias, Y. (2018). Google Duplex: An AI System for Accomplishing Real-World Tasks Over the Phone, Google AI Blog, available at: <https://ai.googleblog.com/2018/05/duplex-ai-system-for-natural-conversation.html>, last access: 20 August 2018.
27. Zen, Heiga, and Hasim Sak. (2015). "Unidirectional long short-term memory recurrent neural network with recurrent output layer for low-latency speech synthesis." *2015 IEEE International Conference*.
28. LeCun, Y., Bengio, Y., and Hinton, G. (2015). Deep learning, *Nature*, **521**, 436-444, <https://doi.org/10.1038/nature14539>.
29. Fang, K., Shen, C., Kifer, D., and Yang, X. (2017). Prolongation of SMAP to Spatio-temporally Seamless Coverage of Continental US Using a Deep Learning Neural Network, *Geophys. Res. Lett.*, **44**, 11030-11039, <https://doi.org/10.1002/2017GL075619>.
30. Laloy, Eric, et al. (2017). "Inversion using a new low-dimensional representation of complex binary geological media based on a deep neural network." *Advances in water resources*, **110**, 387-405.
31. Laloy, E., Héault, R., Jacques, D., and Linde, N. (2018). Training-Image Based Geostatistical Inversion Using a Spatial Generative Adversarial Neural Network, *Water Resour. Res.*, **54**, 381-406, <https://doi.org/10.1002/2017WR022148>.
32. Tao, Yumeng, et al. (2016). "A deep neural network modeling framework to reduce bias in satellite precipitation products." *Journal of Hydrometeorology*, **17**(3), 931-945.
33. Vandal, Thomas, et al. (2017). "Deepsd: Generating high resolution climate change projections through single image super-resolution." *Proceedings of the 23rd ACM SIGKDD international conference on knowledge discovery and data mining*.
34. Zhang, D., Lindholm, G., and Ratnaweera, H. (2018). Use long short-term memory to enhance Internet of Things for combined sewer overflow monitoring, *J. Hydrol.*, **556**, 409-418, <https://doi.org/10.1016/J.JHYDROL.2017.11.018>.
35. Srinivasan, M. (2013). Hydrology from space: NASA's satellites supporting water resources applications, Water Forum III Droughts Other Extrem. Weather Events, available at: [http://www.jsg.utexas.edu/ciess/files/Srinivasanetal\\_TWF\\_Oct14\\_Final.pdf](http://www.jsg.utexas.edu/ciess/files/Srinivasanetal_TWF_Oct14_Final.pdf) (last access: 12 July 2016).
36. Entekhabi, D. (2010). The Soil Moisture Active Passive (SMAP) mission, *Proc. IEEE*, **98**, 704-716, <https://doi.org/10.1109/JPROC.2010.2043918>.
37. Jackson, T., O'Neill, P., Njoku, E., Chan, S., Bindlish, R., Collander, A., Chen, F., Burgin, M., Dunbar, S., Piepmeier, J., Cosh, M., Caldwell, T., Walker, J., Wu, X., Berg, A., Rowlandson, T., Pacheco, A., McNairn, H., Thibeault, M., Martínez-Fernández, J., González-Zamora, Á., Seyfried10, M., Bosch, D., Starks, P., Goodrich, D., Prueger, J., Su, Z., van der Velde, R., Asanuma, J., Palecki, M., Small, E., Zreda, M., Calvet, J., Crow, W., Kerr, Y., Yueh, S., and Entekhabi, D. (2016). Soil Moisture Active Passive (SMAP) Project Calibration and Validation for the L2/3\_SM\_P Version 3 Data Products, SMAP Proj. JPL D-93720, available at: <https://nsidc.org/data/smap/technical-references> (last access: 27 July 2017).
38. Mecklenburg, Susanne, et al. (2008). "The soil moisture and ocean salinity mission-An overview." *IGARSS 2008-2008 IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium*. Vol. 4. IEEE, 2008. <https://doi.org/10.1109/IGARSS.2008.4779878>
39. Knyazikhin, Y., Glassy, J., Privette, J.L., Tian, Y., Lotsch, A., Zhang, Y., Wang, Y., Morisette, J.T., P.Votava, Myneni, R.B., Nemani, R.R., and Running, S.W. (1999). MODIS Leaf Area Index (LAI) and Fraction of Photosynthetically Active Radiation Absorbed by Vegetation (FPAR) Product (MOD15) Algorithm Theoretical Basis Document, [https://modis.gsfc.nasa.gov/data/atbd/atbd\\_mod15.pdf](https://modis.gsfc.nasa.gov/data/atbd/atbd_mod15.pdf) (last access: 8 October 2018).
40. Mu, Q., Zhao, M., and Running, S.W. (2011). Improvements to a MODIS global terrestrial evapotranspiration algorithm, *Remote Sens. Environ.*, **115**, 1781-1800, <https://doi.org/10.1016/j.rse.2011.02.019>.



41. Wahr, J., Swenson, S., and Velicogna, I. (2006). Accuracy of GRACE mass estimates, *Geophys. Res. Lett.*, **33**, L06401, <https://doi.org/10.1029/2005GL025305>.
42. Hall, D.K., Riggs, G.A., and Salomonson, V.V. (2006). MODIS/Terra Snow Cover 5-Min L2 Swath 500 m, Version 5, Boulder, Colorado USA.
43. Pavelsky, T.M., Durand, M.T., Andreadis, K.M., Beighley, R.E., Paiva, R.C.D., Allen, G.H., and Miller, Z.F. (2014). Assessing the potential global extent of SWOT river discharge observations, *J. Hydrol.*, **519**, 1516-1525, <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2014.08.044>.
44. Gleeson, T., Moosdorf, N., Hartmann, J., and van Beek, L.P.H. (2014). A glimpse beneath earth's surface: GLobal HYdrogeology MaPS (GLHYMPS) of permeability and porosity, *Geophys. Res. Lett.*, **41**, 3891-3898, <https://doi.org/10.1002/2014GL059856>.
45. GRDC (2017). River Discharge Data, Glob. Runoff Data Cent., available at: [http://www.bafg.de/GRDC/EN/02\\_svcs/21\\_tmsrs\\_riverdischarge\\_node.html](http://www.bafg.de/GRDC/EN/02_svcs/21_tmsrs_riverdischarge_node.html), last access: 28 July 2017.
46. CUAHSI: HydroClient, available at: <https://data.cuahsi.org/>, last access: 19 August 2018c.
47. Horsburgh, J.S., Morsy, M.M., Castranova, A.M., Goodall, J.L., Gan, T., Yi, H., Stealey, M.J., and Tarboton, D.G. (2016). HydroShare: Sharing Diverse Environmental Data Types and Models as Social Objects with Application to the Hydrology Domain, *J. Am. Water Resour. As.*, **52**, 873-889, <https://doi.org/10.1111/1752-1688.12363>.
48. Aspen (2017). Internet of Water: Sharing and Integrating Water Data for Sustainability, A Rep. from Aspen Inst. Dialogue Ser. Water Data, available at: <https://www.aspeninstitute.org/publications/internet-of-water/> (last access: 27 August 2018).
49. McCabe, M.F., Rodell, M., Alsdorf, D.E., Miralles, D.G., Uijlenhoet, R., Wagner, W., Lucieer, A., Houborg, R., Verhoest, N.E.C., Franz, T.E., Shi, J., Gao, H., and Wood, E.F. (2017). The future of Earth observation in hydrology, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, **21**, 3879-3914, <https://doi.org/10.5194/hess-21-3879-2017>.
50. Allamano, P., Croci, A., and Laio, F. (2015). Toward the camera rain gauge, *Water Resour. Res.*, **51**, 1744-1757, <https://doi.org/10.1002/2014WR016298>.
51. Hiroi, K. and Kawaguchi, N. (2016). FloodEye: Real-time flash flood prediction system for urban complex water flow, 2016 IEEE SENSORS, 1-3.
52. Evans, H., Gervet, E., Kuchembuck, R., and Hu, M. (2018). Will You Embrace AI Fast Enough? AT Kearney Operations & Performance Transformation report, available at: <https://www.atkearney.com/operations-performance-transformation/article/?a/will-you-embrace-ai-fast-enough>, last access 10 August 2018.
53. Dignan, L. (2018). Google Research becomes Google AI to reflect AI-first ambitions, zdnet.com, available at: <https://www.zdnet.com/article/google-research-becomes-google-ai-to-reflect-ai-first-ambitions/>, last access: 20 August 2018.
54. Columbus, L. (2018). Roundup of Machine Learning Forecasts and Market Estimates, 2018, Forbes Contrib., available at: <https://www.forbes.com/sites/louiscolumbus/2018/02/18/roundup-of-machine-learning-forecasts-and-market-estimates-2018/#7d3c5bd62225>, last access: 30 July 2018.
55. Baldi, P., Sadowski, P., and Whiteson, D. (2015). Enhanced Higgs Boson to  $\tau + \tau -$  Search with Deep Learning, *Phys. Rev. Lett.*, **114**, 111801, <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.111801>.
56. Angermueller, C., Pärnämaa, T., Parts, L., and Stegle, O. (2016). Deep learning for computational biology, *Mol. Syst. Biol.*, **12**, 878, <https://doi.org/10.1525/MSB.20156651>.
57. Goh, G.B., Hodas, N.O., and Vishnu, A. (2017). Deep learning for computational chemistry, *J. Comput. Chem.*, **38**, 1291-1307, <https://doi.org/10.1002/jcc.24764>.
58. Russakovsky, O., Deng, J., Su, H., Krause, J., Satheesh, S., Ma, S., Huang, Z., Karpathy, A., Khosla, A., Bernstein, M., Berg, A.C., and Fei-Fei, L. (2014). ImageNet Large Scale Visual Recognition Challenge, arXiv: 1409.0575, available at: <http://arxiv.org/abs/1409.0575> (last access: 24 March 2018).
59. Krizhevsky, A., Sutskever, I., and Hinton, G.E. (2012). ImageNet Classification with Deep Convolutional Neural Networks, *Advances in Neural Information Processing Systems*, **25**, 1097-1105, available at: <https://papers.nips.cc/paper/4824-imagenet-classification-with-deep-convolutional-neural-> (last access: 30 March 2018).
60. Stallkamp, J., Schlipsing, M., Salmen, J., and Igel, C. (2011). The German Traffic Sign Recognition Benchmark: A multi-class classifica-
- tion competition, *The 2011 International Joint Conference on Neural Networks*, 1453-1460.
61. Yu, K.-H., Zhang, C., Berry, G.J., Altman, R.B., Ré, C., Rubin, D.L., and Snyder, M. (2016). Predicting non-small cell lung cancer prognosis by fully automated microscopic pathology image features, *Nat. Commun.*, **7**, 12474, <https://doi.org/10.1038/ncomms12474>.
62. Indermuhle, E., Frinken, V., and Bunke, H. (2012). Mode Detection in Online Handwritten Documents Using BLSTM Neural Networks, *2012 International Conference on Frontiers in Handwriting Recognition*, 302-307, IEEE 2012.
63. Xiong, W., Droppo, J., Huang, X., Seide, F., Seltzer, M., Stolcke, A., Yu, D., and Zweig, G. (2016). Achieving Human Parity in Conversational Speech Recognition, Microsoft Res. Tech. Rep. MSR TR-2016-71, arXiv:1610.05256, available at: <http://arxiv.org/abs/1610.05256> (last access: 24 March 2018).
64. Stollenga, M. F., Byeon, W., Liwicki, M., and Schmidhuber, J. (2015). Parallel multi-dimensional LSTM, with application to fast biomedical volumetric image segmentation, *Proc. 28th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst.*, **2**, 2998-3006.
65. CIF (2016). Results, Int. Time Ser. Forecast. Compet.- Comput. In tell. Forecast., available at: <http://irafm.osu.cz/cif/main.php?c=Static&page=results> (last access: 24 March 2018).
66. Tao, Y., Gao, X., Ihler, A., Sorooshian, S., Hsu, K., Tao, Y., Gao, X., Ihler, A., Sorooshian, S., and Hsu, K. (2017). Precipitation Identification with Bispectral Satellite Information Using Deep Learning Approaches, *J. Hydrometeorol.*, **18**, 1271-1283, <https://doi.org/10.1175/JHM-D-16-0176.1>.
67. Tao, Y., Hsu, K., Ihler, A., Gao, X., Sorooshian, S., Tao, Y., Hsu, K., Ihler, A., Gao, X., and Sorooshian, S. (2018). A Two-Stage Deep Neural Network Framework for Precipitation Estimation from Bispectral Satellite Information, *J. Hydrometeorol.*, **19**, 393-408, <https://doi.org/10.1175/JHM-D-17-0077.1>.
68. Laloy, Eric, et al. (2018). "Training-image based geostatistical inversion using a spatial generative adversarial neural network." *Water Resources Research*, **54**(1), 381-406.
69. Kratzert, F., Klotz, D., Brenner, C., Schulz, K., and Herrnegger, M. (2018). Rainfall-Runoff modelling using Long-Short-Term Memory (LSTM) networks, *Hydrol. Earth Syst. Sci. Discuss.*, <https://doi.org/10.5194/hess-2018-247>, in review.
70. Liu, Y., Racah, E., Prabhat, Correa, J., Khosrowshahi, A., Lavers, D., Kunkel, K., Wehner, M., and Collins, W. (2016). Application of Deep Convolutional Neural Networks for Detecting Extreme Weather in Climate Datasets, ACM SIGKDD 2016 Conference on Knowledge Discovery & Data Mining, available at: <http://arxiv.org/abs/1605.01156>, last access: 21 October 2016.
71. Matsuoka, D., Nakano, M., Sugiyama, D., and Uchida, S. (2017). Detecting Precursors of Tropical Cyclone using Deep Neural Networks, The 7th International Workshop on Climate Informatics, CI, 2017.
72. Gentile, P., Pritchard, M., Rasp, S., Reinaudi, G., and Yacalis, G. (2018). Could Machine Learning Break the Convection Parameterization Deadlock? *Geophys. Res. Lett.*, **45**, 5742-5751, <https://doi.org/10.1029/2018GL078202>.
73. Shen, Chaopeng, et al. (2018). "HESS Opinions: Incubating deep-learning-powered hydrologic science advances as a community." *Hydrology and Earth System Sciences*, **22**(11), 5639-5656.
74. Yosinski, J., Clune, J., Nguyen, A., Fuchs, T., and Lipson, H. (2015). Understanding Neural Networks Through Deep Visualization, in Deep Learning Workshop, 31st International Conference on Machine Learning, Lille, France, available at: <http://arxiv.org/abs/1506.06579> (last access: 19 November 2017).
75. Karpathy, A., Johnson, J., and Fei-Fei, L. (2015). Visualizing and Understanding Recurrent Networks, ICLR 2016 Workshop, available at: <http://arxiv.org/abs/1506.02078> (last access: 7 November 2016).
76. Banino, A., Barry, C., Uria, B., Blundell, C., Lillicrap, T., Mirowski, P., Pritzel, A., Chadwick, M.J., Degris, T., Modayil, J., Wayne, G., Soyer, H., Viola, F., Zhang, B., Goroshin, R., Rabinowitz, N., Pascanu, R., Beattie, C., Petersen, S., Sadik, A., Gaffney, S., King, H., Kavukcuoglu, K., Hassabis, D., Hadsell, R., and Kumaran, D. (2018). Vector-based navigation using gridlike representations in artificial agents, *Nature*, **557**, 429-433, <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0102-6>.
77. Kawaguchi, K., Kaelbling, L.P., and Bengio, Y. (2017). Generalization

- in Deep Learning, arXiv:1710.05468, available at: <http://arxiv.org/abs/1710.05468> (last access: 12 March 2018).
78. Srivastava, N., Hinton, G., Krizhevsky, A., Sutskever, I., and Salakhutdinov, R. (2014). Dropout: A Simple Way to Prevent Neural Networks from Overfitting, *J. Mach. Learn. Res.*, **15**, 1929-1958.
  79. Hochreiter, S. (1998). The Vanishing Gradient Problem During Learning Recurrent Neural Nets and Problem Solutions, *Int. J. Uncertainty, Fuzziness Knowledge-Based Syst.*, **6**, 107-116, <https://doi.org/10.1142/S0218488598000094>.
  80. Ranzato, M., Poulnay, C., Chopra, S., and LeCun, Y. (2016). Efficient learning of sparse representations with an energy-based model, *Proc. 19th Int. Conf. Neural Inf. Process. Syst.*, 1137-1144, available at: <https://dl.acm.org/citation.cfm?id=2976599> (last access: 30 March 2018).
  81. Greff, K., Srivastava, R.K., Koutník, J., Steunebrink, B.R., and Schmidhuber, J. (2015). LSTM: A Search Space Odyssey, available at: <http://arxiv.org/abs/1503.04069> (last access: 18 July 2016).
  82. Hochreiter, S. and Schmidhuber, J. (1997). Long Short Term Memory, *Neural Comput.*, **9**, 1735-1780, <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>.
  83. Kingma, D.P. and Welling, M. (2013). Auto-Encoding Variational Bayes, in Proceedings of the 2014 International Conference on Learning Representations (ICLR), available at: <http://arxiv.org/abs/1312.6114> (last access: 24 March 2018).
  84. Goodfellow, I., Pouget-Abadie, J., Mirza, M., Xu, B., WardeFarley, D., Ozair, S., Courville, A., and Bengio, Y. (2014). Generative Adversarial Networks, in Proceedings of the 27th International Conference on Neural Information Processing Systems (NIPS'14), available at: <http://arxiv.org/abs/1406.2661> (last access: 25 February 2017).
  85. Albert, A., Strano, E., Kaur, J., and Gonzalez, M. (2018). Modeling urbanization patterns with generative adversarial networks, arXiv:1801.02710, available at: <http://arxiv.org/abs/1801.02710>, last access: 24 March.
  86. Arpit, D., Jastrzebski, S., Ballas, N., Krueger, D., Bengio, E., Kanwal, M.S., Maharaj, T., Fischer, A., Courville, A., Bengio, Y., and Lacoste-Julien, S. (2017). A Closer Look at Memorization in Deep Networks, in Proceedings of the 34 th International Conference on Machine Learning, Sydney, Australia, PMLR 70, available at: <https://arxiv.org/abs/1706.05394>.
  87. Krueger, D., Ballas, N., Jastrzebski, S., Arpit, D., Kanwal, M. S., Maharaj, T., Bengio, E., Erraqabi, A., Fischer, A., LacosteJulien, S., and Courville, A. (2017). Deep nets don't learn via memorization, ICLR 2017, available at: <https://openreview.net/pdf?id=rJv6ZgHYg>.
  88. Goodfellow, I., Shlens, J., and Szegedy, C. (2015). Explaining and Harnessing Adversarial Examples, International Conference on Learning Representations, available at: <http://arxiv.org/abs/1412.6572> (last access: 25 February 2017).
  89. Szegedy, C., Zaremba, W., Sutskever, I., Bruna, J., Erhan, D., Goodfellow, I., and Fergus, R. (2013). Intriguing properties of neural networks, available at: <http://arxiv.org/abs/1312.6199> (last access: 8 June 2016).
  90. Ororbia, A.G., Giles, C.L., and Kifer, D. (2016). Unifying Adversarial Training Algorithms with Flexible Deep Data Gradient Regularization, *Neural Computation*, MIT Press, available at: <http://arxiv.org/abs/1601.07213> (last access: 24 February 2017).
  91. Kumar, D. and Menkovski, V. (2016). Understanding Anatomy Classification Through Visualization, 30th NIPS Machine learning for Health Workshop, available at: <https://arxiv.org/abs/1611.06284> (last access: 24 November 2017).
  92. Hendricks, L. A., Akata, Z., Rohrbach, M., Donahue, J., Schiele, B., and Darrell, T. (2016). Generating Visual Explanations, in: Computer Vision – ECCV 2016, 3-19, available at: [https://doi.org/10.1007/978-3-319-46493-0\\_1](https://doi.org/10.1007/978-3-319-46493-0_1), Springer, Cham, Amsterdam, The Netherlands, 2016.
  93. Mount, N.J., Maier, H.R., Toth, E., Elshorbagy, A., Solomatine, D., Chang, F.-J., and Abrahart, R.J. (2016). Data-driven modelling approaches for socio-hydrology: opportunities and challenges within the Panta Rhei Science Plan, *Hydrol. Sci. J.*, **61**, 1-17, <https://doi.org/10.1080/02626667.2016.1159683>.
  94. Fang, K. and Shen, C. (2017). Full-flow-regime storage-streamflow cor relation patterns provide insights into hydrologic functioning over the continental US, *Water Resour. Res.*, **53**, 8064-8083, <https://doi.org/10.1002/2016WR020283>.
  95. Tsai, Wen-Ping, et al. (2020). "Revealing causal controls of storage-streamflow relationships with a data-centric Bayesian framework combining machine learning and process-based modeling." *Frontiers in Water* **2** (2020), 583000.
  96. Nearing, G.S., Mocko, D.M., Peters-Lidard, C.D., Kumar, S.V., and Xia, Y. (2016). Benchmarking NLDAS-2 Soil Moisture and Evapo transpiration to Separate Uncertainty Contributions, *J. Hydrometeorol.*, **17**, 745-759, <https://doi.org/10.1175/JHM-D-15-0063.1>.
  97. Samek, W., Binder, A., Montavon, G., Lapuschkin, S., and Müller, K.-R. (2017). Evaluating the Visualization of What a Deep Neural Network Has Learned, *IEEE Trans. Neural Networks Learn. Syst.*, **28**, 2660-2673, <https://doi.org/10.1109/TNNLS.2016.2599820>.
  98. Mahendran, A. and Vedaldi, A. (2015). Understanding deep image representations by inverting them, 2015 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 5188-5196.
  99. Karpathy, A., Johnson, J., and Fei-Fei, L. (2015). Visualizing and Understanding Recurrent Networks, ICLR 2016 Workshop, available at: <http://arxiv.org/abs/1506.02078> (last access: 7 November 2016).
  100. Tsai, Wen-Ping, et al. (2021). "From calibration to parameter learning: Harnessing the scaling effects of big data in geoscientific modeling." *Nature communications*, **12**(1), 5988.
  101. Shen, C., Appling, A.P., Gentile, P. et al. (2023). Differentiable modelling to unify machine learning and physical models for geosciences. *Nat Rev Earth Environ.*, **4**, 552-567 (2023). <https://doi.org/10.1038/s43017-023-00450-9>.
  102. Hrachowitz, M., Savenije, H.H.G., Blöschl, G., McDonnell, J.J., Sivapalan, M., Pomeroy, J.W., Arheimer, B., Blume, T., Clark, M.P., Ehret, U., Fenicia, F., Freer, J.E., Gelfan, A., Gupta, H.V., Hughes, D.A., Hut, R.W., Montanari, A., Pande, S., Tetzlaff, D., Troch, P.A., Uhlenbrook, S., Wagener, T., Winsemius, H.C., Woods, R.A., Zehe, E., and Cudennec, C. (2013). A decade of Predictions in Ungauged Basins (PUB)—A review, *Hydrol. Sci. J.*, **58**, 1198-1255, <https://doi.org/10.1080/02626667.2013.803183>.
  103. Wagener, T., Sivapalan, M., Troch, P.A., McGlynn, B.L., Harman, C.J., Gupta, H.V., Kumar, P., Rao, P.S.C., Basu, N.B., and Wilson, J.S. (2010). The future of hydrology: An evolving science for a changing world, *Water Resour. Res.*, **46**, 1-10, <https://doi.org/10.1029/2009WR008906>.
  104. Stocker, T.F., Qin, D., Plattner, G.-K., Alexander, L.V., Allen, S.K., Bindoff, N.L., Bréon, F.-M., Church, J.A., Cubasch, U., Emori, S., Forster, P., Friedlingstein, P., Gillett, N., Gregory, J.M., Hartmann, D.L., Jansen, E., Kirtman, B., Knutti, R., Kumar, K.K., Lemke, P., Marotzke, J., Masson-Delmotte, V., Meehl, G.A., Mokhov, I. I., Piao, S., Ramaswamy, V., Randall, D., Rhein, M., Rojas, M., Sabine, C., Shindell, D., Talley, L.D., Vaughan, D.G., and Xie, S.-P. (2013). Technical summary, Climate Change 2013, in: The Physical Science Basis, edited by: Stocker, T.F., Qin, D., Plattner, G.-K., Tignor, M., Allen, S.K., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V., and Midgley, P.M. Contrib. Work. Gr. I to Fifth Assess. Rep. Intergov. Panel Clim. Chang., available at: [http://www.ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar5/wg1/WG1AR5\\_TS\\_FINAL.pdf](http://www.ipcc.ch/pdf/assessment-report/ar5/wg1/WG1AR5_TS_FINAL.pdf) (last access: 8 October 2018).
  105. Wahr, First J. (2004). Time-variable results, *Geophys. gravity Res. Lett.*, from GRACE: 31, L11501, <https://doi.org/10.1029/2004GL019779>.
  106. Blöschl, G. (2006). Hydrologic synthesis: Across processes, places, and scales, *Water Resour. Res.*, **42**, W03S02, <https://doi.org/10.1029/2005WR004319>.
  107. Archfield, S.A., Clark, M., Arheimer, B., Hay, L.E., McMillan, H., Kiang, J.E., Seibert, J., Hakala, K., Bock, A., Wagener, T., Farmer, W.H., Andréassian, V., Attinger, S., Viglione, A., Knight, R., Markstrom, S., and Over, T. (2015). Accelerating advances in continental domain hydrologic modeling, *Water Resour. Res.*, **51**, 10078-10091, <https://doi.org/10.1002/2015WR017498>.
  108. Ajami, H., Khan, U., Tuteja, N.K., and Sharma, A. (2016). Development of a computationally efficient semi-distributed hydrologic modeling application for soil moisture, lateral flow and runoff simulation, *Environ. Model. Softw.*, **85**, 319-331, <https://doi.org/10.1016/J.ENVSOF.2016.09.002>.
  109. Montanari, Alberto, et al. (2013). "Panta Rhei—everything flows": change in hydrology and society—the IAHS scientific decade 2013-2022." *Hydrological Sciences Journal*, **58**(6), 1256-1275.