DOI:10.3969/j.issn.1004-6933.2013.06.009

利用单纯形-混沌优化算法确定河流水质模型参数

袁 华1,刘 方2,刘元会1,郭建青3

(1.长安大学理学院,陕西西安 710064; 2.长安大学建筑工程学院,陕西西安 710064;3.长安大学环境科学与工程学院,陕西西安 710064)

摘要:针对混沌优化算法收敛速度较慢的缺点,将单纯形算法和混沌优化算法结合,构造单纯形-混 沌优化算法,并将该方法应用于分析一维河流水团示踪试验数据,求解河流水质模型参数的函数优 化问题。结果表明,该算法可以有效确定河流水质模型参数,较单纯形法具有更好的收敛性、较混 沌优化算法具有更快的收敛速度。

关键词:环境水利;河流水质模型;参数估计;混沌优化算法;单纯形法;混合算法 中图分类号:TV131 文献标志码:A 文章编号:1004-6933(2013)06-0044-05

Simplex-chaos optimization algorithm for parameter estimation of water quality model of river

YUAN Hua¹, LIU Fang², LIU Yuanhui¹, GUO Jianqing³

(1. College of Science, Chang' an University, Xi' an 710064, China;

2. College of Construction Engineering, Chang' an University, Xi' an 710064, China:

3. College of Environmental Science and Engineering, Chang' an University, Xi' an 710064, China)

Abstract: To overcome the shortcomings of slow convergence of the chaos optimization algorithm, the simplex algorithm and the chaos optimization algorithm were combined to establish the simplex-chaos optimization algorithm. The established algorithm was used to analyze the tracer experiment data of the water quality of a one-dimensional river stream for estimation of the parameters of the water quality model. The results show that the established algorithm can effectively determine the parameters of the water quality model of the river, and it has better convergence compared with the simplex algorithm and faster convergence compared with the chaos optimization algorithm.

Key words: environmental hydraulics; water quality model of river; parameter estimation; chaos optimization algorithm; simplex algorithm; combined algorithm

在水环境研究工作中,河流水质问题是目前的 热点研究问题之一。在反映河流总体特征、预测河 流水质状况时,河流水质模型参数是一种非常重要 的基础性参数。目前,利用其解析解而构造的数据 分析方法是得到河流水质模型参数的主要方法之 一。例如,分析瞬时投放示踪剂条件下一维河流水 团示踪剂实验数据、估算河流纵向离散系数的方法 主要有:直线图解法^[1]、单站法、双站法、抛物线方 程近似拟合法^[2]、演算优化方法^[3]、相关系数极值 法^[4]、粒子群优化算法^[5]、单纯形加速法^[6]和有限 差分-单纯形法^[7]等。然而,这些方法都具有一定 的局限性,文献[8]对上述部分方法的优缺点做出 了较为详细的介绍。

混沌理论属于非线性科学的分支,也是处理其他

基金项目:中央高校基本科研业务费专项资金(CHD2012TD015) 作者简介:袁华(1986—),女,硕士研究生,研究方向为最优化理论与方法。E-mail: chdyhd@126.com 通信作者:刘元会,教授。E-mail: chdlyh@126.com

学科问题的重要工具,它在水环境学科的研究中也有 一定的应用^[9]。文献[10]成功地将混沌优化算法应 用于求解河流水质模型参数问题,但是其收敛速度较 慢。鉴于此,笔者将在局部区域搜索性能良好的单纯 形算法^[6](simplex method,SM)与在全局寻优性能良 好的混沌优化算法^[10](chaos method,CM)结合,构造 了单纯形-混沌优化算法(simplex-chaos method, SCM),并将其应用于分析瞬时投放示踪剂情况下一 维河流水团示踪试验数据、求解断面平均流速与河流 纵向离散系数的函数优化问题。通过数值实验初步 分析了该算法计算结果的可靠性,讨论了待估参数的 初始取值范围和该算法的控制条件对收敛性的影响, 并与其他算法的收敛性和运算速度进行了比较。

1 单纯形-混沌优化算法(SCM)

1.1 SM 和 CM 简介

SM 是一种确定的、局部的优化方法。它也称为 可变多面体搜索法,是一种传统的处理无约束最优 化问题的直接方法。在求极小值问题时,构造一个 n 维欧氏空间的一个包含 n+1 个顶点的凸多面体, 从一个初始化的单纯形开始,求出各个顶点所对应 的适应度,并确定其中的最小值、最大值和次大值, 然后通过反射、压缩、延伸、收缩等操作,求出一个较 好的解,替代最大值所对应的点,构成一个新的多面 体,反复进行上述操作即可搜索到一个最优解。

CM 是一种随机的、全局的优化方法。CM 是利 用混沌运动的特性而进行优化搜索的,整个搜索过 程一般分为粗搜索和细搜索两个阶段。混沌状态是 存在于自然界和社会中的一种普遍的非线性现象, 混沌序列的产生并不混乱,而是根据确定的迭代方 式产生能遍历整个解空间的序列,经过反复搜索找 到一个最佳状态,即粗搜索过程。把粗搜索过程的 最佳状态作为细搜索的初始点,然后在最佳状态附 近产生小扰动,再进行局部区域内的细搜索,直到满 足终止条件为止。

1.2 两种方法结合的算法(SCM)

混沌搜索因其轨道遍历性能够避免陷入局部极 值点而达到全局最优,但在最优点附近搜索时间较 长。单纯形搜索速度快,但对初值依赖性很强,易于 陷入局部最优解。鉴于此,将这两种算法结合,构造 了 SCM。其具体步骤如下:

步骤 1: 令 k_1 = 1, k = 1, 赋给 Logistic 映射 n 个具 有较小差异的初值, 便可得到 n 个相应的混沌变量 $X_{n,m+1}$,其中, n 表示参数个数, m+1 表示混沌序列长度。

步骤 2:利用式 $X'_{n,m+1} = (B_{n,1} + B_{n,2}) X_{n,m+1}$,将混 沌变量 $X_{n,m+1}$ 转化为用于优化的混沌变量 $X'_{n,m+1}$,其 中, $B_{n,1}$ 表示待估参数取值的最小值,取 $B_{n,1}$ =0.000 1, $B_{n,2}$ 表示待估参数取值的最大值。

步骤 3: 混沌粗搜索过程。令 $X_n(k) = X'_{n,m+1}$, 计 算相应的优化函数值 f(k), 令 $X_n^* = X_n(0)$, $f^* = f(0)$ 。若 $f(k) < f^*$,则令 $f^* = f(k)$, $X_n^* = X_n(k)$; 否则 放弃 $X_n(k)$ 。令 k = k+1。

步骤4:经过步骤3的搜索, *f*^{*} <*ε*₁ 或 *k* 大于粗 搜索次数,则停止粗搜索, 否则返回步骤3。

步骤 5:缩小解空间。设 $X^{(0)}$ 为当前最优解,利 用式(1)缩小解空间,其中 $\lambda = 0.618$,为缩小因子。 $\begin{cases} B'_{i,1} = X^{(0)} + \lambda(B_{i,1} - X^{(0)}) \\ B'_{i,2} = X^{(0)} + \lambda(X^{(0)} - B_{i,2}) \end{cases}$ (*i* = 1,2,…,*n*) (1)

步骤 6: 以 $X^{(0)}$ 为基点, 求另外 n 个点 $X^{(i)} = (x_1^{(i)}, x_2^{(i)}, \dots, x_n^{(i)})$, 其中每个点的坐标为

式中, a 为取值在(0,1)内的随机数。

步骤7:求出 n+1 个顶点的函数值,确定其中的 最大值点(X_h, f_h)、次大值点(X_e, f_e)和最小值点 (X_l, f_l),再求出除最大值点外的n 个点的形心 \bar{X} ,利 用式 $X^1 = \bar{X} + \alpha(\bar{X} - X_h)$ 求出 X_h 的反射点 X^1 。

步骤 8:若 $f(X^1) < f_i$,则进行延伸操作,令 $X^2 = \bar{X}$ + $\gamma(X^1 - \bar{X})$;如果 $f(X^1) < f_i$,则用 X^2 代替 X_h ,否则用 X^1 代替 X_h ,并转入步骤 12。

步骤 9:若 $f_l \leq f(X^1) < f_c$,则用 X^1 代替 X_h ,并转入步骤 12。

步骤 10:若 $f_e \leq f(X^1) < f_h$,则用 X^1 代替 X_h ,进行 压缩操作 $X^2 = \overline{X} + \beta(X_h - \overline{X})$;如果 $f(X^2) < f_l$,用 X^2 代 替 X_h ,则转入步骤 12。否则用 $(X_i + X_l)/2$ 代替所有 的 X_i ,转入步骤 12。

步骤 11:若 $f(X^1) \ge f_h$,则进行压缩操作 $X^2 = \bar{X} + \beta(X_h - \bar{X})$;如果 $f(X^2) < f_l$,则用 X^2 代替 X_h ,否则用 $(X_i + X_l)/2$ 代替所有的 X_i ,并转入步骤 12。其中反射、压缩和延伸系数的取值范围为 $0 < \alpha \le 2$, $0 < \beta < 1$, $1 < \gamma \le 3$,文中取 $\alpha = 1$, $\beta = 0.5$, $\gamma = 2^{[11]}$ 。

步骤 12: 若
$$\left\{\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1} \left[f(X^{(i)}) - f(\bar{X})\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}} <$$

 ε_2 ,则停止计算,令 $k_1 = k_1 + 1$,否则转到步骤 6_{\circ}

步骤 13:如果 absy < *ε*₃或 *k*₁ 大于外循环次数, 计算停止,否则转到步骤 1。

以上运算步骤的运算流程如图1所示。



图1 算法流程

2 目标函数

分析河流水团示踪剂试验数据,确定河流断面 平均流速 V 与河流纵向离散系数 D_L 时,多采用瞬 时投放示踪剂情况下的一维河流水团示踪剂试验的 解析解:

$$\rho = \frac{M_0}{A\sqrt{4\pi D_L t}} \exp\left[-\frac{(x - Vt)^2}{4D_L t}\right]$$
(2)

式中: ρ 为示踪剂浓度, ML⁻³; M_0 为瞬时投放示踪剂 的质量, M; A 为河流的横断面积, L²; D_L 为河流纵向 离散系数, L²T⁻¹; t 为时间, T; x 为投放点与采样点 的距离, L; V 为河流的断面平均流速, LT⁻¹。

应用 SCM 法求解该问题时,待估的参数值需使 式(3)表示的目标函数值达到最小:

$$f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (\boldsymbol{\rho}_{i}^{c} - \boldsymbol{\rho}_{i}^{0})^{2} \Longrightarrow \min$$
(3)

式中: ρ_i^0 为*i*时刻观测的实际河流水团示踪剂的质量浓度; ρ_i^c 为通过式(2)得到的*i*时刻的河流水团示踪剂的质量浓度; θ 为待估参数向量;*i*=1,2,…,*N*,为河流水团示踪剂质量浓度的观测时间序列。

式(3)的含义是求得适当的参数向量 θ ,使浓度观测值与浓度计算值的离差平方和的平均值达到最小。此时的函数值,即为问题所求。在此问题中,设 D_L 为 θ_1 ,V为 θ_2 , M_0 /A为 θ_3 。

3 数值实验

3.1 实验数据与条件

在参数真值为 $\theta_1 = D_L = 3\ 000\ \text{m}^2/\min_{\theta_2} = V = \cdot 46$

30 m/min和 $A = 20 \text{ m}^2$ 时,所对应不同时刻的河流水 团示踪剂质量浓度的初始数据 $\rho_i - t_i$ 引自文献[1], 已知 $M_0 = 10 \text{ kg}, x = 500 \text{ m}, \theta_3 = M_0 / A = 0.5 \text{ kg/m}^2$ 。根 据图 1 所示的算法流程,采用 MATLAB 编写的程序 进行数值实验。

3.2 实验结果及其初步分析

3.2.1 算法的可靠性和应用范围

SCM 估计的河流纵向离散系数、断面平均流速 和综合排放参数分别为 $D_L = 3001.8 \text{ m}^2/\text{min}$ 、V = 30.01 m/min、 $M_0/A = 0.5 \text{ kg/m}^2$ 。为了验证 SCM 在 计算河流水质模型参数时的可靠性,将计算得出的参 数代入式(2),得出各个时间的示踪剂质量浓度,图 2 为示踪剂质量浓度原始值与计算值对比图。从两条 曲线的吻合程度可知,SCM 计算出的结果是可靠的。



图 2 示踪剂质量浓度原始值与计算值对比

因为构成目标函数时只需计算优化函数值,不 需要计算优化函数的导数,也无其他附加要求,故理 论上 SCM 也可应用于其他水质解析模型的数据分 析和参数估计中。

3.2.2 算法收敛性的检验和初始取值范围对收敛性的影响

为验证 SCM 的收敛性,在混沌序列长度为 500, 粗搜索次数为 300 次的情况下,给定待估参数初值 介于参数真值的 10~100 倍之间的 6 种方案,分别 进行 100 次数值实验,数值实验结果见表 1。由表 1 可以看出,随着参数倍数的增加,优化结果基本一 致。这表明文中算法的收敛性良好,且参数的初始 取值范围对计算结果的精度和算法的收敛性基本没 有影响。

表1 参数初值取不同范围条件下的计算结果

参数	优化结果				
倍数	$D_L/(\mathrm{m}^2 \cdot \mathrm{min}^{-1})$	$V/(\mathbf{m} \cdot \min^{-1})$	$M_0/A/({\rm kg} \cdot {\rm m}^{-2})$		
10	3 001. 80	30.008	0.50		
20	3 001. 80	30.008	0.50		
30	3 001. 80	30.008	0.50		
50	3 001. 80	30.008	0.50		
80	3 001. 80	30.008	0.50		
100	3 001. 83	30.008	0.50		

3.2.3 混沌序列长度和粗搜索次数对收敛性的 影响

SM 的收敛性决定了 SCM 的收敛性。也就是 说.SM 的迭代次数可以反映出 SCM 的收敛性能。 SM 的迭代次数越少,说明 SCM 的收敛性越优:反之 亦然。在序列长度100~5000中选6种方案.粗搜 索次数从 50~500 次中选 7 种方案, 分别进行 100 次数值实验并求其平均值,数值实验结果见表2。 从表2可以看出,随着粗搜索的次数和混沌序列长 度的增加.SM 的迭代次数整体呈现下降趋势,但下 降幅度较小。可见,粗搜索次数和混沌序列长度对 SM 的迭代次数影响较小。也就是说,混沌序列长度 和粗搜索次数对收敛性影响其微。然而,过大的粗 搜索次数和混沌序列长度会增加算法运算时间,所 以其长度能保证接近问题的全局最优解,且不陷入 局部最优解即可。在实验条件下,比较适宜的混沌 序列长度在 100~800 项之间、粗搜索次数在 100~ 500 次之间。

表 2 不同粗搜索次数和混沌序列长条件下的 SM 的迭代次数

序列	不同粗搜索次数下的 SM 的迭代次数						
长度	50	75	100	150	200	300	500
100	211	207	209	202	200	197	196
200	204	198	205	203	199	193	190
400	199	199	200	191	189	194	188
800	195	196	189	187	189	187	185
1 000	196	190	191	186	182	186	185
5 000	190	184	180	184	178	180	175

3.2.4 SCM 与 SM 两种算法比较

在混沌序列长度为 500、粗搜索次数为 300 次 的情况下,对比两种算法在参数范围 1~20 倍中 6 种方案下的收敛率,每种情况分别进行 100 次数值 实验,当目标函数值小于 5×10⁻⁷时,认为搜索过程 收敛成功,否则认为搜索过程收敛失败。收敛率即 为收敛成功次数与实验总次数之比。数值实验结果 见表 3。从表 3 可以看出,随着参数倍数的增加,SM 收敛失败的次数明显增加,而 SCM 没有出现收敛失 败的情况。这表明 SCM 能够有效地弥补 SM 在运 算过程中收敛失败而陷入局部最优值的缺点。

表 3	SCM -	∃ SM	两种算法的收敛率

参数倍数	算法	收敛率/%	参数倍数	算法	收敛率/%
2	SCM	100	5	SCM	100
	SM	92		SM	67
3	SCM	100	10	SCM	100
	SM	67		SM	41
4	SCM	100	20	SCM	100
	SM	76		SM	3

3.2.5 SCM 与 CM 两种算法的比较

文中以算法运行时间的长短来判断收敛速度的 快慢。在混沌序列长度为 500、粗搜索次数为 300 次的情况下,进行 100 次数值实验并求其运算时间 的平均值,数值实验结果见表 4。从表 4 可以看出, 在相同条件下,CM 完成一次计算所需的平均运算 时间,最长是 SCM 的 35.97 倍、最短是 SCM 的 5.77 倍、平均是 SCM 的 19.40 倍。这表明 SCM 较 CM 的 收敛速度有非常明显的改进,即 SCM 提高了混沌优 化算法在计算河流水质模型参数时的收敛速度。

表 4 SCM 与 CM 在参数初值取不同范围 条件下的运算时间

待估参数	t/min			
倍数	SCM	СМ		
2	0.0331	0.1910		
4	0.0333	0.4271		
5	0.0333	0.7641		
9	0.0333	1.1978		

4 结 语

通过对 SCM 的构造思路、运算流程的介绍和对 一维河流水质模型参数的求解与分析可知, SCM 能 够有效地应用于求解河流水质模型参数的函数优化 问题,并且具有较宽的应用范围。数值实验结果表 明:该算法估算的河流水质模型参数值是可靠的;河 流水质模型参数初值的取值范围对 SCM 的收敛性 影响甚微;较大的混沌粗搜索次数与较长的混沌序 列长度不能有效地改善 SCM 的收敛性;由 SM 与 CM 结合而构成的 SCM 能够有效地弥补原来两种算 法各自在估计河流水质模型参数时的缺点。该方法 的提出为估计河流水质模型参数提供了一种有效的 方法。

参考文献:

- [1]郭建青,温季.示踪试验确定河流纵向弥散系数的直线 图解法[J].环境科学,1990,11(2):24-27.(GUO Jianqing, WEN Ji. The linear graphic method for determining longitudinal dispersive coefficient of the streams by tracer test[J]. Environmental Science,1990, 11(2):24-27.(in Chinese))
- [2]郭建青,李彦,王洪胜,等.确定河流水质参数的抛物方 程近似拟合法[J].水利水电科技进展,2005,25(2): 11-14. (GUO Jianqing,LI Yan,WANG Hongsheng, et al. Approximate fitting method of parabolic equation for determination of water quality parameters for rivers[J]. Advances in Science and Technology of Water Resources, 2005,25(2):11-14. (in Chinese))
- [3] 顾莉,华祖林,何伟,等. 河流污染物纵向离散系数确定

的演算优化法[J]. 水利学报, 2007, 38 (12): 1421-1425. (GU Li, HUA Zulin, HE Wei, et al. Routing optimization method for determination of longitudinal dispersion coefficient in river[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2007, 38(12): 1421-1425. (in Chinese))

- [4]郭建青,王洪胜,李云峰.确定河流纵向离散系数的相关系数极值法[J].水科学进展,2000,11(4):387-391.
 (GUO Jianqing, WANG Hongsheng, LI Yunfeng. The correlation coefficient extreme value method to determine the dispersion parameters of river[J]. Advances in Water Science,2000,11(4):387-391. (in Chinese))
- [5]郭建青,李彦,王洪胜,等. 粒子群优化算法在确定河流水质参数中的应用[J].水利水电科技进展,2007,27
 (6):1-5.(GUO Jianqing,LI Yan,WANG Hongsheng, et al. Application of particle swarm optimization algorithms to determination of water quality parameters of river streams [J]. Advances in Science and Technology of Water Resources, 2007,27(6):1-5. (in Chinese))
- [6]张江山.示踪试验确定河流纵向离散系数的单纯形加 速法[J].环境科学,1994,15(4):66-68.(ZHANG Jiangshan. Accelerated simplex algorithm to determine the longitudinal dispersion coefficient in a river by tracer test [J]. Environmental Science, 1994, 15(4):66-68.(in Chinese))
- [7] 薛红琴,赵尘,刘晓东,等.确定天然河流纵向离散系数 的有限差分-单纯形法[J].解放军理工大学学报:自然

(上接第43页)

由此可知,回水范围随着给水度的增大而减小, 给水度分别为0.05和0.25时回水范围只相差不到 60m,这表明对于一般的潜水含水层,给水度对回水 范围的影响不大。综上分析得出结论,影响回水范 围的主要因素是渗透系数,回水范围随着渗透系数增 大而增大,给水度对回水范围的影响有限。

5 结 论

本文通过解析法构建了河水位连续变化条件下 的潜水回水模型,用 Boussinessq 方程的第2种线性 化方法对模型进行求解,并对奎河的回水范围做出 了预测。计算结果表明,奎河水位连续变化时,两岸 潜水的回水范围在65m左右,由于河水受到严重污 染,该范围内的潜水势必长期受到河水污染的影响。 建议在今后对奎河进行清淤工作时,此范围内的含 水介质也应引起重视。此外,回水范围计算的主要 参数为渗透系数和给水度,通过两者对回水范围的 敏感性分析可知,渗透系数对回水范围有决定性的 影响,给水度对回水范围的影响有限。 科学版,2012,13 (2):214-218. (XUE Hongqin, ZHAO Chen, LIU Xiaodong, et al. Finite difference methodsimplex method for determination of longitudinal dispersion coefficient in natural river[J]. Journal of PLA University of Science and Technology: Natural Science Edition,2012,13(2):214-218. (in Chinese))

- [8] 顾莉,华祖林. 天然河流纵向离散系数确定方法的研究 进展[J]. 水利水电科技进展,2007,27(2):85-89.
 (GU Li, HUA Zulin. Advances in determination of longitudinal dispersion coefficient of natural rivers [J]. Advances in Science and Technology of Water Resources, 2007,27(2):85-89. (in Chinese))
- [9] ZHOU Yinkang, MA Zhiyuan, WANG Lachun. Chaotic dynamics of the flood series in the Huaihe River Baisn for the last 500years[J]. Journal of Hydrology, 2002, 258 (1-4):100-110.
- [10] 郭建青,李彦,王洪胜,等.利用混沌优化算法确定河流 水质模型参数[J].水力发电学报,2004,23(4):92-96.
 (GUO Jianqing, LI Yan, WANG Hongsheng, et al. Chaotic optimization for parameter estimation of water quality model of river [J]. Journal of Hydroelectric Engineering,2004, 23(4):92-96. (in Chinese))
- [11] 张智星,孙春在.神经-模糊和软计算[M].西安:西安 交通大学出版社,2000:131-135.

(收稿日期:2013-07-01 编辑:徐 娟)

参考文献:

- [1] 薛禹群. 地下水动力学[M]. 北京:地质出版社,2005.
- [2] 沈照理,刘光亚,杨成田,等.水文地质学[M].北京:科 学出版社,1985.
- [3] 张蔚榛.地下水非稳定流计算和地下水资源评价[M]. 北京:科学出版社,1983.
- [4] 项彦勇. 地下水力学概论[M]. 北京:科学出版社, 2011.
- [5] 胡佩清.水平隔水层情况下潜水稳定流回水计算的新方法[J].水文地质工程地质,1957(4):33-34. (HU Peiqing. A new calculating method of steady phreatic backwater in the horizontal impermeable layer circumstance [J]. Hydrogeology and Engineering geology, 1957(4):33-34. (in Chinese))
- [6] 宾德曼 H H,陆建康. 论预测潜水回水时考虑水库岸边 再造的必要性[J]. 水文地质工程地质,1960(1):44.
 (Bindman H H, LU Jiankang. The necessity of reservoir shore recycling in the circumstance of predicting phreatic backwater [J]. Hydrogeology and Engineering geology, 1960(1):44. (in Chinese))

(收稿日期:2013-04-29 编辑:徐 娟)