

基于BP算法的地下水模拟中 加速因子的确定*

马荣¹,刘继朝¹,石建省^{1†},王虎²

(1 地质科学院水文地质环境地质研究所, 石家庄 050803; 2 中国石油大学(北京), 北京 102249)

(2010年3月9日收稿; 2010年5月24日收修改稿)

Ma R, Liu J C, Shi J S, et al. Determination of the acceleration factor in groundwater simulation process through BP algorithm[J]. Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, 2011, 28(1): 51-56.

摘要 在大型线性方程组的超松弛迭代法求解中,加速因子经常难以确定.应用BP神经网络对其进行训练学习,经过对比分析,得到最佳模型,应用该模型可快速确定加速因子.将该方法应用于石家庄市栾城水文试验基地,计算结果表明,BP人工神经网络有效地解决了地下水数值模拟中加速因子难以确定的问题.

关键词 地下水数值模拟,加速因子,超松弛迭代法,神经网络

中图分类号 P641

数值模拟已成为地下水资源评价的主要手段之一.在模拟过程中,需要求解含有许多大型、稀疏矩阵的线性方程组,超松弛迭代法(SOR)是求解大型线性方程组的有效方法之一^[1],通过选择恰当的加速因子(ω)可以加快方程的收敛速度.然而在实际的水文地质计算过程中,要选择一个恰当的加速因子需要进行许多复杂的特征值分析和多次试算,基于此,国内外学者提出了一些新的方法来确定加速因子^[2-5],但均需大量的计算且对模拟人员的数理要求较高,难以普遍推广.为此引入人工神经网络(ANN)模型,利用其BP算法强大的自适应与自学习能力,来确定加速因子的数值.并将该方法应用于实际的水文地质模型,对结果的可靠性进行分析、讨论.

1 超松弛迭代法算法

1.1 基本概念

超松弛迭代法是求解线性代数方程组的一种迭代加速方法,它是在高斯-塞德尔迭代法的基础上进行加速求解,将前一步的结果 $h_{i,j}^k$ 与高斯-塞德尔迭代方法的迭代值 $h_{i,j}^{k+1}$ 通过适当的加权平均,期望获得更好的近似值 $h_{i,j}^{k+1}$ 其迭代公式为

$$T_{i+\frac{1}{2},j} \frac{h_{i+1,j}^{k+1} - h_{i,j}^{k+1}}{(\Delta x)^2} + T_{i-\frac{1}{2},j} \frac{h_{i-1,j}^{k+1} - h_{i,j}^{k+1}}{(\Delta x)^2} + T_{i,j+\frac{1}{2}} \frac{h_{i,j+1}^{k+1} - h_{i,j}^{k+1}}{(\Delta y)^2} + T_{i,j-\frac{1}{2}} \frac{h_{i,j-1}^{k+1} - h_{i,j}^{k+1}}{(\Delta y)^2} + w_{i,j} = S_{i,j} \frac{h_{i,j}^{k+1} - h_{i,j}^k}{\Delta t}, \quad (1)$$

(1)式中, $h_{i,j}^{k+1}$ 为待求的水头值; $h_{i,j}^k$ 为前次迭代值; $T_{i,j}$ 为网格差分节点 i,j 处导水系数值; $\Delta x, \Delta y$ 为 x, y 方向上空间步长; $w_{i,j}$ 为网格节点处源汇项.

为方便书写,令

* 国家重点基础研究发展规划(2010CB428800)和中国地质科学院水文地质环境地质研究所项目(SK201015)资助

† 通讯联系人, E-mail: tiger7886@263.net

$$a_{i,j} = \frac{T_{i,j-\frac{1}{2}}}{(\Delta y)^2}; b_{i,j} = \frac{T_{j,i-\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2}; e_{i,j} = \frac{T_{j,i+\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2}; g_{i,j} = \frac{T_{i,j+\frac{1}{2}}}{(\Delta y)^2}; f_{i,j} = -\frac{S_{i,j}h_{i,j}^k - w_{i,j}}{\Delta t}; d_{i,j} = -\left(a_{i,j} + b_{i,j} + g_{i,j} + \frac{S_{i,j}}{\Delta t}\right),$$

则公式(1)可变换为

$$h_{i,j}^{(k+1)} = h_{i,j}^k + \omega \left[\frac{1}{d_{i,j}} (-a_{i,j}h_{i,j-1}^{(k+1)} - b_{i,j}h_{i-1,j}^{(k+1)} - e_{i,j}h_{i+1,j}^k - g_{i,j}h_{i,j+1}^k + f_{i,j}) - h_{i,j}^k \right]. \quad (2)$$

为了加快收敛速度,引入加速因子 ω ,用它来调节这个修正量的大小.加速因子的取值一般为 $1 < \omega < 2$ ^[6]为佳,但在1和2之间有许多取值,究竟如何取值并没有明确的数理公式.若加速因子选的好则可以大大加快计算的收敛速度,由于 ω 依赖于公式(2)中的系数矩阵,故在水文地质的计算当中 ω 的选取与渗透系数、时间步长、储水系数等基础水文地质条件都有密切的联系.

1.2 加速因子的选取方法

现阶段比较通用的加速因子选取方法主要有:逐步实验法、拆半查找法、经验法,以及试算法^[7].但是上述这些方法在计算方面比较繁琐,尤其是对于拆半查找法要找到不超过指定发散的最大迭代次数的 ω 值,虽然其算法简单,但 ω 可能不是最优值;而经验指导法要凭借以往的经验来选取 ω 的值,对于无经验者将无所适从,还要承担一定的风险.而且上述的计算方法完全出于算法方面的考虑,没有考虑到实际的水文地质计算参数,因为在地下水数值模拟过程中,尤其是在使用一些商业软件时,由于使用者难以计算出最终的方程组,故要想使用上述方法便无从谈起.此次研究的主要任务便是探求水文地质参数与加速因子 ω 之间的非线性关系,并通过人工神经网络的BP算法来预测 ω 的具体值.

2 人工神经网络

2.1 人工神经网络介绍

人工神经网络(artificial neural network)简称ANN,是基于现代生物学研究人脑组织成果的基础上,用由大量简单的处理单元(神经元)广泛连接组成的复杂网络来模拟人类大脑的学习、记忆、推理、归纳等功能^[8].在神经网络的应用研究中,使用范围最广的为误差反向传播(error back-propagation)算法模型(简称BP模型).BP神经网络具有许多优秀的品质,如自适应性、自组织性、容错性等,并善于从近似的、不确定甚至相互矛盾的知识环境中做出预测^[9].根据对加速因子及水文地质条件的综合研究,此次训练所采用的BP网络模型输入层有5个神经元;根据经验初步将隐含层为11个神经元,而输出层则只有1个神经元,即加速因子 ω .

2.2 BP算法

标准神经网络主要由输入层、隐含层和输出层组成.一个标准的BP算法主要包括:

1) 隐含层节点的输出

$$y_j = f\left(\sum_{i=1}^n w_{ji}x_i - \theta_j\right); \quad (3)$$

2) 输出节点的计算输出^[10]

$$z_l = f\left(\sum_{j=1}^n v_{lj}y_j - \theta_l\right); \quad (4)$$

3) 将网络误差与最大允许误差进行比较,若满足则结束,否则按公式(5)修正权值^[11]

$$w_{ij}(k+1) = w_{ij}(k) + \eta\delta_jx_i, \quad (5)$$

(3)~(5)式中, $w_{ij}(k+1)$ 为下次循环的连接权值; $w_{ij}(k)$ 为当前循环的连接权值; η 为学习率; x_i 为第一个输出层节点的目标输出; $f(a) = 1/(1 + e^{-a})$ 为转移函数; z_l 为隐含层节点输出; v_{lj} 为连接权值; θ_j 为节点阈值.

2.3 主控因素的选取

为配合即将开展的“华北平原地下水演变机制与调控”,在栾城试验场进行精细含水层结构调查研究.该试验场位于华北平原中东部,隶属于河北省石家庄市,该地区地貌属冲洪积、洪积平原,地势平坦,

海拔高程为 13.5 ~ 28.5m. 研究区为大陆性半干旱季风气候,多年平均降水量 471.1mm,平均蒸发量为 1529.5mm. 试验场自上而下可划分为 5 个含水层组,其中第 I 层为潜水含水层组. 此次研究的重点为第 II 承压含水层,所选取的研究区面积 107km²,在研究区共有 61 口观测井,呈网格状分布于整个研究区内. 根据前期的抽放水试验得出该层平均渗透系数为 17.7m/d,垂向渗透系数为 1.33E-4m/d、储水系数为 1.0E-3,四周边界为定水头边界,用 Nenuman and Witherspoon^[12] 提出的越流理论建立含水层组之间的越流联系. 据以上资料,可将该物理模型概化为二维承压水非稳定流模型,将此研究区划分为 21 个子研究区,选取其中的 16 个子研究区建立人工神经网络学习的样本数据,剩余的 5 个子研究区为测试数据集. 由于加速因子 ω 的取值与其系数矩阵有关,而此矩阵是关于渗透系数、储水系数、时间步长及源汇项的一个综合矩阵. 为了对加速因子的确定更加具有一般性、普遍适用性,故选取子研究区内渗透系数参数分区数、时间步长数、储水系数、模型的平均渗透系数、补给项的分区数作为此次训练模型的主控因素,而将 ω 作为目标值,进行训练、学习.

3 模型训练与预测

本文所选用的数据主要来源于野外实测和加速因子 ω 的试算结果,其主要步骤如下:

1) 野外资料收集、整理及地质概念模型的建立.

2) 利用国际通用数值模拟软件 GMS 对子研究区建立一般水文地质模型,选取该研究区的参数分区、补给分区、平均渗透系数等作为主控因素.

3) 将 ω 的取值区间 [1, 2]^[13] 进行 M 等分, ω 的取值为 $1 + 1/M, 1 + 2/M, \dots, 1 + (M - 1)/M$, 此次模拟中 $M = 10$. 将上述值依次代入模型,选取迭代次数最少 ω 值作为整个模型的最优解.

4) 逐个对子研究区建立水文地质模型,重复步骤 2) ~ 3), 从而得到此次模型的全部训练数据.

5) 选取其中的 16 组数据作为训练集,其余 5 组作为测试集,至此前期的数据准备工作全部完成,模型开始训练学习.

神经网络模型对于给定影射关系的模拟,只有通过学习训练以后才能完成. 网络进行训练时,首先要提供一组训练样本,其中的每个样本由输入与理想输出对组成. 如果提供的样本足够多,而且有很强的代表性,网络会通过自组织自适应的能力,找出主控因素与评价指标之间的非线性关系. 根据各输入输出因素量化的结果提取每个因素对应的数值,组成一个由输入-输出模式对构成的样本序列,把样本序列划分为训练集和测试集,训练集用于网络训练,使网络能按照学习算法调节结构参数,直到满足要求;测试集则是用于评价已训练好的网络的性能是否达到我们的目的,如不满足要求则重新训练、学习,直到得到满意的预测模型为止^[14].

在本次训练过程中,隐含层及输出层的学习率均为 0.6,当经过 695 次训练后,其误差均方根 $E_k = 9.99865E - 05$,达到精度要求,训练结束. 其中表 1 为模型的训练集. 表 2 为神经网络预测值与实测值对比表,表 3 为神经网络的权重及隐含层节点和输出节点的阈值. 在表 3 中, w_{ij} 为输入层到隐含层的权值; v_i 为隐含层到输出层的权值; T_{hj} 为隐含层的阈值; T_{hk} 为输出节点的阈值; i 为输入层神经元序号; j 为隐含层神经元序号; k 为输出节点序号. 在模型训练完毕后,从测试集中选取前 10 组数据,分别赋予 ω 最优值与随机值,观测其分别达到收敛时的迭代次数(见表 4).

计算结果表明,采用渗透系数、时间步长数目、储水系数、渗透系数分区数目等主控因素的 BP 神经网络模型的预测值与理想值基本一致,取得了令人满意的预测效果. 故选取此模型为最佳模型,该模型可以应用于数值模拟计算中来预测加速因子 ω ; 上述数值模型中,在水文地质条件不变的情况下,通过改变加速因子的值可以对迭代次数产生一定的影响. 由于本试验场条件所限,加速因子对最终解的精度影响难以具体量化,关于此方面的研究可见参考文献 [15-17].

表 1 模型的训练集

渗透系数分区	补给分区	平均渗透系数/(m/d)	储水系数	时间步长数	目标值 ω
4	4	22	0.175	35	1.1
6	4	21.8	0.178	39	1.6
6	5	21.8	0.278	49	1.4
5	6	22.1	0.15	30	1.2
10	7	18.4	0.214	55	1.7
3	3	25.6	0.31	70	1.2
7	7	15.8	0.182	50	1.3
12	4	28.8	0.291	60	1.3
4	4	30.2	0.213	59	1.5
4	10	10.8	0.33	47	1.8
8	7	23.6	0.212	80	1.6
3	5	27.1	0.185	100	1.9
5	9	20.5	0.164	72	1.5
10	8	22.4	0.171	72	1.2
1	6	20	0.291	67	1.2
4	7	31.8	0.31	82	1.7

表 2 神经网络预测值与实测值对比

渗透系数分区	补给分区	平均渗透系数/(m/d)	储水系数	时间步长数	目标值	计算值	误差
5	7	19.8	0.251	77	1.5	1.487	-0.013
8	2	23.6	0.174	68	1.6	1.5918	-0.0518
3	7	26.5	0.281	92	1.1	1.1228	0.0228
8	3	22.6	0.351	78	1.3	1.3201	0.0201
7	6	10.8	0.363	62	1.5	1.5109	0.0109

表 3 神经网络权值与阈值

参数	$J=1$	$J=2$	$J=3$	$J=4$	$J=5$	$J=6$	$J=7$	$J=8$	$J=9$	$J=10$	$J=11$
W_{1J}	0.134	1.725	1.447	-2.57	-3.59	-1.44	-9.93	-7.74	1.96	-6.030	-4.65
W_{2J}	0.8286	-1.599	2.3300	-5.290	-0.621	-0.006	-1.366	4.089	0.867	-0.4776	3.5544
W_{3J}	-0.53	7.278	-0.05	-0.11	-0.26	-0.54	12.20	0.572	-1.8	10.460	-5.617
W_{4J}	13.56	2.955	7.883	5.378	11.81	-14.5	18.14	-10.3	13.2	12.556	-2.129
W_{5J}	0.655	-11.1	-1.98	-3.49	-0.17	0.271	-1.07	3.37	1.14	-1.060	3.286
V_i	-1.07	0.730	0.365	0.548	0.387	-0.25	-0.51	0.54	0.28	-0.409	0.967
Th_i	-0.06	-5.68	5.78	-0.21	-9.52	-6.17	-1.17	2.082	-5.31	6.861	4.246
Th_k						-0.2930					

表 4 加速因子确定值与随即值迭代次数对比

	I		II		III		IV		V	
	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值
ω	1.1	1.7	1.6	1.3	1.4	1.9	1.2	1.8	1.7	1.1
迭代次数	138	174	171	212	124	188	112	151	113	159
	VI		VII		VIII		IX		X	
	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值	确定值	随机值
ω	1.2	1.5	1.3	1.7	1.3	1.1	1.5	1.9	1.8	1.2
迭代次数	168	185	132	176	151	166	193	241	118	144

4 结 论

在 数 模 拟 程 中, 参 数: 系 数、储 系 数、源 汇 项 终 的 系 数 非 线 性 系, 难 一 的 解 加 的 方 . 在 绍 BP 算 的 基 础 上, 其 容 错、自 学 的 特 性, 加 ω , 减 次 数, 加 快 方 程 的 收 , 且 在 某 情 况 散 的 收 , 减 模 的 间. 于 在 次 模 拟 中, 个 的 研 究 范 围 较 小, () 井 数 、 参 数 分 数、模 拟 间 较 小, 加 随 机 的 次 数 较 小. 研 究 范 围 较 、 , 尤 其 在 涉 学 场 , 性 的 加 方 程 的 次 数 解 的 的 非 显 的.

在 模 拟 研 究 领 存 在 轻 视 的 研 究、 视 软 的 视 性、 性 的 [18], 次 研 究 , 基 础 模 拟 稳 性、 收 性 . 在 BP 经 网 络 、 学 程 中 的 素 性, 在 的 数 模 拟 中 涉 , 算 良 的 性、 性、 适 于 实 际 的 资 源 评 .

参 考 文 献

[1] 薛 , . 数 模 拟 [M]. 北 京 : 科 学 版 社, 2007.

[2] G H, 范 C F. 算 [M]. 亚 译. 北 京 : 科 学 版 社, 2001.

[3] Zeng M L. Weighting-relaxation Relative Method [J]. Journal of Putian University, 2008, 15(2) : 30-33 (in Chinese).
曾 丽. 加 - 松 [J]. 学 院 学 报, 2008, 15(2) : 30-33.

[4] Maleknejad K, Safdari H. Parallel algorithm for solving linear systems arising from PDE and integral equation [J]. Applied Mathematics and Computation, 2004, 15(2) : 443- 453.

[5] Wang S R. Successive over relaxation iteration method to find the solution of sparsity linear equation system [J]. Journal of Shenyang Normal University: Natural Science, 2006, 24(4) : 408- 410 (in Chinese).
王 然. 疏 线 性 方 程 解 的 逐 次 松 [J]. 范 学 学 报 : 自 然 科 学 版, 2006, 24(4) : 408- 410.

[6] 马 东 升. 数 算 方 [M]. 北 京 : 机 械 业 版 社, 2002.

[7] Hu F, Yu F X. The selection method of the Relaxation factor ω in successive over-relaxation Iteration algorithm [J]. Journal of Qinghai Normal University: Natural Science, 2006(1) : 43- 46 (in Chinese).
, 于 福 . 松 中 松 的 方 [J]. 范 学 学 报 : 自 然 科 学 版, 2006(1) : 43- 46.

[8] 李 . 经 网 络 系 [M]. 西 安 : 西 安 科 技 学 版 社, 1990.

[9] Anurag More, Deo M C. Forecasting wind with neural network [J]. Marine Structure, 2003(16) : 35- 49.

[10] . 经 网 络 [M]. 北 京 : 国 防 业 版 社, 2005.

[11] Chi Z F, Yan Z Z, Huang B. Water quality evaluation model based on genetic algorithm and BP algorithm [J]. Journal of Chongqing University of Science and Technology: Natural Sciences Edition, 2009, 11(1) : 122-124 (in Chinese).
, , . 基 于 遗 传 算 BP 算 的 评 模 [J]. 庆 科 技 学 院 学 报 : 自 然 科 学 版, 2009, 11(1) : 122-124.

[12] Neuman S P, Witherspoon P A. Applicability of current theories of flow in leaky aquifers [J]. Water Resource. Research, 1969, 5: 817- 829.

[13] 讷 . 流 的 数 学 模 数 方 [M]. 北 京 : 版 社, 1981.

[14] Wu Q, Chen P P, Dong D L, et al. Hazard assessment system for ground fissure based on coupling of ANN and GIS: a case study of ground fissures in Yuci City, Shanxi Province [J]. Seismology and Geology, 2002, 24(2) : 249-257 (in Chinese).
武 , 陈 珮 珮, 东 林, . 基 于 GIS ANN 耦 技 术 的 裂 缝 灾 情 非 线 性 模 拟 预 系 : 西 榆 次 裂 缝 灾 害 为 [J]. 震 , 2002, 24(2) : 249-257.

[15] Wang H X, Wu M F. An accelerated overrelaxation iterative linear system with strictly diagonally dominant matrix [J]. Journal of WuYi University: Natural Science Edition, 2004, 18(2) : 23-26 (in Chinese).
汪 宏 喜, 吴 芬. 占 的 线 性 系 的 加 松 [J]. 邑 学 学 报 : 自 然 科 学 版, 2004, 18(2) : 23-26.

[16] Lin Y K, Cai G Q. Probabilistic structural dynamics: advanced theory and applications [M]. 1995.

[17] Woj Tkicwice S F, Bergmanla. High fidelity numerical solutions of the Fokker-Planck equation [C] // Shiraishi, Shinozuki and Wen. Structural Safety and Reliability, 1998: 933-940.

[18] Xue Y Q. Present situation and prospect of groundwater numerical simulation in China [J]. Geological Journal of China Universities, 2010,

16(1):1-6(in Chinese).

薛禹群. 中国地下水数值模拟的现状与展望[J]. 高校地质学报, 2010, 16(1):1-6.

Determination of the acceleration factor in groundwater simulation process through BP algorithm

MA Rong¹, LIU Ji-Chao¹, SHI Jian-Sheng¹, WANG Hu²

(1 *Institute of Hydrogeology and Environmental Geology, CAGS, Shijiazhuang 050803, China;*

2 *China University of Petroleum(Beijing), Beijing 102249, China*)

Abstract In applying the successive over-relaxation iteration method to solve large-scale linear equations, one often has difficulties in determining the acceleration factor. Through training and learning using BP neural network and comparative analyses, we obtained a good model, which could be used for fast determination of the acceleration factor. We used it in the Luancheng hydrology experimental base in Shijiazhuang, and the results show that BP artificial neural network has been successfully used in solving the difficult problem, determination of the acceleration factor in the groundwater numerical simulation process.

Key words groundwater numerical simulation, acceleration factor, successive over-relaxation iteration method, neural network