

UCODE 在反求水文地质参数中的应用及其并行求解

任国澄¹ 朱国荣¹ 江思珉²

(1. 南京大学水科学系 南京市 210093 2. 同济大学水利工程系 上海市 200092)

提 要 UCODE 是美国地质调查局 (USGS) 为地下水模型逆问题求解开发出一套通用求解程序, 可以与各种过程模型 (有限元 fenwater 或有限差 modflow 等等) 耦合使用。它采用修正的 Gauss-Newton 法对逆问题进行求解, 并在求解过程中引入摄动敏感度, 同时 master-slave 协议的加入为程序提供了卓越的并行计算能力。该文简单介绍 UCODE 程序的功能及使用, 并结合具体算例讨论 UCODE 在反求水文地质参数中的应用。

关键词 UCODE 逆问题 修正的 Gauss-Newton 方法 摄动敏感度 并行求解

Application of UCODE to Calculation for Hydrogeological Parameters and Its Parallel Solving Process

Ren Guocheng¹ Zhu Guorong¹ Jiang Simin²

(1. Department of Hydrosociences, Nanjing University 2. Department of Hydraulic Engineering, Tongji University)

Abstract UCODE is a set of common solving program developed by the United States Geological Survey for solving inverse problems in groundwater model, it can couple with kinds of process models (fenwater of FEM or modflow of finite difference etc.). The inverse problem is solving with the modified Gauss-Newton method, and the perturbation sensitivity is introduced in the solving process, while the master-slave protocol provides an excellent parallel computing capacity. This article briefly describes the capabilities of UCODE program, and discusses the application of UCODE to calculation for hydrogeological parameters combined with specific examples.

Key words UCODE; inverse problem; modified Gauss-Newton method; perturbation sensitivity; parallel solving process

1 前言

近年来, 数值模拟技术在地下水问题中的应用越来越广泛, 已经成为评价地下水资源的一种最主要的手段。而模型验证是地下水数值模拟的关键步骤 (即逆问题的求解)。通过对不断调整水文地质参数值, 使水头计算值与实际观测值的误差满足事先的给定值。在实际应用中, 人们往往采用人工识别和自动识别相结合的方法来确定参数。其中, 人工识别的方法就是通常所说的试估—校正法, 其作用是参数粗调, 旨在为计算机自动调整参数寻求参数约束区间; 而自动识别过程则根据事先设计的程序进行, 其作用为参数细调。通过这两个步骤, 就可大致完成水文地质参数的反求过程。

研究表明, 完成参数粗调后的自动识别过程中,

选择快速简便且高效的自动识别方法显得尤为重要。近年来, 这类优化方法发展很快, 具体可分为传统算法 (如 Gauss-Newton 法、单纯形法、共轭梯度法、Powell 法等) 和智能算法 (遗传算法 GA、禁忌搜索算法 Tabu、模拟退火算法、微粒群算法^[1]等) 两类。

本文介绍的 UCODE^[2] 程序是采用修正的 Gauss-Newton 法, 利用最小化目标函数来解决非线性回归问题。它在传统 Gauss-Newton 法的基础上对算法进行改进, 避免 Jacobi 矩阵奇异时的舍入误差, 同时在程序中加入 master-slave 协议, 大大提高了算法的计算速度和效率。

2 UCODE 简介

通用求解程序 (universal inverse code), 简称 UCODE, 它是基于 modflow 或 fenwater 等过程模型开发出一套地下水模型逆问题求解程序。该程序的最新版本是由美国地质调查局 (USGS) 与美国环境保

作者简介: 任国澄 (1985 -), 男, 硕士研究生, 水文地质专业。

收稿日期: 2009 - 09 - 21

护署、科罗拉多州矿业大学国际地下水模型中心合作开发推出的。本文使用的 UCODE_2005 是 2008 年 2 月推出的版本,增加了 RESIDUAL_ANALYSIS、RESIDUAL_ANALYSIS_ADV、LINEAR_UNCERTAINTY、MODEL_LINEARITY、MODEL_LINEARITY_ADV、CORFACPLUS 等六段代码。

由于 UCODE_2005 是基于 JUPITER API 规范编写的,只要程序的输入输出文件类型符合 ASCII 或文本类型就可以很方便的对 UCODE 进行调用,因而,UCODE 能够快速地与物理、化学、地球化学等数值模型进行耦合,扩展了应用范围。

3 UCODE 程序

UCODE 反求参数基本流程见图 1,通过程序计算出的各参数摄动敏感度值,结合修正的 Gauss-Newton 方法,确定需拟合模型参数的演进方向,再根据收敛条件的设定,不断迭代直至求得最优参数。

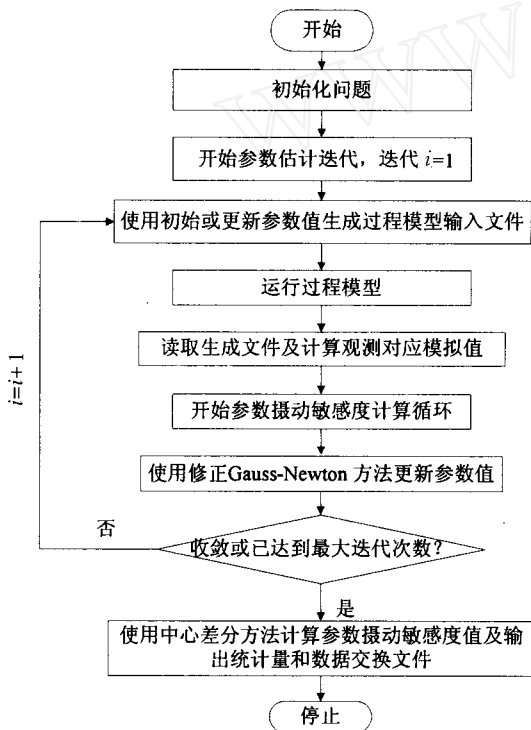


图 1 UCODE 反求参数流程

3.1 修正的 Gauss-Newton 法

运用最优化方法反求水文地质参数问题的基本思想^[3](薛禹群等,2007):根据最小二乘法的原理,用误差平方和作为衡量计算所得的水头值和水头实际观测值之间拟合程度的标准,建立目标函数(1)来约束拟合误差,使 $E(k)$ 达到最小,最终获得反映该区水

文地质特征的水文地质参数,用来构造地下水数值模型。

$$E(k) = \sum_{l=1}^L w_l (H_l - H_l^{ob})^2 = \sum_{l=1}^L f_l^2(k) \quad (1)$$

式中: w_l 为权因子;求和下标 l 遍及所有的观测点和观测时刻,故 $L = N$, l 是观测时刻总数; J 是观测点总数。 k 同时要满足约束条件 $k_i \leq k_i \leq k_i$, $i = 1, 2, \dots, n$ 。

本文 UCODE 使用最优化方法为修正的 Gauss-Newton 法,其确定参数搜索(即目标函数最优化)方向的步骤如下:

1) 给出参数的初始估计值 $k^{(0)}$, 计算在该点的 f_l 和所有水头 H_l 和 f_l 的一阶偏导数 $\frac{\partial H_l}{\partial k_i}$ 、 $\frac{\partial f_l}{\partial k_i}$ 、 $(i = 1, 2, \dots, n; l = 1, \dots, L)$, 同时计算目标函数 E 在 $k^{(0)}$ 点的导数 $\frac{\partial E}{\partial k_i}$ 的值和梯度 g ;

2) 计算所得的偏导数形成矩阵 A , 同时形成 $A^T A$ 和 $A^T f$, 接着求解式 $A^T A k = -A^T f$, 求出 k ;

3) 计算 $g^T k$, 并根据式

$$p_r = \begin{cases} k & \text{当 } g^T k < 0 \\ -g & \text{当 } g^T k \geq 0 \end{cases}$$

确定求解方向 p_0 , 得出满足约束条件的探索方向 \bar{p}_0 ;

4) 用二次插值法求出沿 \bar{p}_0 方向的最优步长 $\alpha^{(0)}$, 接着根据式 $k^{(k+1)} = k^{(k)} + \alpha \bar{p}$ 形成参数更新值, 即改进点 $k^{(1)}$ 。

3.2 摄动敏感度

在模型反演过程中,敏感度 $\partial y / \partial b$ 通常用来衡量一个因素 b 变化对别的因素 y 的影响程度,主要有以下两个功能。首先,在衡量观测值对反求得参数及参数对预测结果的重要性时,它是一个很好的指征量;其次,由于 UCODE 采用的是修正的 Gauss-Newton 方法,这就需要通过计算敏感度来决定参数值的变化方向以便能产生更好的模型拟合。

摄动敏感度是 UCODE 采用的敏感度计算方法。其主要优点是:在保证模型精度的同时可以很方便地进行并行计算。实际计算时,敏感度 $\partial y / \partial b$ 不是直接求解,而是采用有限差分摄动法来近似求解。具体有向前、向后或中心差分方法等三种方法可供选择。这里以向前差分方法进行说明,即:

$$\frac{\partial y}{\partial b} = \frac{y(b) - y(b_0)}{b - b_0} = \frac{y(b + \Delta b) - y(b)}{\Delta b}$$

式中: b 表示被估计参数向量(可以看做是一系列参数); $y(b)$ 表示使用 b 计算出的模拟值; b_0 表示一个

摄动向量(求具体某一参数敏感度时,其它参数的摄动值都为 0); $y(b+b)$ 为使用改变后的参数计算的模拟值; y 为参数改变所引起的模拟值改变量; b 为参数向量中某一参数的摄动值。

通过公式可知,对每个参数求解摄动敏感度时,无论是向前差分还是向后差分方法,由于 $y(b)$ 在摄动开始前已求得,过程模型只需要使用摄动后的参数运行一次求得 $y(b+b)$ 即可。但如果使用中心差分方法 $\frac{\partial y}{\partial b} = \frac{y(b+b) - y(b-b)}{(b+b) - (b-b)}$,过程模型则需要两次运算,优点是精度更好,但更耗费机时。研究表明(据 Yager, 2004)^[4],在拟合过程中,使用向前差分方法精度已满足需求,中心差分方法只有在模型拟合结束后计算最终敏感度等统计量时才会用到。

3.3 并行求解

在反求参数或计算参数敏感性时,由于参数繁多或计算机性能有限而耗时巨大,从而影响效率。而 UCODE 通过 master-slave 协议在多个处理器上实现了并行计算,大大缩减了程序耗时。

UCODE 在计算摄动敏感度时,将一次迭代过程中的多个参数敏感度计算分配给各处理器,节约了运行时间。本文主要介绍这一方法在局域网环境下的实现。UCODE 提供了分别在主从计算机下运行的程序,即主进程(UCODE 本身)和子进程(JRUNNER)。主进程与子进程之间保持通讯,主要负责初始参数分配,把需要反求的参数分配后发送给各子进程;读取子进程输出文件中的参数敏感度值;然后通过修正的 Gauss-Newton 法更新参数值,判断是否达到收敛标准,如没有则进行下一次迭代,直至收敛。

主进程与子进程是通过生成、写入、读取及删除信号文件(见表 1)进行联系。在局域网中,主进程和子进程都有自己独立的文件目录。每个目录中均包含过程模型及其运行所需的文件,且保证主进程必须能够访问任一子进程所在的文件目录,进行读写操作。

表 1 并行计算过程中的信号文件

信号文件	创建进程	目的
jrunner.rdy	JRUNNER	通知主进程子进程已就绪
jdispatcher.rdy	UCODE	传递给子进程运行所需的数据
jdispar.rdy	UCODE	与子进程通信,传递参数值及运行过程模型的命令
jrundep.rdy	JRUNNER	将子进程模型计算值传递给主进程
jdispatcher.fin	UCODE	中止子进程
jrunner.fin	JRUNNER	通知主进程:子进程已停止
jrunfail.fin	JRUNNER	通知主进程:子进程遇到错误已停止

3.4 输入输出文件

UCODE 需要准备的文件除了计算地下水流模型所需的过程模型 fenwater 文件以外,还需要主输入文件、临时文件、指令文件。

1) 主输入文件。由数据输入块组成,说明 UCODE 的运行模式、参数信息、计算精度及并行计算控制,其数据文件名是 *.in。

2) 临时文件。用来建立过程模型运行时所需输入文件。一般程序运行时需要一个或多个临时文件,其数据文件名是 *.tpl。

3) 指令文件。说明拟合模型的数据观测点文件,读取各点不同时刻数据值,其数据后缀名是 *.instructions。

上述三类文件都是必需的,根据实际情况可以灵活选择可选导数接口文件,使用其它参数生成的敏感度值进行计算。

UCODE 输出文件为 *.#uout,可以从中读取参数优化结果。此外程序生成后缀名以下划线开始的文件,如 *.os 文件包含观测值及过程模型运行所生成的模拟值,可以方便地调用其它程序对数据进行图形化处理。

4 算例研究

4.1 地下水数值模型

本文利用 UCODE 对山东省鹏山水源地的水文地质逆问题进行求解^[5],并将结果与 GA 计算结果进行比较。根据研究区的水文地质条件,可将其概化为二维非均质各向异性潜水平系统,其数学模型为:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \left[K_x (H - b) \frac{\partial H}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K_y (H - b) \frac{\partial H}{\partial y} \right] + W = \mu \frac{\partial H}{\partial t} \\ H(x, y, 0) = H_0(x, y) \\ H(x, y, t) \big|_1 = (x, y, t) \\ \frac{\partial H}{\partial n} \big|_{21} = 0 \\ K_x (H - b) \frac{\partial H}{\partial x} \cos(n, x) + K_y (H - b) \frac{\partial H}{\partial y} \cos(n, y) \big|_{22} = q(x, y, t) \\ W = W_q + W_p + W_r \end{array} \right. \quad (2)$$

其中: K_x, K_y 为渗透系数在 x, y 方向上的分量, m/d; H 为水头, m; b 为含水层的底板标高, m; $H - b$ 为含

水层的厚度, m ; W 为源汇项, $m^3/d \cdot m^2$, 包括开采量 W_q , 降雨入渗量 W_p 及河流渗透补给量 W_r ; μ 为潜水含水层的给水度; H_0 为初始水头, m ; t 为时间, d ; Γ_1 为第一类边界; Γ_{21} 为隔水边界; Γ_{22} 为第二类补给边界; H_1 为含水层一类边界水头标高, m ; q 为第二类补给边界的单宽流量, m^2/d 。

采用有限单元法求解上述定解问题, 模拟区域面积 $168km^2$, 模拟时间为 $10d$, 区内有 5 口抽水井, 8 个地下水水位动态观测孔。由于研究区的含水层具有明显的非均质各向异性, 根据研究区含水层的分布规律和勘探结果, 可以将研究区划分为三个参数分区(图 2)。全区划分 832 个单元, 452 个节点。

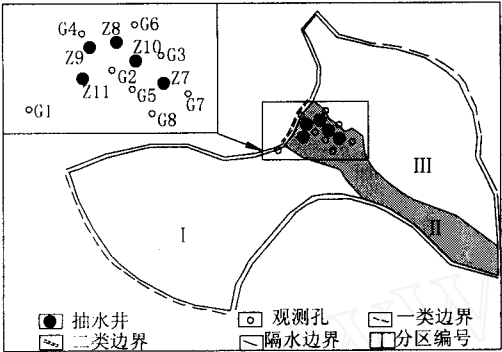


图 2 研究区地下水模拟分区

4.2 参数约束区间

根据抽水试验结果、构造特征、含水层性质、流场形态及水位变化特点等资料, 设定各参数的上下限, 作为对应参数的约束区间, 具体数值为:

表 3 GA 与 UCODE 反求参数计算结果对照

优化方法	参数分区 1			参数分区 2			参数分区 3			目标函数值	计算时间 /(hmins)
	K_{x1}	K_{y1}	μ_1	K_{x2}	K_{y2}	μ_2	K_{x3}	K_{y3}	μ_3		
GA	2.76	1.47	0.028	10.25	9.27	0.021	2.92	1.89	0.085	5.1743	5 20 47
modified GN (UCODE 单机)	2.82	1.54	0.026	9.28	9.51	0.021	2.86	2.08	0.087	0.9729	2 37 36
modified GN (UCODE 并行)	2.82	1.54	0.026	9.28	9.51	0.021	2.86	2.08	0.087	0.9729	1 8 31

由表 3 可知:

- 1) 在计算精度方面, UCODE 采用的修正的 Gauss-Newton 算法的结果优于 GA 算法, 其原因是因为 GA 算法很容易寻到全局最优附近, 但要进一步达到最优点却很难, 而修正的 Gauss-Newton 算法在选择适当参数初值的基础上可以获得最优, 得到满意的收敛精度。另外, 由于并行计算只是在计算敏感度时将各参数分配到不同子计算机, 参数寻优过程仍由主计算机完成, 故单机和并行结果相同。
- 2) 从计算时间角度看, 由于 UCODE 具有并行

$$\begin{cases} K_{xi}^{min} & K_{xi} & K_{xi}^{max} \\ K_{yi}^{min} & K_{yi} & K_{yi}^{max} \\ \mu_i^{min} & \mu_i & \mu_i^{max} \end{cases} \quad i = 1, 2, 3 \quad (3)$$

其中, K_{xi}, K_{yi}, μ_i 为第 i 区的水文地质参数 K_x, K_y 和 μ 值; $K_{xi}^{max}, K_{xi}^{min}, K_{yi}^{max}, K_{yi}^{min}, \mu_i^{max}, \mu_i^{min}$ 为对应参数的上下限值。

4.3 实验计算环境

根据实验室现有的计算机资源, 本地局域网由一台 NETGEARWG1624 108M 无线宽带路由器、一台 D-LINK DES-1026T 1000M 交换机和四台 PC 机以星型结构方式组成交换式局域网, 路由器为局域网网关, 地址为 192.168.1.1, 四台计算机上运行的操作系统均为 Windows xp sp3。详细配置见表 2。

表 2 局域网硬件配置

机器编号	CPU/主频	内存	硬盘	IP 地址
Master	PD820 2.8G	DDR2 - 533 2G	1T	192.168.1.100
Slave01	P4 2.6G	DDR - 266 512M	80G	192.168.1.101
Slave02	P4 2.4G	DDR - 266 1.5G	80G	192.168.1.102
Slave03	T5500 1.6G	DDR2 - 667 1.66G	120G	192.168.1.103

本次试验中的单机运算 (GA 或 UCODE 单机) 均在性能最好的 Master 机器上运行, 并行计算 (UCODE 并行) 则为四台计算机协同进行, 其中 Master 作为主计算机, Slave01、Slave02、Slave03 为从计算机。

4.4 讨论

按照以上的步骤和操作对 4.1 中描述的水文地质逆问题进行了求解, 并将计算结果与遗传算法 GA 进行比较, 对比结果见表 3。

计算能力, 在局域网环境下可以大大减少计算时间, 优于 GA 算法。表 3 中第三列结果就是通过局域网中 4 台计算机 (1master, 3slave) 并行运行获得, 相对于单机运算其加速比达到了 2.3, 但小于理论最大值 3。分析其原因可能为: 运行计算机性能参差不齐, 性能较差的节点延滞了整个运行过程; 采用 master-slave 协议运行的主从计算机, 需要对磁盘文件进行读写、通信传输, 这方面的耗时也影响了并行效率。

(下转第 31 页)

如果地基土上部较硬,铺设褥垫层可以充分发挥土的承载能力;反之,如果地基土上部较软,铺设褥垫层将大大增加上部土层的变形,对基础不利。

由图 8 可见,褥垫层能够较好的调整桩土应力比。桩土应力比随褥垫层厚度的增加而减小,褥垫层厚度越大越能发挥土体的承载作用,但并不是成线性关系,变化曲线呈凹形。在垫层厚度较大的情况下,桩土应力比的曲线比较平缓,说明桩的作用随着褥垫层的增厚而减弱;褥垫层厚度较小时,桩顶的刺入量比较大,桩顶应力集中,垫层很快被压实,桩体不能有效的分担荷载,这就使得桩土应力比很大。在保持荷载不变的情况下,随着褥垫层厚度的增加,允许桩顶有较大的刺入变形,桩顶应力明显减小,桩土应力比也较小。当褥垫层厚度超过 0.3m 时,桩土应力比随褥垫层厚度增加而减小的趋势不再明显,并且逐渐趋向一个定值,表明荷载在此厚度的褥垫层内已得到充分调整,继续增加垫层厚度不能再有效降低桩土应力比。而且褥垫层厚度过大,土体分担过多的荷载,则桩失去了意义。而且过厚的褥垫层造成不必要的浪费。

4 结论

从以上的分析可以看出,褥垫层对桩土应力的分配有较强的调节能力,因此实际工程中应该合理设置褥垫层的厚度。当褥垫层厚度较小时,桩承担的荷载较大,刺入量较小,不能充分发挥桩间土的承载能力。褥垫层达到一定厚度时,桩土应力比随褥垫层厚度的变化趋势已经不明显,褥垫层的存在使桩顶应力大幅度减小,桩顶的应力集中现象明显减弱。在保持荷载不变的情况下,随着褥垫层厚度的增加,允许桩顶有较大的上刺入变形,桩顶应力明显减小,因此桩土应力比也较小。但是褥垫层厚度超过 0.3m 后,桩土应力比随褥垫层厚度增加而减小的趋势不再明显,工程中合理的褥垫层厚度为 0.1~0.3m。褥垫层厚度过大,土体分担过多的荷载,则桩失去了意义。而且过厚的褥垫层会造成不必要的浪费,增加造价。

参考文献

- 1 GB50007 - 2002 建筑地基基础设计规范
- 2 JG94 - 94 建筑桩基技术规范

(上接第 10 页)

5 小结

UCODE 为地下水逆问题求解提供了有效的解决方法,它利用非线性回归方法来拟合模型,对于模拟值为参数连续函数的水文地质问题几乎完全适用。在数值模拟计算中,无论有限元或有限差模型,均能取得满意的结果。由于 UCODE 提供了并行运算需要的子程序 runner,只要利用现有的局域网环境即可方便快捷地实现分布式并行计算,大幅度提高问题求解效率。另外需要指出的是 UCODE 还可以结合 RESIDUAL_ANALYSIS、MODEL_LINEARITY、LINEAR_UNCERTAINTY 等六段代码,提供统计学方面的信息来定量地诊断分析不合适的数据和参数,评估模型拟合精度、模型线性与非线性、参数敏感度

及模型不确定性情况,从而更能全面地反映所建立地下水模型的有效性。

参考文献

- 1 闵望,朱国荣,江思珉.微粒群算法在反求水文地质参数中的运用.勘察科学技术,2007,(5):50~54
- 2 Roeter E P, Hill M C, Banta E R, etc. 2005, UCODE-2005 and Six Other Computer Codes for Universal Sensitivity Analysis, Calibration, and Uncertainty Evaluation: U. S. Geological Survey Techniques and Methods 6 - A11, 283p
- 3 薛禹群,谢春红.水文地质学的数值法.北京:科学出版社,2007
- 4 Yager R M, 2004, Effects of model sensitivity and nonlinearity on nonlinear regression of ground water flow: Ground Water 42(3): 390~400
- 5 江思珉,朱国荣,等.单纯形-模拟退火混合算法反求水文地质参数及其并行求解.地质评论,2007,53(1):92~97