用 Hooke—Jeeves 方法进行水文地质参数寻优的研究

王敏，朱国荣，孔祥龙，江思珉，季月华
南京大学地球科学系，210093

内容提要：模型验证阶段的水文地质参数调整一直是地下水数值模拟过程中的关键步骤。传统的参数调试方法如试估—校正法既需要大量的时间，又必须凭借经验进行人工干预。这对于本就缺少经验的人来说是无法逾越的难题。因此前人研究了包括单纯形等多种自动优化方法来反求水文地质参数。本文采用的 Hooke—Jeeves 法是一种算法简单，便于使用的优化方法，它避免了单纯形法必须先形成一系列单纯形顶点及通过形心寻优的麻烦，而是根据误差下降趋势直接寻优获得结果。方法首先将反求水文地质参数问题简化为一无约束优化问题，最终运用 Hooke—Jeeves 方法对问题进行求解，是一种简单且实用的方法。

关键词：Hooke—Jeeves；水文地质参数；地下水数值模拟；无约束优化

地下水数值模拟技术在地下水研究领域中占有非常重要的地位。特别是地下水系统概念的提出，使人们有可能对更复杂、更大型的模型展开研究，模型耦合技术、并行模拟技术(王浩然等，2003)的出现为研究这些问题提供了可能，当然，模型的识别难度和也随之增加。地下水数值模拟的一个重要步骤就是进行模型验证，这一步骤的基本工作就是通过对水文地质参数的不断调整，使观测孔结点的水头计算值与实际观测值的误差满足事先的给定。为达此目的，人们一般采用人工结合计算机自动调整来确定参数的手段，其中，人工调整参数的方法就是人们通常所说的试估一校正法，其作用是参数粗调，也旨在为计算机自动调整参数寻求参数约束区间；而计算机实现的参数调整称为参数自动寻优，这一步骤必须根据事先设计的程序进行，一般人们也称这一过程为参数细调。通过这两个步骤，就可以完成水文地质参数优化。

显然，人工调整水文地质参数除了必须深刻了解模型条件之外，最好还必须具备一定的数值模拟经验，这对于快速寻找水文地质参数的正确解是很有帮助的。同样的，一个简便且易用而高效的自动寻优程序，更是获得正确的水文地质参数所必须的。

从数学角度来说，寻优问题的求解可分为有约束优化和无约束优化两类，象惩罚函数法、可行方向法、既约梯度法、二次逼近法以及用在求解地下水最优控制问题中的微分动态规划(王浩然等，2001)等均属有约束优化方法，而单纯形法、共轭方向法、变尺度法等则为无约束优化方法。就地下水流模拟中的水文地质参数寻优来说，本身是一种有约束优化问题，但大多都通过将其转化为无约束问题，然后再利用无约束优化方法求解，截止目前，用得最多的无约束优化方法为单纯形方法。

本文利用的优化方法在20世纪60年代由 Hooke 和 Jeeves 首先提出(唐焕文等，2001)。1995年，国内学者曾在求解稠油地层岩石热物性参数中得到了成功的运用(徐振章等，1995)。Hooke—Jeeves 优化方法也是无约束优化方法的一种。

本文讨论如何利用 Hooke—Jeeves 方法进行水文地质参数寻优，目的在于提供一种原理更加简单，更容易实现的实用算法，这也是 Hooke—Jeeves 优化方法与单纯形方法相比的优点所在。

1 运用优化方法反求水文地质参数的复杂性

运用最优化方法反求水文地质参数问题的基本思想是(薛禹群等，1980)：先给待定的水文地质参数

注：本文为国家自然科学基金项目(编号 49972021)资助的成果。
收稿日期：2004-09-28；改回日期：2005-03-16；责任编辑：章雨旭。
作者简介：王敏，女，1978年生。现为南京大学地球科学系水文学与水资源专业博士研究生。通讯地址：210093，南京大学地球科学系；E-mail：brightwangm@163.com；wangmin—nju@hotmail.com。

假设一组初值，求出各点在 t_i 时刻的水头计算值 $h_j^c(t_i)$，设 $h_j^o(t_i)$ 是 j 个观测孔在 t_i 时刻的水头观测值，ω_{ij} 为权因子。则可以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)式来约束拟合误差，使 E 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。

$$\mathrm{E}(k)=\sum_{i,j}\omega_{i,j}[h_j^c(t_i)-h_j^o(t_i)]^2 \tag{1}$$

(1) 式中的 k 同时要满足约束条件

$$\alpha_i\leqslant k_i\leqslant\beta_i, i=1,2\cdots,n$$

求解这样的优化问题，主要存在两点困难：

(1) 目标函数的计算：目标函数计算的关键是要求出观测孔的计算水头 h。而水头 h 需要通过求解描述地下水流运动的非线性偏微分方程组获得。求解这一类边值问题的有效方法就是有限差分或是有限元法。这些数值方法的计算量较大，而且需要经过一系列的方程组求解和迭代。因此无法直接将目标函数的表达式用 k 显式表达。

(2) 约束条件：有约束优化问题的一般数学表达式为：

$$\begin{aligned}&\mathrm{Min} f(x)=f(x_1,x_2,\cdots,x_n)\\ &s.t.\quad g_j(x)=g_j(x_1,x_2,\cdots,x_n)\leqslant 0(j=1,2,\cdots,m)\\ &\qquad h_k(x)=h_k(x_1,x_2,\cdots,x_n)=0(k=1,2,\cdots,l)\end{aligned}$$

迄今为止，较为成熟的约束优化方法有几十种，但就其总体发展水平而言，约束优化方法不如无约束优化法。约束优化问题由于存在其解必须满足的约束条件，而增大了求解的难度。特别是含有非线性等式约束优化问题的求解更困难，相应的优化方法就更复杂。因此约束优化方法一直都是研究的热点和难点。

2　反求水文地质参数的优化方法

2.1　约束条件的处理

分析反求问题的约束条件可以发现，约束条件属于比较简单的约束条件，可以在求解优化问题前加以预处理，适当的简化。

根据以上的思路，对于条件 $\alpha_i\leqslant k_i\leqslant\beta_i, i=1,2,\cdots,n$：可以将其转化为(席少霖，1992)

$$k_i=\beta_i+(\alpha_i-\beta_i)\sin^2 y_i$$

则上述的约束优化问题就可以视为无约束优化问题来求解。

2.2　求解方法的选择

无约束优化问题的求解方法目前发展得较为成熟。同时由于目标函数的获得需要通过一系列的迭代获得，因此不能采用求解目标函数的偏导数的手段来实现优化。为此，我们必须使用求多变量极值的直接搜索法来实现参数优化求解。作为直接搜索法的一种，这里采用 Hooke—Jeeves 优化方法来讨论。

2.3　Hooke—Jeeves 优化方法的基本原理及算法实现

Hooke—Jeeves 方法的原理可以从求一个二元函数的极小值谈起，这可想象为寻找某个曲面的最低点。比方说，人们若要从组成盆地的周围山峰开始寻找该盆地的最低点，一般会首先确定一条通往盆地中心的山谷，进入这条山谷后就可加快搜索速度，Hooke—Jeeves 方法就是根据这一搜索原理设计的。该方法由两类“移动”构成，一类称为探测搜索，目的是寻找下降的有利方向(好比寻找山谷)；另一类称为模式搜索，目的是沿着有利方向进行加速搜索(沿山谷加速搜索)。该方法是模式搜索法的一种，也形象地称之为步长加速法。

对于水文地质参数的寻优问题，笔者等以一个各向同性的承压水问题为例。假设研究区域包含有 n 个非均质分区，每个分区的待求水文地质参数为渗透系数 K 和贮水系数 S。我们可把各分区的水文地质参数寻优问题归纳为一个$2n$ 元函数求极值的优化问题。该问题的目标函数表达式为：

$$\begin{aligned}&E(K_1,\cdots,K_n,S_1,\cdots,S_n)\\ &=\sum_j\sum_k[h_j^c(t_k)-h_j^o(t_k)]^2\end{aligned}$$

根据以上的讨论，求解函数 E 的最优值的步骤如下：

(1) 为地下水数值模型给出一组水文地质参数的初值，记为 $x^1=(K_1,\cdots,K_n,S_1,\cdots,S_n)$，$x^1$ 为初始点，给定初始步长 d，加速因子 $\alpha(\alpha>0)$，计算精度 ε (ε 一般取1×10^{-5})，令 $k=1$

(2) 确定参考点 $y=x^k$

(3) 进行轴向移动。其目的是在参考点附近获得一组新的水文地质参数使得目标函数更小。从参考点 y 出发，依次沿坐标轴方向 e 进行探测，探测可沿坐标轴的两个方向进行：

沿正轴方向探测：

若 $E(y+de)<E(y)$，令 $y=y+de$

若 $E(y+de)\geqslant E(y)$，进行负轴向探测

沿负轴方向探测：

若 $E(y-de)<E(y)$，令 $y=y-de$

若 $E(y-de)\geqslant E(y)$，令 $y=y$

通过以上的探测，势必获得新的参考点 y，令 $x^{k+1}=y$

(4) 进行模式移动，沿着找到的有利于目标函数的下降方向进行加速前进，具体过程如下：

令加速方向为 $p^k=x^{k+1}-x^k$

若 $E(x^{k+1})<E(x^k)$，令 $y=x^{k+1}+\alpha p^k, k=k+1$

否则缩短轴向移动的步长，判断是否满足迭代终止条件：$d\leqslant\varepsilon$，满足则终止迭代，不满足则转到第三步继续轴向探测。

以上四个步骤就是 Hooke—Jeeves 优化算法的核心，其中的初始步长 d，加速因子 α 和计算精度 ε 的取值要视具体的应用确定。

3 应用实例

3.1 模型假设

本文通过一个包含有8个水位观测孔的各向同性承压水问题来讨论如何利用 Hooke—Jeeves 优化方法来求解渗透系数和贮水系数。该问题存在于一个假设的理想区域中，区域的面积为1000×1000 m，笔者采用三角形剖分方法将其离散成如图1的形状。为讨论参数的优化，本文考虑以下的三种情况分别研究。

(1) 区域内的承压含水层具有均质各向同性的特征，即整个区域具有统一的 K 值和 S 值，具体形状如图2(a)所示；

(2) 考虑区域内存在两个非均质区域，形状如图2(b)所示，两个参数分区分别为 AFED 和 BCEF；

(3) 区域内存在三个非均质分区，形状如图2(c)所示，三个分区分别为 AFED，FHGE 和 HBCG。

为了给参数优化结果提供对比依据，笔者等为这三种情况各分区分别假设了 K 值和 S 值(见表1)，正演出各种情况下10个时段的结点水头分布，将其中8个观测孔的对应结点的水头值作为观测水头。

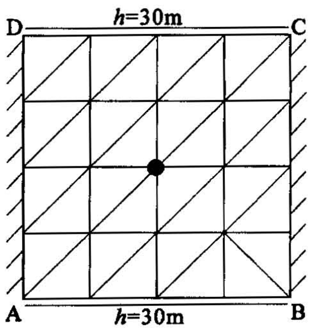

图 1 单元剖分图

Fig. 1 Element subdivision

表 1 Hooke—Jeeves 优化方法获得的水文地质参数与标准值比较

Table 1 contrast of hydrologic parameters obtained by Hooke—Jeeves Method and standard value

参数分区	参数个数	迭代次数	误差分析				
			K		S		E
			标准值	计算值	标准值	计算值	
$n=1$	2	36	100.00	100.00	0.001	9.99×10^{-4}	0.00581
$n=2$	4	78	100.00	99.37	0.001	9.40×10^{-4}	0.0610
			300.00	300.62	0.005	5.07×10^{-3}	
$n=3$	6	82	100.00	99.85	0.001	1.17×10^{-3}	0.16
			200.00	200.08	0.002	1.87×10^{-3}	
			300.00	299.76	0.003	3.25×10^{-3}	

3.2 水文地质参数优化

以下将问题转到反演上，此时我们不知道各参数分区的具体参数值，为了获得他们，我们采用 Hooke—Jeeves 参数寻优方法来求解。对模型中存在的 n 组($n=1,2,3$)水文地质参数所确定的优化问题

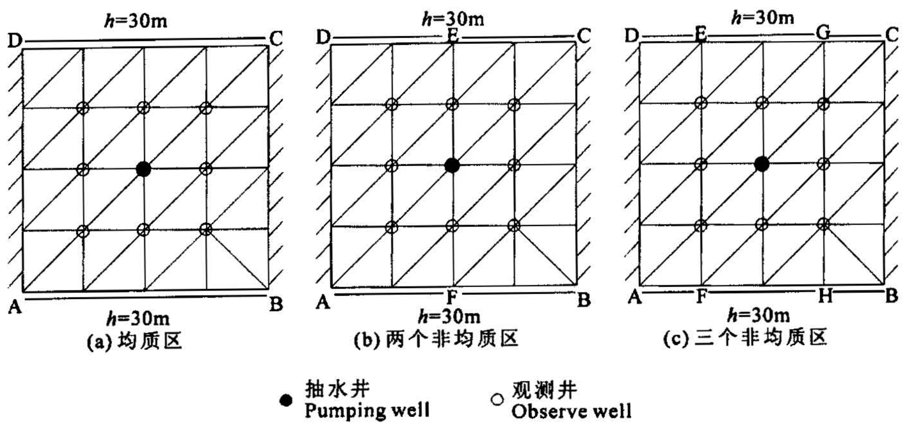

图 2 模型的三种参数分区情况

Fig. 2 Three kinds of zonation of hydrogeologic parameters

包含的目标函数如下：

$$E(K_1,\cdots,K_n,S_1,\cdots,S_n) = \sum_j \sum_k [h_j^c(t_k) - h_j^o(t_k)]^2$$

约束条件为：

$$50 \leqslant K_i \leqslant 500$$

$$0.01 \leqslant S_i \leqslant 0.0001 \qquad i=1,\cdots,n$$

运用 Hooke—Jeeves 优化方法，取 $\alpha=2, d=1$，优化所得的参数与假设值的对比列于表1中。

表1中的数据直观地反映了参数优化结果非常理想地收敛于假设值。图3分别给出优化所得的参数与事先假定的参数的比较结果，它们的 Y 轴表示优化结果，X 轴为假设参数值，从中明显地发现优化结果与假设值所确定的点均投影在45°方向的直线附近，偏离非常小。

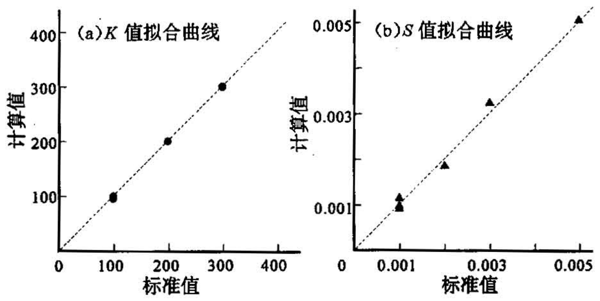

图 3　优化参数与假设参数对比

Fig. 3　Contrast optimal parameters with default parameters

4　结论

本文通过一个理想的模型讨论了无约束优化方法 Hooke—Jeeves 的基本原理、算法实现和具体应用，其通俗易懂的原理，容易实现的算法和求解精度均表现出方法本身的应用价值。尽管研究结果是针对一个理想模型进行的，但并不影响其在实际问题和各种类型的地下水问题中的应用。

参　考　文　献

唐焕文，秦学志. 2001. 实用最优化方法. 大连：大连理工大学出版社，135～141.

王浩然，王敏，朱国荣. 2001. 孝妇河源头地区岩溶地下水资源可持续利用的决策支持. 水文地质工程地质，(5)：32～34.

王浩然，朱国荣，赵金熙. 2003. 基于区域分解法的地下水有限元与边界元耦合模型. 地质论评，49(1)：48～52.

席少霖. 1992. 非线性最优化方法. 北京：高等教育出版社，287～288.

徐振章，胡志荣，唐焕文，秦学志. 1995. 稠油油层热物性参数计算模型. 特种油气藏，2(1)：13～18.

薛禹群，谢春红. 1980. 水文地质学的数值法. 北京：煤炭工业出版社，274～290.

Reference

Wang Haoran, Wang Min, Zhu Guorong. 2001. The study of decision supporting for carst groundwater resources sustainable development in source area of Xiaofu River. Hydrogeology & Engineering Geology, 28(5): 32～34.

Wang Haoran, Zhu Guorong, Zhao Jinxi. 2003. A groundwater flow domain decomposition model coupling the boundary and finite element methods. Geological Review, 49(1): 48～52.

Xu Zhenzhang, Hu Zhirong, Tang Huanwen, Qin Xuezhi. 1995. A computation model for thermo-physical parameters used in heavy oil reservoir. Special Oil & Gas Reservoirs, 2(1): 13～18.

A Study of Optimization for Hydrogeologic Parameters with Hooke—Jeeves Methods

WANG Min, ZHU Guorong, KONG Xianglong, JIANG Simin, JI Yuehua

Department of Earth Sciences, Nanjing University, Nanjing, 210093

Abstract

Optimization for hydrogeologic parameters in phase of model examination is the most important step in groundwater numerical modeling. The traditional methods, such as trial-and-error method, need much time and need manual intervention with experiences. It is the impassable puzzle for the people short of experience. So, many researchers study several optimization method to determining the parameters. Hooke—Jeeves method is a kind of optimization which algorithm is simple and easy to realize. This method avoids the problem in simplex method which must create a series of simplex peaks first and calculate the center of simplex to find the optimal solution. And it directly optimizes the function with trend of the value reducing. The determination of hydrologic parameters problem firstly converts into a unconstrained optimization, and then unsolved with the Hooke—Jeeves method. It is a simple and practical method.

Key words: Hooke—Jeeves; Hydrogeologic parametres; Numerical model; unconstrained optimization