

# 单纯形模拟退火算法反演地下水污染源强度

江思珉<sup>1</sup>, 张亚力<sup>1</sup>, 蔡奕<sup>1</sup>, 郑茂辉<sup>2</sup>

(1. 同济大学 土木工程学院, 上海 200092; 2. 同济大学 上海防灾救灾研究所, 上海 200092)

**摘要:** 基于单纯形模拟退火混合算法(SMSA 混合算法), 结合污染物迁移问题的解析解反演地下水污染源的强度变化历时曲线。SMSA 混合算法结合了单纯形法的确定性搜索和模拟退火算法的全局概率搜索机制, 是一种高效的混合优化算法; 同时采用 Yeh 提出的解析解, 它具有可靠性强、易于编程实现和扩展性强的特点。计算结果显示, 1 维、2 维、3 维情形下点污染源的强度反演浓度均较好地再现了真实的污染物释放过程, 这表明基于 SMSA 混合算法和 Yeh 解析解的反演方法是一种有效的地下水污染源重建方法。

**关键词:** 污染源反演; 地下水逆问题; 单纯形法; 模拟退火算法

**中图分类号:** P641.2; P641.8

**文献标志码:** A

## Groundwater Contaminant Identification by Hybrid Simplex Method of Simulated Annealing

JIANG Simin<sup>1</sup>, ZHANG Yali<sup>1</sup>, CAI Yi<sup>1</sup>, ZHENG Maohui<sup>2</sup>

(1. College of Civil Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China; 2. Institute of Disaster Prevention & Relief, Tongji University, Shanghai 200092, China)

**Abstract:** A hybrid simplex-simulated annealing method is adopted and incorporated with the analytical solutions of the contaminant transport equation to recover the history of groundwater contaminant. The hybrid simplex method of simulated annealing (SMSA) algorithm, which incorporates the deterministic search pattern of simplex method and the global probabilistic search mechanism of simulated annealing algorithm, proves to be a robust hybrid optimization algorithm. Meanwhile, the analytical solution to contaminant transport equation proposed by Yeh is adopted, for it is easy to programme, reliable and scalable. As shown by the calculation results, the recovered release history obtained by hybrid SMSA method and Yeh's analytical solution well reproduces the real process of contaminant release. It is further concluded that hybrid SMSA method and its incorporation with

Yeh's analytical solutions can be widely used in reconstructing the release history of groundwater contaminant.

**Key words:** contaminant source identification; groundwater inverse problem; simplex method; simulated annealing algorithm

目前, 我国地下水污染状况已十分严重。与地表水体相比, 地下水一旦遭受污染其治理和修复往往需要更长的时间(常常持续 30 年以上), 其治理和修复费用往往极为昂贵。地下水污染无疑是人类实现可持续发展中需要解决的关键问题。随着环境保护观念和法律意识的逐步加强, 人们不再满足于根据污染源位置和强度去预测未来某时刻的污染物浓度, 转而试图根据浓度监测数据来反求污染源信息(位置和强度)。

关于污染物在土壤、地下水中的迁移规律及相关预测数学模型的研究已经较为成熟<sup>[1-3]</sup>。虽然只有在比较简单的条件下才能求得污染物迁移问题的解析解, 但解析解的应用却十分广泛, 它是分析水动力弥散现象的重要手段, 通过它能够反映污染物的迁移规律, 揭示有关参数和条件的影响, 还能进行各种数值方法的验证和比较, 也能够进行污染物迁移参数的确定和简单问题的污染预报等<sup>[3]</sup>。Yeh 开发的 AT123D (Analytical transient, 1-, 2-, and 3-dimensional model, AT123D) 是一套被广泛认可的污染物迁移解析解程序<sup>[4]</sup>。

与已知污染源位置和强度进行未来某时刻的污染预测不同, 反求污染源信息(位置和强度)是一类典型的地下水逆问题。反求污染源信息这类地下水逆问题就是对决策变量为污染源位置和强度历时曲线的最优化问题的求解。Alapati 等采用非线性最小二乘法反求 1 维污染源的强度历时曲线<sup>[5]</sup>; Mahar

收稿日期: 2012-02-11

基金项目: 国家自然科学基金青年基金(41002078)

第一作者: 江思珉(1980—), 男, 讲师, 工学博士, 主要研究方向为地下水数值模拟。E-mail: jiangsimin@tongji.edu.cn

通讯作者: 郑茂辉(1976—), 男, 讲师, 工学博士, 主要研究方向为灾害仿真模拟。E-mail: zmh@tongji.edu.cn

等采用非线性优化技术进行污染源识别和监测井网的优化<sup>[6]</sup>;Aral等利用遗传算法进行污染源位置和强度识别<sup>[7]</sup>;Mahinthakumar等提出结合遗传算法和局部搜索方法的混合算法,并应用于2维、3维污染源识别问题<sup>[8]</sup>;Sun等提出一种稳健的约束最小二乘法反求2维污染物的污染源强度<sup>[9]</sup>。

模拟退火算法是受热力学物理退火过程启发而产生的一种启发式方法,具有广泛的应用性,允许任意选取初始解,模拟退火算法具有渐近收敛性,已在理论上被证明是一种以概率1收敛于全局最优解的全局优化算法<sup>[10]</sup>。但是,为了寻到最优解,模拟退火算法通常需要较高的初温、较慢的降温速率、较低的终止温度以及各温度下足够多的抽样次数,因而算法的实现效率较低。在保证一定优化质量的前提下提高算法的搜索效率,可以考虑将模拟退火算法与局部搜索方法进行结合实现混合算法。相对于Newton法、Powell法等其他局部搜索方法而言,单纯形法SM(simplex method)所具有的群体搜索的特性增强了算法的遍历性,因而它也更多地被应用于混合算法的构建<sup>[11-13]</sup>。

本文以地下水污染源强度(假定污染源位置已知)为决策变量,基于单纯形模拟退火混合算法,结合污染物迁移问题的解析解反演地下水污染源的强度变化历时曲线。

## 1 单纯形模拟退火混合算法

单纯形模拟退火混合算法通过结合单纯形法SM的确定性搜索和模拟退火算法SA(simulated annealing)的全局概率搜索机制,设计出高效可靠的SMSA混合算法。

### 1.1 混合算法的搜索机制

SM是确定性局部搜索方法,SA是概率搜索全局算法,选择机制上完全不同的两种类型算法进行混合,丰富了搜索行为,增强全局和局部意义下的搜索能力和效率。

### 1.2 单纯形顶点的退火搜索概率

对单纯形群体的进化而言,Metropolis抽样搜索的作用是使得单纯形个体能够跳出局部极值点。从种群进化的角度出发,类似于遗传算法的自适应变异策略,可以以一定的概率选择部分单纯形顶点进行模拟退火操作。在单纯形群体的搜索前期,选择较多的顶点进行退火搜索从而跳出局部极值点,而在后期则更多地依靠单纯形操作进行局部寻优搜

索,因此采用概率递减的退火搜索概率函数 $P(k) = \exp(-k/K_{\max})$ 。其中, $P(k)$ 是第 $k$ 代的退火搜索概率, $k$ 是当前退火次数, $K_{\max}$ 是最大退火次数。

### 1.3 SA状态产生函数和接受函数

SA状态产生函数借鉴了实数编码的遗传算法的变异策略,具体实现见文献<sup>[13]</sup>。状态接受函数采用 $\min\{1, \exp(-\Delta/T)\} > \text{rand}(0, 1)$ 作为接受新状态的条件,其中 $\Delta, T$ 分别为新旧状态的目标值差和温度。

### 1.4 初始温度和退温函数

初始温度根据目标函数差确定。当初始种群(即单纯形法随机产生的 $n+1$ 个状态)产生后,利用下述函数产生初始温度 $T_0 = -(f_b - f_w)/\ln p$ 。其中, $f_b, f_w$ 分别为种群中最佳和最差个体的目标值; $p$ 为最佳个体在初温下接受最差个体的概率,取值 $0 \sim 0.5$ 。由于考虑了初始种群的相对性能,初温与种群性能存在一定的关系,且容易通过概率 $p$ 得到调整。

退温函数采用了指数退温函数, $T_{k+1} = \alpha T_k$ , $\alpha$ 为退温速率,取值为 $0 \sim 1$ 。

### 1.5 抽样稳定与算法终止准则

Metropolis抽样稳定准则用于决定在各温度下产生候选解的数目,这里选择为固定步数法,即在各温度下均以一定步数 $L$ 进行抽样,达到阈值就进行退温。

SMSA混合算法采用了SA算法的 $K_{\max}$ 为终止条件,若 $k \geq K_{\max}$ ,则退出算法。

## 2 污染物迁移问题的解析解

Yeh开发的污染物迁移程序AT123D是美国国家环境保护局认可的污染物迁移计算程序,已被美国25个州的法规列为用于预测土壤和地下水污染的推荐分析工具。然而,AT123D代码未公开,作为核心组件嵌入污染物模拟和治理商业软件SEVIEW和Delft DGPlume。本文在文献<sup>[4]</sup>的基础上,结合基础解析解和卷积公式,在Matlab平台实现了1维、2维和3维污染物迁移的解析解。

### 2.1 假设条件

①介质是均质各向同性的;②等速均匀流场,实际水流速度 $u$ 为常数;③初始时刻研究域中无污染物;④瞬时线性等温吸附。

### 2.2 数学模型

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \left( \frac{D}{R_d} \cdot \nabla \rho \right) - \frac{u}{R_d} \nabla \rho + \frac{M}{n_e R_d} - \left( \frac{K}{R_d} + \lambda \right) \rho \quad (1)$$

式中:  $\rho$  为质量浓度,  $g \cdot m^{-3}$ ;  $D$  为弥散系数,  $m^2 \cdot d^{-1}$ ;  $R_d$  为量纲一阻滞系数 ( $>1$ );  $u$  为实际流速,  $m \cdot d^{-1}$ ;  $n_e$  为有效孔隙度;  $M$  为源汇项,  $g \cdot (m^3 \cdot d)^{-1}$ ;  $K$  为化学降解速率,  $d^{-1}$ ;  $\lambda$  为放射性衰减率,  $d^{-1}$ .

结合特定问题的初始条件和边界条件,对式(1)进行求解。

### 2.3 连续源、瞬时源与卷积公式

污染源可以作为源汇项  $M$  加入污染物迁移方程式(1),也可以作为边界条件加入。从 0 到  $T$  时刻的连续源可视为瞬时源的连续分布。连续源的作用等于瞬时源作用的叠加,可用卷积公式表达<sup>[14-15]</sup>。假定污染源的污染物释放过程函数为  $C_m(t)$ , 空间位置  $x$  在时间  $t$  的污染物质量浓度  $\rho$  表示为

$$\rho(x, t) = \int_0^t \rho_m(\tau) F(x, t-\tau) d\tau \quad (2)$$

式中:  $\rho_m(\tau)$  为时刻  $\tau$  的瞬时源强度;  $F(x, t-\tau)$  为点源瞬时注入污染物的解析解。

Yeh 根据污染源形状(点、线、面、体)和含水层的延伸性(考虑  $y$  方向和  $z$  方向)由式  $F(x, t-\tau) = X_i Y_j Z_k$  计算  $F(x, t-\tau)$ , 其中  $X_i, Y_j, Z_k$  为基础解析解<sup>[4]</sup>。

### 2.4 点瞬时污染源的基础解析解

结合初始条件和边界条件,采用 Green 函数变换和 Simpson 积分对式(1)进行求解。下面式(3)~(7)为点瞬时污染源的基础解析解。

#### 2.4.1 $x$ 方向的点污染源(无限含水层)

$$X_1 = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D_{xx}}{R_d}(t-\tau)}} \cdot \exp\left[-\frac{\{(x-x_s) - (u/R_d)(t-\tau)\}^2}{4(D_{xx}/R_d)(t-\tau)} - (K/R_d + \lambda)(t-\tau)\right] \quad (3)$$

式中:  $x_s$  为污染源位置  $x$  坐标;  $D_{xx}$  为弥散系数张量的  $x$  轴主分量。

#### 2.4.2 $y$ 方向的点污染源(有限宽含水层)

$$Y_1 = \frac{1}{B} + \frac{2}{B} \sum_{i=1}^{\infty} \cos\left(\frac{i\pi y}{B}\right) \cdot \cos\left(\frac{i\pi y_s}{B}\right) \cdot \exp\left[-\left(\frac{i\pi}{B}\right)^2 \frac{D_{yy}}{R_d}(t-\tau)\right] \quad (4)$$

式中:  $y_s$  为污染源位置  $y$  坐标;  $B$  为含水层宽度;  $D_{yy}$  为弥散系数张量的  $y$  轴主分量。

#### 2.4.3 $y$ 方向的点污染源(无限宽含水层)

$$Y_3 = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D_{yy}}{R_d}(t-\tau)}} \exp\left[-\frac{(y-y_s)^2}{4 \frac{D_{yy}}{R_d}(t-\tau)}\right] \quad (5)$$

#### 2.4.4 $z$ 方向的点污染源(有限厚含水层)

$$Z_1 = \sum_{i=1}^{\infty} \phi_i(z) \phi_i(z_s) \cdot \exp\left[-k_i^2 \frac{D_{zz}}{R_d}(t-\tau)\right] \quad (6)$$

式中:  $z_s$  为污染源位置  $z$  坐标;  $\phi_i(z) = \sqrt{\frac{2}{H}} \cos\left(-\frac{i\pi}{H}z\right)$ ;  $k_i = -\frac{i\pi}{H}$ ;  $H$  为含水层厚度。

#### 2.4.5 $z$ 方向的点污染源(无限厚含水层)

$$Z_3 = \frac{1}{\sqrt{4\pi \frac{D_{zz}}{R_d}(t-\tau)}} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-z_s)^2}{4(D_{zz}/R_d)(t-\tau)}\right] + \exp\left[-\frac{(z+z_s)^2}{4(D_{zz}/R_d)(t-\tau)}\right] \right\} \quad (7)$$

式中:  $z_s$  为污染源位置  $z$  坐标;  $D_{zz}$  为弥散系数张量的  $z$  轴主分量。

## 3 应用研究

Skaggs 等<sup>[14-15]</sup>根据污染源的衰减特性提出用多项指数函数式(8)拟合污染源强度历时曲线,并给出如式(9)所示的假想污染源。Alapati 等、Woodbury 等、Snodgrass 等采用不同的方法对该假想污染源式(9)进行了反演计算<sup>[5,16-17]</sup>。污染物迁移过程只考虑基本的对流和弥散作用。

$$C_m(t) = \sum_{j=1}^N a_j \cdot \exp\left(-\frac{(t-t_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \quad (8)$$

式中:  $a_j$  为污染释放强度;  $t_j$  为污染释放时间;  $\sigma_j$  为污染释放宽度参数。

$$C_m(t) = 1.0 \times \exp\left(-\frac{(t-130)^2}{2 \times 5^2}\right) + 0.3 \times \exp\left(-\frac{(t-150)^2}{2 \times 10^2}\right) + 0.5 \times \exp\left(-\frac{(t-190)^2}{2 \times 7^2}\right) \quad (9)$$

### 3.1 目标函数

目标函数采用均方根误差(RMSE),如下式:

$$\min g = \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (C_{i,t,comp} - C_{i,t,obs})^2 \right]^{1/2} \quad (10)$$

式中:  $g$  为目标函数;  $C_{i,t,obs}$  为监测点  $i$  在时刻  $t$  的浓度观测值;  $C_{i,t,comp}$  为监测点  $i$  在时刻  $t$  的浓度模拟值。浓度监测点分布在  $x$  轴上,布置在 0~300 m 之间,间隔 20 m,共 16 个监测点,取样时刻为第 300 d。

本文采用 SMSA 混合算法分别对 1 维、2 维、3 维情形下对假定污染源进行反演计算(污染源位置假定已知),反求参数  $a_j, t_j$  和  $\sigma_j$ 。SMSA 混合算法的主要参数设置如下:最佳个体在初温下接受最差个体的概率  $p=0.3$ ,退温速率  $\alpha=0.97$ ,Metropolis 抽样步数  $L=150$ ,最大退火次数  $K_{max}=300$ 。

### 3.2 1 维迁移问题反演

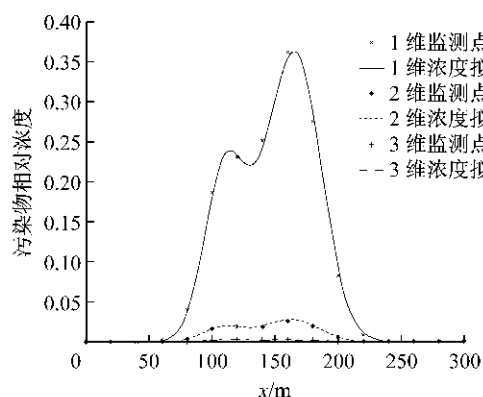
考虑含水层  $x$  方向无限延伸的情形,  $x$  方向均匀流( $u=1 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$ ). 污染源位置已知( $x_s=0$ ), 含水层参数为  $D_{xx}=1.0 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ . 在该情形下,  $F(x, t-\tau)=X_1$ .

### 3.3 2 维迁移问题反演

考虑含水层  $x$  方向和  $y$  方向均无限延伸的情形,  $x$  方向均匀流( $u=1 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$ ). 污染源位置已知( $x_s=0, y_s=0$ ), 含水层参数为  $D_{xx}=1.0 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ ,  $D_{yy}=0.1 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ . 在该情形下,  $F(x, t-\tau)=X_1 Y_3$ .

### 3.4 3 维迁移问题反演

考虑含水层厚度为 50 m,  $x$  方向和  $y$  方向无限延伸的情形,  $x$  方向均匀流( $u=1 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$ ). 污染源位置已知( $x_s=0, y_s=0, z_s=0$ ), 含水层参数为  $D_{xx}=1.0 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ ,  $D_{yy}=0.1 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ ,  $D_{zz}=0.1 \text{ m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$ . 在该情形下,  $F(x, t-\tau)=X_1 Y_3 Z_1$ .



a 全图

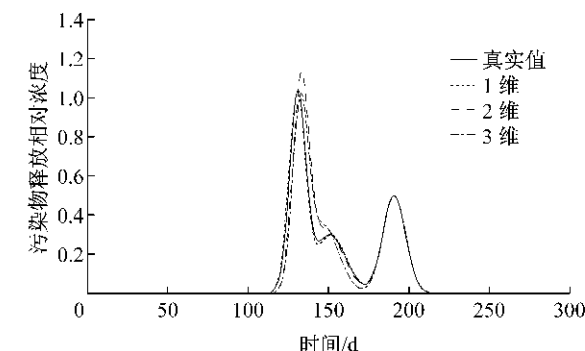
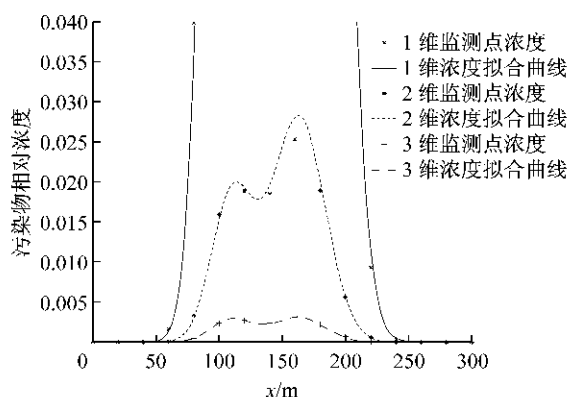


图 1 污染源强度历时曲线

Fig.1 The contaminant source release history



b 局部放大

图 2 监测点浓度拟合曲线

Fig.2 Fitting curve of sampling concentration

表 1 是 1 维、2 维和 3 维迁移反演问题的污染释放强度、污染释放时间、污染释放宽度参数的反演结果. 由表 1 看出: ①各参数的反演结果与真实值很接近, 与图 1、图 2 所得的结论一致, 污染源强度历时曲线的反演效果很好; ②离监测时刻 300 d 最接近的强度释放  $a_3, t_3, \sigma_3$  的拟合值最接近真实值, 分析原因在于污染物的天然衰减特性决定了间隔时间越久浓

度消散越明显, 反演难度相应提高; ③随着维度的提高, 各参数的拟合值偏差有稍微变大的趋势, 这与数值模型的参数拟合趋势基本一致; ④对比图 2 的监测点浓度值, 均方根误差与之相比相差 2 个数量级, 拟合精度较高. 以上结果表明基于 SMSA 混合算法和 Yeh 解析解的反演方法计算结果可靠、精度较高.

表 1 污染源反演参数表

Tab.1 The estimated parameters in the release function for contaminant source

维度	$a_1$	$t_1$	$\sigma_1$	$a_2$	$t_2$	$\sigma_2$	$a_3$	$t_3$	$\sigma_3$	RMSE
真实值	1.00	130.00	5.00	0.30	150.00	10.00	0.50	190.00	7.00	—
1 维	1.00	129.65	5.12	0.30	150.68	9.52	0.50	190.05	7.05	$1.710 \times 10^{-3}$
2 维	1.03	132.05	4.92	0.32	147.68	10.68	0.50	190.02	7.02	$8.279 \times 10^{-4}$
3 维	0.92	131.75	4.88	0.34	146.23	9.38	0.50	190.08	7.14	$4.788 \times 10^{-5}$

## 4 结论

(1)本文采用的 SMSA 混合算法结合了 SM 确定性搜索和 SA 全局概率搜索机制,大大丰富了搜索行为,提高了算法的搜索能力和效率。

(2)与污染物迁移问题的数值解法相比,本文采用的解析解实现更为简单,特别是从 1 维模型扩展到 2 维、3 维模型,只需要对  $F(x, t-\tau) = X_i Y_j Z_k$  进行相应处理即可。

(3)1 维、2 维和 3 维污染物迁移问题的污染源反演的计算表明,基于 SMSA 混合算法和 Yeh 解析解的反演方法能够广泛应用于地下水污染源的污染物排放过程重建,具有一定的推广应用价值。

(4)本文的污染源反演是在假定污染源位置已知的前提下对污染源强度历时曲线参数进行反演,是污染源反演的试探性研究。下一步拟通过对污染源位置变化可能引起的解析解形式变化入手,开展对污染源位置和强度历时曲线的同步反演。

## 参考文献:

- [1] Bear J, Alexander H, Cheng D. Modeling groundwater flow and contaminant transport[M]. Dordrecht: Springer, 2010.
- [2] 薛禹群,谢春红. 地下水数值模拟[M]. 北京:科学出版社, 2007.  
XUE Yuqun, XIE Chunhong. Numerical simulation for groundwater[M]. Beijing: Science Press, 2007.
- [3] 王洪涛. 多孔介质污染物迁移动力学[M]. 北京:高等教育出版社, 2008.  
WANG Hongtao. Dynamics of fluid flow and contaminant transport in porous media[M]. Beijing: Higher Education Press, 2008.
- [4] Yeh G T. AT123D: analytical transient one-, two-, and three-dimensional simulation of waste transport in the aquifer system report ORNL-5602, oak ridge [R]. Knoxville: Oak Ridge National Laboratory, 1981.
- [5] Alapati S, Z J Kabala. Recovering the release history of a groundwater contaminant using a non-linear least-squares method[J]. Hydrological Processes, 2000, (14): 1003.
- [6] Mahar P S, B Datta. Optimal identification of groundwater pollution sources and parameter estimation[J]. Journal of Water Resources Planning and Management, 2001, 127(1): 20.
- [7] Aral M M, Guan J, Maslia M L. Identification of contaminant source location and release history in aquifers[J]. Journal of Hydrologic Engineering, 2001, 6(3): 225.
- [8] Mahinthakumar G K, Mohamed Sayeed. Hybrid genetic algorithm—local search methods for solving groundwater source identification inverse problems[J]. Journal of Water Resources Planning and Management, 2005, 131(1): 45.
- [9] Sun A Y, Scott L P, Gordon W W. A constrained robust least squares approach for contaminant release history identification[J]. Water Resources Research, 2006, 43(W04414): 1.
- [10] 王凌. 智能优化算法及其应用[M]. 北京:清华大学出版社, 2001.  
WANG Ling. Intelligence optimization algorithms and applications[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2001.
- [11] 李树有,都志辉,吴梦月,等. 模拟退火算法的并行实现及其应用[J]. 物理学报, 2001, 50(7):1260.  
LI Shuyou, DU Zhihui, WU Mengyue, et al. Parallel realization of simulated annealing algorithm: modifications and applications [J]. Acta Physica Sinica, 2001, 50(7):1260.
- [12] 罗亚中,唐国金. 两层非线性规划问题的并行模拟退火全局优化[J]. 系统仿真学报, 2005, 17(5): 1040.  
LUO Yazhong, TANG Guojin. Global optimization of bilevel nonlinear programming problems by parallel simulated annealing [J]. Journal of System Simulation, 2005, 17(5): 1040.
- [13] 江思珉,朱国荣,胡西嘉,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[J]. 地质论评, 2007, 53(1): 92.  
JIANG Simin, ZHU Guorong, HU Xijia, et al. Hybrid simplex-simulated annealing method for solving hydrogeologic parameters and its parallel implementation [J]. Geological Review, 2007, 53(1): 92.
- [14] Skaggs H T, Kabala Z J. Recovering the release history of a groundwater contaminant [J]. Water Resources Research, 1994, 30(1): 71.
- [15] Skaggs H T, Kabala Z J. Recovering the history of a groundwater contaminant plume: method of quasi-reversibility [J]. Water Resources Research, 1995, 31(11): 2669.
- [16] Woodbury A D, Ulrych T J. Minimum relative entropy inversion: theory and application to recovering the release history of a groundwater contaminant [J]. Water Resources Research, 1996, 32(9): 2671.
- [17] Snodgrass M F, Kitanidis P K. A geostatistical approach to contaminant source identification [J]. Water Resources Research, 1997, 33(4): 537.