

7-31-2020

Estimation of Contamination Source by Using QPSO with Perturbation Operator

Tian Na

1. School of Tianjiabing Educational Sciences, Jiangnan University, Wuxi 214122, China; ;2. Institute of Electrical Automation, Jiangnan University, Wuxi 214122, China;

Zhicheng Ji

2. Institute of Electrical Automation, Jiangnan University, Wuxi 214122, China;

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

Estimation of Contamination Source by Using QPSO with Perturbation Operator

Abstract

Abstract: *An improved quantum-behaved particle swarm optimization (QPSO) with perturbation operator was proposed and applied to solve the convection-diffusion inverse problem of estimating time-varying contamination source.* Because the contamination source is time-dependent, the inverse problems are classified into function estimation problem. To transform the inverse problem to optimization problem, the nonlinear least square method was used. Meanwhile, Tikhonov regularization was used to stabilize the solution with noisy measured data. And the regularization parameter was chosen by L-curve method. The simulation results tell that QPSO with perturbation operator outperforms QPSO and PSO. Moreover, tests over different views (regularization terms, noise level, sensor positions) were performed.

Keywords

perturbation operator, quantum-behaved particle swarm optimization, contamination source estimation, partial differential equation

Recommended Citation

Tian Na, Ji Zhicheng. Estimation of Contamination Source by Using QPSO with Perturbation Operator[J]. Journal of System Simulation, 2015, 27(7): 1628-1637.

带扰动算子的量子粒子群在水污染源识别中的应用

田娜^{1,2}, 纪志成²

(1. 江南大学 田家炳教育科学学院, 无锡 214122; 2. 江南大学 电气自动化研究所, 无锡 214122)

摘要: 提出一种带扰动算子的量子行为粒子群优化算法, 将其用于求解对流-扩散反问题中的估计随时间变化的污染源问题。污染源是时变函数, 问题归结为函数估计问题(function estimation problem)。为了将反问题转化为优化问题, 我们采用了非线性最小二乘模型。考虑到采样数据可能存在噪声, Tikhonov 正则化方法用来取得稳定解, L-curve 方法用来求得正则参数。仿真结果表明: 带扰动算子的量子粒子群算法明显优于传统量子粒子群算法, 能够帮助粒子从局部最优中跳出来。从不同的角度对算法进行了测试(正则项, 噪声级别, 传感器的位置等)。

关键词: 扰动算子; 量子粒子群; 水污染源识别; 偏微分方程

中图分类号: TP399

文献标识码: A

文章编号: 1004-731X (2015) 07-1628-10

Estimation of Contamination Source by Using QPSO with Perturbation Operator

Tian Na^{1,2}, Ji Zhicheng²

(1. School of Tianjiabing Educational Sciences, Jiangnan University, Wuxi 214122, China;

2. Institute of Electrical Automation, Jiangnan University, Wuxi 214122, China)

Abstract: An improved quantum-behaved particle swarm optimization (QPSO) with perturbation operator was proposed and applied to solve the convection-diffusion inverse problem of estimating time-varying contamination source. Because the contamination source is time-dependent, the inverse problems are classified into function estimation problem. To transform the inverse problem to optimization problem, the nonlinear least square method was used. Meanwhile, Tikhonov regularization was used to stabilize the solution with noisy measured data. And the regularization parameter was chosen by L-curve method. The simulation results tell that QPSO with perturbation operator outperforms QPSO and PSO. Moreover, tests over different views (regularization terms, noise level, sensor positions) were performed.

Keywords: perturbation operator; quantum-behaved particle swarm optimization; contamination source estimation; partial differential equation

引言

由于人口的增长和社会经济的快速发展, 对水资源的需求量也大幅度增长, 而地下水无疑在供水

量中担当了这一重要角色。然而水污染是一个普遍存在的问题, 当肮脏、有害的物质进入洁净的水, 尤其是含水层或地表水体, 会危机人类的健康。确定地下水中污染物的来源, 对于污染事件中制定有效的补救策略, 确定责任方, 是非常重要的。地下水污染广义定义为任何减少地下水质量的要素。污染物可能是化学的, 物理的或生物的。化学污染, 又可被分解成可溶性成分和非水溶性液体成分。可



收稿日期: 2014-07-17 修回日期: 2014-11-21;
基金项目: 江苏省博士后基金(1401004B); 国家粮食局公益性行业科研专项(201313012);
作者简介: 田娜(1983-)女, 河北, 博士, 副教授, 研究方向为智能控制, 系统辨识; 纪志成(1959-)男, 浙江, 教授, 博士, 研究方向为智能控制, 系统辨识。

<http://www.china-simulation.com>

• 1628 •

溶性成分溶解在地下水中并且随地下水运动。非水溶性液体, 独立于水并且一般不随地下水运动。本文主要关注可溶解物质在水饱和多孔介质中的运输, 而运输可溶性化学物质在物理上是属于对流扩散过程。对流是描述污染物随大量地下水运动。扩散描述污染物通过多孔介质时的传播过程。

如果初始和边界条件, 模型参数和污染物释放历史过程是已知的, 对流扩散方程可以通过解析技术或数值方法求解污染物浓度的分布, 这一过程被称为对流-扩散正问题, 其解是唯一的, 适定的。与此相反, 对流-扩散反问题涉及确定未知时变污染物释放历史过程, 所需要的额外辅助信息是测量得到的污染物的浓度。地下水污染物来源的识别问题是不适定的, 不同的污染源可能会造成相同的浓度分布。由于污染物浓度数据的采样是在有限个离散点进行的, 无限多个可能的源函数可以产生相同的一组测量数据。因此, 这个反问题的解不是唯一的。此外, 反问题解的不稳定性是由不可避免的测量噪声和计算误差导致的, 从而使得反问题的解不稳定。本文研究一个污染源释放历史重现问题, 使用在一维流场中已知位置的点污染源。污染物浓度的空间分布采样, 是在污染源开始释放之后的某一特定时间。

在过去 10 年中, 地下水污染物转移受到了广泛的关注。Sidauruk 在文献[1]中给出了一个相关工作的简明回顾。Gorelick 等人在文献[2]中使用最小二乘法和线性规划来确定污染源的位置和强度, 他们的数值模型在 2 套假设数据上进行测试, 分别代表稳态和瞬态的情况, 该模型假定其他参数是已知的。Wagner 在文献[3]中同时估计传输参数和污染源。Zou 和 Parr 在文献[4]中提出了一种解析解来确定纵向和横向延散度。Skaggs 和 Kabala 在文献[5-7]中采用 Tikhonov 正则方法和准可逆性方法求解污染源反问题。Woodbury 和 Ulrych 在文献[8-9]中用最小相对(MRE)来解决此问题。Snodgrass 和 Kitanidis 在文献[10]中用统计学方法来解决同样的问题。在文献[11-13]中, 一些确定性优化方法,

如 CGM, 用于解决各种反问题。Tikhonov 正则化方法在处理噪声采样数据时, 稳定性更好。然而, 它不能被用来重建非光滑的污染源函数。MRE 方法是一种基于梯度的方法, 在处理多峰污染源函数时, 是更有效的。但另一方面, 它对于处理未知大小的测量噪声, 并不是十分有效。此外, 目标函数的梯度计算非常复杂, 甚至对于一些目标函数, 梯度可能是不存在的, 另外确定拉格朗日乘数也是 MRE 方法的一个难点。对于这类问题, 随机搜索方法, 如粒子群优化算法(PSO)算法更有效。Bharat 等人在文献[14]中首次使用 PSO 算法解决地下水污染中的污染源反问题。

1 问题的数学描述

地下水中污染物运动的控制方程由对流-扩散方程描述。一个通过饱和多孔介质一维污染物溶质运动可以用式(1)~(4)表示:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = d \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} - V \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}, \quad 0 < x < L, 0 < t \leq t_f \quad (1)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq L \quad (2)$$

$$u(0,t) = C(t), \quad 0 < t \leq t_f \quad (3)$$

$$u(L,t) = 0, \quad 0 < t \leq t_f \quad (4)$$

其中: u 是污染物的浓度; d 是一个常数扩散系数; V 是均匀孔隙速度; $C(t)$ 是位于 $x=0$ 的污染源; $u_0(x)$ 是最初的污染物浓度的空间分布。方程(1)等号右侧第 1 项称为扩散项, 第 2 项称为对流项。这里 $C(t)$ 是待确定的未知污染源。

因为方程(1)中对流项的中心差分近似可能导致解的振荡, 所以我们采用隐式 upwind 差分来离散方程(1):

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = d \frac{u_{i+1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i-1}^{j+1}}{\Delta x^2} - V \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1}}{\Delta x} \quad (5)$$

为了将反问题转化为优化问题, 我们采用了最

小二乘法与 Tikhonov 正则化方法, 那么目标函数可以表示为:

$$J[C(t)] = \sum_{i=1}^N \int_{t=0}^{t_f} (u(C(t); x_i, t) - Y(x_i, t))^2 dt + \lambda^2 \|LC(t)\|^2 \quad (6)$$

其中: N 是传感器的数量; λ 是正则化参数; $C(t)$ 是要求解的未知量。式(6)等号右侧第 1 项是差异项(余量), 第 2 项是正则项。 $LC(t)$ 是正则算子的一般形式, 因为 $C(t)$ 随时间 t 变化的, 可以表示为:

$$\|LC(t)\|^2 = \int_{t=0}^{t_f} \left(\frac{d^n C(t)}{dt^n} \right)^2 dt \quad (7)$$

当($n=0$)时, 正则项是零阶的, 当($n=1$)时, 正则项是一阶的(这 2 种也是最常用的)。

正则化可以使得反问题的解稳定。目标函数 $J[C(t)]$ 的最小化过程, 是一个匹配测量数据和保证稳定解之间的权衡过程。正则参数 λ 值的选取影响了解的稳定性, 我们采用 L -曲线方法来选择最优参数 λ , 随着 λ 取一组不同的值, 正则项 $\|LC(t)\|^2$ 和差异项 $\sum_{i=1}^N \int_{t=0}^{t_f} (u(x_i, t) - Y(x_i, t))^2 dt$ 的对数值一一画在图表上。 L -曲线上拐点处的 λ 值就是最优的正则参数值。

为了评估求解反问题算法的准确性, 采用估计的未知量的平均误差:

$$C_{error} = \frac{1}{N_t} \sqrt{\sum_{j=1}^{N_t} (C_j - \bar{C}_j)^2} \quad (8)$$

其中: C_j 是估计的未知量的第 j 项; \bar{C}_j 是准确的未知量的第 j 项。

为了检查包含随机测量噪声的情况, 我们假设一组不相关的, 均值为 0, 标准偏差为常数的正态分布的随机数。模拟的含噪声测量数据可以表示为

$$Y(x_i, t) = u_{exact}(x_i, t) + \varepsilon \delta_i u_{exact}(x_i, t) \quad (9)$$

其中: $u_{exact}(x_i, t)$ 是用准确的 \bar{C} 求得的正问题的解 $i=1, 2, \dots, N$; ε 是噪声水平; δ_i 是满足标准正太分布的随机数。

2 带扰动算子的量子行为粒子群算法

2.1 粒子群优化算法

粒子群优化算法(PSO)是基于群体智能的优化技术, 最初由 Kennedy 和 Eberhart 在 1995 提出的^[15]。该算法的概念是来源于鸟群或鱼群的社会行为。该系统有一个粒子群体, 其中每个粒子代表一个优化问题可能的解。已经证明 PSO 算法与遗传算法(GA)有相当的性能^[16]。

在有 M 个粒子, D 维空间的原始 PSO 算法中, 第 i 个粒子在第 k 次迭代步的位置向量和速度向量表示为: $X_i(k) = (X_{i1}(k), X_{i2}(k), \dots, X_{iD}(k))$, $V_i(k) = (V_{i1}(k), V_{i2}(k), \dots, V_{iD}(k))$ 。粒子根据以下迭代公式更新速度和位置:

$$V_i(k+1) = \omega V_i(k) + c_1 r_1 (P_i(k) - X_i(k)) + c_2 r_2 (P_g(k) - X_i(k)) \quad (10)$$

$$X_i(k+1) = X_i(k) + V_i(k+1) \quad (11)$$

其中: $i=1, 2, \dots, M$, $j=1, 2, \dots, D$; ω 是惯性权重, 是 c_1 和 c_2 是加速系数; r_1 和 r_2 是均匀分布在 $(0, 1)$ 中的随机数; 向量 $P_i = (P_{i1}, P_{i2}, \dots, P_{iD})$ 是第 i 个粒子的历史最佳位置; 向量 $P_g = (P_{g1}, P_{g2}, \dots, P_{gD})$ 是整个粒子群的历史最佳位置。

2.2 量子行为粒子群优化算法

PSO 算法的缺点是不能确保收敛到全局最优解^[16], 为了克服这个缺点, Sun 在 2004 年提出了量子行为粒子群优化算法的概念^[17], 文献[18]中的轨迹分析说明, 当每个粒子收敛到 $p_i = (p_{i1}, p_{i2}, \dots, p_{iD})$ 时, PSO 算法实现收敛:

$$p_i(k) = \varphi P_i(k) + (1 - \varphi) P_g(k) \quad (12)$$

其中 $\varphi \in (0, 1)$ 。

在量子世界中, 粒子的速度是没有意义的。所以在 QPSO 中, 位置是唯一描述粒子状态的变量, 更新公式如下:

$$X_i(k+1) = p_i(k) \pm \alpha |mbest(k) - X_i(k)| \ln(1/u) \quad (13)$$

其中 $mbest(k)$ 称作平均最优位置, 定义为所有粒

子历史最优位置的平均值:

$$mbest(k) = \left(\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M P_{i1}(k), \dots, \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M P_{iD}(k) \right) \quad (14)$$

其中 M 是粒子的个数。式(13)中的参数 α 是收缩系数, 通过调整可以控制收敛速度。

与 PSO 不同的是, QPSO 算法不需要速度向量, 并且只有一个参数需要控制, 使得算法更容易执行。标准测试函数证明, QPSO 算法的性能要优于 PSO 算法^[17-18]。

2.3 带扰动算子的量子行为粒子群优化算法

QPSO 或其他随机搜索算法的全局收敛性, 意味着算法在无限的迭代次数里, 一定会达到全局最优解。然而, 当算法应用到实际问题中时, 只允许有限的迭代次数, 所以过早收敛是不可避免的。QPSO 算法也会因为过早收敛, 而陷入局部最优, 尤其是当算法用来解决复杂的不适定问题时, 到目前为止已经提出了许多的改进策略以提高算法的搜索能力^[19-21]。在本文中, 一个新的扰动算子被引入算法中以提高 QPSO 寻找全局最优解的能力。在此算法中, 可以通过对每个粒子施加随机扰动来增加群体的多样性:

$$X_i^{per}(k) = X_i(k) + pert_{coff} X_i(k)(r_1 - r_2) \quad (15)$$

其中 $pert_{coff} = a \exp \left\{ 2.3025851 \frac{(k_{max} - k)}{(k_{max} - 1)} \right\}$ 是一个

非线性扰动系数, 从 $10a$ 递减到 a (a 是一个可以根据具体问题进行调整的尺度参数)如图 1 所示。在这里, r_1 和 r_2 是均匀分布在 $(0, 1)$ 上的随机数。这种多样化策略确实能提高群体的全局搜索能力, 特别是在后期搜索过程中粒子的多样性处在一个较低水平时, 无法进一步全局搜索可能会导致粒子过早收敛。带扰动算子的 QPSO 算法(QPSO-PER)的程序流程可以用以下伪代码描述:

QPSO-PER 算法

初始化粒子群的位置 $X(0)$ 和粒子的个体最优位置 $P(0)$, $\alpha = 1.0$;

Do while ($k < k_{max}$)

For $i = 1, 2, \dots, M$

评估每个粒子的适应度 $f(X_i(k))$;

If $f(X_i(k)) < f(P_i(k))$ then

$P_i(k) = X_i(k)$;

If $f(P_i(k)) < f(P_g(k))$ then

$P_g(k) = P_i(k)$;

End for

根据公式(11)计算平均最优位置 $mbest(k)$;

For $i = 1, 2, \dots, M$

根据公式(12)计算 $p_i(k)$;

根据公式(13)更新 $X_i(k+1)$;

根据公式(15)对位置 $X_i(k+1)$ 做扰动运算;

End for

对缩放系数 α 进行线性递减;

End do

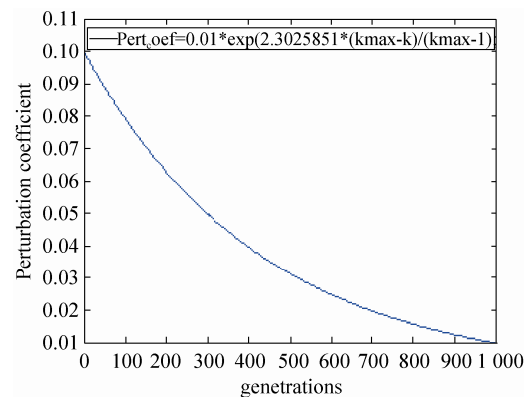


图 1 随迭代步数递减的扰动系数

为了验证 QPSO-PER 算法的性能以及与 PSO 和基本 QPSO 的比较, 我们从 2 个方面进行了比较。为了比较的公平性, 我们对 PSO 算法的参数设置为:

$$\omega = 0.5 + 0.4 \times (k_{max} - k) / k_{max} \quad (16)$$

即由 0.9 线性递减到 0.4; $c_1 = c_2 = 2$ ^[17]。对 QPSO 和 QPSO-PER 的参数设置为:

$$\alpha = 0.5 + 0.5 \times (k_{max} - k) / k_{max} \quad (17)$$

即由 1.0 线性递减到 0.5。

表 1 中的测试函数的维数均分别采用 10, 20 和 30。根据维数的不同, 最大迭代数 k_{max} 也取不同的值。对每一个测试函数, 均进行了 50 次试验,

对每一个测试函数的 50 次试验的平均最优值和标准偏差都列在了表 2 中。计算结果表明, 对于所有的测试函数, QPSO-PER 比 PSO 和 QPSO 都有更好的性能。

表 1 标准测试函数和参数设置

fun.	Mathematical Expression	Range
f_1	$f_1 = \sum_{i=1}^D x_i^2$	$(-100, 100)^\circ$
f_2	$f_2 = \sum_{i=1}^D (100(x_{i+1} - x_i)^2 + (x_i - 1)^2)$	$(-30, 30)^\circ$
f_3	$f_3 = \sum_{i=1}^D (x_i^2 - 10 \cos(2\pi x_i) + 10)$	$(-5.12, 5.12)^\circ$
f_4	$f_4 = \frac{1}{4000} \sum_{i=1}^D x_i^2 - \prod_{i=1}^D \cos\left(\frac{x_i}{\sqrt{i}}\right) + 1$	$(-600, 600)^\circ$

表 2 标准测试函数结果

fun.	D	k_{\max}	Mean Best Value (Standard Deviation)				
			PSO	QPSO	QPSO-PER		
f_1	10	1 000	5.42E-23 (1.99E-22)	0.00 (0.00)	0.00 (0.00)		
			20	2 000	3.90E-19 (1.30E-18)	2.49E-42 (0.00)	1.40E-45 (0.00)
					30	3 000	3.43E-15 (8.94E-15)
f_2	10	1 000	56.80 (85.75)	30.55 (60.17)			21.86 (28.02)
			20	2 000	113.03 (204.15)	55.41 (58.03)	42.10 (34.63)
					30	3 000	152.36 (228.74)
f_3	10	1 000	4.23 (2.11)	4.67 (2.59)			3.78 (1.97)
			20	2 000	17.73 (4.34)	14.35 (4.23)	10.89 (3.43)
					30	3 000	37.67 (9.73)
f_4	10	1 000	9.12E-02 (3.79E-02)	4.96E-02 (4.09E-02)			3.36E-02 (3.28E-02)
			20	2 000	2.40E-02 (1.62E-02)	1.76E-02 (1.61E-02)	1.53E-02 (2.45E-02)
					30	3 000	1.80E-02 (1.95E-02)

3 种算法(PSO, QPSO 和 QPSO-PER)的收敛曲线如图 2 所示。图中所有的测试函数的维数都是 30。在图 2(a)~(d)中, 在算法的早期阶段, QPSO-PER 的性能几乎与 QPSO 相同, 甚至比 QPSO 还差。由于对粒子应用了扰动算子, 粒子群的多样性得到

了增加, 从而粒子的早熟现象得到控制。

3 数值测试

将带扰动算子的 QPSO(QPSO-PER)用于求解反问题中估计随时间变化的污染源函数。粒子的位置代表一个污染源的候选解 $C(t)$ 。在离散计算中, 粒子位置的维数 D 与时间步数 N_t 相等。目标适应度函数 $J[C]$ 的定义如公式(3)。在寻求 $J[C]$ 最小值的每一步迭代 k 中, 粒子定义为:

$$X_i(k) = (X_{i1}(k), X_{i2}(k), \dots, X_{ij}(k), \dots, X_{iD}(k)) = (C(t_1), C(t_2), \dots, C(t_j), \dots, C(t_{N_t})) \quad (18)$$

其中 $D = N_t$ 。将 $X_i(k)$ 代入方程(1), 污染物浓度的分布可以通过求解正问题得到。每一个可行解通过计算目标函数 $J[C]$ 来评估它的适应值。在每一次迭代中, 粒子的位置根据公式(10)更新, 重复这个过程直到达到预定义的迭代步数或者解已收敛。 C_{error} , 如公式(5)所定义, 用来评估解的精确性。

为了验证 QPSO-PER 算法的可行性和效率, 并且比较基本 PSO 和 QPSO 求解污染源反问题的性能, 我们采用一个典型的例子^[1-6]:

$$C(t) = \exp\left[-\frac{(t-130)^2}{2 \cdot 5^2}\right] + 0.3 \exp\left[-\frac{(t-150)^2}{2 \cdot 10^2}\right] + 0.5 \exp\left[-\frac{(t-190)^2}{2 \cdot 7^2}\right] \quad (19)$$

污染源函数(公式(19))的图形如图 3 所示, 从 $t=0$ 到 $t=300$ 周期内显示出 3 个峰值。这个精确的污染源函数是用来产生污染物浓度, 可作为在随后的计算中用到的模拟采样浓度。经过 300 个时间单位之后, 污染物浓度在不同地点的分布, 如图 4 所示。整个模拟过程的参数设置如下: $t \in [0, 300]$, $V=1.0$, $d=1.0$; 时间步长和网格尺寸设置为 $\Delta t = 3.0$, $\Delta x = 1.0$ 。

PSO 算法的参数设置为: $M=50$, $D=N_t=300/\Delta t=100$, $V_{\max}=1.2$, $k_{\max}=2000$ 。为了在相同条件下比较结果, QPSO, QPSO-PER 和 PSO 中共同的参数使用相同的值。

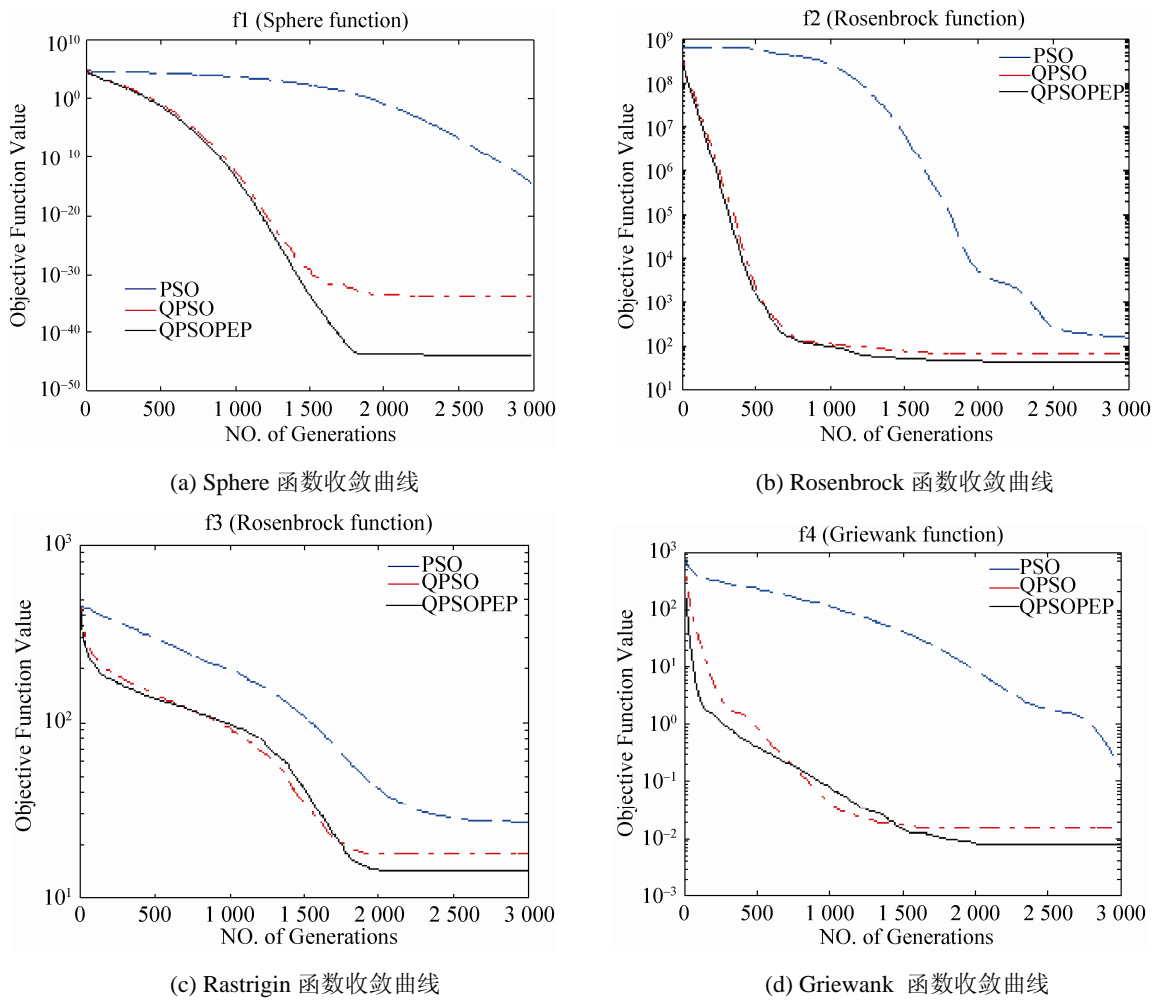


图 2 3 种算法在不同测试函数上的收敛曲线

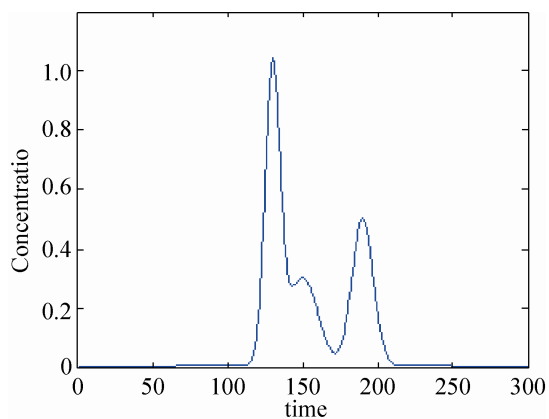


图 3 随时间变化的污染物释放历史(g/s)

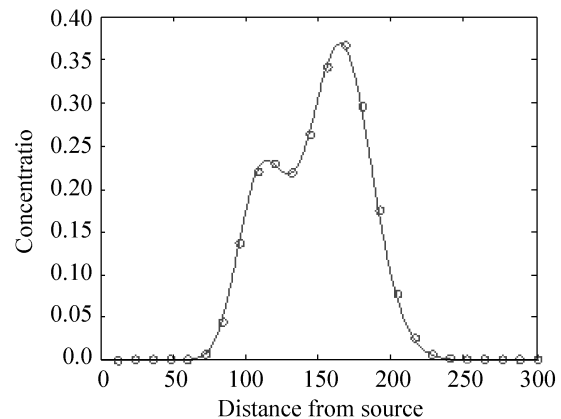


图 4 污染物浓度分布, 圆圈代表采样位置(h/m)

在文献中, 包括了 3 种类型的样本: 一个位置在一段时间内的采样; 多个位置在一个时间点的采样; 前面两种类型的组合。数值试验测试了采样时间(t_s)和位置(x_s)对解的影响。这些试验案例都列

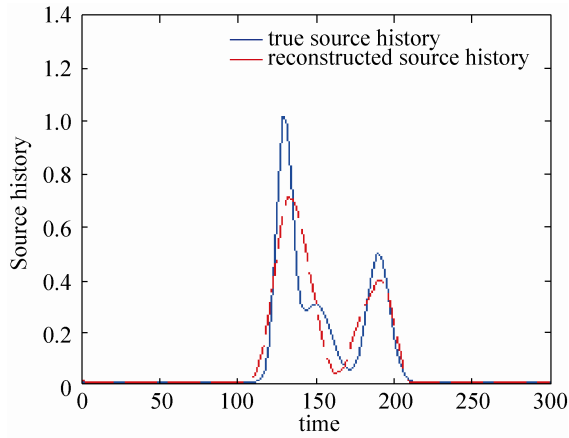
在表 3 中。图 5 显示的是这 3 个测试案例的估计污染源。相应的平均误差 C_{error} 和目标函数值 $J[C]$ 列于表 4。从图 5(c)中可以看到, 在多个位置持续一段时间内的采样产生的结果具有更好的准确性。

表 3 取样时间和地点的测试案例

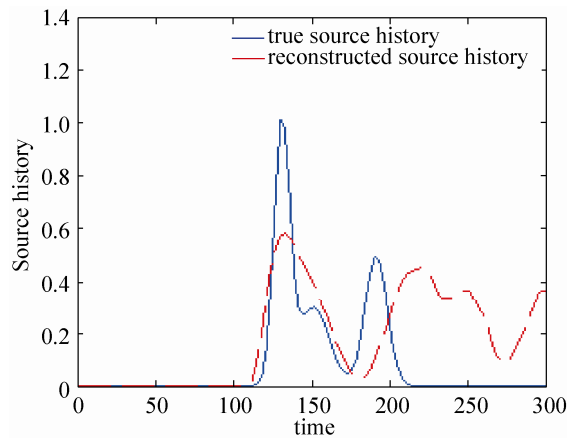
Run No.	采样时间	采样位置
Run1	$t_s = t_f$	25 个采样位置(图 4)
Run2	$t_s = \Delta t, 2\Delta t, \dots, N_t \Delta t$	$x_s = L / 2$
Run3	$t_s = \Delta t, 2\Delta t, \dots, N_t \Delta t$	25 个采样位置(图 4)

表 4 取样时间和地点对结果的影响

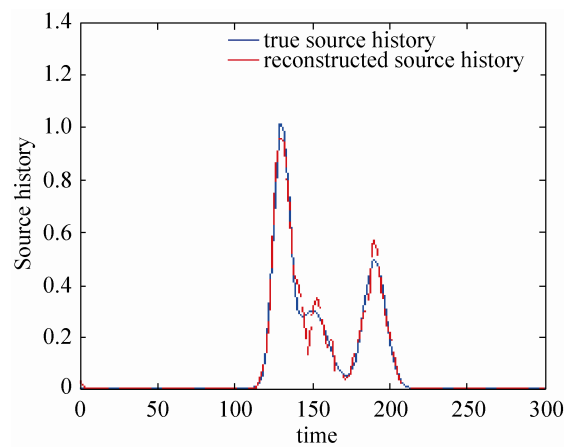
Run No.	C_{error}	$J[C]$
Run1	7.96E-03	5.20E-06
Run2	2.12E-02	1.00E-04
Run3	2.95E-03	3.38E-04



(a) Run1 测试结果(g/s)



(b) Run2 测试结果(g/s)



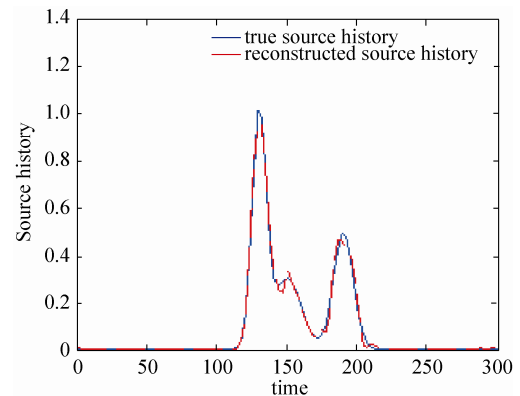
(c) Run3 测试结果(g/s)

图 5 不同取样时间和地点测试结果

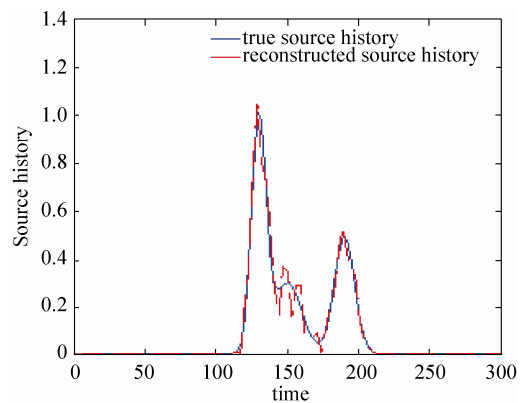
为了分析正则化项对污染源反问题解的影响,对不同的正则项和噪声水平进行了测试(如表 5)。图 6 显示了由 QPSO 算法重绘的污染源历史,此测试中采用的是精确的浓度采样和一阶正则化项。最佳正则化参数是由 L-曲线方法得到($\lambda = 6 \times 10^{-3}$)。由表 6 列出的平均误差和目标函数值可以看出,一阶正则项可以有效的处理非光滑函数,而零阶正则项不能减少输入函数的振荡特征。

表 5 正则项和正则参数的测试案例

Run No.	正则项	噪声 / ϵ
Run4	First order	0
Run5	Zeroth order	0
Run6	First order	0.05
Run7	First order	0.2



(a) Run4 测试结果(g/s)



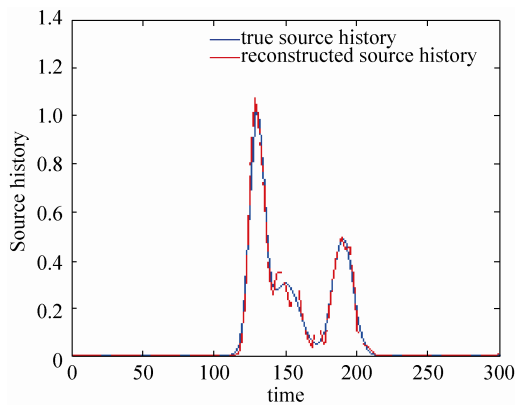
(b) Run5 测试结果(g/s)

图 6 不同正则项的测试结果

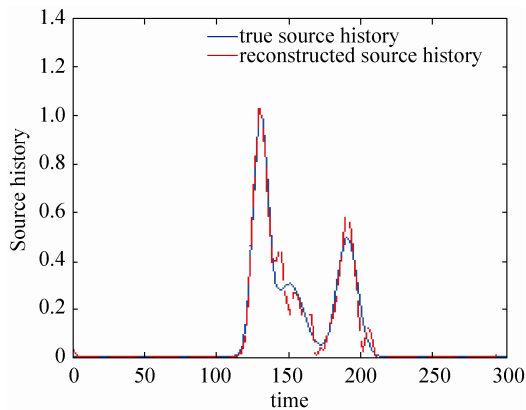
表 6 正则化对结果的影响

Run Number	C_{error}	$J[C]$
Run4	1.81E-03	2.03E-04
Run5	3.49E-03	3.12E-04

为了验证 QPSO 算法的稳定性, 案例 Run6 和 Run7 中使用带噪声的采样。重现后的污染源历史显示在图 7 中。表 7 列出相应的平均误差和目标函数值。从中注意到, QPSO 算法在使用带噪声的采样时, 也能够非常精确的重现污染源历史。



(a) Run6 测试结果(g/s)



(b) Run7 测试结果(g/s)

图 7 噪声对测试结果的影响

表 7 噪声误差对误差的影响

Run Number	C_{error}	$J[C]$
Run6	2.94E-03	7.66E-02
Run7	2.07E-03	0.29

PSO 和 GA 也用来测试表 8 中列出的案例。从表 9 和图 8-9 中, 可以看出, 由 QPSO 算法重现的污染源历史优于 PSO 和 GA。特别是, QPSO 在

处理噪声采样时, 鲁棒性比其他算法强。

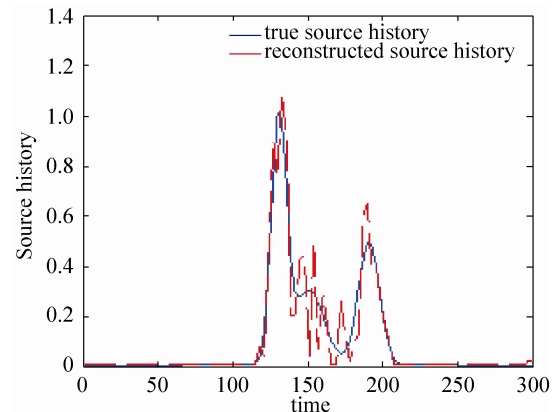
QPSO-PER 算法用于重现污染源历史(表 10)。结果显示在图 10 和表 11 中。可以看出, QPSO-PER 比其他算法提供了一个更好的污染源历史的重现结果。几个算法的收敛曲线如图 11 所示, 可以看出 QPSO-PER 和 QPSO 算法显示出更好的收敛速度。

表 8 PSO 和 GA 的测试案例

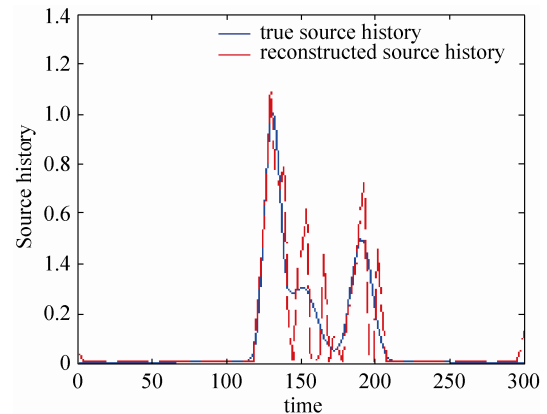
Run No.	算法	噪声(ϵ)
Run8	PSO	0.0
Run9	PSO	0.1
Run10	GA	0.0
Run11	GA	0.1

表 9 PSO 和 GA 求得的结果

Run No.	C_{error}	$J[C]$
Run8	7.59E-03	2.58E-03
Run9	1.02E-02	0.31
Run10	1.10E-02	0.32
Run11	7.10E-03	0.46

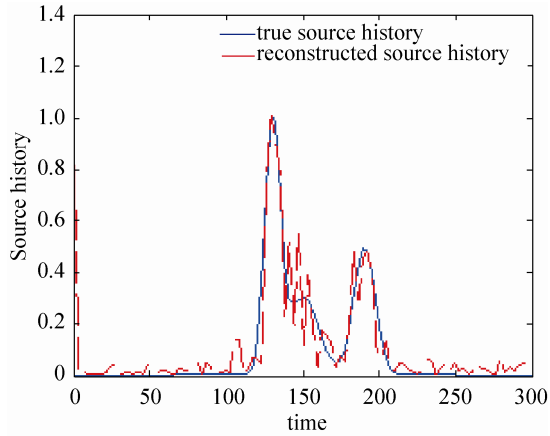


(a) Run8 测试结果(g/s)

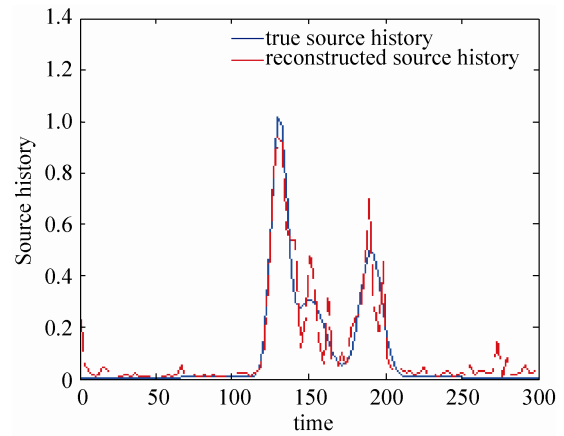


(b) Run9 测试结果(g/s)

图 8 PSO 算法重现污染源



(a) Run10 测试结果(g/s)



(b) Run11 测试结果(g/s)

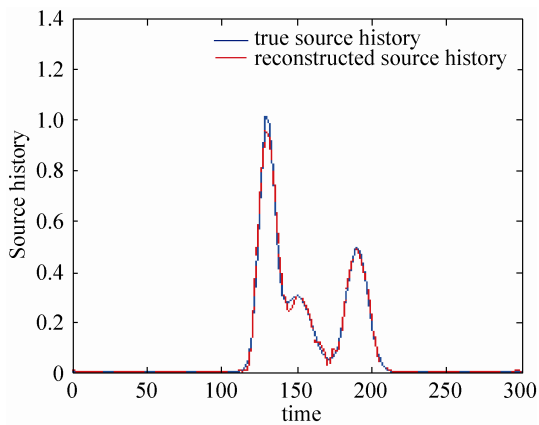
图 9 用 GA 重现污染源

表 10 QPSO-PER 的测试案例

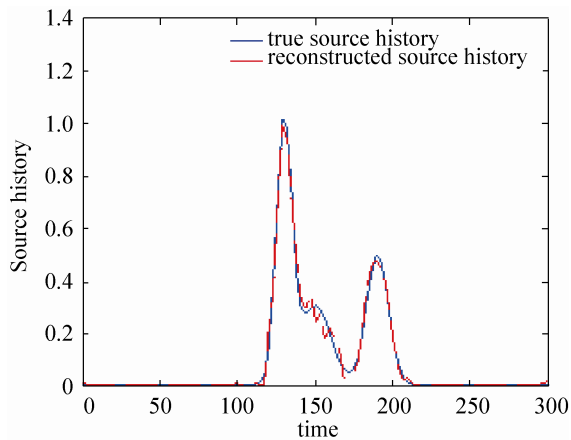
Run No.	算法	噪声/ ε
Run12	QPSO-PER	0.0
Run13	QPSO-PER	0.1

表 11 QPSO-PER 求得的结果

Run No.	C_{error}	$J[C]$
Run12	1.59E-03	1.89E-04
Run13	3.64E-03	0.28



(a) Run12(g/s)



(b) Run13(g/s)

图 10 用 QPSO-PER 重现污染源

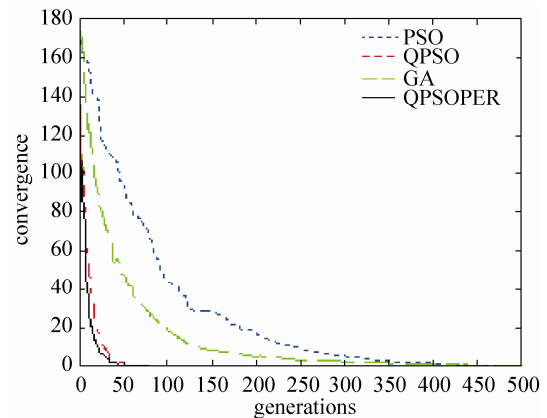


图 11 几种算法求解污染源反问题的收敛曲线

4 结论

我们提出了一种带扰动算子的 QPSO 算法 (QPSO-PER) 用于解决对流-扩散反问题的估计污染源函数。函数形式事先是未知的, 并且有多个峰值存在于函数中。数值实验结果表明, 几种算法均能收敛到最优或次优解, QPSO-PER 算法在处理噪声采样时比其他算法有更强的鲁棒性。

特别指出的是, 相比确定性方法(如 MRE), 随机性方法(如 QPSO), 避免了复杂的梯度计算, 并且能保证收敛到全局最优解。

参考文献:

- [1] P Sidauruk. Parameter determination for multi-layered aquifer and groundwater contaminant transport [D]. USA: University of Delaware, 1996.
- [2] S M Gorelick, B Evans, I Remson. Identifying sources of groundwater pollution: An optimization approach [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1983, 19(3): 779-790.
- [3] B J Wagner. Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modeling [J]. *Journal of Hydrology* (S0022-1694), 1992, 135(1/4): 275-303.
- [4] S Zou, A Parr. Estimation of dispersion parameters for two dimensional plumes [J]. *Ground Water* (S1745-6584), 1993, 31 (3): 389-392.
- [5] H T Skaggs, Z J Kabala. Recovering the release history of a groundwater contaminant [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1994, 30(2): 71-79.
- [6] H T Skaggs, Z J Kabala. Limitations in recovering the history of a groundwater contaminant plume [J]. *Journal of Contaminant Hydrology* (S0619-7722), 1998, 33(3/4): 347-359.
- [7] H T Skaggs, Z J Kabala. Recovering the history of a groundwater contaminant plume: method of quasi-reversibility [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1995, 31(11): 2669-2673.
- [8] A D Woodbury, T J Ulrych. Minimum relative entropy inversion: Theory and application to recovering the release history of a groundwater contaminant [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1996, 32(9): 2671-2681.
- [9] A D Woodbury, E Sudicky, T J Ulrych, R Ludwig. Three-dimensional plume source reconstruction using minimum relative entropy inversion [J]. *Journal of Contaminant Hydrology* (S0619-7722), 1998, 32(1/2): 131-158.
- [10] M F Snodgrass, P K Kitanidis. A geostatistical approach to contaminant source identification [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1997, 33 (4): 537-546.
- [11] N Z Sun. *Inverse Problems in Groundwater Modeling* [M]. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer, 1994.
- [12] C Liu, W P Ball. Application of inverse methods to contaminant source identification from aquitard diffusion profiles at Dover AFB, Delaware [J]. *Water Resources Research* (S1944-7973), 1999, 35(7): 1975-1985.
- [13] T V Bharat, P V Sivapullaiah, M M Allam. Accurate parameter estimation of contaminant transport inverse problem using particle swarm optimization [C]// *IEEE Swarm Intelligence Symposium*, St Louis, USA, 2008. USA: IEEE, 2008.
- [14] H X Long, J Sun, X G Wang, C-H Lai, W B Xu. Using selection to improve quantum-behaved particle swarm optimization [J]. *International Journal of Innovative Computing and Applications* (S1751-6498), 2009, 2(2): 100-114.
- [15] J Kennedy, R C Eberhart. *Particle swarm optimization* [C]// *IEEE Int. Conf. on Neural Networks*, Perth, Australia, 1995. USA: IEEE, 1995.
- [16] F Van den Bergh. *An analysis of particle swarm optimizers* [D]. South Africa: University of Pretoria, 2001.
- [17] J Sun, W B Xu, W Fang. *A diversity-guided quantum-behaved particle swarm optimization algorithm* [C]// *Simulated Evolution and Learning*, Hefei, China, 2006. Berlin, Germany: (Springer Berlin Heidelberg), 2006: 497-504.
- [18] J Sun, W B Xu, W Fang. *Quantum-behaved particle swarm optimization algorithm with controlled diversity* [C]// *ICCS*, Reading, UK, 2006. Berlin, Germany: (Springer Berlin Heidelberg), 2006: 847-854.
- [19] M Clerc. *The swarm and the queen: towards a deterministic and adaptive particle swarm optimization* [C]// *Proc Cong. on Evolutionary Computation*. Washington D C, USA: IEEE Press, 1999: 1951-1957.
- [20] R C Eberhart, Y Shi. *Comparing inertia weights and constriction factors in particle swarm optimization* [C]// *Proc. the IEEE Cong. on Evolutionary Computation*. San Diego, USA: IEEE Press, 2000: 84-88.
- [21] Y Shi, R C Eberhart. *Parameter selection in particle swarm optimization* [C]// *Proc. the Seventh Annual Conf. on Evolutionary Programming*, New York, USA. Berlin, Germany: Springer Berlin Heidelberg, 1998: 591-600.