

基于随机粒子群算法的 Van Genuchten 方程参数优化求解

陈大春, 马英杰

(新疆农业大学水利与土木工程学院, 乌鲁木齐 830052)

摘要: 使用随机粒子群算法拟合土壤水分特征曲线并以此求解出 Van Genuchten 方程参数。通过算例与其他优化算法比较, 结果表明: 随机粒子群算法具有运算速度快, 编程简单, 初值无关性, 全局收敛和计算精度高等优点, 可以作为计算 Van Genuchten 方程参数的新方法。

关键词: 粒子群算法; Van Genuchten 方程; 参数优化

中图分类号: S152.7

文献标识码: B

文章编号: 1002-6819(2006)12-0082-04

陈大春, 马英杰. 基于随机粒子群算法的 Van Genuchten 方程参数优化求解[J]. 农业工程学报, 2006, 22(12): 82- 85.

Chen Dachun, Ma Yingjie. Optimized algorithm for estimating parameters by solving Van Genuchten equation based on stochastic particle swarm optimization[J]. Transactions of the CSAE, 2006, 22(12): 82- 85. (in Chinese with English abstract)

0 引言

土壤水分特征曲线是反映水分和化学物质在非饱和土壤中运移的关键曲线。它定义了压力水头与土壤水分含量之间的函数关系, 并与水力传导率决定了水分和化学物质在土壤中的运移速度, 其可靠性直接影响着土壤水分运动模型的预测结果。土壤水分特征曲线是高度非线性的函数, 受到多种因素的影响, 准确测定这一关系非常困难。解析形式的水分特征曲线经验公式目前已得到广泛的应用, 这是因为这种形式的函数可根据有限的实测数据点估计完整的水分特征曲线, 便于在各种计算机模型中采用, 而且许多间接方法也是根据这些经验公式的参数与土壤基本性质之间的相关关系建立起来的。更为重要的是, 它可以结合统计的孔径分布模型来预测非饱和水力传导率^[1]。而在其中描述土壤水分运动曲线的 Van Genuchten 方程, 由于其线性与实测数据曲线相似, 而且参数意义明确, 因而有关研究中常以该方程描述土壤水分变化过程。然而, Van 方程的参数较多, 其参数拟合属于非线性拟合问题, 常规的线性处理和线性拟合方法难于实现。确定该方程参数的方法通常分为两类: 一类是通过试验方法获取土壤水分参数, 如邵明安等(2000)建立了推求非饱和土壤水分运动参数的简单入渗法, 用以推求 Van Genuchten 方程的参数 α 和 n ; 另一类是根据获取的土壤含水率和土壤水吸力的实测数据, 利用拟合方法求参数, 如王金生等(2000)^[3]将最小二乘法和非线性单纯形法相结合研究土壤持水曲线的滞留特征; 徐绍辉等(2000)^[4]借助于最小二乘法, 结合 Picard 迭代法拟合了砂质黏壤土持水曲线的 Van 方程参数; 李春友等(2001)^[5]将单纯形调优方法应用于 Van 方程参数的拟合问题; 马英杰等(2005)^[6]运用非线性阻尼最小二乘法拟合了 Van Genuchten 方程的参数。由于初值对拟合参数有较大的影响, 需要多次选择初值才可获得较为满意的拟合效果, 这是上述方法的局限所在^[2,5]。近年来, 模拟退火、遗传算法、粒子群算法等进化算法逐渐成为求解非线性问题的热点, 它们具有初值无关性, 可行域无要求及全局最优化等特点。与通常的进化算法相比粒子群算法是一类群体智能算法, 它只需很少的代码和参数, 但在各种问题的求解与应用中却展现了它的特点和魅力^[7]。基

于解决初值无关性和拟合精度考虑, 本文作者使用 Visual C++ 语言编写了随机粒子群算法 (SPSO), 并成功求解出该方程参数。与前述方法比较, 其计算精度高, 而且速度快。由于是群体智能优化方法, 彻底摆脱了初值对算法的干扰; 避开矩阵计算而不必担心最小二乘的病态方程问题。

1 基本粒子群算法及其求解过程

粒子群算法是在 1995 年由美国社会心理学家 James Kennedy 和电气工程师 Russell Eberhart^[8,9]共同提出的, 其基本思想是受他们早期对鸟类群体行为研究结果的启发, 并利用了生物学家 Frank Heppner 的生物群体模型^[7]。

粒子群算法与其他进化类算法相类似, 也采用“群体”与“进化”的概念, 同样也是依据个体(粒子)的适应值大小进行操作。所不同的是, 粒子群算法不像其他进化算法那样对于个体使用进化算子, 而是将每个个体看作是在 n 维搜索空间中的一个没有重量和体积的粒子, 并在搜索空间中以一定的速度飞行。该飞行速度由个体的飞行经验和群体的飞行经验进行动态调整。

设

$X_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}, \dots, x_{in})$ 为粒子 i 的当前位置;

$V_i = (v_{i1}, v_{i2}, v_{i3}, \dots, v_{in})$ 为粒子 i 的当前飞行速度;

$P_i = (p_{i1}, p_{i2}, p_{i3}, \dots, p_{in})$ 为粒子 i 所经历的最好位置, 也就是粒子 i 所经历过的具有最好适应值的位置, 称为个体最好位置。对于最小化问题, 目标函数值越小, 对应的适应值越好。

最优化问题描述为

$$\min(F) = f(X)$$

$$\text{s.t. } X \in S = \{X \mid g_i(X) \leq 0, i = 1, 2, \dots, m\}$$

则粒子 i 的当前最好位置由下式确定

$$P_i(t+1) = \begin{cases} P_i(t) & \text{若 } f(X_i(t+1)) \geq f(P_i(t)) \\ X_i(t+1) & \text{若 } f(X_i(t+1)) < f(P_i(t)) \end{cases} \quad (1)$$

设群体中的粒子数为 s , 群体中所有粒子所经历过的最好位置, 称为全局最好位置。则

$$P_g(t) \in \{P_0(t), P_1(t), \dots, P_s(t)\} \mid f(P_g(t)) = \min\{P_0(t), P_1(t), \dots, P_s(t)\} \quad (2)$$

有了以上定义, 基本粒子群算法的进化方程可描述为

$$V_i(t+1) = V_i(t) + c_1r_1(t)(P_i(t) - X_i(t)) + c_2r_2(t)(P_g(t) - X_i(t)) \quad (3)$$

$$X_i(t+1) = X_i(t) + V_i(t+1) \quad (4)$$

式中 下标 “ i ”——粒子 i ; t ——第 t 代; c_1, c_2 ——加速常数, 通常在 0~2 间取值, $r_1 \sim U(0, 1), r_2 \sim U(0, 1)$ 为两个相互独立的随机函数。

收稿日期: 2005-12-30 修订日期: 2006-05-12

基金项目: 新疆水利水电工程重点学科基金(XJZDXK2002-10-05)

作者简介: 陈大春(1973-), 男, 重庆人, 主要从事农田水利工程、智能算法研究。新疆乌鲁木齐市南昌路 42 号 新疆农业大学水利与土木工程学院, 830052。Email: vision_studio@sohu.com

从上述粒子进化方程可以看出, c_1 为调节粒子飞向自身最好位置方向的步长, c_2 为调节粒子向全局最好位置飞行的步长。为了减少在进化过程中, 粒子离开搜索空间的可能性, v_{ij} 通常限定于一定范围内, 即, $v_{ij} \in [-v_{max}, v_{max}]$ 。如果问题的搜索空间限定在 $[-x_{max}, x_{max}]$ 内, 则可设定 $v_{max} = k \cdot x_{max}$, $0.1 \leq k \leq 1.0$ 。

基本粒子群算法的流程如下:

step1, 依照初始化过程, 对粒子群的随机位置和速度进行初始设定;

step2, 计算每个粒子的适应值;

step3, 对于每个粒子, 将其适应值与所经历过的最好位置 P_i 的适应值进行比较, 若较好, 则将其作为当前的最好位置;

step4, 对每个粒子, 将其适应值与全局所经历的最好位置 P_g 的适应值进行比较, 若较好, 则将其作为当前的全局最好位置;

step5, 根据方程(3)(4)对粒子的速度和位置进行进化;

step6, 如未达到结束条件通常为足够好的适应值或达到一个预设最大代数 (G_{max}), 则返回 step2。

2 保证全局收敛的随机粒子群算法(PSO)^[7]

基本粒子群算法与其他进化计算方法相同都有早熟现象, 因此有许多专家一直探索改进办法, SPSO 就是其中应用较好的一种算法。在式(3)、(4)所描述的基本 PSO 算法中, 当 $w = 0$ 时, 微粒的飞行速度只取决于微粒的当前位置、历史最好位置和微粒群的历史最好位置, 速度本身无记忆性。这样, 对于位于全局最好位置的微粒将保持静止, 而其他微粒则趋向于它本身最好位置和全局最好位置的加权中心。进化方程化为

$$X_i(t+1) = X_i(t) + c_1r_1(P_i - X_i(t)) + c_2r_2(P_g - X_i(t)) \quad (5)$$

与基本 PSO 算法相比, (5) 式描述的进化方程使得全局搜索能力减弱, 而局部搜索能力加强。同时, 当 $X_j(t) = P_j = P_g$ 时, 第 j 个微粒将停止进化。为了改善上式的全局搜索能力, 可保留作为微粒群的历史最好位置, 而在搜索空间 S 重新随机产生微粒 j 的位置, 其他微粒 i 以(5) 式进化产生($i \neq j$), 则

$$P_i = \begin{cases} P_i & f(P_i) < f(X_i(t+1)) \\ X_i(t+1) & f(P_i) \geq f(X_i(t+1)) \end{cases} \quad (6)$$

$$P'_g = \min\{f(P_i) | i = 1 - S\}$$

$$P_g = \min\{f(P'_g), f(P_g)\}$$

若 $P_g = P_j$, 则随机产生的微粒 j 处于历史最好位置, 无法按(5) 式进化, 继续在搜索空间 S 随机产生, 其他微粒在更新 P_g, P_i 后按(5) 式进化; 若 $P_g \neq P_j$, 且 P_g 未更新, 则所有微粒均按(5) 式进化; 若 P_g 已更新, 即存在 $k \neq j$, 使得 $X_k(t+1) = P_k = P_g$, 则微粒 k 停止进化, 在搜索空间 S 重新随机产生, 其余微粒在更新 P_g, P_i 后按(5) 式进化。这样在进化的某些代, 至少有一个微粒 j 满足 $X_j(t) = P_k = P_g$, 也就是说, 至少有一个微粒需在 S 中重新随机产生, 这样就势必增强了全局搜索能力。为了与基本 PSO 算法相区别, 上述算法称之为随机 PSO 算法(SPSO)。可以证明当 $0 < c_1 + c_2 < 2$ 时, 算法的进化方程线性渐近收敛。

3 计算方法

描述土壤水分运动曲线的 Van Genuchten 方程形式为

$$\theta(h) = \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha|h]^m} \quad (7)$$

式中 θ ——土壤含水率, cm^3/cm^3 ; h ——土壤基质势, cm ; θ_r 、 θ_s ——土壤饱和含水率和残余含水率, cm^3/cm^3 ; α, n, m ——土

壤水分曲线参数, $m = 1 - 1/n (n > 1)$ 。

对于曲线拟合及优化求参, 通常使用误差函数来描述拟合状况。即

$$\min(F) = \sum_{i=1}^n |x_i - x_p|^k \quad (8)$$

式中 x_i ——实测的各个值($i = 1, 2, \dots, n$); x_p ——曲线上相应的值; n ——系列项数; k ——幂次。取 $k = 2$ 为最小二乘法, 取 $k = 1$ 为最小一乘法。这是目前常见的两种方法, 它们的结果常有明显的差异。据一些实例表明, 用最小二乘法拟合的曲线是通过点群中心, 而最小一乘法所得的曲线必然通过 3 个点(碰巧时可通过更多个点), 其结果偏向于所通过的点。

本文直接使用最小二乘法误差函数作为适应度函数, 即

$$\min(F) = \sum_{i=1}^N |\theta_1(h)_i - \theta_2(h, X)_i|^2 \quad (9)$$

式中 $\theta_1(h)_i$ ——实测土壤含水率, cm^3/cm^3 ; $\theta_2(h, X)_i$ ——根据 Van Genuchten 方程计算的土壤含水率, cm^3/cm^3 ; h ——实测土壤基质势, cm ; X ——粒子向量 $(\theta, \theta, \alpha, n)$, Van Genuchten 方程参数; N ——实测数据个数。

对实测 $h - \theta$ 数据, 上述函数成为决策变量 θ, θ, α 和 n 的函数, 即而原函数求参问题转化为非线性无约束优化问题。通过使用 SPSO 求解此优化问题, 就可以得出指定实测 $h - \theta$ 数据的 Van Genuchten 方程参数 θ, θ, α 和 n 。

4 实例计算

本文以文献[3]的实测资料作为本方法的计算原始数据, 并运用 Visual C++ 语言将上述过程进行了编程计算。采用均方误差 MSE 式(10) 作为模型拟合度评价指标。

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \hat{x}_i)^2 \quad (10)$$

SPSO 参数选择为: 粒子数 $n = 20$, 加速常数 $c_1 = 0.5, c_2 = 1.2$, 最大速度 $v_{max} = 1.0$, 最大迭代次数为 10000 次, 精度控制 $\epsilon = 10^{-6}$, 收敛准则以 1000 次不变为准。变量范围: $\theta, \theta, \alpha, m \in [0, 1]$, 变量初值 $\theta_s = \theta_r = \alpha = m = 0.01$ 。

计算结果如下表 1~5 所示。

表 1 不同方法确定的粉壤土 Van Genuchten 方程参数
Table 1 Clay loam Van Genuchten equation parameters in different methods

方法	α/cm^{-1}	$\theta_r/\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$	$\theta_s/\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$	n
文献[3]	0.013	0.053	0.363	4.241
文献[6]	0.014	0.053	0.363	4.197
SPSO	0.013	0.066	0.359	4.044

表 2 SPSO 计算的 Van Genuchten 方程参数
Table 2 Van Genuchten equation parameters calculated by SPSO

类型	$\theta_r/\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$	$\theta_s/\text{cm}^3 \cdot \text{cm}^{-3}$	n	α/cm^{-1}
粉壤土吸湿	0.352	0.063	5.336	0.013
粉壤土脱湿	0.359	0.066	4.044	0.013
细砂脱湿	0.378	0.085	4.450	0.015
细砂吸湿	0.374	0.082	4.965	0.015
砾石脱湿	0.274	0.060	3.065	0.023
砾石吸湿	0.269	0.057	3.441	0.023

表3 不同方法模拟 $h - \theta$ 数据与实测数据对比(一)

Table 3 Contrast data between measurement and different method simulations

类 型		基质势 h/cm									
		5	30	70	100	200	300	500	1000	1300	
粉壤土	脱湿	实测	0.363	0.347	0.279	0.165	0.095	0.081	0.069	0.059	0.054
		文献[3]	0.363	0.361	0.304	0.210	0.077	0.060	0.054	0.053	0.053
		SPSO	0.359	0.354	0.269	0.177	0.083	0.071	0.067	0.066	0.066
	吸湿	实测	0.362	0.340	0.269	0.141	0.082	0.069	0.061	0.056	0.053
		文献[3]	0.363	0.358	0.258	0.156	0.066	0.057	0.054	0.053	0.053
		SPSO	0.352	0.351	0.266	0.145	0.067	0.063	0.063	0.063	0.063

表4 不同方法模拟 $h - \theta$ 数据与实测数据对比(二)

Table 4 Contrast data between measurement and different method simulations

类 型		基质势 h/cm								
		10	50	100	200	400	800	1000	1300	
细砂	脱湿	实测	0.377	0.330	0.146	0.106	0.092	0.083	0.079	0.076
		文献[3]	0.380	0.318	0.160	0.087	0.073	0.070	0.070	0.070
		SPSO	0.378	0.328	0.150	0.092	0.086	0.085	0.085	0.085
	吸湿	实测	0.374	0.326	0.131	0.092	0.089	0.081	0.078	0.074
		文献[3]	0.380	0.325	0.136	0.077	0.071	0.070	0.070	0.070
		SPSO	0.374	0.325	0.132	0.085	0.082	0.082	0.082	0.082
砾石	脱湿	实测	0.272	0.173	0.093	0.074	0.066	0.061	0.059	0.057
		文献[3]	0.271	0.191	0.102	0.065	0.055	0.053	0.053	0.052
		SPSO	0.272	0.172	0.096	0.069	0.063	0.061	0.061	0.061
	吸湿	实测	0.268	0.167	0.081	0.069	0.062	0.056	0.054	0.052
		文献[3]	0.268	0.165	0.088	0.061	0.054	0.053	0.052	0.052
		SPSO	0.268	0.166	0.084	0.062	0.058	0.057	0.057	0.057

表5 不同方法的 MSE 对比($\times 10^{-6}$)Table 5 MSE contrast($\times 10^{-6}$) of different methods

	粉壤土脱湿		粉壤土吸湿		细砂脱湿		细砂吸湿		砾石脱湿		砾石吸湿	
	文献[3]	SPSO	文献[3]	SPSO	文献[3]	SPSO	文献[3]	SPSO	文献[3]	SPSO	文献[3]	SPSO
MSE	430.3	83.8	125.4	69.0	169.6	48.6	101.5	21.4	91.6	7.4	24.3	13.8

表1中,3种方法计算出的 Van Genuchten 方程参数, α 值差别不大,但后3个参数 SPSO 与文献[3]、[6]差别较大。从表3、4数据的拟合情况看,文献[3]对实测数据中部数值拟合较差,对 h 数值大的部分偏小。而从表5的 MSE 值可以直观地看出,文献[3]明显没有达到参数的最优估计。

SPSO 方法迭代计算收敛速度快(平均为0.2s左右),避免了困扰进化计算的早熟现象。笔者针对初值问题也作了部分实验,甚至于使用明显不合理的数据作为初值,该算法均能100%收敛到相同的计算结果。程序算法实现简单,适于推广使用。

5 结 语

从上述算例可以看出,使用随机粒子群算法求解 Van Genuchten 方程参数具有计算速度快,编程简单,对决策变量初值无关性等优点,全局最优化的计算结果也比其他几种优化方法的精度要高。当然,作为一种新的群体智能算法,它也有自身的一些局限性。相对于确定性优化技术来说,随机优化技术都需要人为地设置某些参数,如粒子数 n , 加速常数 c_1, c_2 和最大速度 v_{max} , 需要针对实际问题根据经验来确定。粒子群算法的数学基础对于遗传算法而言显得相对薄弱,缺乏深刻且具有普遍意义的理论分析。对不同搜索问题的收敛性、收敛速度估计、预防陷入局部最优值和参数设置影响等将是未来该算法进一步的研究方

向^[10]。

参 考 文 献

- [1] 刘建立,徐绍辉,刘慧.估计土壤水分特征曲线的间接方法研究进展[J].水利学报,2004,(2):68-76.
- [2] 邵明安,王全九,Horton R.推求土壤水分运动参数的简单入渗法[J].土壤学报,2000,37(1):1-8.
- [3] 王金生,杨志峰,陈家军,等.包气带土壤水分滞留特征研究[J].水利学报,2000,(2):1-6.
- [4] 徐绍辉,张家宝.求土壤水力特征的一种迭代法[J].土壤学报,2000,37(2):271-274.
- [5] 李春友,任理,李保国.利用优化方法求算 Van Genuchten 方程参数[J].水科学进展,2001,12(4):473-478.
- [6] 马英杰,虎胆,沈冰.利用阻尼最小二乘法求解 Van Genuchten 方程参数[J].农业工程学报,2005,21(8):179-180.
- [7] 曾建潮,崔志华.一种保证全局收敛的 PSO 算法[J].计算机研究与发展,2004,41(8):1333-1338.
- [8] Eberhart R C, Kennedy J. Particles swarm theory [A]. Proc. Sixth International Symposium on Micro Machine and Human Science [C]. Nagoya, Japan, 1995.
- [9] Kennedy J, Eberhart R C. Particle swarm optimization [C]. IEEE International Conference on Neural Network, Perth, Australia, 1995.

[10] 谢晓峰, 张文俊, 杨之康. 微粒群算法综述[J]. 控制与决策, 2003, 18 (2): 129- 134.

Optimized algorithm for estimating parameters by solving Van Genuchten equation based on stochastic particle swarm optimization

Chen Dachun, Ma Yingjie

(College of Water Conservancy and Civil Engineering, Xinjiang Agricultural University, Urumqi, Xinjiang 830052, China)

Abstract: Using stochastic particle swarm optimization, soil water characteristics curves were fitted and Van Genuchten equation parameters were solved. Comparing with other optimized algorithms through instance, it has many merits such as rapid calculation speed, simple programming, initial value non-sensitivity, general astringency and high precision, which can be used as a new method to calculate Van Genuchten equation parameters.

Key words: particle swarm optimization; Van Genuchten equation; parameter optimization