第 37 卷 第 3 期 力 学 学 报 Vol. 37, No. 3
2005 年 5 月 ACTA MECHANICA SINICA May, 2005

用同伦方法反演非饱和土中溶质迁移参数[1)]

崔 凯[*,2)] 杨国伟[*] 李兴斯[†] 李宝元[†]

[*](中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室，北京 100080)

[†](大连理工大学工程力学系，大连 116023)

摘要 非饱和土中溶质迁移参数反演问题可以归结为非线性算子方程的求解问题. 将同伦方法引入该问题的求解，通过构造线性同伦将原问题转化为求解同伦函数最小值的无约束优化问题. 同时在分析了同伦参数正则化效应的基础上，提出一种两段同伦参数修正方法. 即在求解的初始阶段，根据拟 Sigmoid 函数调整同伦参数，以追踪同伦路径，保证计算稳定地进行；在迭代的后期，采用与残差相关的同伦参数修正方法，以抵抗观测噪声对求解的影响. 数值算例为求解带有平衡及非平衡吸附效应的一维非饱和土中溶质迁移模型参数反演问题，计算结果表明了该方法的大范围收敛性及较强的抵抗观测噪声的能力.

关键词 参数反演，同伦方法，正则化，溶质迁移

中图分类号: O302, X53 **文献标识码**: A **文章编号**: 0459-1879(2005)03-0307-06

引 言

溶质在土壤及地下水中的迁移转化是一个十分复杂的物理化学过程，主要的控制机制包括对流、分子弥散、机械逸散、不动水效应、吸附及蜕变等 [1]. Nielsen 等 [2] 总结出了非饱和土中溶质传输的一般方程形式，该方程考虑了对流、扩散、吸附及源 / 汇项等，为研究溶质在土壤中的迁移规律奠定了很好的基础，但该模型的某些相关参数往往很难直接测得，需依据某些观测量，借助于数值反演方法来确定其参数值. 这就构成了土壤中溶质迁移的参数反演问题.

在求解土壤中溶质迁移参数反演问题的方法中，最优化方法是一种广泛使用的方法. 传统的非线性最小二乘法以及近年发展起来的启发式算法 (如模拟退火 [3]、遗传算法 [4] 等) 等在求解该类问题中均已得到应用. 非线性最小二乘法是较早用于求解参数反演问题的一种方法，Parker 和 van Genuchten[5] 曾基于这种方法，开发出一套分析一维溶质迁移问题的软件包 CXTFIT. 在非线性最小二乘法中，传统的 Gauss-Newton 法具有较快的收敛速度，但属于局部收敛算法，采用修正 Gauss-Newton 方法 (Hartley 方法) 及阻尼最小二乘法 (Levenberg-Marquardt 方法) 可以在一定程度上对此不足进行改进. 启发式算法利用转移概率来指导搜索，本质上属于随机搜索方法，虽然可能搜寻到全局最优解，但相对而言，该类方法计算效率较低.

同伦方法 [6,7] 是求解非线性问题的一种全局收敛方法. 该方法对于初始解的选取没有严格限制，并已在二维波动方程反问题 [8]、一维双相介质波动方程孔隙率反演 [9] 等问题中得到了成功应用. 本文以带有平衡及非平衡吸附效应的一维非饱和土中溶质迁移规律研究为背景，将同伦方法引入土壤中溶质迁移参数反演问题的求解，通过追踪同伦路径，在保证较高计算效率的同时，扩大了求解的收敛范围. 本文还分析了同伦方法的正则化效应，在综合考虑了计算效率及该方法抵抗观测噪声能力的基础上，提出一种两段同伦参数修正方法，即在求解的初始阶段，根据拟 Sigmoid 函数调整同伦参数，以追踪同伦路径，保证计算稳定而高效地进行；而在迭代的后期，采用与残差相关的同伦参数修正方法，以抵抗观测噪声对求解的影响. 数值结果表明，该方法收敛范围大，并具有很强的抵抗观测噪声的能力.

本文主要结构如下：第 1 节给出一维非饱和土中溶质迁移的数学模型及参数反演问题，以及应用同伦方法求解该问题的推导过程；第 2 节分析同伦参

2003–08–06 收到第 1 稿， 2004–08–09 收到修改稿.

1) 国家重点基础性研究发展规划资助项目 (G1999032805).

2) E-mail: karlcui@hotmail.com

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

数的正则化效应，并给出两段同伦参数修正方法；第 3 节应用同伦方法求解带有平衡及非平衡吸附效应的一维非饱和土中溶质迁移参数反演问题，并得到相应的数值结果；最后给出结论.

1 非饱和土中溶质迁移参数反演的同伦方法

当考虑平衡吸附及非平衡吸附效应时，一维非饱和土柱中溶质 (如重金属离子镉) 迁移规律的无量纲化方程可以表达为 [10]

$$K_{Cd}\rho\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\rho K_A\gamma(1-S_2)C-\rho K_B\gamma S_2=\frac{\partial}{\partial Z}\left(\theta\alpha v\frac{\partial C}{\partial Z}\right)-\frac{\partial(qC)}{\partial Z}\quad(0\le z\le L)\tag{1}$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t}=K_A(1-S_2)C-K_BS_2\quad(0\le z\le L)\tag{2}$$

$$C(0,t)=\begin{cases}1,\ 0\le t\le t_1\\ 0,\ t_1\le t\le t_2\end{cases}\quad(z=0)\tag{3}$$

$$\frac{\partial C(L,t)}{\partial z}=0\quad(z=L)\tag{4}$$

$$C(z,0)=0\quad(0\le z\le L)\tag{5}$$

其中 C 为溶质相对浓度，S_2 为溶质相对吸附浓度，α 为纵向弥散度，K_{cd} 为吸附系数，K_A 为沉淀速度，K_B 为裂解速度，γ 为相对最大沉淀量；均为无量纲参数. ρ 为干土样密度 (cm/g^3), θ 为饱和度 (体积含水率), ν 为液相流速 (cm/h), q 为达西流速 (cm/h), L 为土样长度 (cm), t_1 和 t_2 分别为加污及加水时间 (h). 若给定合适的相关参数值，方程 (1)~(5) 可以通过数值方法，如有限元法计算求解得到溶质在非饱和土柱出流边界的浓度.

方程 (1)~(5) 中，纵向弥散度 α, 吸附系数 K_{cd}, 沉淀速度 K_A, 裂解速度 K_B 和相对最大沉淀量 γ 很难通过实验直接测得，它们被作为待反演参数，以矢量 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ 表示，即 $\tilde{\boldsymbol{p}}=\{\alpha,K_{Cd},K_A,K_B,\gamma\}$. 给定参数 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ 的数值后，根据方程 (1)~(5) 计算求得出流端边界污染物浓度，用 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)$ 表示，它与 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ 存在非线性的依赖关系. 以 $\tilde{C}_E(t)$ 表示实际观测到的污染物出流端边界浓度，参数反演的目标为寻求到一组合适的参数 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ 的值，使得根据此组参数值由方程 (1)~(5) 计算得到的边界浓度值与观测得到的实验值吻合. 这样，非饱和土中溶质迁移的参数反演问题可以表达为如下非线性算子方程

$$L(\tilde{\boldsymbol{p}},t)=\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)-\tilde{C}_E(t)\|^2=0\tag{6}$$

依据同伦方法的思想 [6]，构造式 (6) 的线性同伦函数如下

$$H(\tilde{\boldsymbol{p}},t,\lambda)=(1-\lambda)\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)-\tilde{C}_E(t)\|^2+\lambda\|\tilde{\boldsymbol{p}}-\tilde{\boldsymbol{p}}^0\|^2\tag{7}$$

其中，λ 为同伦参数，$\tilde{\boldsymbol{p}}^0$ 为求解的初始值. 当同伦参数 λ 为 1 时，方程 (7) 的求解对应一个平凡问题，当 λ 为 0 时，方程 (7) 的解即对应方程 (6) 的解. 引入同伦函数后，原问题 (6) 的求解即转化为如下同伦方程的求解问题

$$H(\tilde{\boldsymbol{p}},t,\lambda)=(1-\lambda)\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)-\tilde{C}_E(t)\|^2+\lambda\|\tilde{\boldsymbol{p}}-\tilde{\boldsymbol{p}}^0\|^2=0\tag{8}$$

实际问题中不可避免地包含观测噪声，因此方程 (8) 一般不能精确满足. 由于同伦函数 $H(\tilde{\boldsymbol{p}},t,\lambda)\ge 0,\forall\lambda\in[0,1]$，故按最优拟合的原则，可以将方程 (8) 的求解转化为如下的无约束最优化问题

$$\min H(\tilde{\boldsymbol{p}},t,\lambda)=(1-\lambda)\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)-\tilde{C}_E(t)\|^2+\lambda\|\tilde{\boldsymbol{p}}-\tilde{\boldsymbol{p}}^0\|^2\tag{9}$$

将式 (9) 对 $\tilde{\boldsymbol{p}}$ 求一阶导数并令其为零，得

$$(1-\lambda)\frac{\partial\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)}{\partial\tilde{\boldsymbol{p}}}[\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}},t)-\tilde{C}_E(t)]+\lambda(\tilde{\boldsymbol{p}}-\tilde{\boldsymbol{p}}^0)=\boldsymbol{0}\tag{10}$$

采用迭代法求解方程 (10)，当迭代进行至第 n 步时，将第 $n+1$ 步计算得到的溶质边界浓度值在第 n 步计算得到的溶质边界浓度值附近展开为一阶 Taylor 级数，并略去高阶小量，得

$$\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1},t)=\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)+\left.\frac{\partial\tilde{C}}{\partial\tilde{\boldsymbol{p}}}\right|_n(\tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1}-\tilde{\boldsymbol{p}}^n)\tag{11}$$

将式 (11) 代入式 (10)，令 $\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}=\tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1}-\tilde{\boldsymbol{p}}^n$，并取 $\tilde{\boldsymbol{p}}^0=\tilde{\boldsymbol{p}}^n$，整理后，可得

$$(1-\lambda)\{\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}+\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}[\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)-\tilde{C}_E(t)]\}+\lambda\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{0}\tag{12}$$

式 (12) 中，$\boldsymbol{G}$ 为梯度阵，即 $\boldsymbol{G}=\partial\tilde{C}/\partial\tilde{\boldsymbol{p}}|_n$，可通过数值微分求得. 将式 (12) 整理后，可得采用同伦方法求解非饱和土中溶质迁移参数反演问题的迭代公式

$$\left.\begin{aligned}&[(1-\lambda)\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}+\lambda\boldsymbol{I}]\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}=\\&\qquad-(1-\lambda)\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}[\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)-\tilde{C}_E(t)]\\&\tilde{\boldsymbol{p}}^{n+1}=\tilde{\boldsymbol{p}}^n+\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}\end{aligned}\right\}\tag{13}$$

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

其中，$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵. 由式 (12) 可知，同伦函数的 Jacobian 满足正则性要求，根据路径定理 [6] 可知，同伦路径是存在的.

2 同伦参数的两段修正法

在追踪同伦路径时，各种预估 - 校正算法经常使用，如 Euler 预估 -Newton 校正算法 [6,9]，高阶插值预估 -Newton 校正算法 [6] 等. 本文参考人工神经元网络的传递函数，即 Sigmoid 函数 (或称 S 函数)

$$\lambda(N)=\frac{1}{1+\mathrm{e}^{-\beta(N_0-N)}} \tag{14}$$

提出一种连续化同伦参数的修正方法，如式 (14) 所示. 将该函数称为拟 Sigmoid 函数，如图 1 所示.

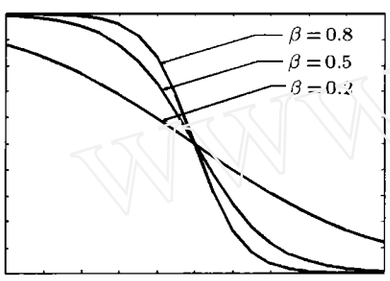


图 1　不同 β 下的拟 Sigmoid 函数曲线

Fig.1　Quasi-Sigmoid function with different β

式 (14) 中，N 为迭代步数，相应的 $\lambda(N)$ 为第 N 个迭代步时同伦参数的取值. β 为修正步长调整参数，若采用较大的 β 值，可以增大同伦参数的修正步长，加速求解的收敛速度，但 β 值过大可能会引起迭代的发散. N_0 为对应同伦参数预估初值的调整参数，该参数越大，则同伦参数的初始预估值越接近 1. 对于本文的问题，建议 β 取值介于 0.5~0.8 之间，N_0 建议选取为 1~5 之间的整数.

对于实际问题而言，观测量不可避免地会带有观测噪声，正则化方法 [11] 能在一定程度上达到抑制观测噪声的目的. 下面作者将分析同伦参数的正则化效应，进而对前面提出的连续化同伦参数修正方法加以改进，并提出两段同伦参数修正方法.

对于实际问题而言，其观测量不可避免地会带有观测噪声，即

$$\tilde{C}_E(t)=\tilde{C}_E(t)^*+\tilde{\sigma} \tag{15}$$

其中，$\tilde{\sigma}$ 为观测噪声，$\tilde{C}_E(t)^*$ 为不含噪声的观测真值.

将式 (15) 代入式 (12)，为表达简便，令 $\Delta\tilde{C}=\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)-\tilde{C}_E(t)^*$，整理得

$$[(1-\lambda)\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}+\lambda\boldsymbol{I}]\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}+(1-\lambda)\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}[\Delta\tilde{C}-\tilde{\sigma}]=\boldsymbol{0} \tag{16}$$

一般来说，矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为一长方形矩阵，对其做奇异值分解 (SVD)

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{U}\mathrm{diag}(s_i)\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{17}$$

其中，$\boldsymbol{U}$ 为左奇异向量构成的矩阵，$\boldsymbol{V}$ 为右奇异向量构成的矩阵，s_i 为按照下降顺序排列的奇异值，且有下列两式成立

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I},\qquad \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}=\boldsymbol{I} \tag{18}$$

$$\boldsymbol{G}\tilde{\boldsymbol{v}}_i=s_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i,\qquad \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{u}}_i=s_i\tilde{\boldsymbol{v}}_i \tag{19}$$

式 (19) 中，$\tilde{\boldsymbol{u}}_i$ 及 $\tilde{\boldsymbol{v}}_i$ 分别为第 i 个左、右奇异向量.

将式 (17)~(19) 代入式 (16)，整理可得

$$\sum_{i=1}^{m}[(1-\lambda)s_i^2+\lambda]\cdot\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}+\sum_{i=1}^{m}(1-\lambda)s_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i^{\mathrm{T}}(\Delta\tilde{C}-\tilde{\sigma})\tilde{\boldsymbol{v}}_i=\boldsymbol{0} \tag{20}$$

即

$$\Delta\tilde{\boldsymbol{p}}=\sum_{i=1}^{m}\frac{(1-\lambda)s_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i^{\mathrm{T}}\Delta\tilde{C}}{(1-\lambda)s_i^2+\lambda}\tilde{\boldsymbol{v}}_i-\sum_{i=1}^{m}\frac{(1-\lambda)s_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i^{\mathrm{T}}\tilde{\sigma}}{(1-\lambda)s_i^2+\lambda}\tilde{\boldsymbol{v}}_i \tag{21}$$

其中，m 为方阵 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}$ 的秩.

从式 (21) 可知，当不考虑观测噪声，即 $\tilde{\sigma}=0$ 时，逐步减小 λ 的取值，至其为 0 时，通过迭代将会使 $\|\Delta\tilde{C}\|\to 0$，从而保证反演得到的结果是准确的. 但反问题一般为不适定的，即奇异值 s_i 的某些分量非常小，乃至趋近于零，因而当考虑观测噪声时，如果取 λ 为 0，则式 (21) 右端的第 2 项将在方程右端绝对占优，从而造成解的不准确，甚至导致求解过程的发散. 正则化方法就是通过选取合适的正则化参数达到抑制观测噪声的目的. 从式 (21) 可以看出，在迭代结束时，若将同伦参数选取为一个合适的非零值，同样可以达到抑制观测噪声的目的，即同伦参数亦具有正则化效应.

在求解参数反演问题的迭代过程中，计算结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 总应该不断地向观测结果 $\tilde{C}_E(t)$ 靠近. 定义第 n 个迭代步中计算结果与观测结果之间残差 $\tilde{\eta}$ 的归一化强度为

$$\|\tilde{\eta}^n\|=\frac{(\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)\|-\|\tilde{C}_E(t)\|)^2}{\max\{\|\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)\|^2,\|\tilde{C}_E(t)\|^2\}} \tag{22}$$

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

由式 (22) 可知, $\|\tilde{\eta}^n\|$ 的取值必介于 [0,1] 之间, 而且, 随着迭代的不断进行, 计算结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 总应该不断地向观测结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 靠近, 因此 $\|\tilde{\eta}^n\|$ 的取值也应不断地向 0 逼近. 但由于实际观测误差的存在, 计算结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 不能完全与观测结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 重合, 而且观测误差越大, 计算结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 与观测结果 $\tilde{C}(\tilde{\boldsymbol{p}}^n,t)$ 间的计算残差也必然越大, 即计算残差 $\|\tilde{\eta}^n\|$ 与观测误差相关. 在此意义上, 可以选择同伦参数如下

$$\lambda^n = \|\tilde{\eta}^n\| \tag{23}$$

式 (14) 给出的连续化同伦参数修正方法和式 (22) 及式 (23) 给出的计算残差相关的同伦参数修正方法分别有着各自的优点及不足. 对于连续化的同伦参数修正方法而言, 同伦参数的下降是稳定而连续的, 这样可以保证稳定的跟踪同伦路径及迭代稳定的进行, 但由式 (14) 可知, 这种参数修正方法在迭代的后期, N 的取值越来越大, 同伦参数的变化也将变得十分缓慢, 因此会降低计算效率. 计算残差相关的同伦参数修正方法虽可以在存在观测噪声的情况下, 保证反演结果的准确性及较好的计算效率, 但同伦参数的修正仅与计算残差相关, 其变化是一种跳跃型的间断变化过程, 这又不能保证计算的稳定性. 因此综合前面的讨论, 本文提出两段同伦参数修正方法: 在反演迭代的初始阶段, 计算值与观测值之间的残差将远大于观测误差, 此时同伦参数修正的主要目的为追踪同伦路径, 故根据式 (14) 采用连续化同伦参数修正方法, 以保证迭代稳定而高效地进行. 当迭代进行到一定阶段, 同伦参数 λ 的数值下降到某一门限值 $\bar{\lambda}$ 后, 依据式 (23) 和 (24) 修正同伦参数, 以保证迭代结束时反演结果的准确性并提高反演计算的效率.

3 数值算例

反演计算时, 方程 (1)~(5) 中将可直接测得的实验参数 (模拟实验参数) 给定, 然后给定一组待反演参数 $\tilde{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{True}} = \{\alpha, K_{Cd}, K_A, K_B, \gamma\}^{\mathrm{True}}$ 的数值 (参数真实值), 采用有限元法求解方程 (1)~(5) 得到边界结果 (穿透曲线), 并在此计算结果上加入一定强度的随机噪声 (模拟观测噪声), 作为模拟实验结果, 并以模拟实验结果作为反演依据, 采用本文给出的同伦方法进行反演计算. 给定的模拟实验参数数值如表 1 所示, 其中 Δt 为模拟取样时间间隔 (h).

表 1 实验参数数值

Table 1 The value of experimental parameters

ρ/ (cm·g^{-3})	θ	v/ (cm·h^{-1})	q/ (cm·h^{-1})	L/ cm	t_1/ h	t_2/ h	Δt/ h
1.7476	0.2084	6.4093	1.3357	7.9	6.5	16.5	0.5

算例 1 取参数真实值 $\{\alpha, K_{Cd}, K_A, K_B, \gamma\}^{\mathrm{True}} = \{0.6835, 0.1154, 1.9298, 0.0026, 0.6037\}$. 随机噪声强度为 0, 即不引入观测噪声. 式 (14) 中, 修正步长调整参数 $\beta = 0.5$, 同伦参数预估初值调整参数 $N_0 = 1$, 同伦参数调整的门限值 $\bar{\lambda} = 0.05$. 迭代中止误差为 10^{-6}. 分别采用本文提出的同伦方法 (HM) 及非线性最小二乘法 (LS) 从不同的反演初值开始进行反演计算. 计算结果如表 2 所示.

表 2 不同初始值时的参数反演结果

Table 2 Numerical inversion results for different initial value of parameters

No.	Initial value						Inversed value					IT	Time/s
	α	K_{Cd}	K_A	K_B	γ		α	K_{Cd}	K_A	K_B	γ		
1	0.5	0.5	3.0	0.5	0.5	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	10	23.297
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.0026	0.6037	24	42.672
2	3.0	0.5	3.0	0.5	0.5	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	41	87.937
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.0025	0.6037	18	38.203
3	0.5	0.8	3.0	0.5	0.5	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	21	47.297
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.0025	0.6037	33	54.016
4	0.5	0.5	6.0	0.5	0.5	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	29	54.187
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	34	59.64
5	0.5	0.5	3.0	0.9	0.5	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	15	32.172
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.0025	0.6037	24	42.125
6	0.5	0.5	3.0	0.5	0.1	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	13	30.766
						LS	0.6835	0.1154	1.9298	0.0026	0.6037	24	42.656
7	3.0	0.8	10.0	0.9	0.1	HM	0.6835	0.1154	1.9298	0.00255	0.6037	37	87.406
						LS			——				

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net

表 2 中，IT 为迭代次数，Time 为计算时间 (s). 从表 2 可以看出，当待反演参数的任一参数求解初始值选取与真值距离较远时 (结果 No.2~No.7)，迭代仍能准确地收敛到正确的结果. 而采用非线性最小二乘方法时，则可能造成迭代的发散 (结果 No.7). 这说明了同伦方法具有大范围收敛性，对于求解初始值较难估计的实际问题较具有实用价值. 另外，除第 2 组结果外，采用同伦方法的计算效率均在不同程度上优于非线性最小二乘法. 该算例同时表明，当求解初始值与真值相差较远时，迭代次数将会相应地增加.

算例 2 选取参数真实值 $\{\alpha, K_{Cd}, K_A, K_B, \gamma\}^{\mathrm{True}} = \{0.6835, 0.1154, 1.9298, 0.0026, 0.6037\}$. 式 (14) 中，修正步长调整参数 $\beta = 0.5$, 同伦参数预估初值调整参数 $N_0 = 1$，同伦参数调整的门限值 $\bar{\lambda} = 0.3$. 迭代中止误差为 10^{-6}. 求解初值为 {0.5, 0.5, 3.0, 0.5, 0.5}. 在引入不同强度的模拟观测噪声条件下进行反演计算. 计算结果如表 3 所示.

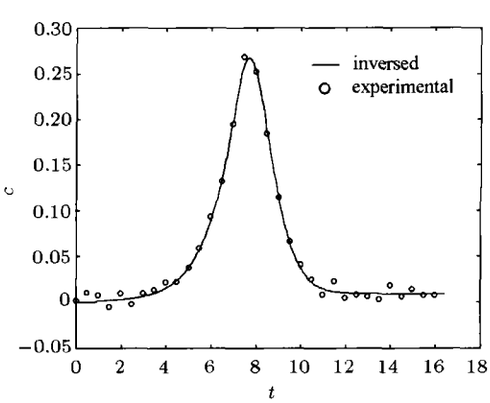
表 3 不同噪声强度下的反演结果

Table 3 Numerical inversion value for different noise level

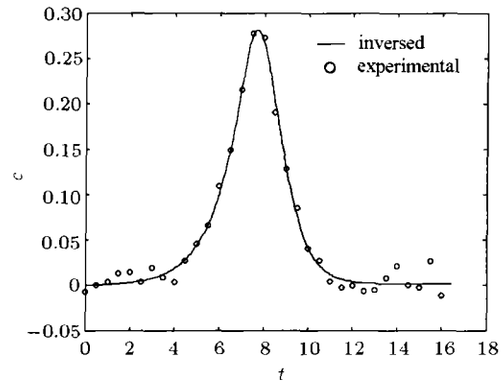
NA/%	Inversed results					IT	Time/s
	α	K_{Cd}	K_A	K_B	γ		
1	0.6532	0.1130	1.8786	0.0028	0.6021	10	23.375
2	0.6567	0.1151	1.8582	0.0028	0.6027	10	22.985
4	0.5877	0.1092	1.7918	0.0025	0.6003	11	25.14
8	0.6889	0.1199	1.8117	0.0004	0.5960	10	23.269

表 3 中，NA 为模拟观测噪声的相对强度，IT 为迭代次数，Time 为计算时间 (s).

不同模拟观测噪声强度下，根据表 3 所示的后两组反演结果计算得到的穿透曲线与模拟试验结果穿透曲线的拟合情况如图 2 所示.



(a) Relative noise level is 4%



(b) Relative noise level is 8%

图 2 反演穿透曲线与模拟实验穿透曲线的拟合情况

Fig.2 BTCs fitting between the inversed curves and simulated experimental curves

从算例 2 的计算结果可以看出，在存在较大观测噪声的情况下，采用同伦方法进行反演计算仍能收敛到一个较好的解点. 同时还可看出，在不同的观测噪声强度下，从同一求解初始点出发，至迭代收敛时所用的迭代步数基本相同.

4 结　论

从计算结果可以看出，即使求解初值与参数真实值距离较远，采用同伦方法求解仍能收敛到正确的解点，这说明同伦方法具有很大的收敛范围. 由于采用了两段同伦参数修正方法，使得该方法亦具有较好的抑制观测噪声能力及计算效率. 但同时也能看出，在求解初值与参数真实值距离较远的条件下，收敛相对缓慢. 如何在保证该方法抵抗观测噪声能力的前提下，更加有效地修正同伦参数，从而选择相对最优的同伦路径，以进一步提高计算效率，将是一个值得继续研究的问题.

参　考　文　献

1 李锡夔，饱和 - 非饱和土壤中污染物运移过程的数值模拟. 力学学报，1998, 30(3): 321~331 (Li Xikui. Numerical modeling of pollutant transport in unsaturated/saturated soils. *Acta Mechanica Sinica*, 1998, 30(3): 321~331 (in Chinese))

2 Nielsen DR, van Genuchten M Th, Biggar JW. Water flow and solute transport process in the unsaturated zone. *Water Resources Research*, 1986, 22(9): 895~1085

3 Li L, Barry DA, Morris JC, et al. Cxtanneal: An improved program for estimating solute transport parameters. *Environmental Modelling & Software*, 1999, 14: 607~611

4 Giacobbo F, Marseguerra M, Zio E. Solving the inverse problem of parameter estimation by genetic algorithms:

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved.　http://www.cnki.net

the case of a groundwater contaminant transport model. *Annals of Nuclear Energy*, 2002, 29: 967~981

5 Parker JC, van Genuchten M Th. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. 1984, Vir Agric Ex Stat Bull 84-3. Vir Poly Inst and State Univ, Blacksburg

6 王宇. 计算机优化同伦算法. 大连: 大连海事大学出版社, 1996 (Wang Yu. Homotopy Optimization Algorithm Via Computer. Dalian: Dalian Marine University Press, 1996 (in Chinese))

7 王则柯, 高堂安. 同伦方法引论. 重庆: 重庆出版社, 1990 (Wang Zeke, Gao Antang. Introduction of Homotopy Method. Chongqing: Chongqing Press, 1990(in Chinese))

8 韩波, 肖德山, 刘家琦. 二维波动方程反问题的一种大范围收敛方法. 哈尔滨工业大学学报, 1995, 27(5): 1~5 (Han Bo, Xiao Deshan, Liu Jiaqi. A widely convergent method for solving the inverse problem of two-dimension wave equation. *Journal of Harbin Institute of Technology*, 1995, 27(5): 1~5 (in Chinese))

9 韩华, 章梓茂, 汪越胜等. 双相介质波动方程孔隙率反演的同伦方法. 力学学报, 2003, 35(2): 235~239 (Han Hua, Zhang Zimao, Wang Yuesheng, et al. Homotopy method for inversing the porosity of 1-D wave equation in porous media. *Acta Mechanica Sinica*, 2003, 35(2): 235~239 (in Chinese))

10 Li Baoyuan, Zhu Zhaohui, Zhang Aixiang, et al. The experimental study on the transport of Na^+ and C^{++} in unsaturated soil. In: Proceeding of Second International Conference on Unsaturated Soils Vol I, International Academic Publishers, 575~580

11 Tikhonov A, Arsenin V. Solutions of Ill-posed Problems. John Wiley & Sons, Inc, 1977

A HOMOTOPY METHOD FOR PARAMETER INVERSION OF SOLUTE TRANSPORT THROUGH UNSATURATED SOILS [1)]

Cui Kai*,2) Yang Guowei* Li Xingsi† Li Baoyuan†

*(*Key Lab. of High Temperature Gas Dynamics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100080, *China*)

†(*Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian* 116023, *China*)

Abstract Parameter inversion of solute transport inside unsaturated soils was generally solved through a nonlinear operator equation. In this paper, we propose a homotopy method to deal with this problem. The original problem is finally transformed into an unconstrained optimization problem of minimizing the homotopy function. Considering the regularization effect of homotopy parameter, we adopt a two-step update scheme of homotopy parameter. In the early stage, a quasi-sigmoid method is used to assure the stability of computation, while in the later stage, the calibration of the homotopy parameter is governed by the computational residuals in order to compensate the error of observed data. Problems of parameter inversion of solute transport coupled with equilibrium and non-equilibrium effects through one-dimensional unsaturated soils are carried out as numerical examples and the computational results clearly demonstrate the feature of global convergence of the homotopy method. Moreover, even though experimental quantities are contaminated heavily by noise, a favorable solution is still obtained.

Key words parameter inversion, homotopy methods, regularization, solute transport

Received 6 August 2003, revised 9 August 2004.

1) The project supported by the National 973 Foundation of China (G1999032805).

2) E-mail: karlcui@hotmail.com

© 1994-2008 China Academic Journal Electronic Publishing House. All rights reserved. http://www.cnki.net