

# 整合最佳控制理論與類神經網路於地下水管理規劃

## 目錄

目錄.....	IV
表目錄.....	VI
圖目錄.....	VII
第一章 前言 .....	1
1.1 研究目的 .....	3
1.2 文獻回顧 .....	3
1.2.1 最佳化地下水管理模式 .....	3
1.2.2 應用類神經網路於地下水管理.....	4
1.2.3 應用微分動態規劃於地下水管理 .....	6
1.3 模式主體架構.....	8
第二章 模式定義.....	12
2.1 地下水流與污染傳輸控制方程式.....	12
2.2 地下水水量管理規劃模式 .....	16
2.3 地下水污染整治規劃模式 .....	18
第三章 演算法整合與說明.....	20
3.1 整體演算流程概述 .....	20
3.2 類神經網路於地下水流及水質之長期動態預測 .....	23
3.3 系統轉換函數微分之推導 .....	26
3.4 ANN-CDDP 之演算流程 .....	28
3.5 ANN-CDDP 計算效率改善的原因 .....	33
第四章 地下水流及水質類神經網路模式建構.....	35
4-1 類神經網路模式建構流程 .....	35
4.2. 類神經網路模式建立與驗證 .....	39
4.2.1 類神經網路模式架構.....	40
4.2.2 觀測井位置及數量對類神經網路預測之影響 .....	52
4.2.3 抽水型態對類神經網路預測之影響.....	60
4.3 類神經網路微分式之驗證 .....	63

第五章 管理模式之規劃應用 .....	67
5.1. 地下水水量管理規劃模式 .....	67
5.1.1 需水型態之影響分析 .....	67
5.1.2 總需求量之影響分析 .....	75
5.1.3 背景流場之影響分析 .....	79
5.1.4 計算效率比較 .....	81
5.2 地下水污染整治規劃模式 .....	85
5.2.1 簡例驗證 .....	85
5.2.2 計算效率比較 .....	93
5.2.3 大尺度案例之考量 .....	97
第六章 結論與建議 .....	101
附錄 .....	
附錄 A 類神經網路 .....	105
附錄 B 微分動態規劃理論 .....	115
附錄 C 資料分析 .....	135
附錄 D 參考文獻 .....	138



## 表目錄

表 3.1	CDDP 計算量估計.....	3-14
表 4.1	測試案例 1 之水位均方根誤差 .....	46
表 4.2	測試案例 1 之濃度均方根誤差 .....	47
表 4.3	隱藏層層數神經元個數之敏感度分析 .....	51
表 4.4	測試案例 2 說明 .....	53
表 4.6	測試案例 2-1 及 2-2 之相關性分析.....	57
表 4.7	測試案例 2-1 及 2-2 之敏感度分析.....	59
表 4.8	測試案例 3 之水位與濃度均方根誤差 .....	62
表 5.1	模擬含水層之參數 .....	68
表 5.2	案例 1 操作成本現值之比較 .....	71
表 5.3	案例 2 操作成本現值之比較 .....	75
表 5.4	案例 3 操作成本現值之比較 .....	80
表 5.5	案例 4 之節點與元素 .....	82
表 5.6	案例 4 操作成本與計算時間之比較 .....	83
表 5.7	模擬含水層之參數 .....	86
表 5.8	案例 5 操作成本之比較 .....	89
表 5.9	案例 6 之節點與元素 .....	93
表 5.10	案例 6 操作成本與計算時間之比較 .....	95
表 5.11	案例 7 操作成本與計算時間比較.....	98
表 5.12	每次迭代平均計算時間之比較(狀態變數數目 n=91 與 n=364) .....	99

## 圖目錄

圖 3.1	模式演算架構示意圖.....	20
圖 3.2	模式建置流程圖.....	22
圖 3.3	ANN 網路架構圖(訓練階段).....	24
圖 3.4	ANN 模式架構圖(預測階段).....	24
圖 3.5	ANN-CDDP 之演算流程.....	29
圖 4.1	ANN 模式之建立.....	37
圖 4.2	地下水類神經模式長期動態預測流程圖.....	38
圖 4.3	簡化之地下水流區域示意圖.....	40
圖 4.4	地下水單個類神經網路模式.....	42
圖 4.5	地下水類神經網路群模式.....	44
圖 4.6	測試案例 1 配置圖.....	46
圖 4.7	測試案例之時變抽水量.....	46
圖 4.8	測試案例 1 水位、濃度趨勢比較圖(類神經網路群).....	48
圖 4.9	測試案例 1 水位、濃度預測與實際值比較(類神經網路群).....	49
圖 4.10	測試案例 2 配置圖.....	52
圖 4.11	測試案例 2-5 水位與濃度趨勢圖.....	55
圖 4.12	案例 3 各個時刻抽水量.....	60
圖 4.13	測試案例 3 井 2 水位與濃度趨勢比較圖.....	61
圖 4.14	$y-x$ 圖.....	64
圖 4.15	$dy/dx-x$ 圖.....	64
圖 4.16	$y-x_1$ 圖.....	65
圖 4.17	$\partial y/\partial x_1-x_1$ 圖.....	66
圖 5.1	案例 1 簡化之地下水流區域示意圖.....	69
圖 5.2	案例 1 & 2 井網配置圖.....	70
圖 5.3	需水歷線圖.....	70
圖 5.4	案例 1 ANN-CDDP 所求得之觀測井水位歷線.....	73

圖 5.5 案例 1 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量.....	74
圖 5.6 案例 2 ANN-CDDP 所求得之觀測井水位歷線圖.....	77
圖 5.7 案例 2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量圖.....	78
圖 5.8 案例 3 井網配置圖 .....	79
圖 5.9 案例 3 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量及水位圖.....	80
圖 5.10 案例 4 井網配置圖 .....	82
圖 5.11 每次迭代計算時間之比較.....	84
圖 5.13 案例 5 簡化之地下水流區域示意圖 .....	87
圖 5.14 未經整治情況下，五年後污染物之擴散情形圖 .....	87
圖 5.15 案例 5 井網配置圖 .....	89
圖 5.16 案例 5-1ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量.....	89
圖 5.17 案例 5-1ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況.....	90
圖 5.18 案例 5-1 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況 .....	90
圖 5.19 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量 .....	91
圖 5.20 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況 .....	91
圖 5.21 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況 .....	92
圖 5.22 案例 6 井網配置圖 .....	94
圖 5.23 模式每次迭代平均計算時間比較 .....	96
圖 5.24 案例 7 初始污染團位置及井網配置圖 .....	98
圖 5.25 案例 7ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量 .....	99
圖 5.26 案例 7 ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況.....	100
圖 5.27 案例 7 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況.....	100

## 一、前言

根據聯合國 2006 年人類發展報告中指出，未來 2025 年全球 79 億人口將有 30 億人口生活在水資源匱乏地區。雖然台灣的水文條件年平均降雨量約 2,510 公釐，約為世界平均值之 2.6 倍，但由於台灣地區人口稠密及面積狹小，使得每人每日平均的雨量分配只為世界平均值之七分之一，以致於有缺水疑慮，而且雨量在時間及空間上之分佈極不均勻，台灣地區五月至十月之雨量即佔全年之 78%，枯水期長達六個月，再加上河川坡陡流急，因此逕流量被攔蓄利用的僅佔年總逕流量之 18%，其餘均奔流入海，因此造成很大的缺水風險。尤其近年來全球暖化造成氣候變異性提高，以及台灣地區工業及電子高科技產業發達，用水結構與需水量隨著產業結構之變遷有所變化，為了因應這些改變，台灣地區的水資源更加需要妥善的規劃管理。在水資源中，地下水為一非常重要之天然資源，其含量佔地球表面淡水總量(不包含兩極)的 90% 以上，它由於儲存於地下，少受污染水質潔淨，可提供人類的飲用水，植物的生長，工業的需求，當地表水不足時，地下水就成為彌補地表水資源不足之補充水源，並且可視之為一地下水庫，成為重要水資源的來源之一。

水利署指出台灣目前(2005)的地下水年總抽用量約 56 億立方公尺，約佔總用水量的三分之一。雖然地下水之含量極為豐富，然而由於地下水之循環速度極為緩慢，且補注不易，當超抽地下水，得不到充分補注時，常常導致儲存量減少，並帶來各種危害，造成地層下陷、海水入侵、土地鹽化，且往往這種傷害是無法回復的，直到目前為止台灣發生地層下陷之地區面積已超過一千平方公里，約佔台灣平地面積十分之一以上，嚴重地層下陷區主要集中在雲林縣、彰化縣、嘉義縣、台南縣以及屏東縣等縣市。此外，隨著工業之發展，地下水之污染事件時有所聞，如地下油品儲存槽年久失修破裂、垃圾掩埋場滲漏等，台灣首批公告土壤及地下水污染整治場址共有三地，分別是台南縣的「中石化安順廠」、高雄的「中油高雄煉油廠 P37 油槽區」及桃園縣的「RCA 廠」(環保署 2004 年)。這些廠址面臨地下水污染，需要污染整治，其所需花費之金錢將非常龐大，且非一朝一夕可完成整治之目的，所以政府對於地下水污染事件相當重視，於 2001 年三讀通

過「土壤及地下水污染整治法」，經由政府向石化及農藥等相關產業課稅籌措經費，作為未來污染場址的整治基金。

為避免上述之地下水資源相關問題，使得地下水資源能永續利用，良好的規劃管理乃是不可或缺。就技術層面而言，模式分析乃是規劃管理過程中，一個釐清問題提供決策輔助的重要的步驟，而地下水資源相關規劃與管理問題所應用的模式，大致可分為單純的模擬模式與最佳化管理模式兩大類，模擬模式是對問題所涵蓋之系統行為作一描述，仍要經過管理者多次試誤才能得到較佳的管理方案；而最佳化管理模式則整合優選法和模擬模式，可在設定範圍內，進行搜尋而得到最佳解。從管理者的角度來看，最佳化管理模式提供比較多的資訊，但是其計算量隨著問題的增大而遽增，限制了實際案例的應用，因此若能降低最佳化管理模式的計算量，增加其使用價值，對於地下水管理將有莫大的幫助。



## 1.1 研究目的

爲了發展兼具計算效率與精度要求之地下水管理模式，本研究整合類神經網路(Artificial Neural Network, ANN)與最佳化理論(Optimization Theory)，發展新的演算架構應用於地下水管理，以微分動態規劃(Constrained Differential Dynamic Programming, CDDP)爲最佳化理論，嵌入類神經網路作爲地下水流與污染傳輸之模擬預測，而不是如傳統規劃模式般直接嵌入數值模式於其中。此新發展的演算架構兼顧到準確性與大量降低計算量，因此可應用於實際地下水管理案例的規劃。

## 1.2 文獻回顧

### 1.2.1 最佳化地下水管理模式

以最佳化理論爲基礎之地下水管理模式之研究有: Gorelick and Voss (1984) 結合非線性規劃(Nonlinear Programming, NLP)與模擬模式，解決地下水污染整治之規劃問題; Jones et al., (1987)應用限制型微分動態規劃(CDDP)於非拘限含水層之水量管理; Chang and Shoemaker (1992)應用限制型微分動態規劃求解受污染之地下水層之最佳動態整治策略; MicKinney and Lin (1995)應用混合整數非線性規劃(Mixed-integer Nonlinear Programming, MINLP)於地下水污染整治問題上; Huang and Mayer (1997)採用遺傳演算法(Genetic Algorithm, GA)來搜尋地下水污染整治中的最佳抽水率及設井位置; Zheng and Wang (1996)利用兩種啓發式演算法，包含禁忌搜尋法(Tabu search, TS)及模擬退火演算法(Simulated Annealing, SA)來求解地下水質參數檢定之問題; Randall et al.(1997)以混合整數線性規劃(Mixed-integer Linear Programming, MILP)建立多標的之地表地下聯合營運模式，與地下水相關之操作則是在目標函數求抽水量最小及在限制式加入最大補注量; Hsiao and Chang (2002), Chang and Hsiao (2002)針對離散型變數、非線性及動態等問題，提出結合限制型微分動態規劃(CDDP)與遺傳演算法(GA)之演算架構，發揮兩演算法的優點，可同時考量包含固定成本及動態操作成本之最佳總成本。Yang et al.(2007)亦以微分動態規劃與遺傳演算法建立多目標地表地下聯合營

運之優選模式，處理整體水資源系統規模(固定成本)與營運目標(如缺水及其影響)間之競爭關係。

上述的地下水管理模式大多直接結合模擬模式與最佳化模式，稱為模擬-最佳化(Simulation-Optimization)模式，其架構的外層是一最佳化模式，內層為地下水模擬模式。Gorelick (1983)曾探討地下水模擬模式如何與最佳化模式整合，而區分為嵌入法(Embedding Method)與反應矩陣法(Response Matrix Method)。嵌入法乃直接將以有限差分或有限元素法所得之數值模式嵌入最佳化模式之中，當成最佳化模式之限制條件，其變數包含有每一個節點之水位或抽水井之抽水量。嵌入法對於小區域之問題可獲得精度較高之解答。然而當面對大區域之問題時，將每個數值格網點上每一時刻之狀態變數納入限制條件，則會有變數過多而難以求解之困難。

另一種整合的方式為反應矩陣法，反應矩陣法假設某一抽水井之抽水量與水位之洩降具有線性關係，若已知任一口抽水井抽取一單位地下水所造成之水位洩降量，則可應用疊加原理獲得抽水後地下水位之變化情況。反應矩陣法中之變數較嵌入法少，因此可節省記憶體需求及計算時間，故可應用於大區域之地下水最佳化模式中。Basagaoglu and Marino (1999)處理地表地下聯合營運時，建立河川與含水層之交換量，抽水量與地下水位之反應矩陣，作為地表與地下系統之聯結，然而整個問題所有方程式均為線性之假設，當遭遇非線性系統(如非拘限含水層)時，則無法直接應用，在抽取非拘限含水層之地下水的情況下，反應矩陣法將無法確切的反應其特性。

為了兼顧計算效率與克服非線性之限制，本研究將利用類神經網路嵌入最佳化模式中，以反應地下水流與污染傳輸之物理機制。類神經網路除了可以描述非線性系統，較嵌入法節省計算時間，比起傳統數值模式，類神經網路建模時不需要輸入系統內部的參數如水文參數等，直接以觀測資料來建模，使得建模很有效率，故近年來類神經網路常併入最佳化模式中。

### 1.2.2 應用類神經網路於地下水管理

近年來，人工智慧如類神經網路與模糊理論等已被成功的應用於水資源管理上(黃義銘(1996)；羅建洲(2002)；Chang and Chang(2001)；張雅婷(2006))，其中類神經網路可同時處理大量資料，且具有優越的非線性映射能力可處理如預測、

分類等問題。類神經網路類似人類神經結構的一個平行計算模式，是「一種基於腦與神經系統研究，所啓發的資訊處理技術」，它可以利用系統的輸入與輸出所組成的資料，建立系統模型。

經過數十年的發展，類神經網路已經普遍應用在各個領域，亦有多位學者應用類神經網路於地下水管理，如 Rogers and Dowla(1994)結合類神經網路(ANN)與遺傳演算法(GA)於地下水污染整治規劃，其整治方式為抽水處理，此研究以遺傳演算法優選抽水井位置，以類神經網路學習設井位置與整治成果之間的關係，再藉由類神經網路檢驗此設計井網是否可滿足整治標準。該研究的目標函數為總抽水量最小，但是各井各時刻的抽水量為固定值且須事先給定，其研究之優選結果與傳統的模擬-最佳化模式之結果一致，驗證類神經網路應用於地下水污染整治之可行性。同樣的，Aly and Peralta(1999)結合類神經網路(ANN)與遺傳演算法(GA)於地下水污染整治規劃，利用遺傳演算法優選非時變(每個時刻抽水量相同)的抽水量，但由於抽水量與污染濃度關係複雜且非線性，難以簡單線性函數描述，該研究以類神經網路學習抽水量與污染濃度之關係，判斷整治後的濃度是否達到整治標準，研究結果發現類神經網路的預測結果準確度高，但是類神經網路只能預測最終時刻的濃度，無法預測所有時刻的濃度，因此整治系統的操作策略無法隨時做調整，容易造成總成本的高估。

Rao et.al(2003)結合類神經網路(ANN)及模擬退火演算法(SA)，發展新的演算架構：類神經網路-模擬退火演算法(ANN-SA)於印度(India)東岸臨海含水層管理，以類神經網路取代海水入侵模擬模式(SHARP)模擬抽水量與地下水、海水水位變化之間對應的關係，以適切管理地下水含水層，避免海水入侵之問題產生，研究結果顯示內嵌類神經網路的架構，當研究區域範圍擴大時，類神經網路學習資料的維度仍然固定，使得此管理模式的計算量不會劇烈增加。Rao et.al (2005)利用相同的架構(ANN-SA)於海岸三角洲，管理臨海含水層以避免地下水鹽化，其研究中亦以類神經網路取代地下水流-海水入侵模擬模式(SEAWAT)，該類神經的輸入值為各時刻抽水量，輸出值為管理時期末之氯鹽濃度(chloride concentrations)，但是礙於計算量的因素，此研究利用模擬退火演算法僅優選四個時刻的抽水量。

嚴格而言，以上這些關於類神經網路的研究並未優選動態的抽水量，因此本

研究將利用微分動態規劃的特性以解決動態地下水管理及污染整治之問題，期望能反映真實的操作系統。另一方面，本研究應用類神經網路於動態預測，動態預測則是類神經網路根據各時刻狀態及決策變數，預測下一時刻之狀態，所預測的狀態將作為後續時刻動態預測的輸入之用，僅在第一個時刻將初始狀態輸入，後續各時刻則由前一個時刻預測後自動代入(Diaz et al. (2001); Coppola et al. (2003))。Coppola et al. (2003)曾採用坦帕灣當地地下水含水層實際水文資料來訓練類神經網路，並以訓練好之類神經網路來進行水位動態預測，發現可以運用於短期之地下水位預測，但就長期規劃而言地下水位的預測仍需要其他數值模式加以協助；黃浚璋(2005)以地下水數值模式(MODFLOW)產生資料訓練類神經網路，傅怡釧(2006)以地下水數值模式MODFLOW與湖泊模組(LAK2)模擬產生湖水與地下水交互作用之相關資料，並以其訓練並驗證類神經網路，發現類神經網路具有高計算效率與描述非線性反應的能力。

為了在兼顧地下水系統模擬的精確度與計算效率雙重考量下，本研究亦以地下水數值模式產生資料訓練類神經網路，在給定抽水量下，驗證以類神經網路進行長期預測地下水位變化之可行性。然而，上述類神經網路只能動態預測地下水流，本研究希望將類神經網路之動態預測擴展到地下水流與汙染傳輸方面。

### 1.2.3 應用微分動態規劃於地下水管理

前述結合類神經網路與遺傳演算法或是退火演算法等之地下水管理模式(Rogers and Dowla(1994); Aly and Peralta(1999); Rao et.al(2003; 2005))，大都侷限於穩態之情形，雖然這些演算法可考慮時變之系統，然由於它必須對問題之解題範圍離散化，若應用於時變之系統時，將會產生需要求解之變數過多之情形，將產生維度困擾，因此本研究應用微分動態規劃於地下水管理。

主要由於水資源系統為時變特性，因此任何模擬或最佳化模式必須是動態的，才可得到令人滿意的結果，對於地下水水量管理問題而言，因地下水位會隨時間季節而變動，且若地下水之水量配合地表水源聯合供應需求(Basagaoglu and Marino, 1999)，則地下水抽取量應配合地表水源之時變性以改變抽水策略。而對於污染整治問題，因其本身即為非穩態之系統，採用動態系統更能符合自然之現

象，以水資源規劃的觀點，進一步強調動態控制的重要性。

通常模擬法無法對系統控制提供最佳的解答，規劃者常須借助優選分析的方法，如傳統梯度型之演算法線性規劃、非線性規劃、微分動態規劃，或是啟發式搜尋法等，以獲得系統之最佳化，然而在這些方法之中，微分動態規劃(Differential Dynamic Programming, DDP)可求解跨時刻之最佳操作策略，且可避免維度困擾及減低計算量(Jones et al., 1987)，在地下水污染整治方面，微分動態規劃所求得之時變抽水量明顯優於非時變抽水量之優選結果(Chang and Shoemaker, 1992; Culver and Shoemaker, 1992)。基本上微分動態規劃屬於動態規劃(DP)之分支，由於一般動態規劃解題時，需要將變數加以離散化，因此若面對大型問題時，會遭遇維度困擾之問題(curse of dimensionality)，而微分動態規劃因不需要對變數離散化，而採用微分方式獲得搜尋方向，故可避免維度困擾。另一方面微分動態規劃類似於非線性規劃之處，為其問題之目標函數與限制條件可為非線性，其與非線性規劃最大之不同，為其問題之目標函數與限制條件需為可分離，並採用遞迴函數關係獲得整體之最佳解。由於微分動態規劃可針對目標函數與限制條件在時間上加以分離，故非常適合應用於非穩態之系統。

微分動態規劃已成功的應用於地下水之水量管理與污染整治上。Jones et al.(1987)應用限制型微分動態規劃於非拘限含水層之水量管理上，他們首先對非拘限含水層之非線性控制方程式，採用差分的方式獲得數值解，然後將此數值解針對初始軌跡作泰勒一階展開成線性方程式，並以此一階泰勒展開之線性方程式作為限制型微分動態規劃之系統轉換函數。對於不等號限制條件之處理則採用二次規劃(Quadratic Programming)的方式處理，由優選結果證明，微分動態規劃可應用於時變之抽水量問題，而不致產生維度困擾。Chang and Shoemaker (1992)應用連續近似線性二次解法(Successive Approximation Linear Quadratic Regulator, SALQR)求解拘限含水層之污染整治問題，基本上 SALQR 亦為 DDP 的一種變形，SALQR 對於各微分項之求得，是採用解析解的方式而並非為數值解，因此計算時比採用數值解獲得微分項之演算法來得有效率，然而對於地下水控制方程式之二次微分項則加以忽略，至於限制條件則全部以處罰函數來處理。Culver and Shoemaker (1993)考量 SALQR 忽略二次微分項可能會降低演算法之收斂效率，因此乃採用近似的方式，來獲得 SALQR 演算法中所忽略之二次微分項，其演算

法稱為半牛頓微分動態規劃(Differential Dynamic Programming with Quasi Newton, QNDDP)，由其研究之結果顯示，QNDDP 之收斂效率比 SALQR 快接近兩倍。由於 SALQR 演算法中，系統轉換函數之一階微分會有部分微分值為 0 之情形，因此 Mansfield et al. (1998)使用稀疏矩陣之特性於 SALQR 演算法中，以減低整個演算法之計算量。此外，Minsker et al.(1998)應用 QNDDP 於生物復育 (bioremediation)技術上，發現考量動態抽水策略比沒有考量動態策略之整治成本來得小，充分證明動態抽水策略對於污染整治上確實有很大的助益。以上地下水管理範疇的研究，由於系統本身具有時變特性，因此利用微分動態規劃求解時變的最佳化問題，相當合適。

但應用微分動態規劃於實際案例，若直接嵌入模擬模式，當計算網格數目增多，往往會遭遇到計算上的複雜度增大，將造成相當大的困擾，多篇研究提出改善之方法，如 Culver and Shoemaker (1992)利用減少規劃時期數目來減少計算量，拉長優選模式每一規劃時間間距，以減少規劃時刻數，使得優選模式的轉換函數由數個模擬模式的轉換函數組合而成。Mansfield et al. (1998)利用稀疏矩陣相關技巧降低微分項係數矩陣運算之計算量。Yong and Minsker (2001)利用多尺度格網的方式(multiscale method)，首先優選粗格網的最佳操作策略，以粗格網的最佳操作策略作為細格網的初始軌跡來加快初始軌跡搜尋的速度，進而加快模式整體的計算效率。除了上述技巧可以地下水管理模式的計算量，平行運算亦可有效得節省計算量，羅(2001)採用 50 顆 CPU 參與地下水管理模式之平行計算，則平行化之非拘限含水層水量管理模式之計算時間約為未平行化之循序模式之 1/22。

根據探討 CDDP 計算效率的相關研究，Chang and Shoemaker (1992)；Mansfield et al. (1998) 發現 CDDP 計算量與狀態變數數目的三次方成正比的關係，若能適度的減少狀態變數數目，對整個演算法之計算效率將會有很大的幫助，有鑑於此，本研究以此觀點發展新演算架構，利用 ANN 取代模擬模式以減少狀態變數數目來提升計算效率。

### 1.3 模式主體架構

由以上文獻回顧可知，類神經網路及微分動態規劃雖已各自廣泛的應用在地

下水或水資源整體最佳規劃問題上，但傳統上應用微分動態規劃於大尺度實際案例，由於微分動態規劃直接嵌入模擬模式，當計算網格數目增多，往往遭遇到變數過多且維度過大等問題，大幅增加計算上的複雜度及計算量。且由於地下水系統有時變特性，因此應用最佳化模式地下水管理問題時，最好能優選出動態的策略，才可符合真實系統之要求，但過去結合類神經網路之最佳化模式從未優選過動態的抽水量。

有鑑於此，本研究結合類神經網路及微分動態規劃兩者，發展新的演算架構，稱為 ANN-CDDP，優選動態的策略，以微分動態規劃為整體優選模式之主架構，不是嵌入傳統數值模擬模式，而是嵌入類神經網路作為動態預測，以節省計算時間。於本研究中將探討類神經網路於動態預測之適用性，並應用此架構於地下水水量管理與水質管理上，以證明此演算架構之可行性，其中包含四大部分，以下簡述各個部分的目的及方法，明確之數學定義及理論請詳述於第二章、第三章及第四章前段。本研究主要的工作項目包含：

(1)類神經網路之長期動態預測：以類神經網路來描述地下水水流及污染傳輸隨時間之變化情形，作為微分動態規劃之系統轉換函數。

(2)系統轉換函數微分項之推導：以類神經網路作為系統轉換函數，透過連鎖律方能得到類神經網路輸出變數對輸入變數之敏感度，即為系統轉換函數之微分項。

(3)地下水水量管理模式之建立：以操作成本最小為目標函數，滿足用水需求，井抽水率上下限及水位下限等限制，求得最佳抽水策略。

(4)地下水污染整治規劃模式之建立：本研究整治規劃的目標函數為整治成本最小化，並在達到整治標準、井抽水率上下限及處理能力上限等限制條件下，求得最佳抽水整治策略。

前面第一章以闡述本研究之目的，以及相關的文獻回顧，為了期望讀者能對本論文整體架構有一初步之了解，以下將先對後續章節作一簡介。

第二章介紹地下水流及污染傳輸方程式，及地下水管理模式之數學定義，廣義的將地下水管理模式分為地下水水量管理模式與污染整治規劃模式。

第三章為演算法整合與說明，述說新演算法(ANN-CDDP)的整體架構與演算

流程，包含類神經網路於地下水流及水質之長期動態預測，系統轉換函數微分項之推導之演算流程等重要部份。

第四章介紹如何建構地下水流及水質類神經網路模式，與其動態預測之驗證，以及系統轉換函數微分項之驗證。

第五章為地下水管理模式之規劃應用，藉由案例模擬，比較案例結果，量化新演算法之於傳統演算法的相對誤差與計算效率。

第六章為結論與建議，除了對本研究之成果作綜合性說明外，亦對未來可加以改善的方向提出建議。

### 數學符號

本研究有關之重要數學符號定義如下，其他未說明之數學符號將於各章節中加以說明。

- 
- [ ] = 二維矩陣。  
[ ]<sub>*i,j*</sub> = 二維矩陣中之 *i,j* 元素。用於有限元素法中之相關矩陣。  
{ } = 一維向量。  
*T* = 系統轉換函數。  
*N* = 優選模式中總規劃時間。  
*I* 地下水管理區域中，抽水井位置之集合  
 $\Phi$  地下水管理區域中，觀測井位置集合。  
*n* = 狀態變數之個數。  
*m* = 控制變數之個數。  
*h<sub>*t*</sub>* = 地下水計算水頭高。  
*c<sub>*t*</sub>* = 污染質濃度。  
*a<sub>1</sub>* = 抽水井單位操作成本。  
*a<sub>2</sub>* = 單位污水處理成本。  
*x<sub>*t*</sub>* = 狀態變數，水量模式中代表水頭(*h<sub>*t*</sub>*)，水質模式中包含水頭與污染值濃度(*c<sub>*t*</sub>*)。

- $u_t$  = 控制變數，水井之抽水量。
- $b$  = 於地下水流或污染傳輸模式中為飽和含水層厚度，於限制型微分動態控制理論中為等號右邊之限制條件向量。
- $y$  = 於限制型微分動態控制理論中為處罰函數。
- $A, B, C$  = 目標函數對狀態變數與控制變數之二次微分所形成之二維矩陣。
- $D, E$  = 目標函數對狀態變數與控制變數之一次微分所形成之一維向量。



## 二、模式定義

本研究所考慮之地下水管理模式主要分成兩大部分，即地下水水量管理模式與地下水污染整治規劃模式。地下水水量管理模式的每一口井應如何抽水，皆是決策者所關心之問題，一般於地下水之水量管理模式中，其目標函數可區分為求取地下含水層之最大抽水量，或設井成本與操作支出最小，本研究以限制型微分動態規劃求取最佳之操作策略(時變的抽水量)，使得操作成本最小；至於地下水污染整治規劃模式則是希望於多少時間內，將受污染之地下含水層，控制其污染值在一定的濃度範圍內，並將操作支出列入目標函數中考量，使得整治的操作成本最小。

而地下水管理模式限制條件中描述地下水流與污染的反應方程式(Response Equation, Response Function)，或稱轉換函數(Transform Function)，乃為必備之條件，此轉換函數亦決定該規劃模式所考量的物理條件及限制。

### 2.1 地下水流與污染傳輸控制方程式

#### 2.1.1 拘限含水層

介紹地下水水量管理與污染整治模式之前，本節首先介紹地下水流與污染傳輸控制方程式，以了解地下水流與污染值之傳輸特性。

二維拘限含水層之地下水流與污染傳輸控制方程式可表示如下：

$$\nabla \cdot K b \nabla h + f_a \pm \sum_{i \in I} u_i \delta(x_i, y_i) = b S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.1)$$

$$\nabla \cdot (\theta b D \cdot \nabla c) - \nabla \cdot (b \theta v c) - f_a (c - c_f) - \sum_{i \in I} u_i (c - c') \delta(x_i, y_i) = \frac{\partial}{\partial t} (R b \theta c) \quad (2.2)$$

其中  $h$  為地下水水頭； $c$  為污染質濃度； $b$  為飽和含水層厚度； $K$  為水力傳導係數(hydraulic conductivity)； $\theta$  為孔隙率(porosity)； $f_a$  為由鄰近含水層進入含水層之水流通量； $c_f$  為進入含水層之水流通量所含之污染值濃度； $D$  為動力擴散係數(hydrodynamic dispersion tensor)； $R$  為遲滯係數(retardation

coefficient)可表示成  $1 + \frac{\rho_b K_D}{\theta}$  ;  $\rho_b$  為土壤密度(soil bulk density) ;  $K_D$  為 solution partition coefficient ;  $I$  為含水層中可設井之位置集合 ;  $S_s$  表示比貯水率(Specific storage) ;  $u_j$  表示於  $(x_j, y_j)$  之抽水量 ;  $\delta(x_j, y_j)$  為於  $(x_j, y_j)$  之 dirac delta function 。求解方程式所需之初始條件與邊界條件說明於範例演算中。本研究採用 ISOQUAD (Pinder, 1978)為地下水流與污染傳輸之模擬模式，產生資料作為類神經網路訓練之用，ISOQUAD 主要是採用 Galerkin 有限元素法處理偏微分方程式中之空間微分項，而以隱式有限差分法處理時間之微分項。經由空間項之 Galerkin 有限元素法與時間項之隱式有限差分法之處理，方程式(1)、(2)可分別表示成：

$$([A] + [B]/\Delta t)\{h_{t+1}\} = \frac{[B]}{\Delta t}\{h_t\} - \{F_h\} + [L_h]\{u_t\} \quad (2.3)$$

$$([N(h_{t+1}, u_t)] + [M]/\Delta t)\{c_{t+1}\} = \frac{[M]}{\Delta t}\{c_t\} - \{F_c\} + [L_c(u_t)]\{c' - c_{t+1}\} \quad (2.4)$$

於式(2.3)、(2.4)中之各係數說明如下： $[A]$ 為模擬區域之全域傳導係數矩陣 (conductance matrix)，於有限元素法中每一個元素(element)之傳導係數矩陣可表示成：

$$[A]_{ij}^e = \left( \iint \left( T_{xx} \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \frac{\partial \omega_j}{\partial x} + T_{yy} \frac{\partial \omega_i}{\partial y} \frac{\partial \omega_j}{\partial y} \right) dx dy \right)^e$$

$[B]$ ：為全域儲水係數矩陣(capacitance matrix)，每一個元素可表示成：

$$[B]_{ij}^e = \left( \iint S \omega_i \omega_j dx dy \right)^e$$

$[N(h_t, u_t)]$ 為全域對流-擴散矩陣(advection-dispersion matrix)，每一個元素可表示成：

$$[N]_{ij}^e = \left( \iint \left( D_{xx}(\bar{v}_{t+1}) \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \frac{\partial \omega_j}{\partial x} + 2D_{xy}(\bar{v}_{t+1}) \frac{\partial \omega_i}{\partial x} \frac{\partial \omega_j}{\partial y} + D_{yy}(\bar{v}_{t+1}) \frac{\partial \omega_i}{\partial y} \frac{\partial \omega_j}{\partial y} + b\bar{v}_{t+1,x} w_i \frac{\partial \omega_j}{\partial x} + b\bar{v}_{t+1,y} w_i \frac{\partial \omega_j}{\partial y} + f_a w_i w_j \right) dx dy \right)^e$$

$[M]$ 為全域吸附矩陣(sorption matrix)，每一個元素可表示成：

$$[M]_{ij}^e = \left( \iint (b\theta + \rho_b b K_D) w_i w_j dx dy \right)^e$$

$[F_h]$ ， $[F_c]$ ：邊界條件所形成之向量，每一個元素可表示成下式：

$$[F_h]_i^e = \left( - \iint \omega_i f_a dx dy - \int_{\Gamma} \omega_i \sum_{j=1}^{nd} \left( \hat{T}_{xx} \frac{\partial \omega_j}{\partial x} \vec{n}_x - \hat{T}_{yy} \frac{\partial \omega_j}{\partial y} \vec{n}_y \right) h_j \cdot d\vec{l} \right)^e$$

$$[F_c]_i^e = \left( - \int_{\Gamma} (b\theta D \cdot \nabla c) \cdot \vec{n} w_i dl - \iint f_a c_f w_i dx dy \right)^e$$

$[L_h]$ ， $[L_c(u_i)]$ 為抽水井位置係數矩陣， $\omega_i$ 為結點*i*的基底函數， $\omega_j$ 為為結點*j*的基底函數， $\vec{n}_x$ 為x方向的法向量， $\vec{n}_y$ 為y方向的法向量， $f_a$ 為邊界上水流通量(flux)的進出量(L/T)。於拘限含水層中，式(2.3)為一線性方程式，式(2.4)為非線性方程式。

### 2.1.2 非拘限含水層

在杜普假設下(Dupit assumption)，非拘限含水層之控制分程式與拘限含水層相似，所不同者，只需將式(2.1)中之飽和含水層厚度**b**改成含水層之水頭**h**既可。由於 ISOQUAD 主要是用來模擬拘限含水層之水流情況及污染傳輸行為，蕭金財(2000)以 ISOQUAD 為基礎，發展一非拘限含水層之模擬模式，本研究沿用此模式產生訓練資料。由於非拘限含水層不似拘限含水層有一固定之含水層厚度**b**，其飽和含水層厚度**h**隨流況變動，因此本研究利用此一特性，於每一個模擬時間間距內，對於有限元素法中之每一個元素( $e_{l,l=1,\dots,k}$ )，假設有一組平均之含水層厚度( $\bar{b}_{l,l=1,\dots,k}^o$ )，並採用 Picard 迭代法，修正此組平均含水層厚度，直到模式收斂為止(*k*為有限元素法中對空間離散化後之總元素數)，此一非拘限含水層之模擬模式說明如下。

1. 假設含水層厚度( $\bar{b}_{l,l=1,\dots,k}^{r-1}$ )作為 ISOQUAD 中之含水層厚度，並計算地下水流水之水頭( $h_{t+1}$ )及污染質濃度( $c_{t+1}$ )，*r*為迭代數指標。
2. 根據計算所得之地下水水頭( $h_{t+1}$ )，重新評估有限元素法中之每一個元素之

厚度如下  $\bar{b}_l^r = \frac{1}{n^e} \sum_{j=1}^{n^e} h_{t+1}^j, l=1,\dots,k$ ，其中  $n^e$  為於元素 *e* 中之總節點數。

3. 計算前後兩次迭代之平均含水層厚度誤差如下：

$$err = \max[abs(b_1^{r-1} - b_1^r), abs(b_2^{r-1} - b_2^r), \dots, abs(b_k^{r-1} - b_k^r)].$$

4. 檢查是否收斂( $err \leq \varepsilon$ )，如果滿足收斂標準則停止。否則將前一次迭代之含水層厚度置換( $\bar{b}_{l,l=1,\dots,k}^r = \bar{b}_{l,l=1,\dots,k}^{r-1}$ )，並且回到步驟一，進行下一次迭代，直到模式收斂為止。

如同拘限含水層，非拘限含水層之水流與污染傳輸方程式可表示如下：

$$([A(h_{t+1})] + [B]/\Delta t)\{h_{t+1}\} = \frac{[B]}{\Delta t}\{h_t\} - \{F_{h,t}\} + [L_h]\{u_t\} \quad (2.5)$$

$$([N(h_{t+1}, u_t)] + [M(h_{t+1})]/\Delta t)\{c_{t+1}\} = \frac{[M(h_{t+1})]}{\Delta t}\{c_t\} - \{F_{c,t}\} + [L_c(u_t)]\{c_t - c_{t+1}\} \quad (2.6)$$

比較拘限含水層與非拘限含水層之水流與污染傳輸方程式(式(2.3)、(2.5)與式(2.4)、(2.6))，於非拘限含水層中之係數 $[A]$ 與 $[M]$ 為水頭 $h_{t+1}$ 之函數，因此非拘限含水層之模擬比拘限含水層複雜。假設 $n_h$ 與 $n_c$ 分別代表地下水模擬區域有限元素法中非定水頭節點，則水頭 $h_t$ 與濃度 $c_t$ 即為長度為 $n_h$ 與 $n_c$ 之向量，並且可將水頭與濃度兩者表示成 $x_t = \langle h_t^T : c_t^T \rangle^T \in R^{(n_h+n_c) \times 1}$ ，其中 $x_t$ 可為最佳控制演算法中之狀態變數。若使用 $x_t$ 表示狀態變數，則含水層之水流與污染傳輸方程式(式(2.3)、(2.4)或式(2.5)、(2.6))可採用單一之方程式表示為 $\{x_{t+1}\} = T(x_t, u_t, t)$ ，其中 $T(x_t, u_t, t)$ 即為最佳控制演算法中系統轉換函數，所謂嵌入法即是將此式直接應用演算法中，因此若狀態變數之維度過於龐大則相對的 $[A]$ 、 $[B]$ 、 $[N]$ 、 $[M]$ 矩陣亦會以 $n^2$  ( $n = n_h + n_c$ )增加，則會使得最佳控制演算法所須之記憶體大幅增加，此為嵌入法之缺點。然而因為嵌入法直接應用地下水之模擬模式於最佳演算法中，並不需要對地下水系統再作進一步簡化，故其最佳化之結果較為精確。

## 2.2 地下水水量管理模式

對於複雜系統的規劃或操作管理，常會將問題以最佳化模式的形態表示之，一般而言，最佳化模式可以表示如下：

$$\text{Min } f(x) \quad (2.7)$$

$$\text{subject to } g_j(x) \leq b_j; \forall j$$

$$a_L \leq x \leq a_U$$

其中  $x$  為決策變數組成之向量， $f(\bullet)$  為目標函數， $g(\bullet)$  為狀態函數；

$b$  為狀態變數的之限制值， $a_L, a_U$  為決策變數的上下邊界所組成之向量。

地下水水量管理模式是以操作成本現值最小為目標函數，並滿足用水需求，抽水率上下限，及水位下限等限制條件下，求得最佳抽水策略。限制條件考量水位下限之目的，是希望抽水所引致之水位下降不致危害環境生態。本優選模式可表示如下：

$$\min_{u_t^i, i \in I, t=1, \dots, N} J(I) = \sum_{i \in I} \left\{ \sum_{t=1}^N a_i u_t^i(I) [L_*^i(I) - h_{t+1}^i(I)] \frac{1}{(1+r)^t} \right\} \quad (2.8)$$

限制條件：

$$h_{t+1} = T(h_t, u_t, t), \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.9)$$

$$h_{t+1}^j \geq h_{\min}^j, \quad t = 1, 2, \dots, N, j \in \phi \quad (2.10)$$

$$\sum_{i \in I} u_t^i \geq d_t, \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.11)$$

$$u_{\min} \leq u_t \leq u_{\max}, \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.12)$$

其中：

$\Phi$ ：觀測井位置集合

$I$ ：設計井網之集合

$u_t^i$ ： $t$  時刻在  $i$  點的抽水量(決策變數)

$a_1$  : 井的單位抽水成本可表示成  $a_1 = \gamma \times a'_1 \times \Delta t$

$a'_1$  : 單位功率成本

$\gamma$  : 重力項

$\Delta t$  : 優選時間間距(抽水時間)

$L_*^i$  : 在  $i$  點之地表高程

$h_{t+1}$  :  $t+1$  時刻的地下水水位

$L_*^i - h_{t+1}$  : 抽水揚程

$r$  : 利率值

$h_{\min}$  : 水位下限

$d_t$  :  $t$  時刻的用水需求

$u_{\min}$  : 每一口井的抽水下限

$u_{\max}$  : 每一口井的抽水上限

式(2.9)為系統轉換函數，若考慮拘限含水層則為式(2.3)，非拘限含水層則為式(2.5)，由於本模式只考慮水量管理，因此系統轉換函數不需要包含污染傳輸方程式。式(2.10)為水位下限，式(2.11)為每一個時刻之需水限制，式(2.12)為水井抽水能力限制條件。

### 2.3 地下水污染整治規劃模式

本研究所採用之污染整治方式為抽水處理(pump-and-treat)之技術，即由受污染之含水層中，抽出含有污染值之地下水，然後送至污水處理廠處理。抽水處理對於大區域之污染整治問題是一種實用之方法，本文亦探討此一整治方法，使其達到最佳化之目的。Hoffman(1993)定義地下水抽水處理整治技術的流程，包含三大步驟，先瞭解污染場址的地質、水文、化學等特性，再來建立一套系統化的管理方式，最後制定整治目標進行整治。由於污染物會隨時間傳輸擴散，為了降低規劃之不確定性，所規劃的污染整治模式應可以優選動態的抽水量，使得所規劃的整治系統能動態調整以因應時變的狀態，整治時期採用可適性抽水策略(adaptive pumping)比固定抽水策略(fixed well configuration)更有效率。本研究所討論之污染整治模式可表示如下，其目標函數為最小之整治成本，

$$\min_{u_t^i, i \in I, t=1, \dots, N} J(I) = \sum_{i \in I} \left\{ \sum_{t=1}^N [a_1 u_t^i(I) [L_*^i(I) - h_{t+1}^i(I)] + a_2 u_t^i(I)] \right\} \quad (2.13)$$

限制條件：

$$\{x_{t+1}\} = T(x_t, u_t, t), \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.14)$$

$$c_N^j \leq c_{\max}, \quad j \in \phi \quad (2.15)$$

$$\sum_{i \in I} u_t^i \leq T u_{\max}, \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.16)$$

$$u_{\min} \leq u_t \leq u_{\max}, \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (2.17)$$

其中：

$\Phi$ ：觀測井位置集合

$I$ ：設計井網之集合

$x_t$ ：狀態變數，包含有水位  $h_t$  與污染質濃度  $c_t$ ，即  $x_t = (h_t^T; c_t^T)^T$ 。

$u_t^i$ ： $t$  時刻在  $i$  點的抽水量(決策變數)

$a_1$  : 單位抽水成本

$a_2$  : 單位污水之處理成本。

$L_*^i$  : 在  $i$  點之地表高程

$h_{t+1}$  :  $t + 1$  時刻的地下水水位

$L_*^i - h_{t+1}$  : 抽水揚程

$c_{\max}$  : 為整治期末達到法令規定之地下水污染管制標準。

$Tu_{\max}$  : 污水處理廠之污水處理能力限制。

$u_{\min}$  : 每一口井的抽水下限

$u_{\max}$  : 每一口井的抽水上限

式(2.13)之目標函數中，第一項代表井抽水之操作成本，第二項代表污水處理成本。式(2.14)為系統轉換函數，若考慮拘限含水層則為式(2.3)、(2.4)，非拘限含水層則為式(2.5)、(2.6)；式(2.15)為整治期末達到法令規定之地下水污染管制標準；式(2.16)為每一個時刻之總抽水量限制，可視為污水處理廠之污水處理能力限制；式(2.17)為水井抽水能力限制條件。

### 三、演算法整合與說明

#### 3.1 整體演算流程概述

針對地下水管理包括地下水水量管理(式(2.8)至式(2.12))與污染整治規劃模式(式(2.13)至式(2.17))之優選問題，這些問題為一非線性及動態的問題型態，以及為了顧及精度與計算效率，本研究整合類神經網路與限制型微分動態規劃兩種方法來解上述之地下水管理的優選問題。

本研究中整合限制型微分動態規劃與類神經網路成為新型態的演算法(ANN-CDDP)，架構如圖 3.1 所示，主要架構外層為限制型微分動態規劃，內層嵌入類神經網路來反應非線性的含水層地下水位和污染的變化情形。新型態的演算架構(ANN-CDDP)與傳統演算法(ISOQUAD-CDDP, Chang and Shoemaker, 1992 ; Culver and Shoemaker, 1992, 1993)不同在於新的演算架構是以類神經網路作為微分動態規劃之系統轉換函數，以及利用連鎖律直接得到類神經網路的輸出變數對輸入變數之敏感度，作為系統轉換函數之微分項。將於 3.2 節詳細介紹類神經網路於地下水流及水質之長期動態預測，於 3.3 節詳細介紹系統轉換函數微分之推導。



圖 3.1 模式演算架構示意圖

本研究模式建置主要分為描述地下水系統之類神經網路之建立，以及整合類神經網路與限制型微分動態規劃於地下水管理之應用，在此針對此模式建置流程進一步說明如下，如圖 3.2 所示：

(一) 建立地下水流與污染傳輸之案例庫：

為使得類神經網路能正確的運作，則必須透過訓練 (training) 的方式，讓類神經網路反覆的學習，直到對於每個輸入都能正確對應到所需要的輸出，因此在類神經網路學習前，必須建立出一個訓練樣本 (training pattern) 作為類神經網路學習過程的參考。訓練樣本的建立則來自於系統輸入與輸出，如果現地觀測資料充足，可以觀測資料直接作為類神經網路之輸入輸出資料，本研究針對研究案例建置一數值模式，產生一定數量之模擬結果資料，作為產生類神經網路之案例庫。

(二) 建立類神經網路與驗證：

以前一步驟所產生之數據來訓練類神經網路，並驗證其可準確預測系統的變化，使其成為地下水量及水質管理模式之系統轉換函數。

(三) 整合 ANN 與 CDDP，建立地下水管理規劃模式：

本研究中整合限制型微分動態規劃與類神經網路，主要架構為限制型微分動態規劃，內層嵌入類神經網路，應用已訓練好的類神經網路來作為地下水及污染傳輸反應方程式，可即時的反應非線性的地下水位和污染濃度的變化情形，作為整體地下水量管理之用，或是作為求解地下水污染整治規劃問題之用。

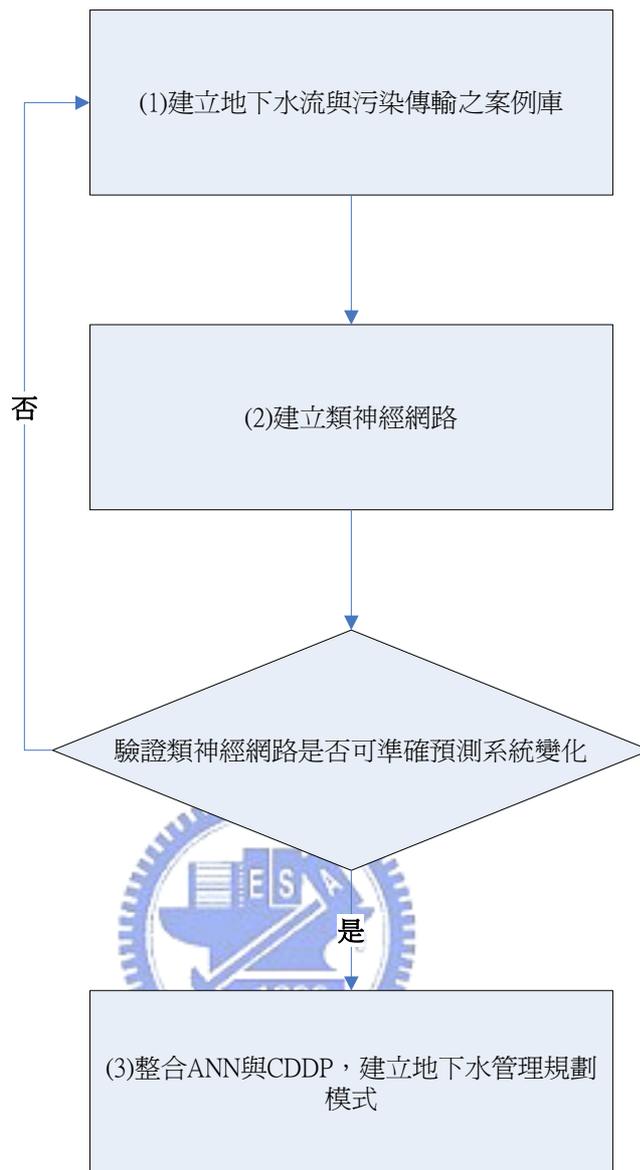


圖 3.2 模式建置流程圖

### 3.2 類神經網路於地下水流及水質之長期動態預測

系統轉換函數是描述從當下時刻系統轉換到下一個時刻系統的數學模型，對於地下水量管理模式的系統轉換函數為地下水流控制方程式，而對於地下水污染整治規劃模式，則是地下水流與污染傳輸控制方程式。系統轉換函數可採以下之通式表示：

$$\{x_{t+1}\} = T(x_t, u_t, t) \quad (2.14)$$

式(2.14)中  $x_{t+1}$  為 t+1 時刻的狀態變數， $x_t$  為 t 時刻的狀態變數和  $u_t$  為 t 時刻的決策變數，其中狀態變數  $x_t$ ，對水量管理問題則為水頭( $h_t$ )，若為污染整治問題則同時包含有水頭( $h_t$ )與污染質濃度( $c_t$ )，系統轉換函數式(3.1)若以 ISOQUAD 作為地下水流與污染傳輸之模擬模式(Chang and Shoemaker, 1992; Culver and Shoemaker, 1992; Chang and Hsiao(2002))，則對應式(2.3)與(2.4)。

本研究以類神經網路來描述地下水水流及污染傳輸隨時間之變化情形(映射關係)，作為 CDDP 之系統轉換函數。一般定義，類神經網路是一種建立映射關係的方法，假設映射關係中輸入向量(X)維度 N，輸出輸入向量(Y)維度 M，從  $R^{N \times 1}$  到  $R^{M \times 1}$  的映射可以下式表示之：

$$F : R^{N \times 1} \rightarrow R^{M \times 1} \quad Y = F(X) \quad (3.1)$$

本研究為了使類神經網路作為 CDDP 之系統轉換函數，因此本研究類神經網路的輸入向量包含 t 時刻的狀態變數( $x_t$ )和決策變數( $u_t$ )，輸出向量包含 t+1 時刻的狀態變數( $x_{t+1}$ )，訓練階段之網路架構如圖 3.3 所示。並以類神經網路模式進行長期動態預測，如圖 3.4 所示，類神經網路根據各時刻狀態及決策變數，預測下一時刻之狀態變數，所預測的狀態將作為後續時刻預測的輸入之用，僅在第一個時刻將初始狀態輸入，後續各時刻則由前一個時刻預測後自動代入。

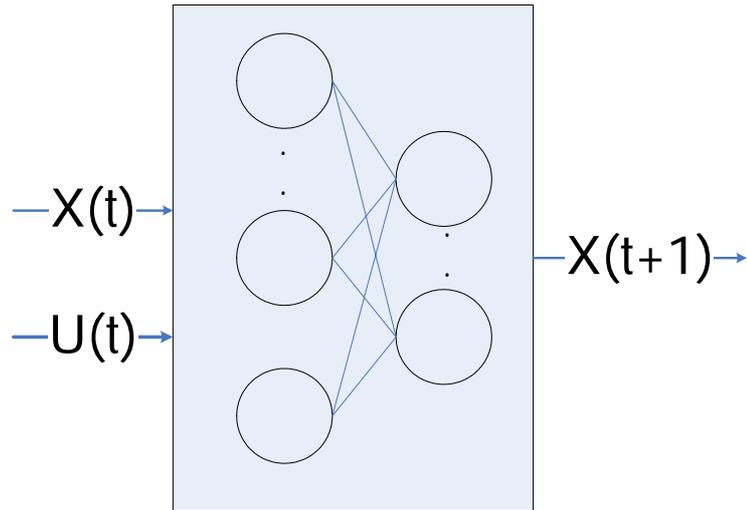


圖 3.3 ANN 網路架構圖(訓練階段)

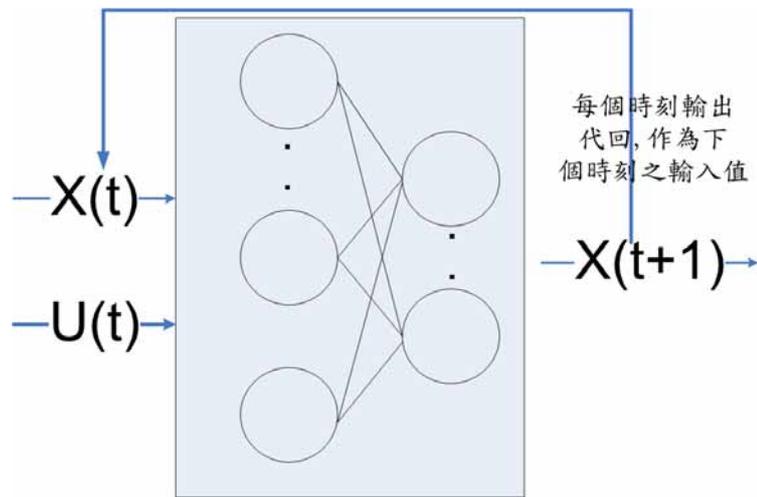


圖 3.4 ANN 模式架構圖(預測階段)

本研究類神經模式架構，後續會再詳細說明(詳見 4.2.1 節)，模式依照不同性質的預測狀態變數(輸出向量)，可分成地下水流之類神經網路與污染傳輸類神經網路，簡而言之，關於地下水流之類神經網路，其輸入向量為 t 時刻的水位和 t 時刻的抽水量，輸出向量為 t+1 時刻的水位。式(3.2)可表示 t+1 時刻的水位與 t 時刻的水位及抽水量之函數關係，

$$h_{t+1} = f_1(h_t, u_t, t) \quad (3.2)$$

地下水污染傳輸類神經網路之函數關係，可描述為式(3.3)，其中 t+1 時刻的濃度為 t 時刻的濃度、水位和抽水量之函數，其輸入向量包含 t 時刻的濃度、水位和抽水量，輸出向量包含 t+1 時刻的濃度，

$$c_{t+1} = f_2(h_t, c_t, u_t, t) \quad (3.3)$$

因此應用此類神經網路長期動態預測地下水位與污染濃度，只須要給定初始狀態之水位( $h_1$ )與濃度( $c_1$ )，以及各時刻各井之抽水量( $u_t$ )，然後藉由類神經網路模式自動計算下一時刻的水位( $h_{t+1}$ )與濃度( $c_{t+1}$ )。



### 3.3 系統轉換函數微分之推導

由於微分動態規劃於每個時刻皆將原目標函數對初始軌跡作泰勒展開至二階，在泰勒展開的過程中需要目標函數及系統轉換函數之微分值。系統轉換函數之微分值是由系統轉換函數分別對狀態變數( $x_t$ )與控制變數( $u_t$ )微分得到，其中狀態變數( $x_t$ )包含水頭( $h_t$ )和濃度( $c_t$ )。系統轉換函數對狀態變數( $x_t$ )與控制變數( $u_t$ )微分可表示成：

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial x_t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_{t+1}}{\partial x_t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_t} & \frac{\partial h_{t+1}}{\partial c_t} \\ \frac{\partial c_{t+1}}{\partial h_t} & \frac{\partial c_{t+1}}{\partial c_t} \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial T}{\partial u_t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_{t+1}}{\partial u_t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial u_t} \\ \frac{\partial c_{t+1}}{\partial u_t} \end{bmatrix} \quad (3.5)$$

本研究採用倒傳遞類神經網路為系統轉換函數，類神經網路由人工神經元所組成，神經元之輸出與輸入之間的關係式是一數學函數，若假設其組成為可微分函數，本研究透過連鎖律的觀念，方能得到類神經網路輸出變數對輸入變數之敏感度(微分值)。以下作一清楚的說明及推導神經網路輸出值，以及輸出值對各輸入變數之一階偏微解析式。從單一隱藏層之神經網路開始推導，其神經網路之輸出值( $O_k$ )可表示如下：

$$O_k = f_o(net_k), \quad net_k = \sum_{j=1}^n H_j w_{jk} - b_k \quad k = 1, 2, 3, \dots, o$$

$$H_j = f_h(net_j), \quad net_j = \sum_{i=1}^m x_i w_{ij} - b_j \quad j = 1, 2, 3, \dots, n$$

其中， $O_k$ 、 $H_j$ 分別為輸出層、隱藏層之輸出單元， $x_i$ 則為輸入層之輸入單元。此外， $w$ 為權重值， $b$ 為閾值， $f_o(x)$ 、 $f_h(x)$ 分別為輸出層與隱藏層之轉換函數。輸出變數( $O_k$ )對輸入變數( $x_i$ )之一階偏微解析式如下：

$$\frac{\partial O_k}{\partial x_i} = \sum_{k=1}^n df_o(net_k) \cdot w_{jk} \cdot df_h(net_j) \cdot w_{ij} \dots \dots \dots (3.6)$$

$$\text{其中： } df_o(x) = \frac{\partial f_o(x)}{\partial x} \text{、 } df_h(x) = \frac{\partial f_h(x)}{\partial x}$$

若將含多層隱藏層的類神經網路寫成一般化之型式，其之輸出值( $O_k$ )可表示如下：

$$O_k = f_o(net_k) \text{ , } net_k = \sum_{jn} O_{jn} w_{jn,k} - b_k$$

$$O_{jn} = f(net_j) \text{ , } net_{jn} = \sum_{jn-1} O_{jn-1} w_{jn-1,jn} - b_{jn}$$

.....

$$O_{j1} = f(net_{j1}) \text{ , } net_{j1} = \sum_i O_i w_{i,j1} - b_{j1}$$

其中 $O_i$ 則為輸入層之輸入單元、 $O_{jn}..O_{j1}$ 為隱藏層之輸出單元，以及 $O_k$ 為輸出層之輸出單元，此外， $W$ 為權重值， $b$ 為閾值。

輸出變數( $O_k$ )對輸入變數( $O_i$ )之一階偏微分解析式如下：

$$\frac{\partial O_k}{\partial O_i} = \sum_{jn} \sum_{jn-1} \sum_{jn-2} \dots \sum_{j1} w_{jn,k} df(net_k) \cdot w_{jn-1,jn} \cdot df(net_{jn}) \cdot w_{jn-2,jn-1} \cdot df(net_{jn-1}) \dots w_{i,j1} \cdot df(net_{j1})$$

..... (3.7)

$$\text{其中： } df(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x}$$

### 3.4 ANN-CDDP 之演算流程

ANN-CDDP 之整體演算步驟: 首先給定初始軌跡, 接著於後掃過程中每一時刻皆對原目標函數針對初始軌跡做泰勒二階展開, 以系統轉換函數(類神經網路)之微分項合成出泰勒展開的各項係數, 得到最佳控制法則以得到目標函數之遞迴方程式; 於前掃過程, 本研究直接以不等號限制之二次規劃求解每個時刻最佳控制值, 再由系統轉換函數(類神經網路)計算出每個時刻狀態變數, 並以此計算所得的最佳控制值及狀態變數取代初始軌跡, 進行下一次迭代求解過程。完成一次前掃與後掃的過程稱為一次迭代, 經由不斷的迭代來求得原問題之最佳解, 直到達收斂標準為止。

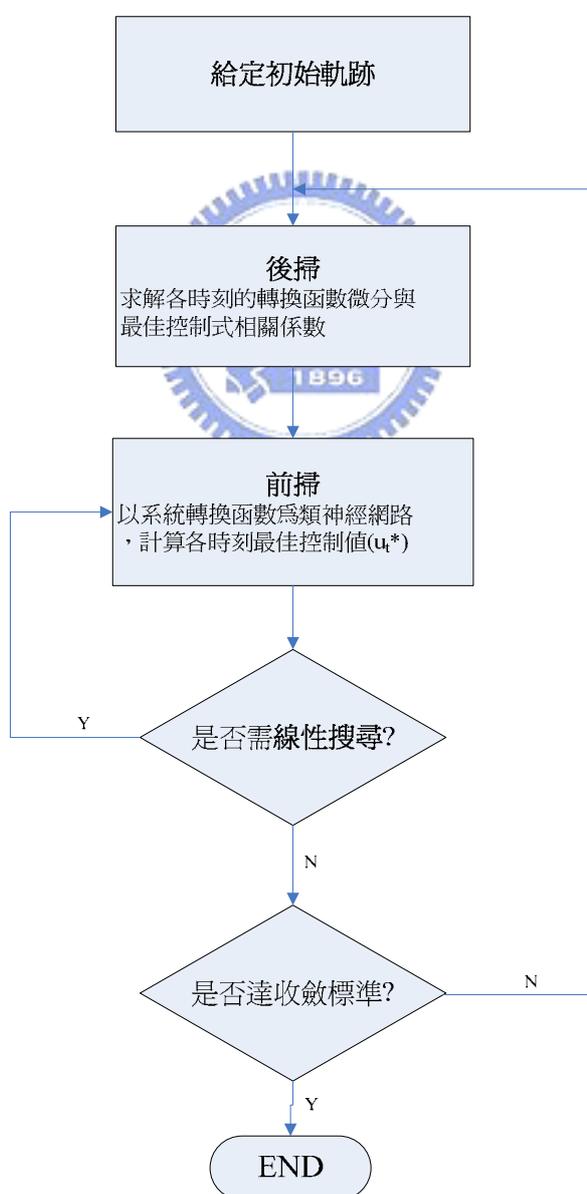


圖 3.5 ANN-CDDP 之演算流程

有關本研究之演算流程，可表示如下：

(1)寫出此操作成本( $J$ )之問題型態如下：

$$\min_{u_t, t=1, \dots, N} J = \sum_{t=1}^N L_t(x_t, u_t) \quad (3.8)$$

受限於：

$$x_{t+1} = T(x_t, u_t, t) \quad (3.9)$$

$$g_t(x_t, u_t) \leq b_{1,t} \quad (3.10)$$

$$\bar{B}_t u_t \leq b_{2,t} \quad (3.11)$$

$$x_1 \text{ 已知} \quad (3.12)$$

其中式(3.8)  $L_t$  為時刻之操作成本， $x_t$  為狀態變數， $u_t$  為決策變數。式(3.9) 為內嵌之類神經網路模式。

(2).設定限制型微分動態規劃之迭代數指標， $r = 0$ 。

(3).設定處罰函數指標， $l = 0$  及給定處罰函數之初始權重  $w_i^l$ 。

(4).給定限制型微分動態規劃之初始軌跡  $\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_N$ ， $\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_N$ 。

(5).將式(3.10)採用處罰函數之方式與原目標函數整合，而形成一包含有處罰函數之目標函數，並根據初始軌跡計算此目標函數之初始目標函數值。

$$J^r = \sum_{t=1}^N \left[ L_t(\bar{x}_t, \bar{u}_t) + \sum_{j=1}^r y_{j,t} (f_{j,t}(\bar{x}_t, \bar{u}_t, w_j^l)) \right] \quad (3.13)$$

Do  $l = 1, 10$  !! 處罰函數權重係數修正迴路

(6).後掃過程

(i).  $r = r + 1$ ， $P_{N+1} = 0$ ， $Q_{N+1} = 0$ 。

(ii). 計算最佳控制法則，以形成目標函數之遞迴方程式。

Do  $t = N, -1, 1$  !! 後掃過程

a. 計算  $\tilde{A}_t, \tilde{B}_t, \tilde{C}_t, \tilde{D}_t, \tilde{E}_t$  , 其中藉由連鎖律得知類神經網路之輸出

變數對輸入變數之微分值  $\left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial x_t}\right)$  和  $\left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial u_t}\right)$  :

$$\begin{aligned} \tilde{A}_t = & \frac{1}{2}L_{xx} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f_t}{\partial x_t}\right)^T (y_t)_{ff} \left(\frac{\partial f_t}{\partial x_t}\right) + \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial x_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial x_t}\right) \\ & + \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^r \left(\frac{\partial y_{t,i}}{\partial f_{t,i}}\right) (f_{t,i})_{xx} + \sum_{i=1}^n (Q_{t+1})_i (T_{t+1,i})_{xx}\right) \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_t = & L_{xu} + \left(\frac{\partial f_t}{\partial u_t}\right)^T (y_t)_{ff} \left(\frac{\partial f_t}{\partial x_t}\right) + 2\left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial x_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial u_t}\right) \\ & + \sum_{i=1}^r \left(\frac{\partial y_{t,i}}{\partial f_{t,i}}\right) (f_{t,i})_{xu} + \sum_{i=1}^n (Q_{t+1})_i (T_{t+1,i})_{xu} \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} \tilde{C}_t = & \frac{1}{2}L_{uu} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f_t}{\partial u_t}\right)^T (y_t)_{ff} \left(\frac{\partial f_t}{\partial u_t}\right) + \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial u_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial u_t}\right) \\ & + \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^r \left(\frac{\partial y_{t,i}}{\partial f_{t,i}}\right) (f_{t,i})_{uu} + \sum_{i=1}^n (Q_{t+1})_i (T_{t+1,i})_{uu}\right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

$$\tilde{D}_t = \nabla_u L + Q_{t+1} \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial u_t}\right) + \sum_{i=1}^r \frac{\partial y_{t,i}}{\partial f_{t,i}} \frac{\partial f_{t,i}}{\partial u_{t,i}} \quad (3.17)$$

$$\tilde{E}_t = \nabla_x L + Q_{t+1} \left(\frac{\partial T_{t+1}}{\partial x_t}\right) + \sum_{i=1}^r \frac{\partial y_{t,i}}{\partial f_{t,i}} \frac{\partial f_{t,i}}{\partial x_{t,i}} \quad (3.18)$$

b. 假設  $\delta x_t = 0$  , 並利用不等號二次規劃解下列問題之等號限制條件 :

$$\min_{u_t} \{\delta u_t^T \tilde{C}_t \delta u_t + \tilde{D}_t^T \delta u_t\} \quad (3.19)$$

$$\tilde{B}_t \delta u_t \leq \delta b_{2,t} \quad (3.20)$$

利用所得到之等號限制條件  $\hat{B}_t \delta u_t = \delta \hat{b}_{2,t}$  計算

$$\begin{cases} R_t^* = (\hat{B}_t C_t^{-1} \hat{B}_t^T)^{-1} \hat{B}_t C_t^{-1} \\ S_t^* = \frac{1}{2} C_t^{-1} (I - \hat{B}_t^T R_t^*) \end{cases} \quad (3.21)$$

$$\alpha_t = (-S_t^* D_t + R_t^{*T} \delta b_{2,t}) \quad (3.22)$$

$$\beta_t = (-S_t^* B_t) \quad (3.23)$$

$$P_t = \tilde{A}_t - \beta_t^T \tilde{C}_t \beta_t + \beta_t^T \tilde{B}_t \quad (3.24)$$

$$Q_t = \tilde{E}_t^T + \alpha_t^T \tilde{B}_t + 2\alpha_t^T \tilde{C}_t \beta_t + \tilde{D}_t^T \beta_N \quad (3.25)$$

若無等號限制條件則：

$$P_t = \tilde{A}_t - \frac{1}{4} \tilde{B}_t^T \tilde{C}_t^{-1} \tilde{B}_t \quad (3.26)$$

$$Q_t = \tilde{E}_t^T + \alpha_t^T \tilde{B}_t + 2\alpha_t^T \tilde{C}_t \beta_t + \tilde{D}_t^T \beta_N \quad (3.27)$$

End do !! 後掃過程

(7). 前掃過程

- (i). 計算最佳控制值與狀態變數，並以式(3.32)內嵌之類神經網路模式重新計算所得最佳控制值與狀態變數取代初始軌跡，以便進行下一次迭代過程，其過程如下：

設定  $\Gamma = 0, \eta = 0$

Do  $l_n = 1, 10$  !! 線性搜尋

$\Gamma = \Gamma + \eta \cdot I$ ,  $\eta$  為線性搜尋參數， $I$  為單位矩陣

Do  $t = 1, N$  !! 前掃過程

採用不等號二次規劃求解下列問題：

$$\min_{u_N} \{ \delta u_t^T (\tilde{C}_t + \Gamma) \delta u_t + (\delta x_t \tilde{B}_t^T + \tilde{D}_t^T) \delta u_t \} \quad (3.29)$$

受限於：

$$\bar{B}_N \delta u_l \leq \delta b_{2,l} \quad (3.30)$$

$$u_t^{r+1} = \bar{u}_t^r + \delta u_t \quad (3.31)$$

$$x_{t+l}^{r+1} = T(x_t^{r+1}, u_t^{r+1}) \quad (3.32)$$

End do !! 前掃過程

(ii). 計算目標函數值。

$$J^{r+1} = \sum_{t=1}^N \left[ L_t(x_t^{r+1}, u_t^{r+1}) + \sum_{j=1}^{r_t} y_{j,t} (f_{l,t}(x_t^{r+1}, u_t^{r+1}, w_i^l)) \right] \quad (3.33)$$

(iii). 若目標函數增加 ( $J^{r+1} > J^r$ )，則進行線性搜尋：

$$\eta = (\eta + 2)^{l_n} ;$$

$$\Gamma = \Gamma + \eta \cdot I$$

End do !! 線性搜尋

(iv). 檢查是否達收斂標準，收斂標準如下：

$$\frac{|J^r - J^{r+1}|}{J^r} \leq \varepsilon_J \quad \text{與} \quad pen = \sum_{j=1}^{r_t} y_{j,t} (f_{l,t}(x_t^{r+1}, u_t^{r+1}, w_i^l)) \leq \varepsilon_{pen}$$

(v). 若  $w_i$  無法獲得答案，增加  $w_i$  之值：

$$w_i^{l+1} = w_0 + (\sqrt{w_0})^l$$

End do !! 處罰函數權重係數修正迴路

### 3.5 ANN-CDDP計算效率改善的原因

計算量是應用CDDP於地下水管理的所面臨問題之一，因此有許多研究提出提升CDDP計算效率的方法(Culver and Shoemaker (1992); Yong and Minsker(2001); Mansfield and Shoemaker (1998))，但是這些研究所節省的計算量有限，爲了突破CDDP的窘境，本研究發展一方法以求能大幅減少計算量。從過去的研究發現CDDP的計算量與狀態變數數目的三次方成正比 (Chang and Shoemaker (1992); Mansfield et al. (1998))，因此若能減少狀態變數數目，對整個演算法之效率將會有很大的幫助。

由於CDDP計算每一時刻目標函數泰勒展開之係數( $\tilde{A}_t$ ,  $\tilde{B}_t$ ,  $\tilde{C}_t$ ,  $\tilde{D}_t$ ,  $\tilde{E}_t$ )需耗費大部份時間，因此CDDP之計算量與狀態變數數目的關係，可以用泰勒展開係數求解過程計算量與狀態變數數目的關係來表示，表3.1爲泰勒展開係數計算量及狀態變數數目的關係， $n$ 爲CDDP模式的狀態變數數目， $m$ 爲CDDP的控制變數數目，ISOQUAD-CDDP的狀態變數數目爲ISOQUAD格網節點數，但是ANN-CDDP的狀態變數數目爲ANN輸入層的節點數(輸入資料維度)，舉例說明，當模擬範圍在格網節點數目=364之下，則ISOQUAD-CDDP的狀態變數數目=364; 若ANN僅以六口觀測井作爲模擬代表，則ANN-CDDP的狀態變數數目簡化成 6，故ISOQUAD-CDDP的狀態變數數目遠大於ANN-CDDP的狀態變數數目。又由於CDDP的計算量與狀態變數數目的三次方成正比，ISOQUAD-CDDP的計算量隨著格網範圍(狀態變數數目)增大而遽增，但是ANN-CDDP的計算量不隨著模擬範圍而改變，相對而言小得多。

根據這項特性ANN-CDDP能以少數且關鍵的狀態變數來代表整個系統，有效地降低狀態變數數目，對整個演算法之效率會有很大之幫助，因此本研究主要發展CDDP結合ANN以減少狀態變數的數目，使得計算量更能有效率。

表3.1： CDDP計算量估計(Chang (1992) ; Mansfield et al. (1998))

項目	CDDP	
	維度	計算量
$\tilde{A}_t$	$R^{2n \times 2n}$	$16n^3$
$\tilde{B}_t$	$R^{2n \times m}$	$8n^2m$
$\tilde{C}_t$	$R^{m \times m}$	$4n^2m + 2nm^2$
$\tilde{D}_t$	$R^{m \times 1}$	$4nm$
$\tilde{E}_t$	$R^{2n \times 1}$	$4n^2$

## 四、地下水流及污染傳輸類神經模式建構

### 4.1 類神經網路模式建構流程

本研究所發展的地下水管理模式(ANN-CDDP)，內層模擬模式不採用地下水流及污染傳輸數值模式，而以類神經網路(ANN)取代之，以提高地下水管理模式之計算效率，類神經網路模式之建立流程如圖 4.1 所示，首先產生訓練資料即以 ISOQUAD 作為地下水流與污染傳輸之模擬模式產生一定數量的模擬資料，從模擬案例中擷取訓練類神經網路所需之輸入輸出資料，再將資料正規化來訓練類神經網路，直到驗證類神經網路模式之準確性後，則完成類神經網路之建立。

ANN 模式之建立步驟闡述如下：

#### 步驟一、訓練資料產生

本研究應用地下水流及污染傳輸數值模式(ISOQUAD)，模擬一均質、等向的二維含水層之水位及濃度變化，作為類神經網路學習資料的來源。

為了資料產生的普及性，每一口井之抽水量以隨機函數決定，抽水量上下限的範圍設定可因案例而有所不同，本研究以地下水污染整治問題為例，每一口井的抽水量上下限設定從 0 到 0.1cms 之間，隨機決定，經由 ISOQUAD 模擬，產生 3000 筆地下水水位及濃度等資料。

#### 步驟二、資料擷取、整理與正規化

選擇輸入及輸出的變數對於類神經網路的學習相當重要，在水流類神經模式方面，各時刻井的抽水量影響到下一時刻的地下水位，故選擇的輸入變數為  $t$  時刻的水位及抽水量，輸出變數為  $t+1$  時刻的水位；以地下水流及污染傳輸而言，汙染質受到水流傳輸及濃度擴散等等機制影響，模式的輸入變數為  $t$  時刻的水位、濃度及抽水量，輸出變數為  $t+1$  時刻的水位及濃度。訓練前將輸入與輸出變數映射至 -1 到 1 之間，稱為資料之正規化。

#### 步驟三、類神經網路模式之學習與驗證

(1) 本研究類神經網路為一動態系統，類神經網路的輸入為  $t$  時刻的狀態變數 ( $x(t)$ ) 以及  $t$  時刻的控制變數 ( $u(t)$ )，輸出為  $t+1$  時刻的狀態變數 ( $x(t+1)$ )。其

中控制變數即各井抽水量，狀態變數即水位或濃度，以地下水流模式而言，狀態變數為地下水水位；以污染傳輸模式而言，狀態變數包含了地下水水位及汙染濃度。

- (2) 類神經網路的類型很多，如倒傳遞類神經網路(BPN)、回饋式類神經網路(RNN)、幅狀基底函數類神經網路(RBF)、自組特徵映射類神經網路(SOM)等，本研究採用一般最普遍的倒傳遞類神經網路，學習法則是採用 Levenberg-Marquardt(LM)演算法，說明如附錄 A。
- (3) 本研究運用 MATLAB 之 Neural Network 函式庫建立類神經網路，類神經網路的架構可由試誤決定，本研究的地下水流類神經網路模式有三層網路結構，包含一層輸入層、一層隱藏層、一層輸出層，其中隱藏層含有 10 個節點，輸入層至隱藏層與隱藏層之間的轉換函數採用雙彎曲線函數，隱藏層至輸出層則採用線性轉換函數。若系統更為複雜，如地下水流及污染傳輸(水量與水質)類神經網路模式，隱藏層層數和神經元個數經由試誤決定(請參考 4.2.1 節最後段)，各個網路結構皆為四層，包含一層輸入層、兩層隱藏層、一層輸出層，其中隱藏層含有 10 個節點，輸入層至隱藏層與隱藏層之間的轉換函數採用雙彎曲線函數，隱藏層至輸出層則採用線性轉換函數。
- (4) 本研究類神經網路訓練精度以地下水流模式的均方誤差不得大於  $10^{-5}$ ，污染傳輸模式的均方誤差不得大於  $10^{-4}$ ，並且為了避免訓練時間過長，設定最大疊代次數為 200 次。
- (5) 完成訓練後，本研究於驗證階段，若地下水流模式均方誤差大於  $10^{-2}$ ，或污染傳輸模式均方誤差大於 0.5，則類神經網路需重新訓練。
- (6) 當類神經網路建立完成後，透過長期動態預測的方式進行檢驗，驗證類神經網路是否具備強健性與適用性。所謂的長期動態預測，其流程如圖 4.2 所示，類神經網路根據  $t$  時刻狀態及決策，預測  $t+1$  時刻之狀態，所預測的狀態將作為後續時刻的輸入之用，所以只要給定最初時刻的狀態以及各時刻的決策，類神經網路就可以動態預測出各時刻的狀態。

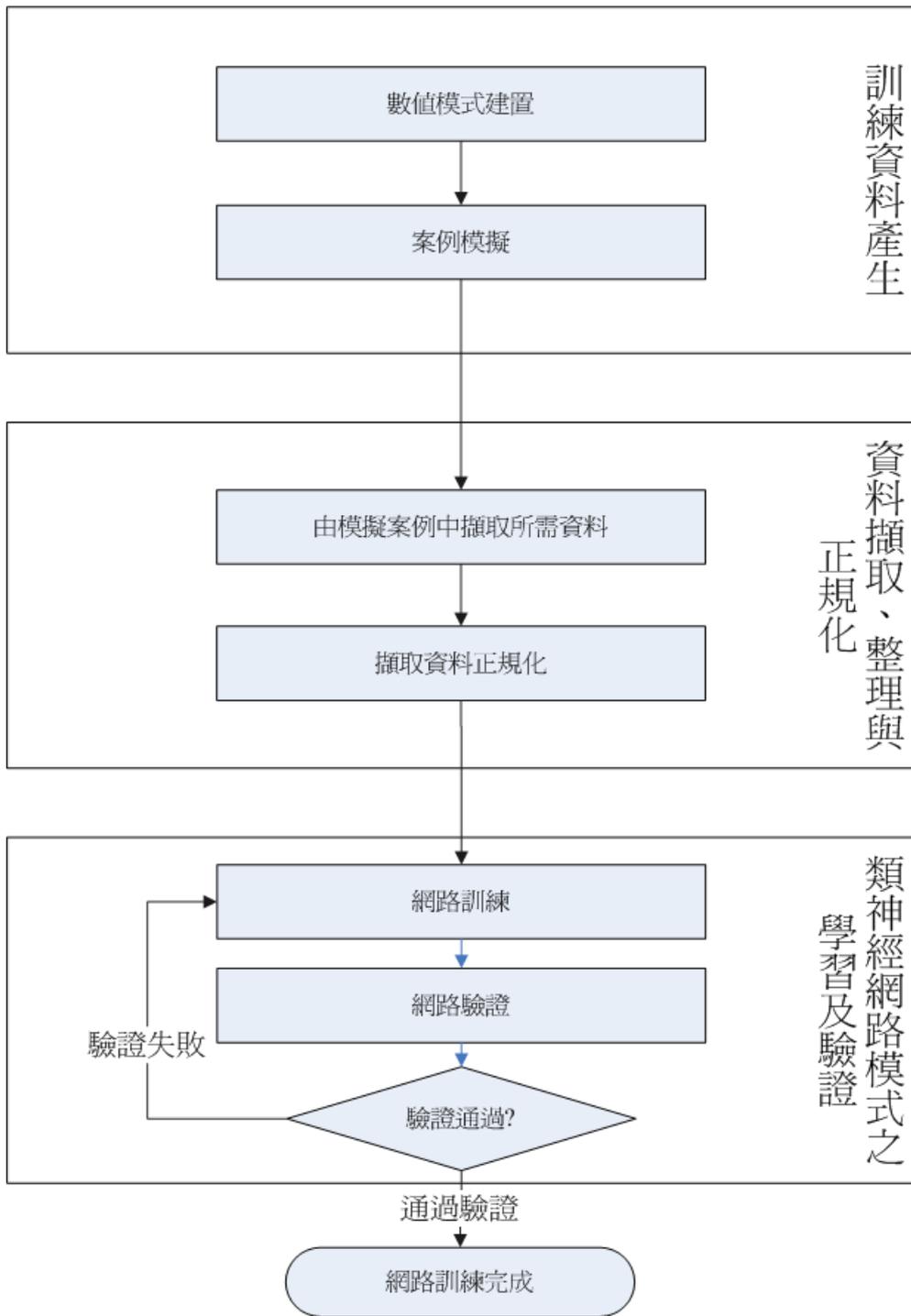


圖 4.1 ANN 模式之建立

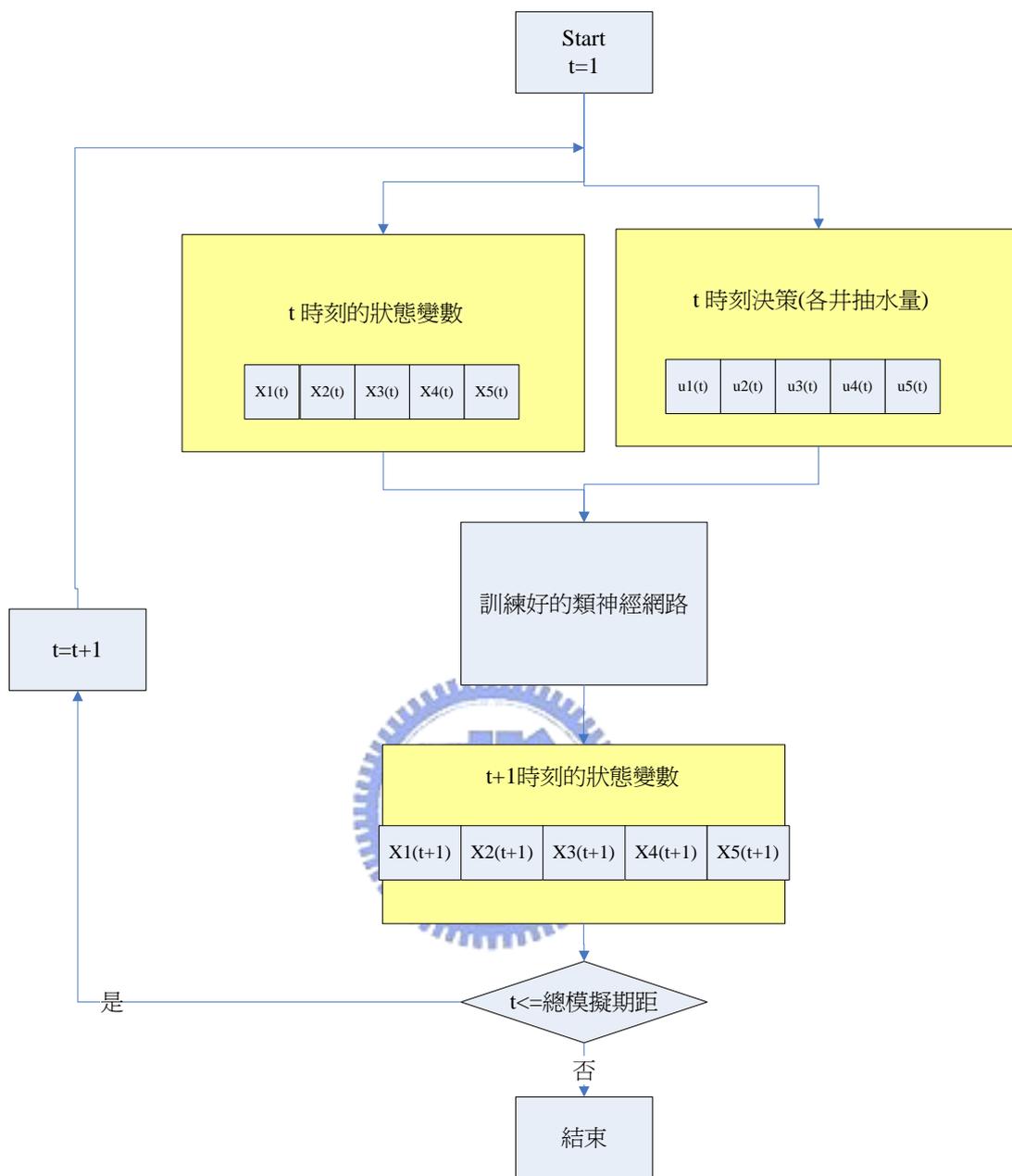
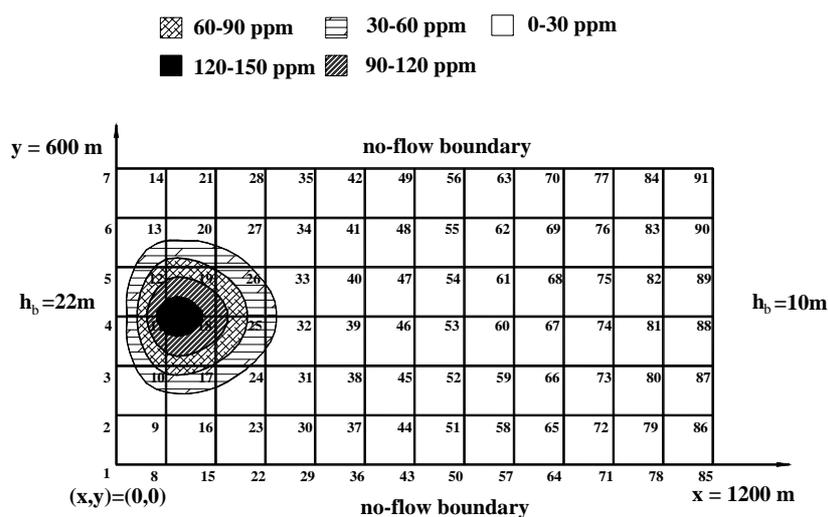


圖 4.2 地下水類神經模式長期動態預測流程圖

## 4.2 類神經網路模式建立與驗證

根據前述之類神經網路建置流程來建立類神經模式，建置類神經網路的基本架構，包含了層數、每層神經元個數、隱藏層層數等，以及採用的學習演算法等，已有諸多的文獻可參考，但是對於如何應用類神經網路於地下水流及水質之動態預測，尙未有相關研究提出，因此本研究設計一些主題進行探討，包含地下水流及水質模式架構、觀測井位置及數量、抽水量型態分佈之影響等主題。

本研究依據建立類神經網路流程來，以地下水流和汙染傳輸模式為例進行動態預測。將以一汙染整治案例展示及驗證動態預測之準確性，由於汙染整治問題同時需求解水流與汙染傳輸方程式，利用汙染整治案例可同時驗證水量與水質類神經網路之動態預測，其中汙染整治問題中只要水流部分即可驗證水量模式之動態預測。地下水流區域示意圖如圖 4.3 所示，模擬範圍係 600(m)×1200(m)大小的矩形，切割分成 7×13 個節點，其中水力傳導係數為  $4.31 \times 10^{-4}$  m/s (m/sec)，有效孔隙率為 0.2，儲水係數為 0.001，含水層的厚度為 10(m)。邊界設定為上下兩邊為無流量邊界條件，左右兩邊的邊界條件為定水頭邊界條件，分別為 22(m)及 10(m)，所以邊界條件供應的水流方向為由左向右流。初始條件則以尙未設置抽水井時，相同邊界條件之穩態水位作為系統之初始水位。模擬之總規劃時期為 5 年，並將此 5 年時間分割成 20 個規劃時刻，而每一個時刻為三個月。



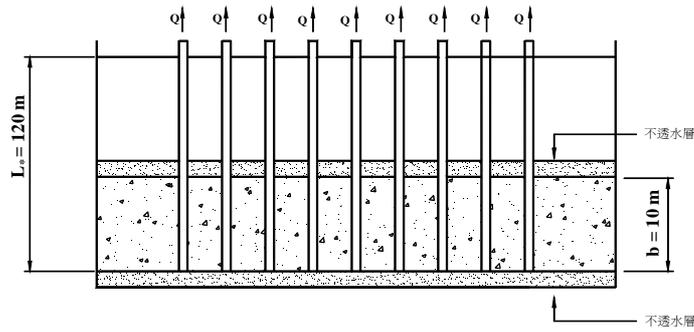


圖 4.3 簡化之地下水流區域示意圖

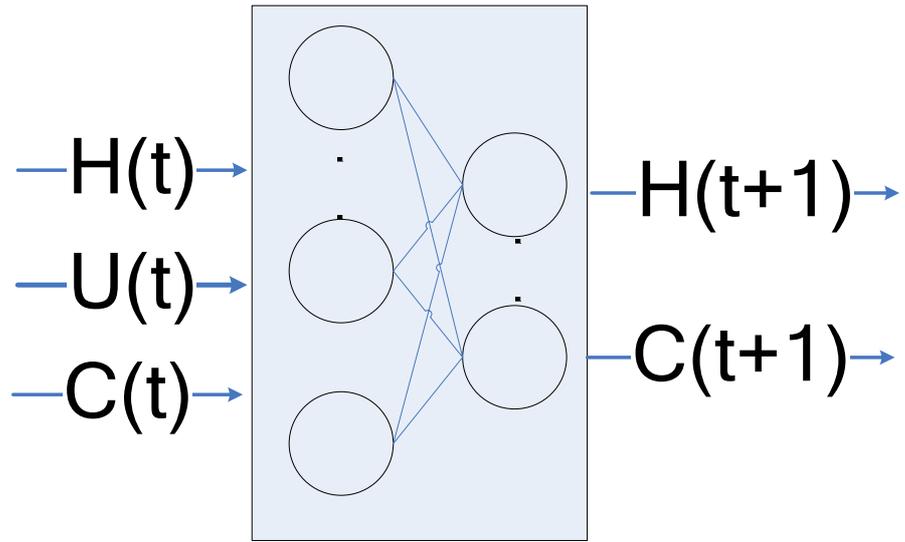
#### 4.2.1 類神經網路模式架構

由於地下水水流及污染傳輸模式包含兩條控制方程式且有水位及濃度兩種狀態變數，為一非線性系統，不易訓練與預測，於是本研究分別以下兩種架構訓練類神經網路來預測地下水水流及污染傳輸，分別為(1)單個類神經網路模式，(2)類神經網路群模式，如下描述：

(1)單個類神經網路模式：圖 4.4(a)為單個類神經網路模式之網路架構，此類神經網路映射出單一組地下水水流及污染傳輸的輸入輸出關係，如 Eq(4.1)。

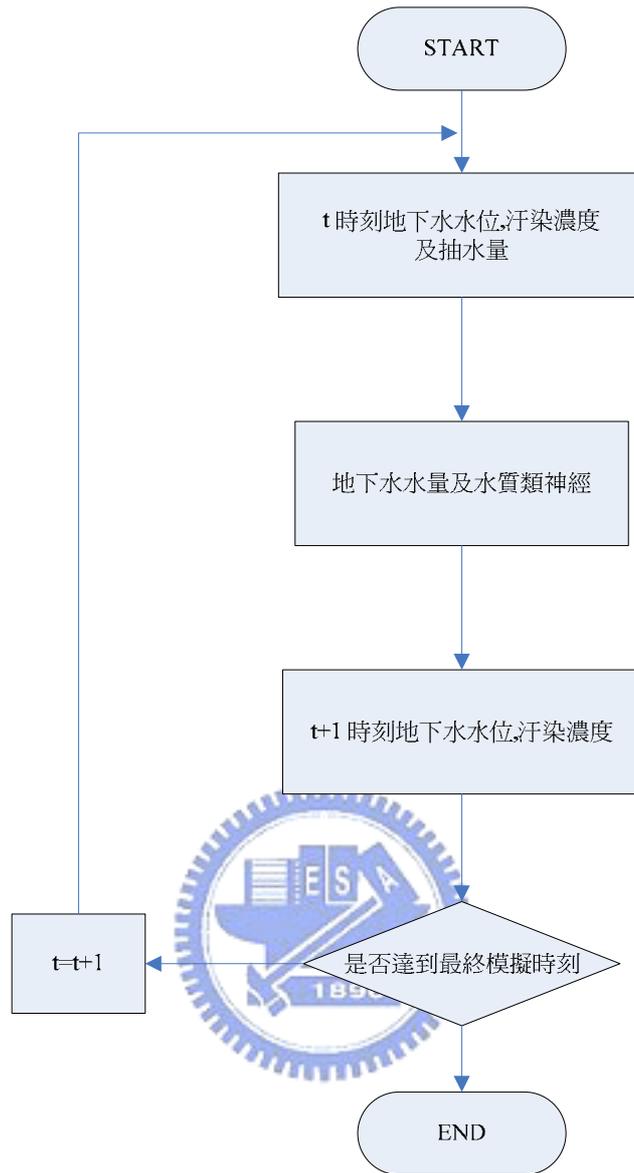
$$\{c_{t+1}, h_{t+1}\} = f(c_t, h_t, u_t) \quad (4.1)$$

其中 Eq(4.1)的輸入向量包括  $h_t, c_t$  及  $u_t$ ，共  $(2n+m)$  維度，輸出向量包括  $h_{t+1}$  及  $c_{t+1}$ ，為  $(2n)$  維度，其中  $n$  是狀態變數(觀測井)的數目， $m$  是控制變數(抽水井)的數目。模式的長期預測流程如圖 4.4(b)，給定初始水位和濃度與當時時刻的抽水量，經由此類神經網路模式，得到下一時刻的水位和濃度，作為預測後續時刻的輸入之用。



(a) 網路架構圖





(b) 長期動態預測流程圖

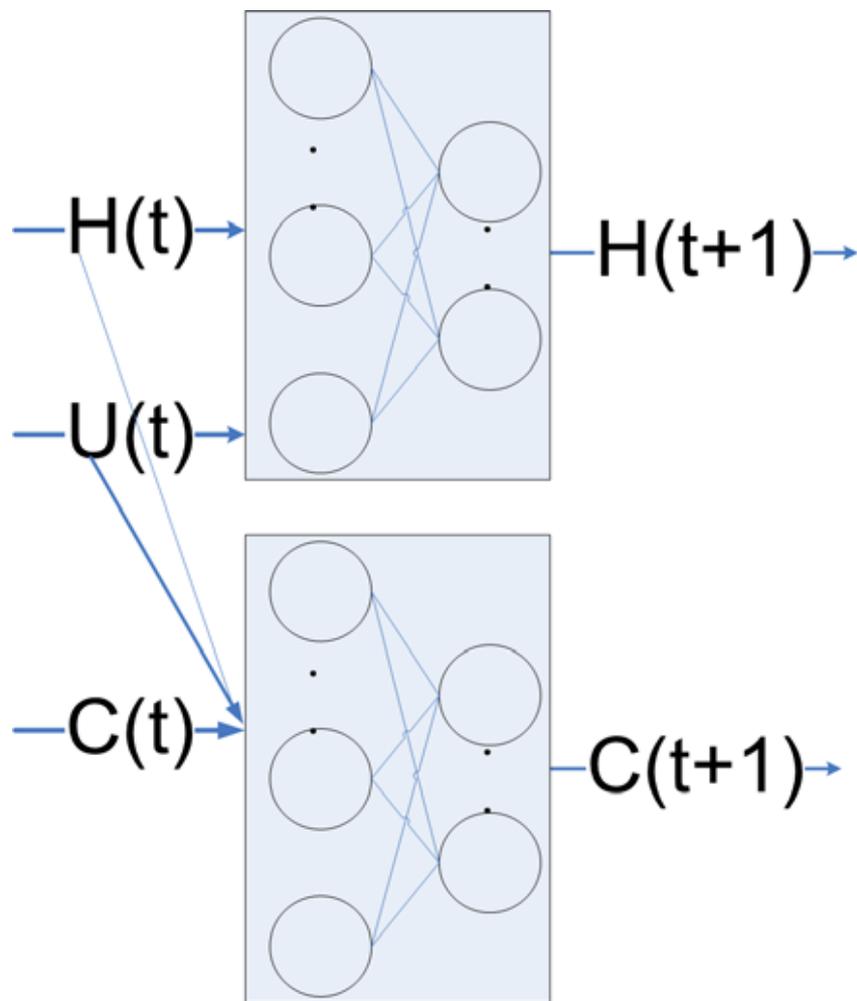
圖 4.4 地下水單個類神經網路模式

(2)類神經網路群模式: 圖 4.5(a)為類神經網路群網路架構，其架構仿照地下水流與污染傳輸控制方程式 Eq(2.1)與 Eq(2.2)，包含地下水流類神經網路及水質類神經網路兩個子模式。網路群模式藉由兩個類神經網路映射兩組輸入輸出關係式，其中水量類神經網路描述地下水流的輸入輸出關係，關係式寫成 Eq(3.2)，Eq(3.2)的輸入向量有  $h_t, u_t$ ，維度為  $(n+m)$ ，輸出向量  $(h_{t+1})$ ，維度為  $n$ ，而水質類神經網

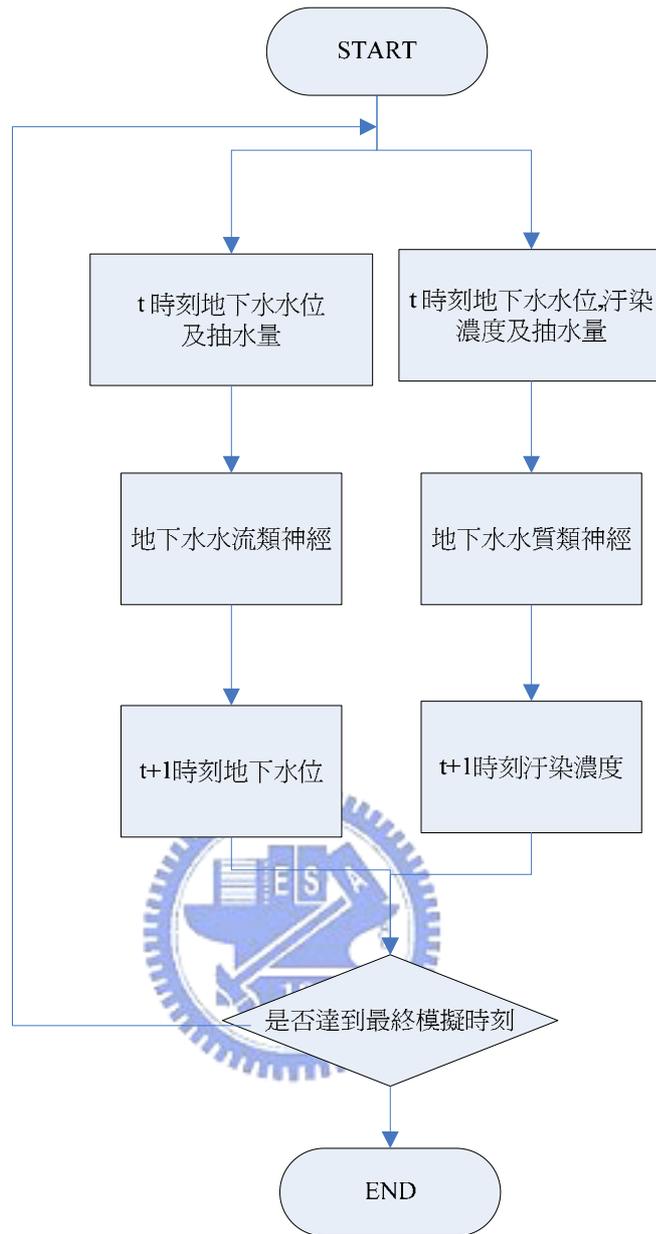
路描述地下水污染傳輸的輸入輸出關係，其輸入輸出關係式為 Eq(3.3)，Eq(3.3) 的輸入向量為  $c_t, h_t, u_t$ ，共有  $(2n+m)$  維度，輸出向量  $(c_{t+1})$ ，維度為  $n$ 。如圖 4.5(b) 地下水流與水質類神經網路群模式長期預測之流程，輸入當時刻的抽水量、地下水水位，經由水量類神經網路模式得到下一時刻的水位；同時，輸入當時刻的抽水量、地下水水位，以及污染濃度，經由地下水質類神經網路模式得到下一時刻的濃度。

$$\{h_{t+1}\} = g_1(h_t, u_t) \quad (3.2)$$

$$\{c_{t+1}\} = g_2(c_t, h_t, u_t) \quad (3.3)$$



(a) 網路架構圖



(b)長期動態預測流程圖

圖 4.5 地下水類神經網路群模式

本研究採用均方誤差(式(4.2))與均方根誤差(式(4.3))為評估指標，測試兩種模式架構對於地下水水位及污染濃度預測的影響。

$$\text{均方誤差(MSE)} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (T_i - P_i)^2 \quad (4.2)$$

$$\text{均方根誤差(RMSE)} = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (T_i - P_i)^2} \quad (4.3)$$

其中  $T_i$  為第  $i$  個類神經網路模擬值， $P_i$  為第  $i$  個類神經網路預測值。

測試案例一佈井之位置，如圖 4.6 所示，該模擬問題具對稱性，爲了減少計算量，採用對稱設井，包含一口抽水井和四口觀測井，其中在圖形中方塊狀爲觀測井，而三角型代表抽水井。根據此問題，單個類神經網路模式有 9 個輸入(包含當時的水位、濃度、抽水量)和 8 個輸出(包含下一時刻水位、濃度)，而網路群模式藉由兩個類神經網路映射兩組輸入輸出關係式，其中水量類神經網路有 5 個輸入(包含當下時刻水位、抽水量)和 4 個輸出(下一時刻水位)，水質類神經網路有 9 個輸入(包含當下時刻濃度、抽水量)和 4 個輸出(下一時刻濃度)。

此案例中抽水井之時變抽水率，如圖 4.7 所示，藉由相同佈井位置下，比較兩種不同架構之類神經預測誤差(以傳統模擬模式(ISOQUAD)爲基準)，表 4.1 與表 4.2 中分別爲兩架構之水位及濃度預測值與觀測值(ISOQUAD 模擬值)之均方根誤差，研究結果發現不管類神經網路架構是單個類神經網路或是多個類神經網路(類神經網路群)，均可準確預測，而且類神經網路預測的水位及濃度與傳統模擬模式之模擬值幾乎相同。如圖 4.8 所示，以類神經網路群架構的 ANN 模擬出 20 個規劃時刻之水位以及濃度變化的趨勢，直線表示 ISOQUAD 模擬值(觀測值)，點表示 ANN 模擬值。圖 4.9 爲以類神經網路群架構的水位以及濃度預測值與實際值之比較，水位預測與實際值的座標範圍分別爲 0~25m，濃度的座標範圍爲 0~60ppm，都顯示 ANN 可以準確地動態預測。

雖然單一網路與網路群等兩種模式架構皆可準確的預測水位以及污染濃度的變化，唯類神經網路群之預測均方根誤差較小，在預測精度上較佳，尤其水位的預測上精度提高一個小數點位，採用類神經網路群之模式架構，多個類神經網路一起訓練，使得每個獨立網路的輸入輸出變數維度較小，訓練較準確及有效率。除了預測準確的優點之外，亦可平行訓練水量類神經模式與水質類神經模式，只要當其中一個 ANN 模式誤差太大時，可以單獨抽換掉此模式，因此訓練

上較為彈性及方便。

總之，採用網路群架構之類神經模式，具有預測的均方根誤差比較小，以及平行訓練等優點，其求解變數的順序也與傳統模擬模式一致，因此本研究後續將採用類神經網路群之架構來訓練類神經網路。

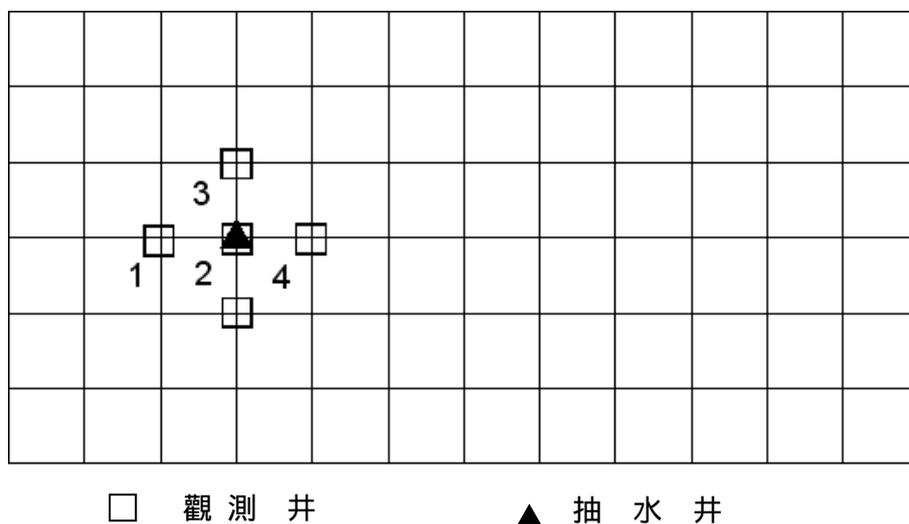


圖 4.6 測試案例 1 配置圖

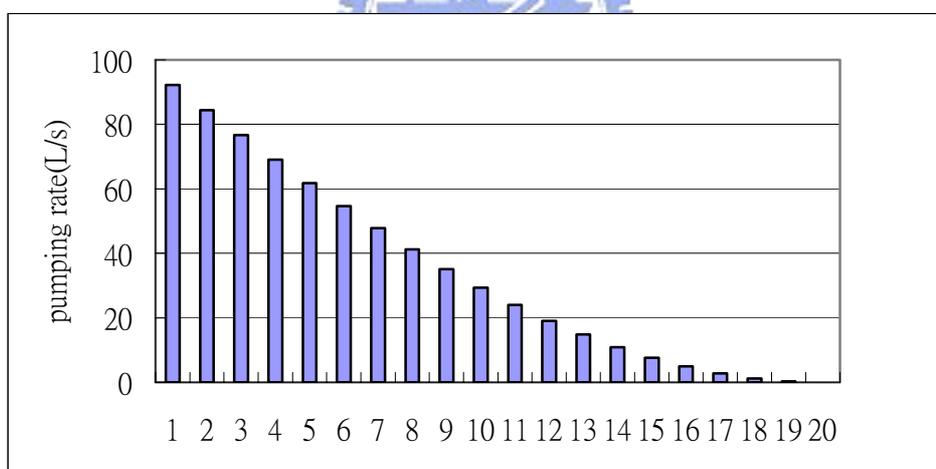


圖 4.7 測試案例之時變抽水量

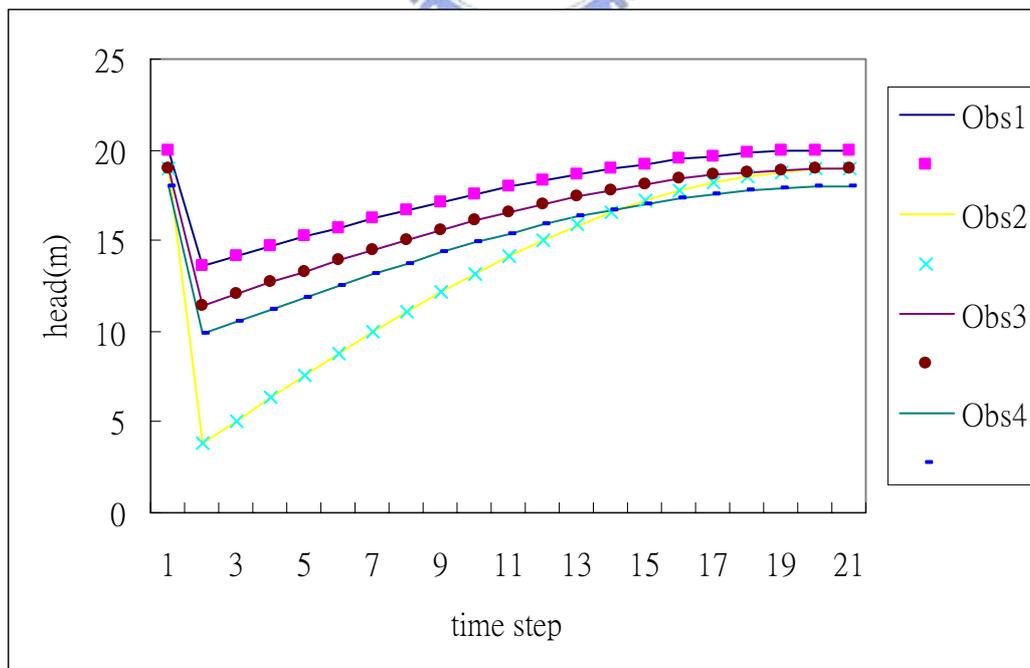
表 4.1 測試案例 1 之水位均方根誤差

水位均方根誤差
---------

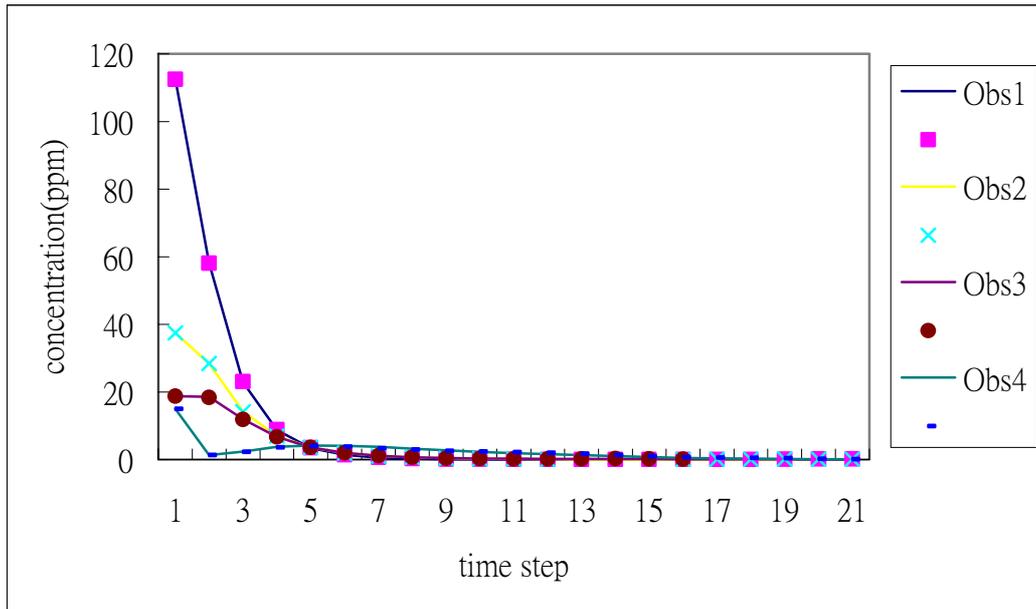
	井位 1	井位 2	井位 3	井位 4
測試案例 1-1 (單個類神經)	0.0063	0.0018	0.0072	0.0075
測試案例 1-2 (類神經網路群)	0.0003	0.0004	0.0009	0.0008

表 4.2 測試案例 1 之濃度均方根誤差

濃度均方根誤差				
	井位 1	井位 2	井位 3	井位 4
測試案例 1-1 (單個類神經)	0.1817	0.1178	0.1540	0.2734
測試案例 1-2 (類神經網路群)	0.0882	0.0779	0.1354	0.2368

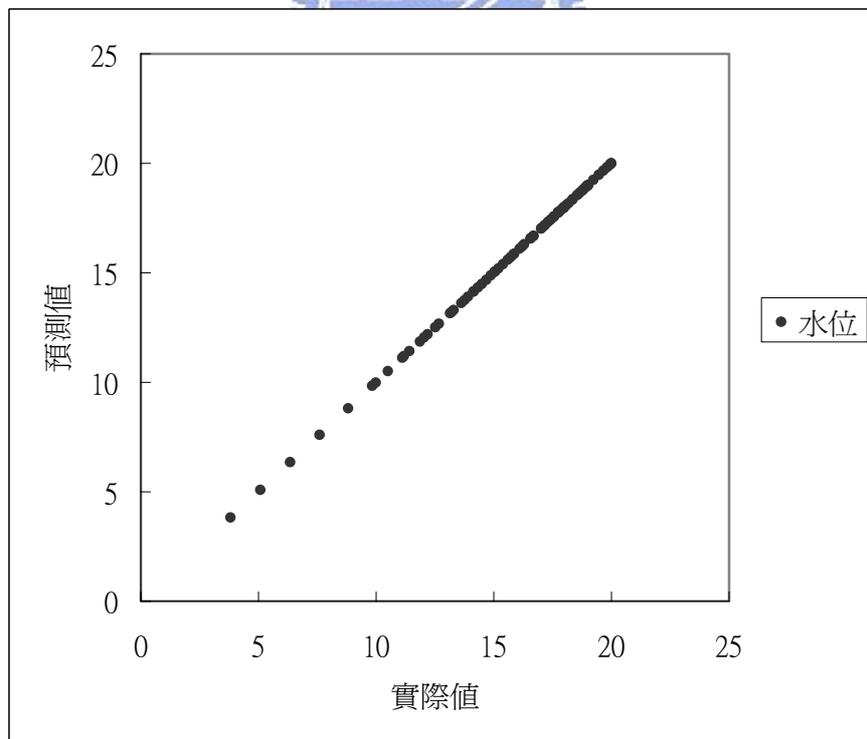


(a) 各個時刻水位(線表示 ISOQUAD 模擬值，點表示 ANN 模擬值)

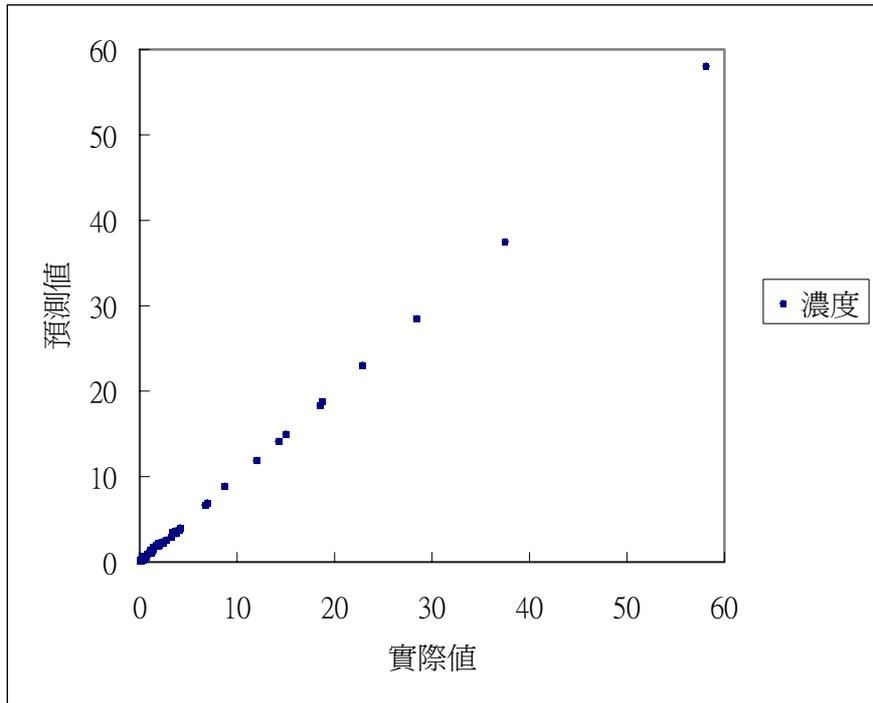


(b) 各個時刻濃度(線表示 ISOQUAD 模擬值，點表示 ANN 模擬值)

圖 4.8 測試案例 1 水位、濃度趨勢比較圖(類神經網路群)



(a)測試案例 1 水位預測與實際值比較



(b)測試案例 1 濃度預測與實際值比較

圖 4.9 測試案例 1 水位、濃度預測與實際值比較(類神經網路群)

## 隱藏層層數和神經元個數之決定

本研究決定網路群之架構後，網路中隱藏層層數和神經元個數之決定對類神經的預測也有相當大的影響，本研究類神經的隱藏層層數和神經元個數是以試誤法來決定，網路權重的數目之決定將影響網路描述系統的能力，當神經元個數過少，使得類神經沒有足夠的權重來描述訓練資料，無法建構適當函數來描述系統，反之，當神經元個數過多時，過多權重造成自由度太高，對於訓練案例會有過度描述的現象。

本研究以前述之測試案例 1.2 (採用類神經網路群的模式架構)作測試，經過測試後，發現水量類神經模式之隱藏層層數和神經元個數對預測結果之影響不大，但水質類神經模式的隱藏層層數和神經元個數，對預測結果影響較大。案例中有四口觀測井及一口抽水井，水量類神經模式的輸入層神經元(包含 t 時刻的觀測井水位、與抽水井抽水量)，其個數為 5，輸出層神經元(t+1 時刻的觀測井水位)個數為 4；水質類神經模式的輸入層神經元(包含 t 時刻的觀測井水位、濃度、與抽水井抽水量)，其個數為 9，輸出層神經元(t+1 時刻的觀測井濃度)個數為 4。

表 4.3 列出水質類神經模式不同的隱藏層層數和神經元個數與驗證誤差的關係，包括隱藏層層數為 1 或是 2，與隱藏層神經元個數為 5 或 10 或 20 等六種排列組合訓練後之驗證結果。根據表 4.3 比較其訓練時濃度均方誤差(MSE)以及驗證時濃度均方根誤差(RMSE)，與計算時間(以 AMD Athlon(tm)XP2000+1.54GHz 為計算平台)，經過比較後發現水質模式的隱藏層層數採用 2，以及隱藏層神經元個數採用 10，其訓練精度達標準與兼具計算效率，驗證階段之 RMSE 平均值又最小，因此本研究後續案例的隱藏層層數和神經元個數，都採用此網路結構，包含一層輸入層、兩層隱藏層、一層輸出層，其中隱藏層含有 10 個節點。

表 4.3 隱藏層層數神經元個數之敏感度分析

編號	1	2	3	4	5	6
隱藏層層數	1	1	1	2	2	2
神經元個數	5	10	20	5-5	10-10	20-20
訓練階段之 MSE	5.12e-5	1.83 e-6	1.14 e-5	2.76e-5	3.16e-6	1.46e-6
訓練時間(Sec)	372	1420	2820	531	3210	9590
井 1 驗證階段之 RMSE	0.086	0.063	0.086	0.066	0.071	0.040
井 2 驗證階段之 RMSE	0.066	0.040	0.041	0.044	0.064	0.026
井 3 驗證階段之 RMSE	0.233	0.372	0.210	0.443	0.152	0.232
井 4 驗證階段之 RMSE	0.935	0.453	0.232	0.527	0.136	0.184
RMSE 平均值	0.330	0.232	0.142	0.270	0.106	0.120

#### 4.2.2 觀測井位置及數量對類神經網路預測之影響

本節的案例設計來探討包括觀測井的數量及位置對於地下水類神經模式之影響，各個模擬案例的觀測井網數量及位置，如表 4.4 之介紹，共有八口候選觀測井以及一口抽水井，且假設抽水井的抽水率與測試案例一相同，地下水井網配置如圖 4.10 所示，其中方塊狀為觀測井，三角型為抽水井。

觀測井數及位置對預測結果之影響，如表 4.5 所示，發現各個案例各觀測井的水位及濃度均方根誤差，除了測試案例 2-2 外，其餘案例的濃度均方根誤差皆達到預測誤差範圍之內。並從測試案例 2-5 之 ISOQUAD 模式與類神經預測水位與濃度圖，如圖 4.11 所示，可發現 ISOQUAD 模式與類神經預測水位與濃度兩者趨勢相當一致。在不同的觀測井數量及位置下，本案例除了單口觀測井(測試案例 2-2)以外，其他井網的類神經網路動態預測誤差都在容許範圍，證明類神經網路預測具有強健性。

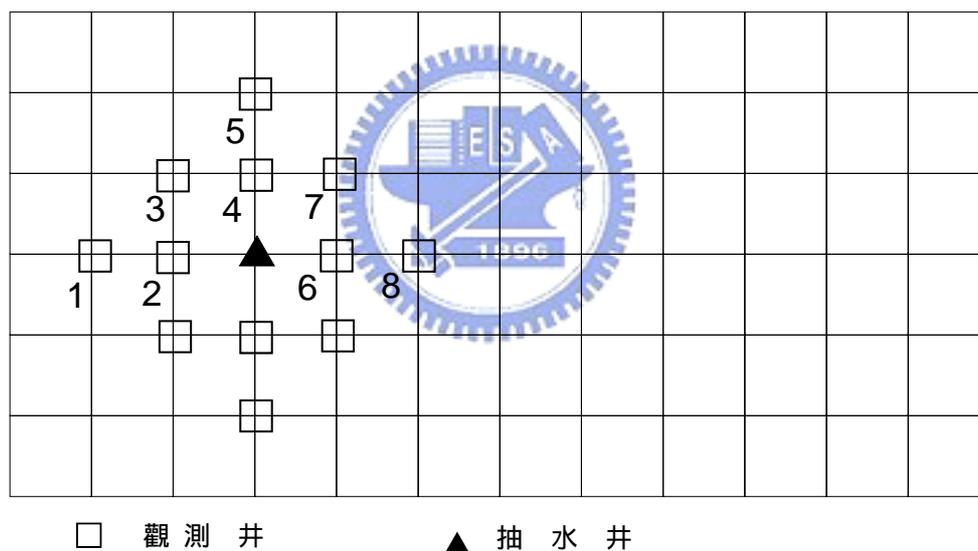


圖 4.10 測試案例 2 配置圖

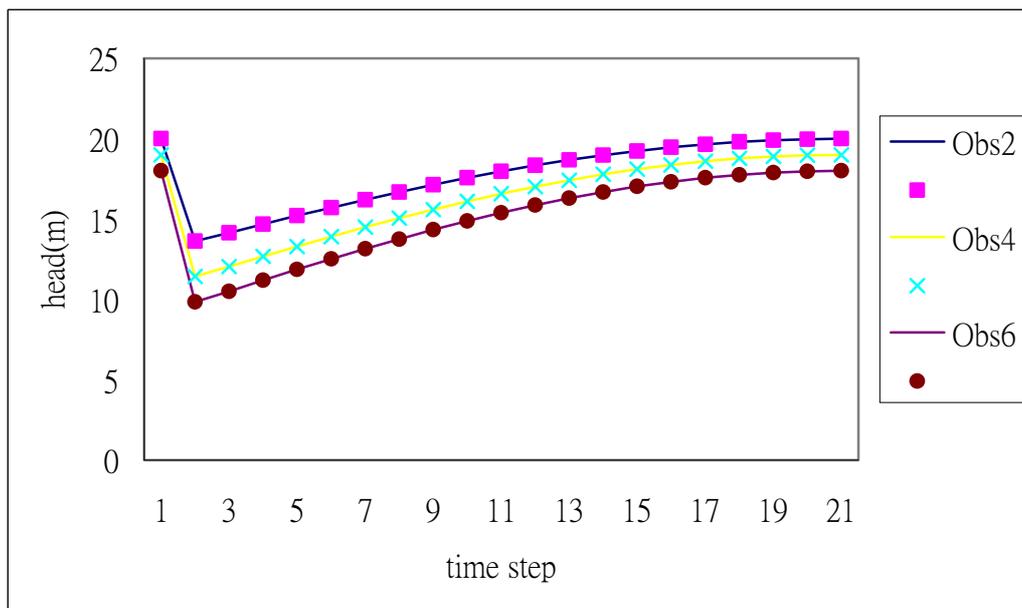
表 4.4 測試案例 2 說明

案例	觀測井數量	觀測井位置
測試案例 2-1	1	2
測試案例 2-2		6
測試案例 2-3	2	2, 4
測試案例 2-4		4, 6
測試案例 2-5		2, 6
測試案例 2-6	3	2, 4, 6
測試案例 2-7	5	2, 3, 4, 6, 7
測試案例 2-8	8	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8

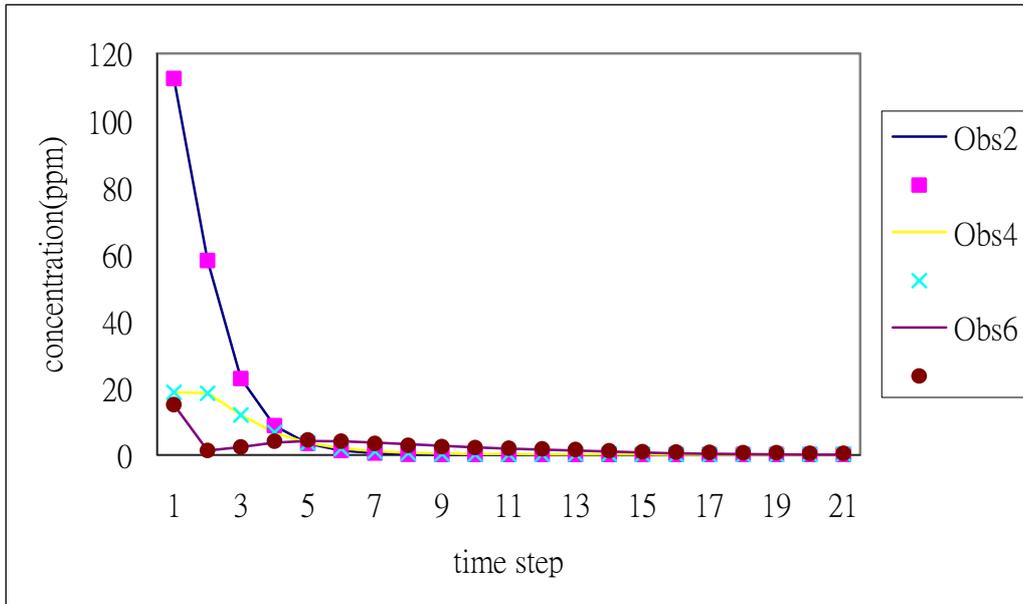
表 4.5 測試案例 2 之水位與濃度均方根誤差  
(a) 水位均方根誤差

觀測井位	1	2	3	4	5	6	7	8
測試案例 2-1 (一口觀測井)		0.0018						
測試案例 2-2 (一口觀測井)						0.0003		
測試案例 2-3 (二口觀測井)		0.0004		0.0007				
測試案例 2-4 (二口觀測井)				0.0002		0.0003		
測試案例 2-5 (二口觀測井)		0.0001				0.0003		
測試案例 2-6 (三口觀測井)		0.0001		0.0001		0.0003		
測試案例 2-7 (五口觀測井)		0.0001	0.0004	0.0001		0.0003	0.0006	
測試案例 2-8 (八口觀測井)	0.0002	0.0003	0.0001	0.0005	0.0002	0.0007	0.0014	0.0003

(b)濃度均方根誤差								
觀測井位	1	2	3	4	5	6	7	8
測試案例 2-1 (一口觀測井)		0.0527						
測試案例 2-2 (一口觀測井)						2.2589		
測試案例 2-3 (二口觀測井)		0.1717		0.2815				
測試案例 2-4 (二口觀測井)				0.4873		0.2546		
測試案例 2-5 (二口觀測井)		0.0342				0.4760		
測試案例 2-6 (三口觀測井)		0.1271		0.3675		0.3587		
測試案例 2-7 (五口觀測井)		0.0959	0.1211	0.3919		0.2648	0.4692	
測試案例 2-8 (八口觀測井)	0.1572	0.1179	0.1413	0.4796	0.2008	0.4979	0.3906	0.2917



(a) 測試案例 2-5 水位趨勢比較



(b) 測試案例2-5濃度趨勢比較

圖 4.11 測試案例 2-5 水位與濃度趨勢圖



## 相關分析

本研究接下來以統計觀點透過相關分析來瞭解類神經網路中輸入輸出變數間是否為線性關係。兩個變數之間“直線關係”的強弱程度與方向，通常以相關係數(correlation coefficient)為相關分析的判斷指標，相關係數的值恆介於-1 與+1 之間。相關係數+1 表示兩變數為完全正向線性相關，表示所有的點落於斜率為正的直線上；-1 表示兩變數為完全負向線性相關，表示所有的點落於斜率為負的直線上；若相關係數的值非常接近零，則表示兩變數無線性關係。

本研究藉由相關分析衡量輸入輸出變數間的關係，表 4.6 中案例 2.1 和 2.2 當下時刻抽水量與下一時刻濃度( $u_t, c_{t+1}$ )的相關係數接近零，表示當時的抽水量與下一時刻濃度之間的關係不是一線性關係，表示地下水水流與污染傳輸不是一線性問題，單純以傳統響應矩陣法或是迴歸等線性方式，受限於本身線性特性，不適合求解此類問題，因此本研究利用類神經網路來模擬此類問題。

經由相關性分析可知(如表 4.6 所示)，不論案例 2.1 或是 2.2 下一時刻預測水位( $h_{t+1}$ )與當下時刻的抽水量( $u_t$ )呈現線性關係，但是下一時刻預測濃度( $c_{t+1}$ )與當下抽水量( $u_t$ )並無線性關係，且由表 4.5 可發現類神經預測下一時刻水位均方根誤差小於濃度預測均方根誤差，因此可以發現類神經預測變數與輸入變數呈線性關係之預測誤差小於與其呈非線性關係之預測誤差。

比較測試案例 2.1 和 2.2 不同觀測井位置的濃度預測誤差，發現觀測井位在下流(案例 2- 2)的類神經預測濃度誤差明顯比觀測井位在上游(案例 2-1)來得大，再觀察表 4.6 水質類神經模式的下一時刻濃度( $c_{t+1}$ )與其他輸入變數間的相關係數，發現案例 2-2 下一時刻濃度與該時刻狀態的相關係數( $c_t, c_{t+1}$ )及( $h_t, c_{t+1}$ )皆比案例 2-1 小，因此案例 2-2 下一時刻濃度相較於案例 2-1 更具有非線性特性，所以類神經預測變數與輸入變數呈線性關係(案例 2-1)之預測誤差小於與其呈非線性關係之預測誤差(案例 2- 2)。

本研究經由預測結果與相關性分析，發現雖然類神經網路為一非線性預測之工具，但是類神經網路預測變數與輸入變數呈線性關係之預測誤差小於與其呈非線性關係之預測誤差。

表 4.6 測試案例 2-1 及 2-2 之相關性分析

計算之變數	計算之案例	相關係數值
$u_t : h_{t+1}$	測試案例 2-1	-1
	測試案例 2-2	-1
$h_t : h_{t+1}$	測試案例 2-1	0.0691
	測試案例 2-2	0.0698
$u_t : c_{t+1}$	測試案例 2-1	-0.0821
	測試案例 2-2	-0.0945
$c_t : c_{t+1}$	測試案例 2-1	0.9830
	測試案例 2-2	0.8624
$h_t : c_{t+1}$	測試案例 2-1	0.3438
	測試案例 2-2	0.1085



## 敏感度分析

本節接著探討一個有趣的問題，測試案例 2-1 和 2-2 都只有一口觀測井，為什麼觀測井位在下游(案例 2- 2)的類神經預測濃度誤差明顯比觀測井位在上游(案例 2- 1)來得大。這是相當複雜的問題，相同觀測井數但位置不同的兩案例存在許多原因，使得預測差距頗大，如網路架構、參數設定、或是資料型態等。經過本研究一一查驗，包括調整網路架構及參數設定等，發現網路架構及參數設定對於預測誤差並沒有大幅的改善，所以排除這些因素的可能。

後來，分析案例 2-1 和 2- 2 中的物理現象才發現此誤差是受到資料型態的影響。分析觀測井附近濃度改變對下一時刻濃度之敏感度，敏感度之推導見附錄 C 式(C.6)，此敏感度矩陣之 Norm 值如表 4.7 所示，可發現案例 2- 2 觀測井附近濃度改變(以下游井位 6 為觀測井)對於此觀測井下時刻濃度的敏感度

$(\text{Norm} \left\{ \frac{\partial C_{6,t+1}}{\partial C_{i,t}} \right\})$  相較於案例 2.1 的  $(\text{Norm} \left\{ \frac{\partial C_{2,t+1}}{\partial C_{i,t}} \right\})$  (以上游井位 2 為觀測井)兩者最大相差到 7 倍，因此說明井位 6 的下一時刻濃度容易受附近濃度場變化的影響，

換句話說，當時刻濃度的空間資訊對於下一時刻濃度的影響相當深遠。

雖然案例 2-1 和 2-2 都只有單口觀測井網，其輸入資料維度比較少，使得類神經網路學習時，缺少空間上連結的資訊，無法反映觀測井附近濃度改變對於該觀測井濃度之影響，但由於案例 2-1 井位 2 之下一時刻濃度不易受到附近濃度改變之影響，此觀測井足以描述系統，ANN 模式可準確預測出下一時刻濃度；但是案例 2-2 的井位 6 下一時刻濃度卻容易受到附近濃度改變之影響，若僅以此觀測井的資訊作為 ANN 的輸入輸出，則缺少系統其他空間上的資訊，造成濃度預測上有較大的誤差。簡而言之，觀測井提供輸入輸出的資訊對於未來預測相當重要，倘若觀測井附近濃度改變對下一時刻濃度的影響不顯著，雖然觀測井數少，既有的濃度資訊就足以提供類神經來預測未來的濃度趨勢。倘若觀測井附近濃度改變對下一時刻濃度的影響顯著，當觀測井太少時，無法反映附近濃度改變對於該觀測井濃度之影響。

藉由敏感度分析證明此現象也是受到資料型態之緣故而造成。資料擷取時，過度簡化資料維度而造成類神經網路輸入輸出關係不明確，產生預測誤差，因此後續設計案例應避免觀測井數太少，而造成預測困難等問題。然而，當訓練類神經網路遇到此問題時，只要增加有效的資料維度，例如多增加一口觀測井(案例 2-3 和 2-4)的輸入輸出資料，就可以避免這樣的問題產生。

表 4.7 測試案例 2-1 及 2-2 之敏感度分析

Time step	$Norm\left\{\frac{\partial C_{2,t+1}}{\partial C_{i,t}}\right\}$ (案例 2- 1)	$Norm\left\{\frac{\partial C_{6,t+1}}{\partial C_{i,t}}\right\}$ (案例 2- 2)	$\frac{\text{欄(3)}}{\text{欄(2)}}$
1	0.003	0.021	6.847
2	0.003	0.024	7.277
3	0.004	0.024	6.629
4	0.004	0.021	5.246
5	0.004	0.016	3.799
6	0.005	0.012	2.566
7	0.005	0.013	2.612
8	0.005	0.018	3.314
9	0.006	0.024	4.023
10	0.007	0.030	4.502
11	0.008	0.036	4.642
12	0.009	0.039	4.372
13	0.010	0.039	3.783
14	0.012	0.039	3.176
15	0.015	0.038	2.588
16	0.019	0.038	2.049
17	0.024	0.039	1.602
18	0.031	0.040	1.273
19	0.038	0.041	1.075
20	0.041	0.041	1.009

#### 4.2.3 抽水型態對類神經網路預測之影響

本節以不同的抽水量型態為輸入，測試 ANN 是否能準確預測下一時刻的水位與污染濃度。本案例的抽水井以及三口觀測井的設井位置參考前述之測試案例 2.6，採用隨機函數產生抽水量及所對應的狀態做為訓練 ANN 的資料，經過訓練後，採用未經訓練三種不同抽水量型態為輸入，例如間歇性抽水(測試案例 3-1)，凸函數(測試案例 3-2)和凹函數(測試案例 3-3)等型態，如圖 4.12 所示，驗證預測的結果是否準確。

結果如表 4.8 所示，發現各案例的均方根誤差皆在可接受的範圍，圖 4.13 (a) 與圖 4.13(b)為觀測井 2 的水位以及濃度趨勢圖，其中以虛線來表示驗證目標值 (ISOQUAD 模擬值)，以點表示之 ANN 預測值，雖然以不同的抽水量型態為輸入，皆可準確預測下一時刻的水位及濃度，水位受到抽水型態的影響很大，當間歇性抽水，類神經網路亦可以準確模擬出水位上下震盪的情形；濃度下降斜率也受到抽水型態不同而略有影響，例如測試案例 3-1 於第二時刻停抽，因此當時濃度下降斜率比其他方案來得平緩，由此證明類神經網路確實能模擬這些物理的現象。

故可得一結論，不論地下水水流及水質類神經網路模式之抽水型態為間歇性抽水，凸函數或是凹函數等型態，只要提供充足的資訊給類神經網路，類神經網路均能準確預測各時刻的水位與濃度。

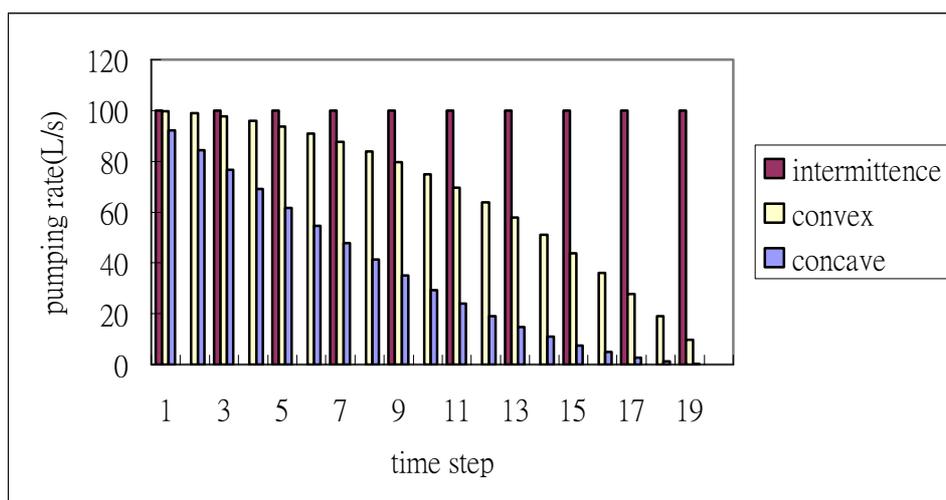
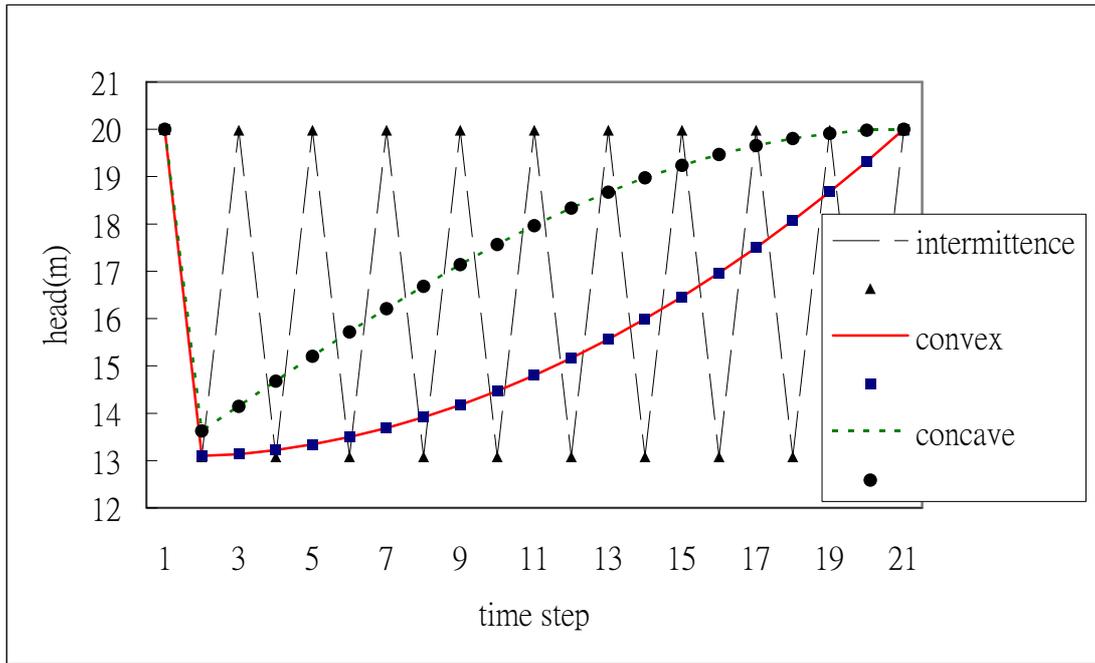
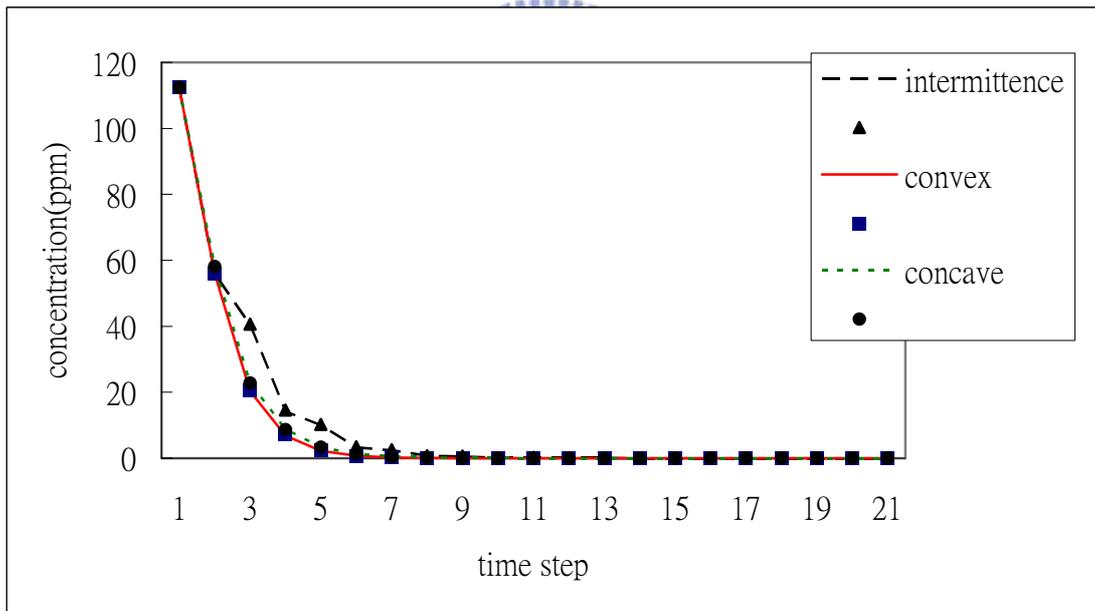


圖 4.12 案例 3 各個時刻抽水量



(a)測試案例 3 井 2 水位趨勢比較圖



(b)測試案例 3 井 2 濃度趨勢比較圖

圖 4.13 測試案例 3 井 2 水位與濃度趨勢比較圖

表 4.8 測試案例 3 之水位與濃度均方根誤差

(a)水位均方根誤差			
	井位 2	井位 4	井位 6
測試案例 3-1 (間歇性抽水)	0.0002	0.0003	0.0002
測試案例 3-2 (凸函數)	0.0001	0.0001	0.0002
測試案例 3-3 (凹函數)	0.0001	0.0001	0.0002

(b)濃度均方根誤差			
	井位 2	井位 4	井位 6
測試案例 3-1 (間歇性抽水)	0.1642	0.4188	0.4279
測試案例 3-2 (凸函數)	0.0870	0.0799	0.2503
測試案例 3-3 (凹函數)	0.0539	0.0944	0.2906

### 4.3 類神經網路微分式之驗證

微分動態規劃以動態規劃的概念為主體，於每個時刻皆對原目標函數及系統轉換函數需作泰勒展開，因此重要程序之一就是對系統轉換函數微分，本研究採用類神經網路為系統轉換函數，類神經網路也是一可微分之函數，有鑑於此本研究透過連鎖律直接得到系統轉換函數之微分項(類神經網路之輸出變數對輸入變數之敏感度)。

為了驗證可利用連鎖律得到該系統轉換函數之微分項，及展示上的方便，本節以常見的三角函數作為實例驗證，以  $y = \sin(x), 0 \leq x \leq 10$  為訓練範本。首先建立及訓練一個單一隱藏層之單輸入單輸出(SISO)類神經網路，隱藏層節點數為 10 個，輸出層與隱藏層之轉換函數均為雙彎曲函數  $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ 。

訓練此類神經網路，使得類神經網路逼近實際數學函式，粉色區段表示實際數學函式，藍色線表示類神經網路模擬值，如圖 4.14 所示。

系統轉換函數微分(敏感度)之推導如 3.3 節，經由推導運算後，得到輸出變數對輸入變數之敏感度，如圖 4.15 所示，與該函數之一階微分( $y' = \cos(x)$ )作比較，粉色區段表示實際數學函式微分值，藍色線表示類神經網路的微分值，可發現僅在輸入變數之上限附近之微分值稍微有些誤差，其餘部份如輸入變數之範圍中間部份能抓住實際函數微分值變化趨勢。

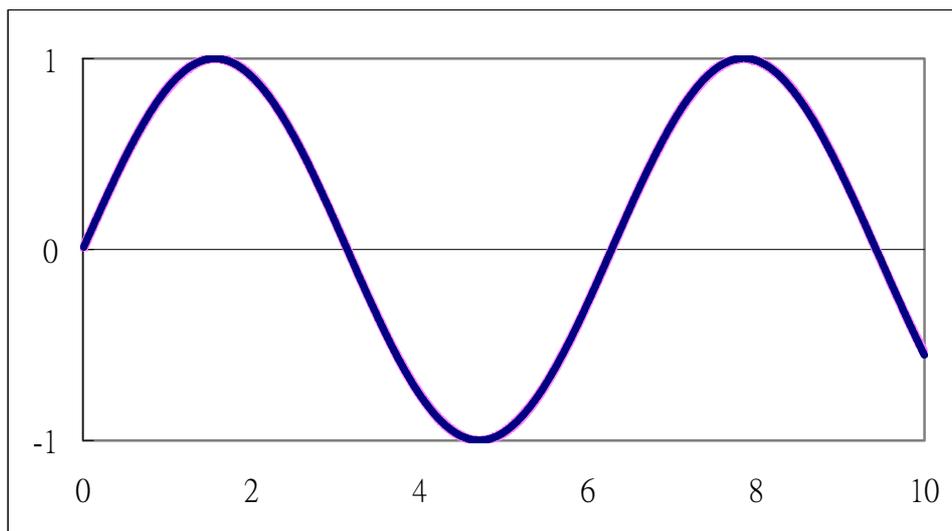


圖 4.14  $y - x$  圖

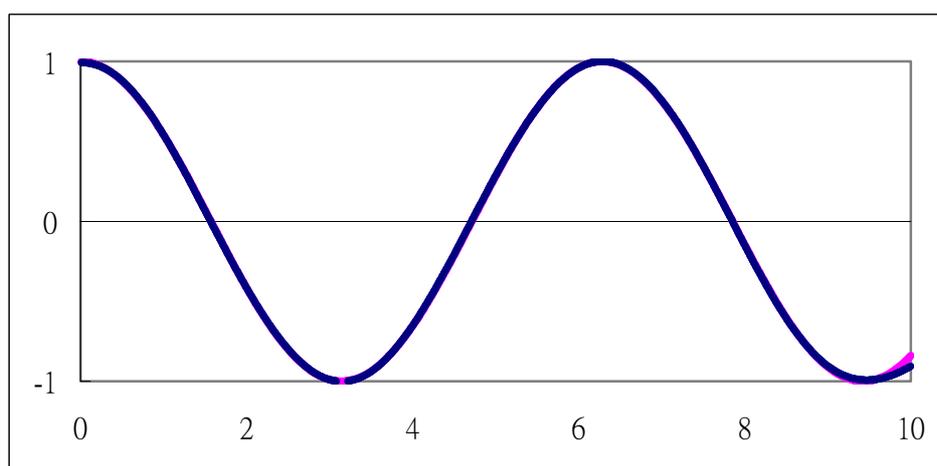


圖 4.15  $dy/dx - x$  圖

接下來討論由多個輸入變數所組成的類神經網路之偏微分值。為了方便展示，以  $y = \cos(x_1) + \cos(x_2)$  ,  $0 \leq x \leq 5$  為訓練範本，建立一個單一隱藏層之類神經網路，有兩個輸入變數，分別為  $x_1, x_2$ ，輸出變數為  $y$ ，隱藏層節點數為 10 個，

輸出層與隱藏層之轉換函數為雙彎曲函數  $f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$ 。

類神經網路訓練後，預測結果為了方便圖示及說明，我們固定  $x_2 = 0$ ，而

$y-x_1$  關係如圖 4.16 所示，粉色區段表示實際數學函式，藍色線表示類神經網路模擬值，類神經網路逼近實際數學函式，接著應用連鎖律求解  $\partial y / \partial x_1$ ， $\partial y / \partial x_1 - x_1$  如圖 4.17 所示，粉色區段表示實際數學函式微分值，藍色線表示類神經網路的微分值，可發現與真實函數之偏微分相似  $y' = \sin(x_1) + \sin(x_2)$ ,  $0 \leq x \leq 5$ ，若從微分求解極值之定理來驗證，當導函數為零時，函數有相對極值產生，如圖  $\partial y / \partial x_1$  為零處，所對應  $y-x_1$  圖的斜率恰好為零，因此確定可以找到類神經網路架構後，利用連鎖律可求出輸出變數對輸入變數之偏微分。

當類神經網路已學習系統的特性後，系統轉換函數可寫成類神經網路輸入與輸出模式，若經由連鎖律對類神經網路模式作微分，經由前述簡單的測試，不論網路架構為單個或是多個輸入變數，都確立透過連鎖律可以得到類神經網路輸出變數對輸入變數之敏感度。

本研究應用類神經網路於地下水水流與污染傳輸，系統轉換函數就是類神經網路其中輸入變數為當時的抽水量，水位和濃度，輸出變數為下一時刻的水位和濃度，透過連鎖律可以得到類神經網路輸出變數對輸入變數之敏感度，此敏感度就是系統轉換函數的微分項。由於系統轉換函數的微分項為微分動態規劃組成之要素，本研究採用類神經網路為系統轉換函數，後續將應用此方式求得系統轉換函數的微分項。

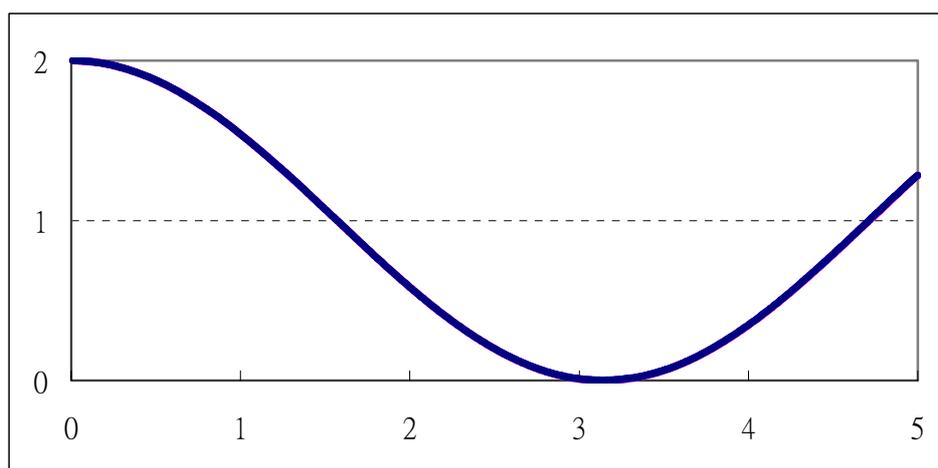


圖 4.16  $y-x_1$  圖

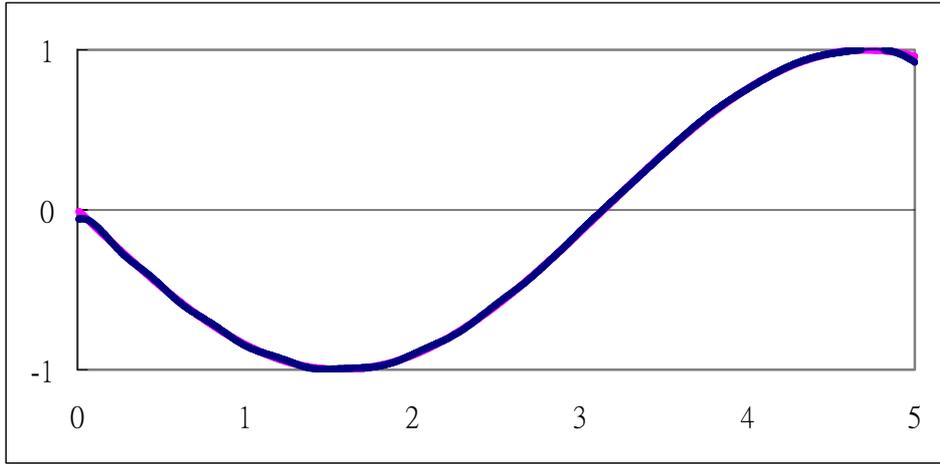


圖 4.17  $\partial y / \partial x_1 - x_1$  圖



## 五、管理模式之規劃應用

前述章節已介紹過新演算法(ANN-CDDP)的數學定義與建置流程，以下就 ANN-CDDP 之應用實例進行探討。於 5.1 節探討地下水水量管理規劃模式，於 5.2 節探討地下水污染整治規劃模式。藉由比較 ANN-CDDP 與 ISOQUAD-CDDP(傳統演算法)的優選結果說明以 ANN-CDDP 作為地下水管理模式的可行性，並比較計算量展示 ANN-CDDP 的計算效率。

### 5.1. 地下水水量管理規劃模式

本研究採用 ANN-CDDP 來求解式(2.8)~式(2.12)之地下水水量管理模式，以 CDDP 為優選模式，求解最小操作成本現值，並且優選各時刻各井的抽水量，使得每個時刻各井的總抽水量能滿足各時刻的需求，以類神經網路(ANN)為轉換函數，用來模擬地下水水位因抽水所造成的變化。

地下水水量管理模式根據第三章 ANN-CDDP 之建立流程來建置。首先以 ISOQUAD 所產生之數據來訓練地下水流類神經網路，其輸入變數為當下時刻的水位與抽水量，輸出變數為下一時刻水位，網路架構包含輸入層、一層隱藏層、輸出層，其中隱藏層含有 10 個節點，輸入層至隱藏層之間的轉換函數採用雙彎曲線函數，隱藏層至輸出層則採用線性轉換函數(參見第四章)。類神經網路訓練之後，驗證其是否可準確的連續預測地下水流的變化，如果類神經網路連續預測之誤差小於容許值，則可將其嵌入 CDDP 中。

5.1.1~5.1.4 節以簡例比較 ANN-CDDP 與 ISOQUAD-CDDP 兩種方法求解最小操作成本的差距，說明以 ANN-CDDP 作為地下水水量管理模式的可行性，5.1.4 節比較兩方法在不同問題大小的計算量差異，說明 ANN-CDDP 的計算效率。

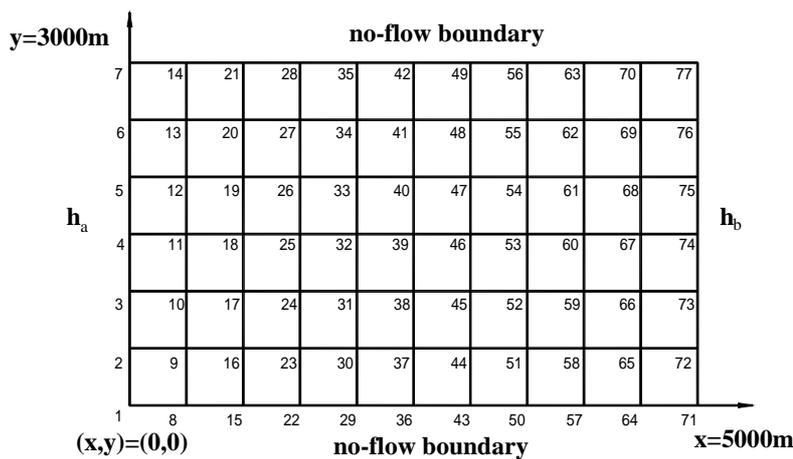
#### 5.1.1 需水型態之影響分析

首先比較新演算法(ANN-CDDP)與傳統演算法(ISOQUAD-CDDP)優選結果的差異，以及驗證模式對水位預測的準確性，以一案例作為展示，案例如下：假設已知抽水井位置與數量情況下，模擬之總規劃時期為 5 年，並將此 5 年時間分割成 20 個規劃時刻，而每一個時刻為三個月，所考量之地下水流區域為一個二維均質與等向、非拘限含水層，且不考慮天然補注量，研究區域為  $3000m \times 5000m$ ，

並分割成 77 個節點與 60 個元素，如圖 5.1 所示，南邊及北邊為不透水邊界，東邊及西邊分別為定水頭邊界( $h_a = h_b = 80m$ )，全區初始水頭( $h_0$ )為  $80m$ ，而地表到含水層底部的高度( $L$ )為  $100m$ ，含水層各項模擬參數，如表 5.1 所示。

表 5.1 模擬含水層之參數

參數	值
水平水力傳導係數(Hydraulic conductivity)	$0.001m/s$
垂直水力傳導係數(longitudinal dispersivity)	$0.001m/s$
貯水係數(Storage coefficient)	0.1
孔隙率(Porosity)	0.2
土壤密度(Media bulk density)	$2.12g/cm^3$
初始水頭(Initial hydraulic head)	$80m$
地表到含水層底部的高度( $L$ )	$100m$



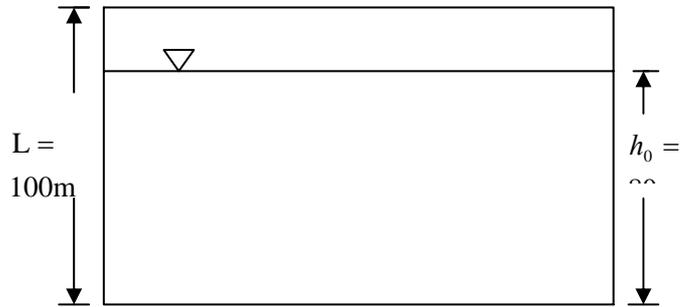


圖 5.1 案例 1 簡化之地下水流區域示意圖

本案例之井網配置圖如圖 5.2 所示，圖中三角型代表抽水井，方塊狀為觀測井，共有五口抽水井和八口觀測井，各抽水井最大抽水量限制為 0.5 cms (500 L/s)，在 5 年內總需水量相同( $110 \times 10^6 m^3$ )之下，考量需水量遞增及利率影響下(年利息 8%)，探討不同需水量曲線下的操作成本現值之變化情形，其中單位操作成本為每消耗 1 度電假設需要 1.35 元。需水量曲線型態分別為凸函數曲線 convex (案例 1-1)、線性函數 linear (案例 1-2) 及凹函數曲線 concave (案例 1-3)，參考 Basagaoglu and Yazicigil (1994) 三種需水量歷線，如圖 5.3 所示。

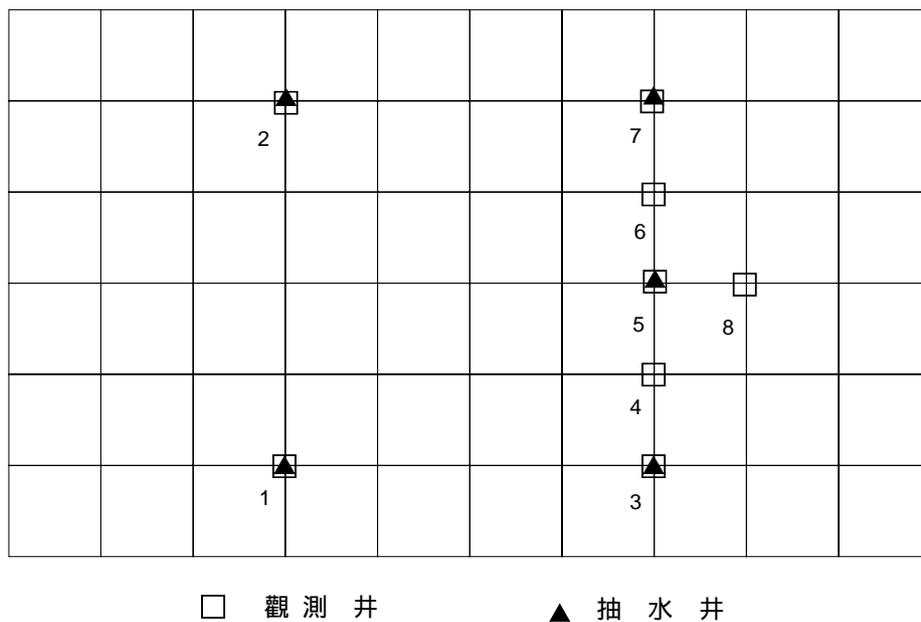


圖 5.2 案例 1 & 2 井網配置圖

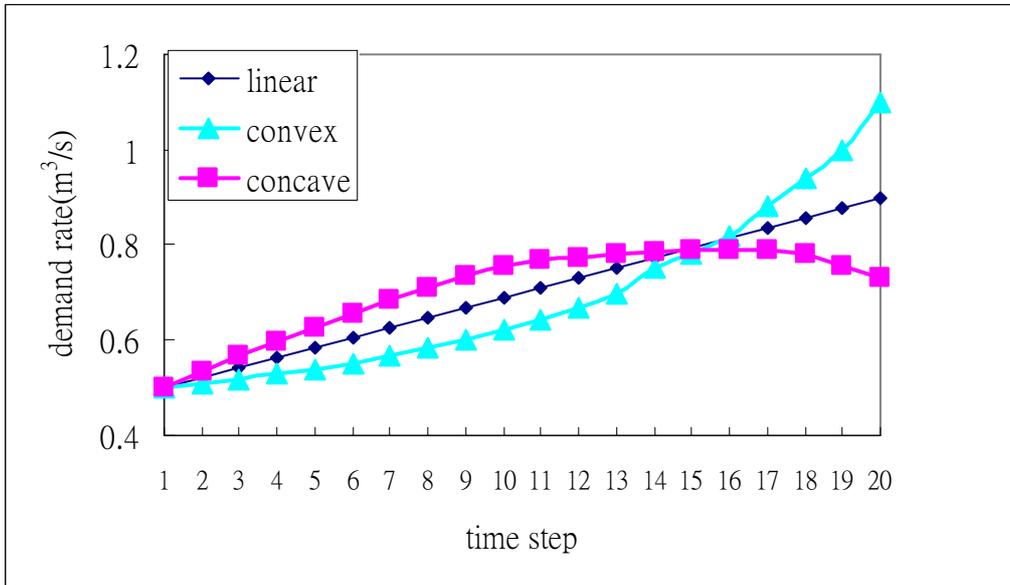


圖 5.3 需水歷線圖

首先比較 ANN-CDDP 與傳統演算法(ISOQUAD-CDDP)兩者求得之目標函數值的差異。其 ANN-CDDP 與 ISOQUAD-CDDP 兩者求得之目標函數(操作成本)的誤差，由表 5.2 知，案例 1-1~1-3 以 ANN-CDDP 求得之操作成本，其最大相對誤差為 0.77%(以 ISOQUAD-CDDP 為基準)，證明可將其方法可成功應用於水量管理模式，僅造成不到 1%的誤差。ANN-CDDP 所求得之操作成本相較於 ISOQUAD-CDDP 誤差尚在容許範圍內，證明 ANN-CDDP 的方法在精度許可之下，亦可以找到一近似全域最佳解的鄰近最佳解，證明此演算法具有實際應用的發展性。

分析表 5.2 需水量曲線型態與成本變化情形，雖然總需水量相同條件下，操作成本卻不同，案例 1-3 的操作成本現值最高，案例 1-2 次之，案例 1-1 之操作成本現值最低，表示操作成本現值與需水量變化趨勢有關。主要是當需水量呈現凸函數曲線時(前期需水量較少，後期需水量逐漸升高)，ANN-CDDP 模式優選各時刻的抽水量亦呈現凸函數曲線，如圖 5.5 所示，由於現值換算的影響，使得案例 1-1 的操作成本的現值最小，同理可知案例 1-3 當需水量呈現凹函數曲線(前期需水量較其他曲線高，後期需水量逐緩)，其操作成本的現值最高。

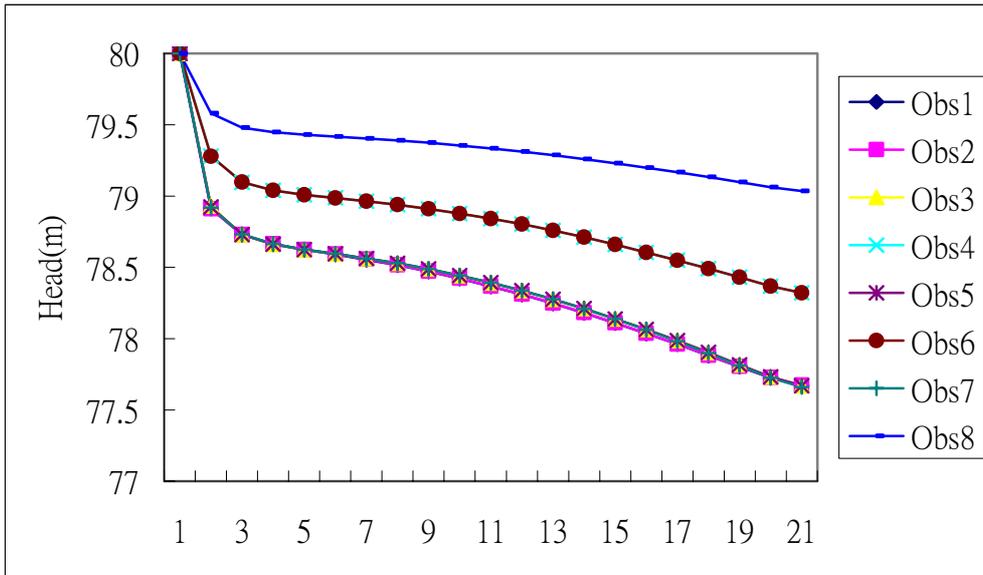
ANN-CDDP 所求得之觀測井之水位歷線如圖 5.4 所示，不同的需水量曲線型

態，使得觀測井水位下降的趨勢不盡相同，如果案例中的需求曲線為凸函數，後期需求遽增，其觀測井水位歷線後期下降趨勢遽烈；如果需求曲線為凹函數，後期需求漸緩，其觀測井水位歷線後期下降趨勢漸緩，由此可看出觀測井水位趨勢與需求曲線有正向的關係，水位歷線與需求曲線趨勢相同。亦可發現觀測井與抽水井的距離遠近與水位下降變化量有很大的關聯，位於抽水井附近的觀測井(Obs 1, Obs 2, Obs 3, Obs 5, Obs 7)水位下降都很嚴重，距離抽水井最遠的觀測井(Obs 8)的水位下降趨勢最緩和，其他的觀測井(Obs 4, Obs 6)水位洩降次之，以上結果亦說明 ANN 確實可以成功反應抽水與地下水位關係。

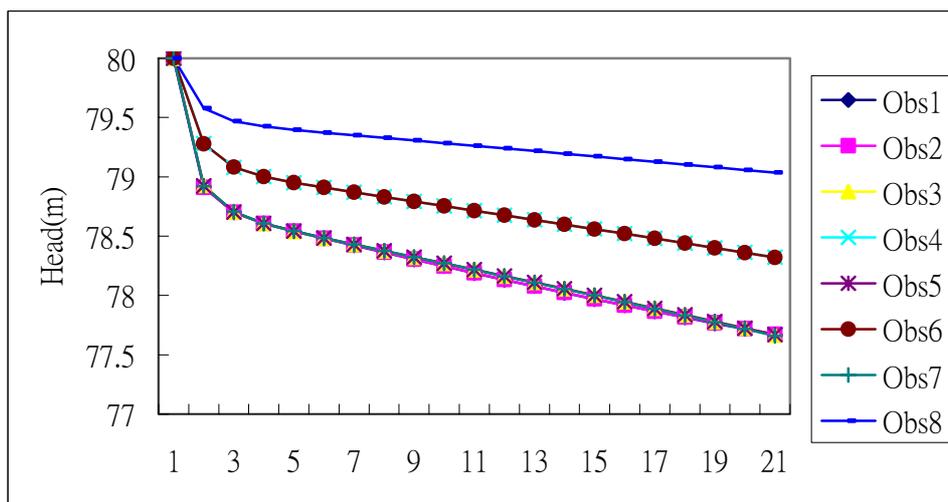
ANN-CDDP 所求得之各井各個時刻的抽水量結果，如圖 5.5 所示，模式優選各井的抽水量不盡相同，西側兩口抽水井 W1(Obs.1)和 W2(Obs.2)較大，東側三口抽水井 W3(Obs.3), W4(Obs.5)和 W5 (Obs.7)略小，但是其觀測水位(Obs 1, Obs 2, Obs 3, Obs 5, Obs 7)幾乎相同。主要由於操作成本為抽水量與抽水揚程的乘積，且抽水量與水位洩降呈正比，使得操作成本與抽水量的平方呈正比，或是與水位洩降的平方呈正比，所以水位略微變化，卻會大幅增加成本，而為了使得操作成本最小化，模式優選最佳抽水量使得各個觀測井水位洩降盡量相同。

表 5.2 案例 1 操作成本現值之比較

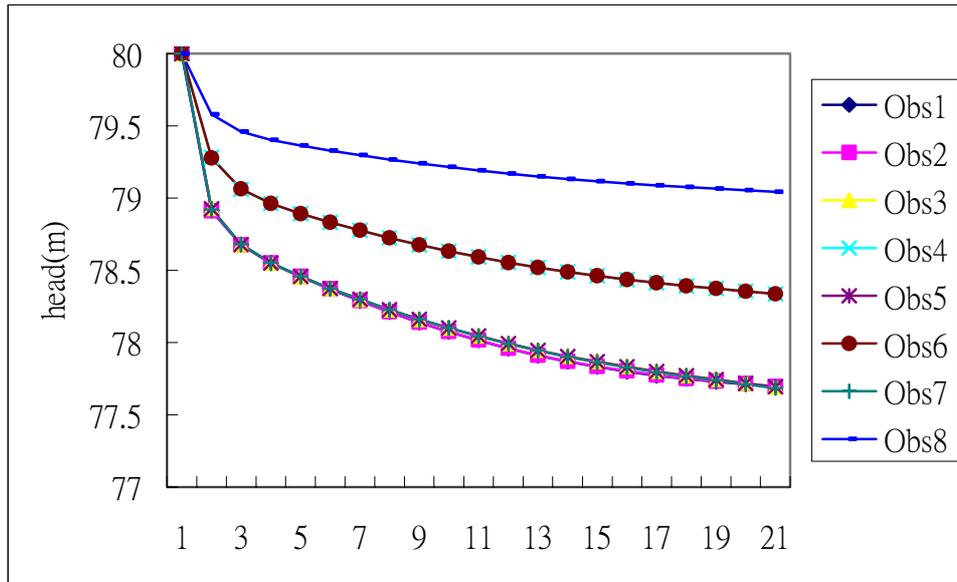
	需水型態	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 1-1	凸函數 Convex	\$3,776,940	\$3,751,050	0.69
案例 1-2	線性函數 Linear	\$4,035,510	\$4,006,170	0.73
案例 1-3	凹函數 Concave	\$4,295,670	\$4,262,670	0.77



(a)凸函數需水型態下觀測井水位歷線

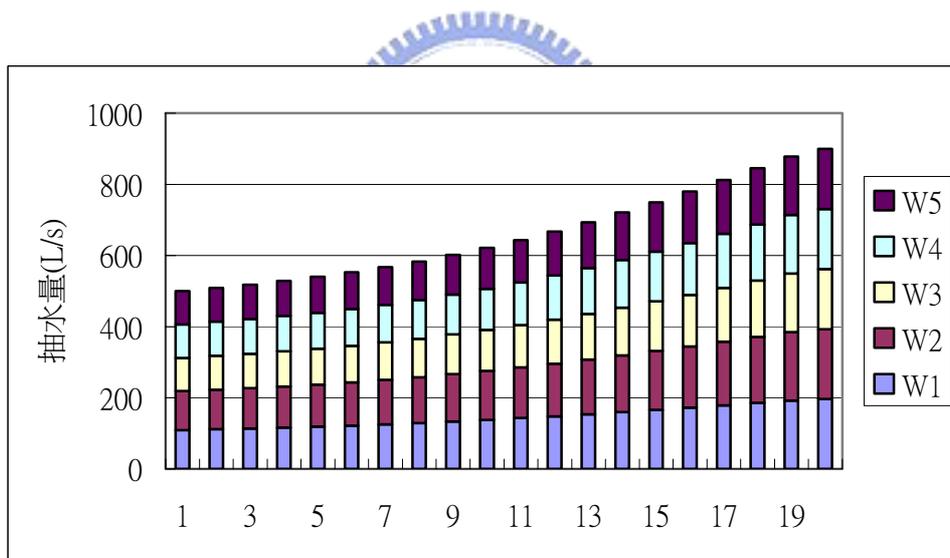


(b)線性函數需水型態下觀測井水位歷線

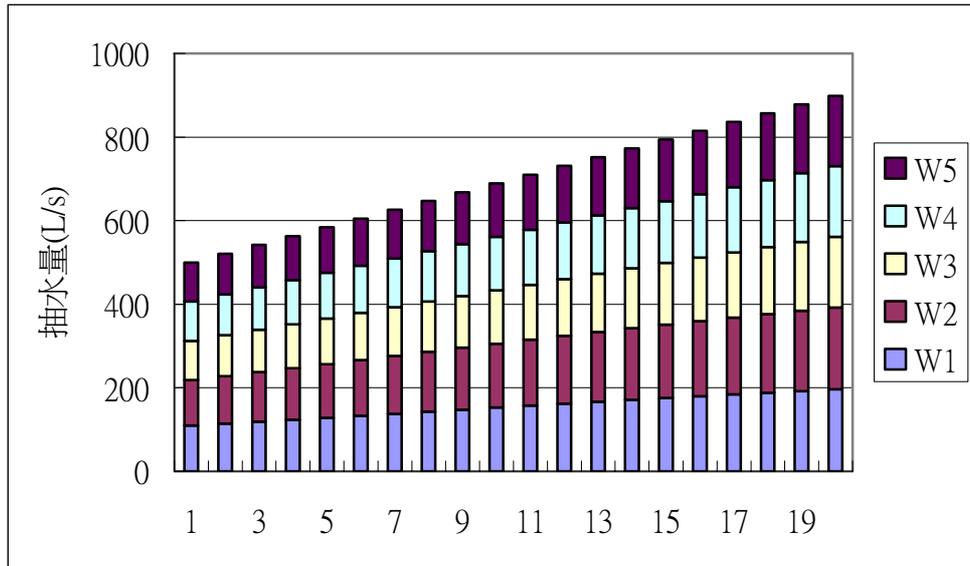


(c)凹函數需水型態下觀測井水位歷線

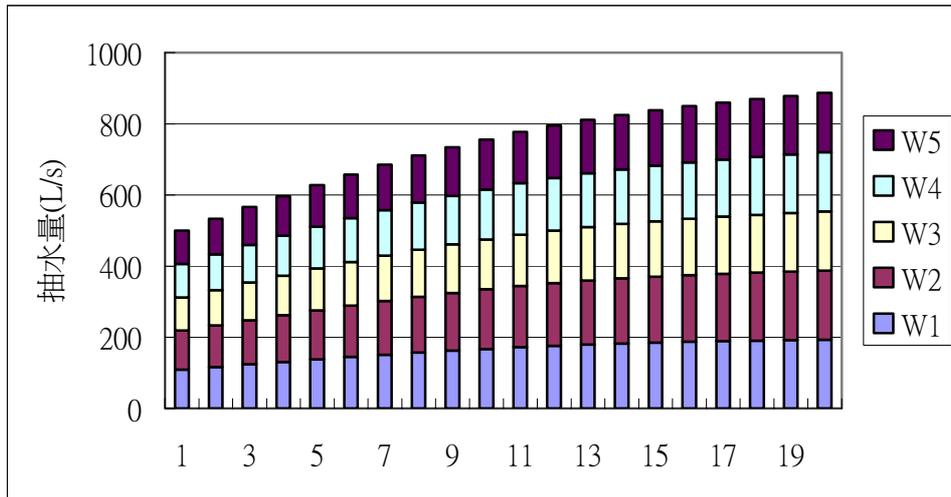
圖 5.4 案例 1 ANN-CDDP 所求得之觀測井水位歷線



(a)凸函數需水型態下各時刻的抽水量圖



(b)線性函數需水型態下各時刻的抽水量圖



(c)凹函數需水型態下各時刻的抽水量圖

圖 5.5 案例 1 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量

### 5.1.2 總需求量之影響分析

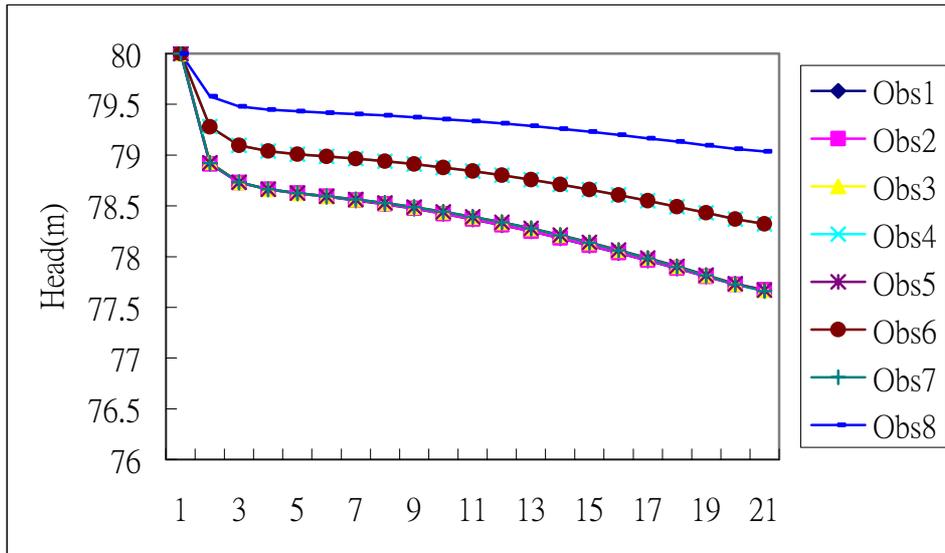
在相同模擬條件與時距下，假設需求型態為凸函數，總需求量為 110、135 及 160 ( $\times 10^6 m^3$ )三種，井網配置圖同於案例 1 如圖 5.2 所示，有五口抽水井和八口觀測井，各抽水井最大抽水量限制為 0.5cms，前一節訓練得到的類神經網路內嵌於微分動態規劃(ANN-CDDP)在不同的總需求量下優選各時刻的抽水量，進一步探討操作成本與總需求量之間的關係。

從表 5.3 可發現當總需水量越大，其操作成本現值也會越大，操作成本現值隨著總需求量增加而增加，故操作成本現值與總需水量的關係為正比的。如前節所述以傳統模擬模式(ISOQUAD-CDDP)為基準作案例驗證，將 ANN-CDDP 優選出最佳抽水量代入 ISOQUAD 算出操作成本，以同一檢驗基礎之下，觀察兩方法求得之操作成本的誤差，亦由表 5.3 可知，ANN-CDDP 與 ISOQUAD-CDDP 兩方法求得的操作成本相對誤差在 1.02%以下。

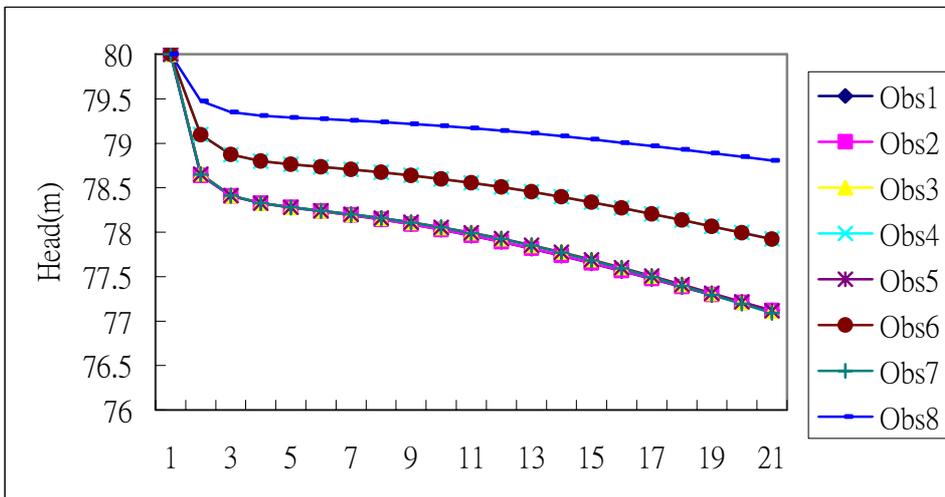
從 ANN-CDDP 所求得之抽水量與觀測井水位歷線圖，如圖 5.6 與 5.7 所示，由此案例亦可知 ANN 模式可精準地預測水位，當總需水量越大，水位下降趨勢也越大，於規劃期末，案例 2-1 的總需求量為  $110 \times 10^6 m^3$ ，最低地下水位發生在抽水井附近，地下水位下降到 77.5 公尺，案例 2-2 的總需求量為  $135 \times 10^6 m^3$ ，最低地下水位為 77 公尺，而案例 2-3 的總需求量為  $160 \times 10^6 m^3$ ，最低地下水位為 76.5 公尺，因此規劃管理者須留意水位的變化，評估是否要減少總需求量以減少抽水所造成之衝擊。本研究的案例藉由簡單的物理現象(抽水與地下水位關係)，證明本演算法確實可以成功反應系統的操作行為，可以作為未來地下水水量管理之應用。

表 5.3 案例 2 操作成本現值之比較

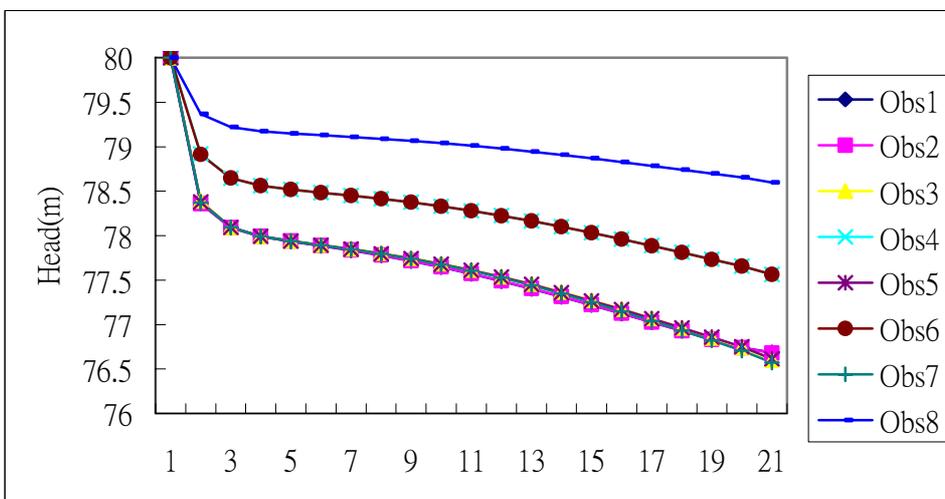
	總需求量	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 2-1	$110(\times 10^6 m^3)$	\$4,035,510	\$4,006,170	0.73
案例 2-2	$135(\times 10^6 m^3)$	\$4,992,300	\$4,948,860	0.88
案例 2-3	$160(\times 10^6 m^3)$	\$5,978,340	\$5,918,100	1.02



(a) 觀測井水位歷線圖(總需求量  $110 \times 10^6 m^3$ )

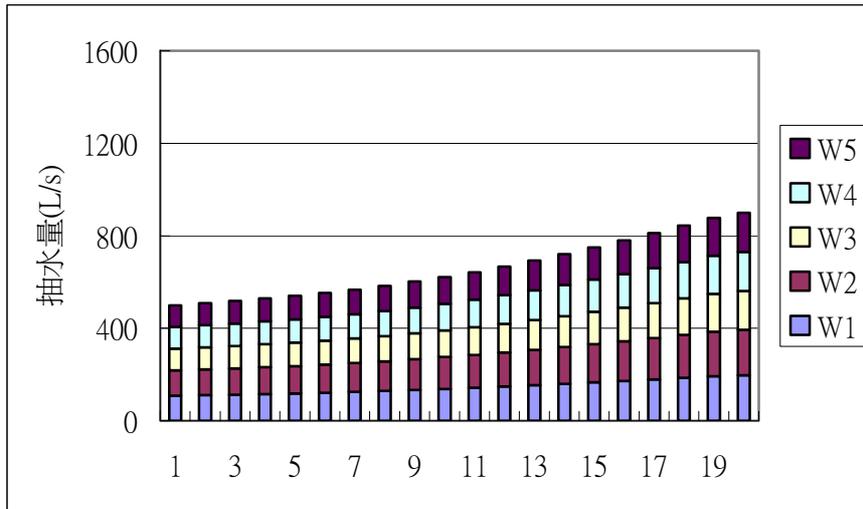


(b) 觀測井水位歷線圖(總需求量  $135 \times 10^6 m^3$ )

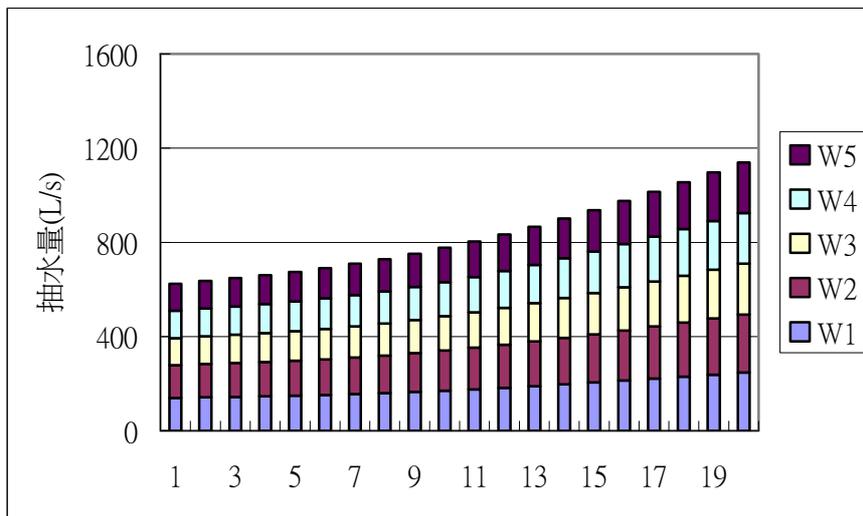


(c) 觀測井水位歷線圖(總需求量  $160 \times 10^6 m^3$ )

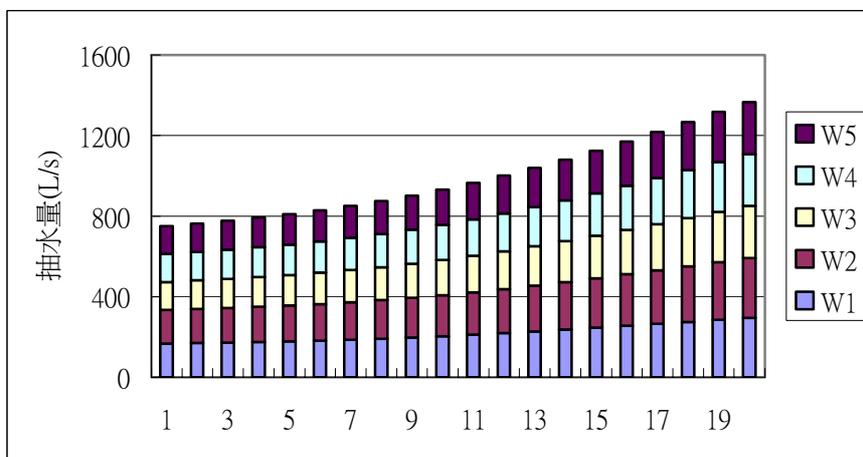
圖 5.6 案例 2 ANN-CDDP 所求得之觀測井水位歷線圖



(a)各時刻的抽水量圖(總需求量  $110 \times 10^6 m^3$ )



(b)各時刻的抽水量圖(總需求量  $135 \times 10^6 m^3$ )



(c)各時刻的抽水量圖(總需求量  $160 \times 10^6 m^3$ )

圖 5.7 案例 2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量圖



### 5.1.3 背景流場之影響分析

前述案例均不考量背景流場之影響，本節考量有背景流場的情況，即使不抽水，地下水仍會由左到右自由流動，於是案例 3 假設模式邊界條件設定上、下兩邊為無流量邊界條件，左、右兩邊為定水頭邊界，左邊界水頭  $h_a = 80m$ ，右邊界水頭  $h_b = 75m$ ，設計流場的水力坡降為 1/1000 以形成背景流場，其餘的地下水參數皆與案例 1 之設定相同。

總規劃時期為 5 年，總需水量  $110 \times 10^6 m^3$ ，需水量曲線假設為線性(linear)。觀測井與抽水井之配置，如圖 5.8 所示，有五口抽水井與五口觀測井，各抽水井最大抽水量限制為 0.5 cms，首先檢驗新演算法(ANN-CDDP)與傳統演算法(ISOQUAD-CDDP)兩者目標函數(操作成本)，如表 5.4 所示，發現兩方法相對誤差尚在誤差容許範圍內，僅為 0.12%，表現相當不錯。

ANN-CDDP 所求得之各個抽水井抽水量的隨時間之變化，如圖 5.9(a)所示，抽水井 1 與 2 供水遠大於其他抽水井的抽水量，基於目標函數為抽水成本最小化的關係，因此在越高水位的井抽水，才使得成本越小，結果顯示除了高水位的抽水井 1 與 2 會全額供水，其餘抽水井的抽水量較小。也可從抽水井的水位變化，如圖 5.9(b)所示，發現上游(抽水井 3)的水位恆高於下游(抽水井 4 或 5)的水位，只要抽水井 3 的水位接近甚至低於下游(抽水井 4 或 5)的水位時，為了降低操作成本，模式自動減少下一時刻井 3 的抽水量，以抬高該井的水位。經過本案例證實，即使模擬案例有無複雜的背景流場，ANN 皆可模擬出抽水與水位變化的關係，也證實新演算法(ANN-CDDP)的確實可以反應物理特性，具有強健性。

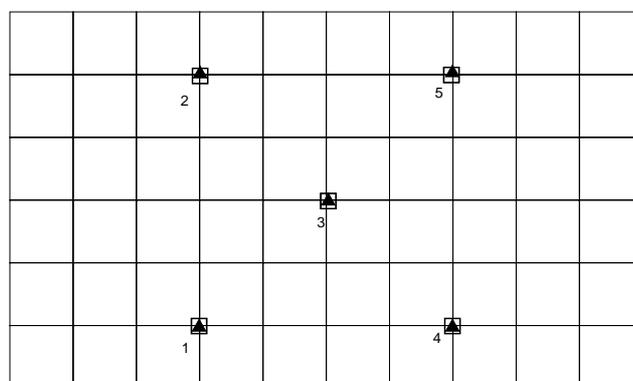
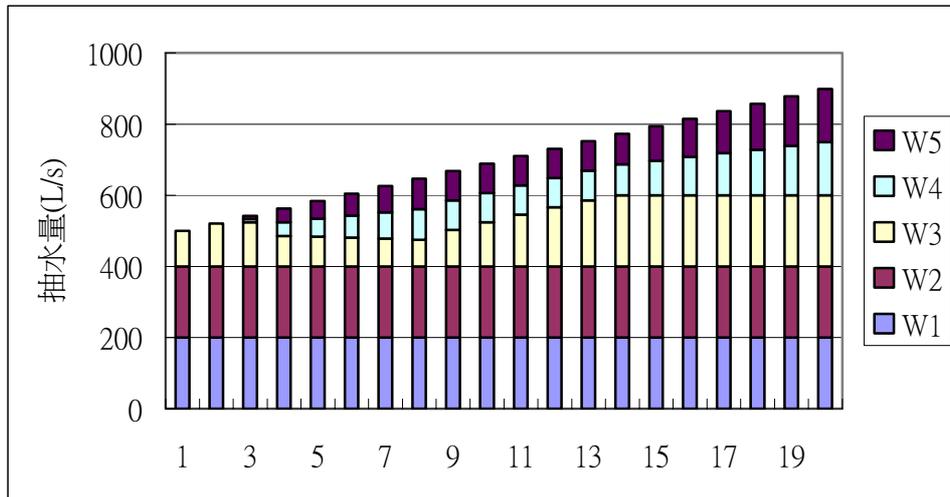


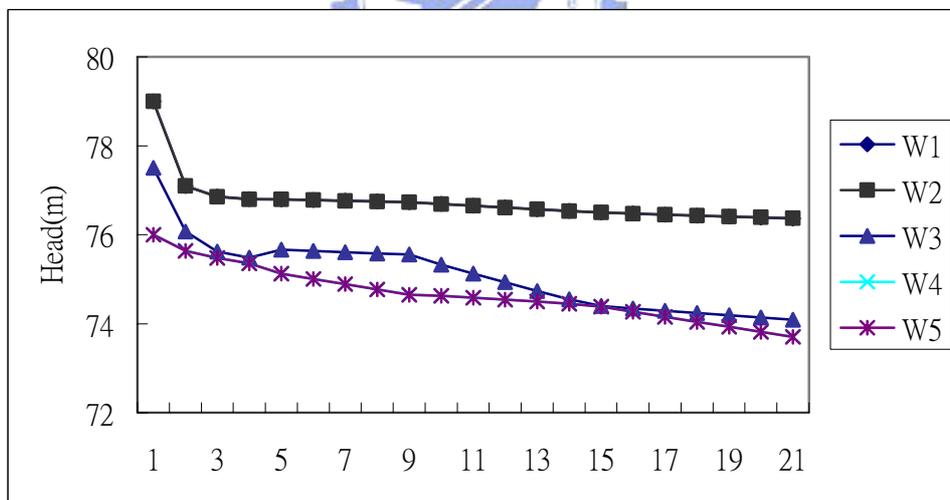
圖 5.8 案例 3 井網配置圖

表 5.4 案例 3 操作成本現值之比較

	總需求	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 3	$110(\times 10^6 m^3)$	\$4,433,730	\$4,428,540	0.12



(a) ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量



(b) 觀測井水位歷線圖

圖 5.9 案例 3 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量及水位圖

#### 5.1.4 計算效率之比較

前兩節驗證新演算法於水量管理模式的準確性，接下來則是證明新演算法於水量管理模式之計算效率，說明新演算法應用在大尺度案例可以破除計算量的限制。

本節著重在計算效率改善之探討，為了方便比較模式計算效率的改善，假設案例同樣具有五口抽水井與五口觀測井，但三案例模擬區域的元素與節點數目並不相同，如表 5.5 所示，圖 5.10 為案例 4 之井位配置圖，其中案例 4-1 模擬區域範圍為  $600m \times 1200m$  (藍)，分割成 91 個節點與 72 個元素；案例 4-2 模擬區域為  $1000m \times 1600m$  (紅)，分割成 187 個節點與 160 個元素；案例 4-3 模擬區域為  $1400m \times 2000m$  (綠)，分割成 315 個節點與 280 個元素，皆以  $h_0 = 80m$  為全區初始水頭，南邊及北邊邊界條件為不透水邊界，東邊及西邊分別為定水頭邊界，含水層及各項模擬參數與案例 1 相同，如表 5.1 所示。假設五年內規劃總需水量  $125 \times 10^6 m^3$ ，且需求曲線的型態為線性，各抽水井最大抽水量限制為 0.5cms，模式總規劃時期為 60 個時期，每個規劃時期的期距縮短為一個月(30.4 天)。

在 ANN-CDDP 演算架構中內嵌入各自獨立訓練的類神經網路，且已訓練好的類神經網路分別來描述地下水流之物理現象，然後進行優選。在同一基準下比較兩方法(ISOQUAD-CDDP 和 ANN-CDDP)的優選後的目標函數(操作成本現值)，從表 5.6(a)發現以 ISOQUAD-CDDP 為基準，ANN-CDDP 所得到的操作成本相對誤差在 0.72%以下，其相對誤差並不大。比較兩方法所耗費的計算時間(以 AMD Athlon(tm)XP2000+1.54GHz 為計算平台)，如表 5.6(b)所示，隨著計算格網(節點)數目的增加，ISOQUAD-CDDP 計算時間也大幅增加，計算量為狀態變數的 3.18 次方呈正比( $O(n^{3.18})$ )，與先前的推論相符，然而，但是隨著計算格網數目的增加，ANN-CDDP 計算量未有顯著的增加，如圖 5.11 為兩方法的每次迭代計算時間之比較，以案例 4-3 為例，新演算法(ANN-CDDP)每次迭代的計算時間約為傳統演算法的 1/73.6 倍，換句話說，ANN-CDDP 計算速度相當於傳統演算法的 73.6 倍，可證明利用 ANN-CDDP 之方法可有效的減少狀態變數的數目，使得計算量大幅度降低，足以提升管理模式之實用價值。

本案例主要展示模擬格網數目對於兩方法所造成的計算量影響，由結果附帶發現邊界距離對於地下水供應系統的操作成本略有影響。就本案例而言，之所以

造成案例 4-3 之操作成本略大於案例 4-2 (1%)，案例 4-2 略大於案例 4-1(0.6%)的現象，主要由於案例的井群固定，當邊界距離抽水井遠，水位受到邊界條件影響減小，操作成本只受到抽水之影響，當邊界距離抽水井拉近，抽水井附近的水位受到邊界影響而抬高，造成操作成本略微減少。

表 5.5 案例 4 之節點與元素

	節點	元素
案例 4-1	91	72
案例 4-2	187	160
案例 4-3	315	280

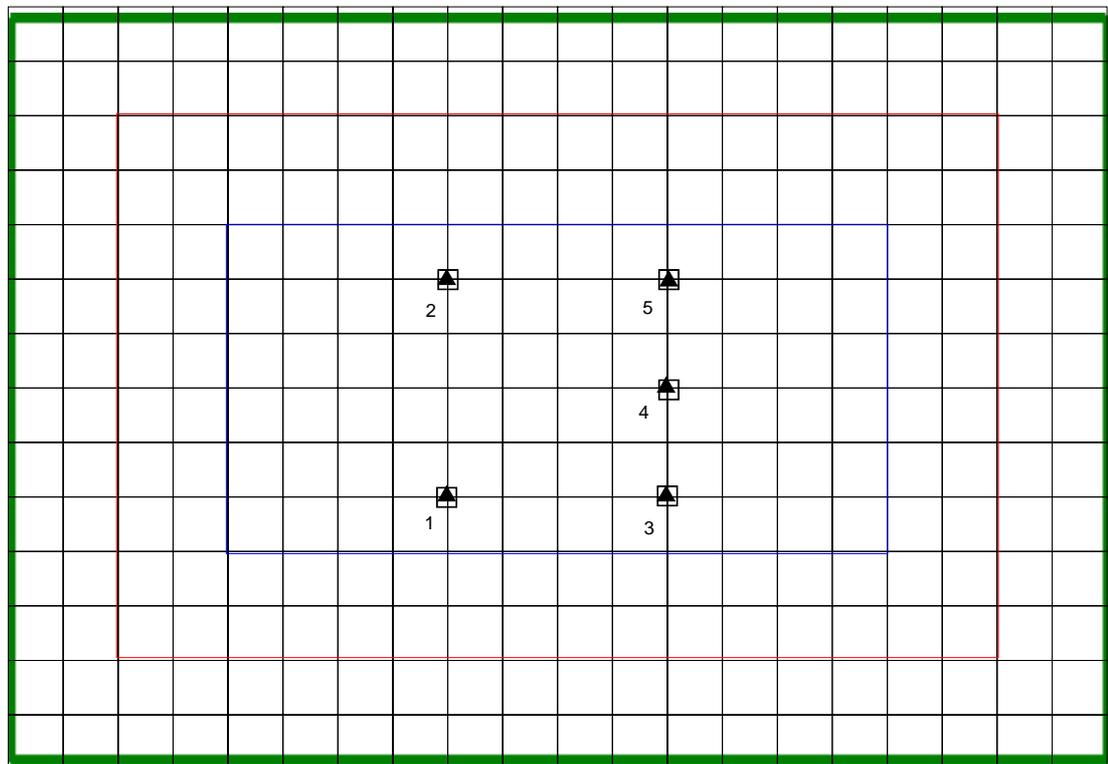


圖 5.10 案例 4 井網配置圖

表 5.6 案例 4 操作成本與計算時間之比較

(a)兩方法之操作成本比較

	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 4-1	\$4,677,300	\$4,645,890	0.68
案例 4-2	\$4,704,540	\$4,680,660	0.51
案例 4-3	\$4,752,000	\$4,718,040	0.72

(b)兩方法之計算時間比較(單位: Sec)

		ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對計算時間 欄(3)/欄(4)
案例 4-1	計算時間 (迭代次數)	11.36 (3)	11.48 (2)	
	每次迭代 平均計算時間	3.79	5.74	1/1.52
案例 4-2	計算時間 (迭代次數)	26.23 (6)	58.65 (2)	
	每次迭代 平均計算時間	4.37	29.33	1/6.71
案例 4-3	計算時間 (迭代次數)	34.38 (8)	632.52(2)	
	每次迭代 平均計算時間	4.30	316.26	1/73.59

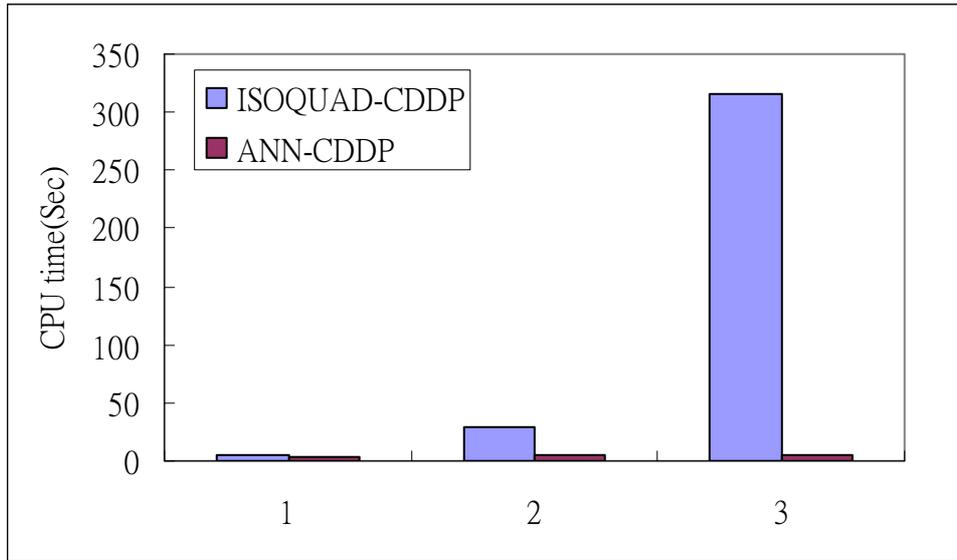


圖 5.11 每次迭代計算時間之比較



## 5.2 地下水污染整治規劃模式

在同一含水層中，地下水水質的模擬比水量的模擬更複雜，所以對於內嵌模擬模式的管理模式而言，水質管理模式的計算量會比水量管理模式更為龐大，為了增加管理的效率，更需要應用能降低計算量的水質管理模式。因此計算量的改善對於水質管理模式更是重要，本研究以 ANN-CDDP 作為地下水污染整治規劃模式，本節將證明此一新架構應用於地下水污染整治規劃之可行性，並比較 ANN-CDDP 與傳統演算法(ISOQUAD-CDDP)之計算量的差異。

5.2.1 節以簡例比較 ANN-CDDP 與 ISOQUAD-CDDP 兩種方法求解最小操作成本的差距，說明以 ANN-CDDP 作為地下水污染整治規劃模式的可行性，5.2.2 節則是比較兩方法處理不同問題大小的計算量差異，5.2.3 節考量大尺度案例，以說明 ANN-CDDP 的計算效率。

### 5.2.1 簡例驗證

本研究採用 ANN-CDDP 來求解式(2.13)~式(2.17)之地下水污染整治規劃模式，以 CDDP 為優選模式優選各井各時刻的抽水量，使得所有觀測井之污染濃度能滿足期末之整治標準，其中 CDDP 之系統轉換函數為類神經網路，用來模擬地下水水位因抽水所造成的變化。以 ANN-CDDP 來作為地下水污染整治規劃模式，首先建置類神經網路用來作為系統轉換函數，以 ISOQUAD 所產生之數據來訓練地下水流與水質類神經網路，網路架構於第四章已做過說明，採用類神經網路群之架構，類神經網路群的輸入變數為當下時刻的水位、濃度與抽水量，輸出變數為下一時刻水位及濃度，地下水流與水質類神經網路分別包含輸入層、兩層隱藏層、輸出層，其中隱藏層含有 10 個節點，輸入層至隱藏層之間的轉換函數採用雙彎曲線函數，隱藏層至輸出層則採用線性轉換函數。類神經網路訓練之後，驗證其是否可連續預測地下水流及濃度的變化，如果類神經網路連續預測之誤差小於容許值，則將應用已訓練好的類神經網路嵌入 CDDP，以求解最小操作成本。

以一模擬情境作為驗證案例：地下水流區域大小為  $600 \times 1,200 \text{ m}^2$ ，為一個二維均質等向、拘限含水層，總共被切成 91 個有限元素法節點，邊界條件方面，在左、右兩邊為定水頭邊界，上、下兩邊為無流量邊界條件，如圖 5.13 所示，而初始條件為以上述之邊界條件下之穩定流況。於整治前，其最大污染值之濃度

為 150 ppm，發生於節點 11 附近。本模擬模式每一個時刻之時間間距( $\Delta t$ )為三個月(91.25 天)，未經整治情況下(零方案)，污染物於五年後之擴散情形，由圖 5.14 中可看出整個地下水區域仍充滿污染物，其最大污染濃度為 19 ppm，發生於節點 67、74 附近。其中含水層之相關參數，如表 5.7 所示。本演算範例為修改 Chang and Shoemaker (1992)之地下水污染整治範例，並曾應用於地下水污染整治模式之研究 (Chang and Hsiao, 2002; Hsiao and Chang, 2001)。

表 5.7 模擬含水層之參數

參數	值
水力傳導係數(Hydraulic conductivity)	$4.31 \times 10^{-4} \text{ m/s}$
縱向擴散係數(longitudinal dispersivity)	70 m
橫向擴散係數(Transverse dispersivity)	3 m
擴散係數(Diffusion coefficient)	$1 \times 10^{-7} \text{ m}^2 / \text{s}$
貯水係數(Storage coefficient)	0.001
孔隙率(Porosity)	0.2
Sorption partitioning coefficient	$0.245 \text{ cm}^3 / \text{g}$
土壤密度(Media bulk density)	$2.12 \text{ g} / \text{cm}^3$
含水層厚度(Aquifer thickness, b)	10 m
地表高程(Ground elevation, $L_*$ )	120 m

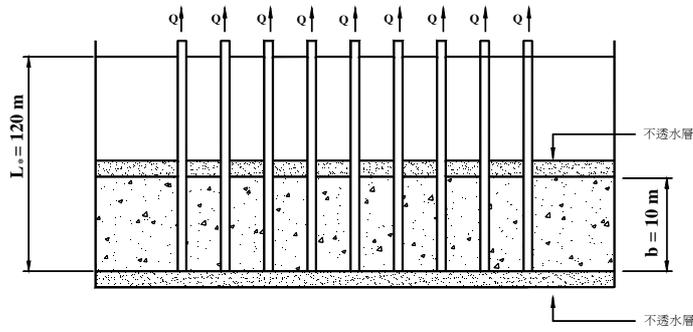
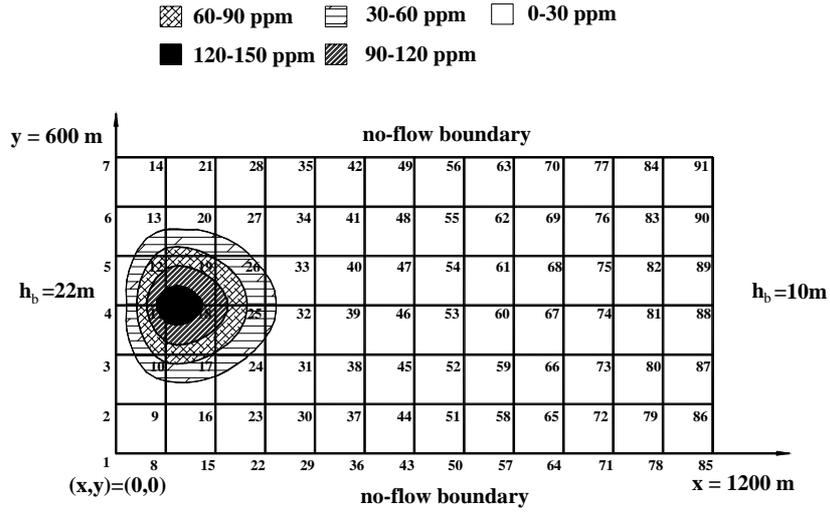


圖 5.13 案例 5 簡化之地下水流區域示意圖

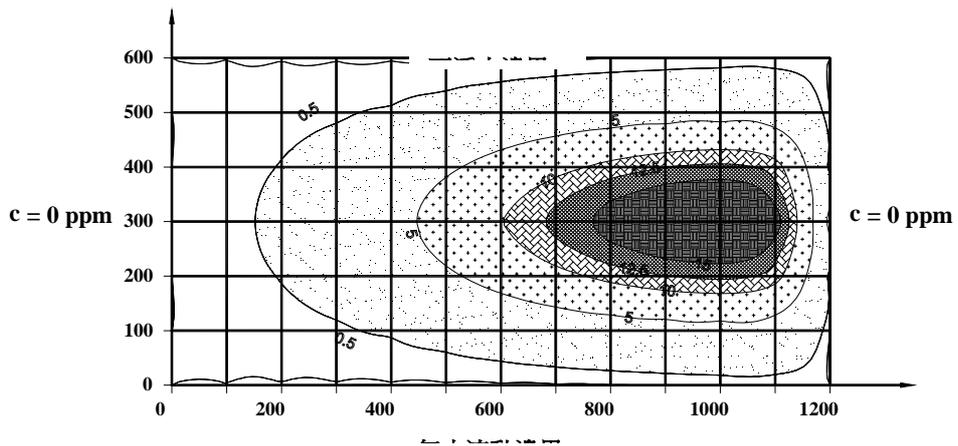
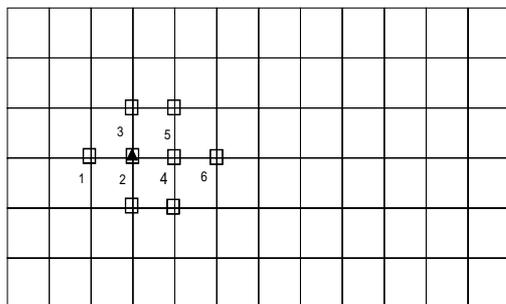


圖 5.14 未經整治情況下，五年後污染物之擴散情形圖

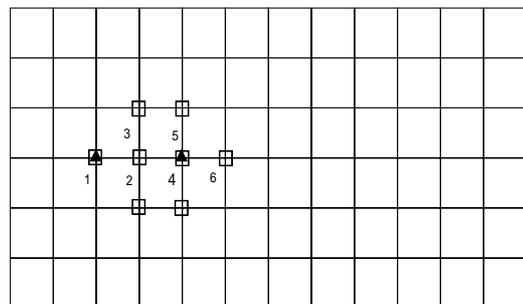
爲了測試本研究的水質管理模式(ANN-CDDP)的可行性，設計兩案例，其中案例 5-1 設計一口抽水井與六口觀測井(圖 5.15a)，以及案例 5-2 設計兩口抽水井與六口觀測井(圖 5.15b)，本研究經由多次試誤得到觀測井網的位置，其觀測井網佈置的原則是位於抽水井的周圍且數目不可以過少。各抽水井最大抽水量限制爲 0.1 cms，污水處理廠之污水處理能力限制爲 0.15 cms。整治的總規劃時期爲 5 年，並將此 5 年時間分割成 20 個規劃時刻，每個時刻的時間間距( $\Delta t$ )爲三個月，整治後，濃度限制 0.5 ppm。測試案例的操作成本相關係數參考蕭[2001]之定義，如單位抽水操作成本( $a_1$ )爲每消耗 1 度電 1.35 元，單位處理成本( $a_2$ )爲  $120000(m^3 / s \Delta t)$ 。

案例 5-1 與案例 5-2 的水質管理模式(ANN-CDDP)優選出最佳抽水量，如圖 5.16 與 5.19 所示，ANN-CDDP 模式嵌入兩個類神經網路於 CDDP 中，包括水量類神經網路與水質類神經網路，水位與污染濃度連續預測的結果如圖 5.17 和 5.18(案例 5-1)，與圖 5.20 和 5.21(案例 5-2)所示，--代表 ANN-CDDP 之類神經網路的預測值，\*代表以 ANN-CDDP 優選的抽水量代回 ISOQUAD 得到的模擬值，發現 ANN-CDDP 模式之類神經預測值與 ISOQUAD 模式模擬結果相當一致，亦可證明確實可以使得污染濃度達到整治標準。

比較兩方法(ANN-CDDP 與 ISOQUAD -CDDP)優選操作成本的差異，其操作成本相對誤差，如表 5.8 所示，若以 ISOQUAD-CDDP 爲準，發現 ANN-CDDP 的操作成本有 2%左右的相對誤差。此成本上的相對誤差證明了利用 ANN-CDDP 方法不一定找到原問題之全域最佳解，但是所找到仍是一近似全域最佳解的鄰近最佳解，因此在精度許可之下，找到的鄰近最佳解仍然對工程規劃有很大的幫助，下節將展示 ANN-CDDP 能在容許誤差內，有效的節省計算量。



(a)案例 5-1 配置圖



(b)案例 5-2 配置圖

圖 5.15 案例 5 井網配置圖

表 5.8 案例 5 操作成本之比較

	抽水井數	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 5-1	1	\$2,089,560	\$2,045,220	2.16
案例 5-2	2	\$2,065,350	\$2,055,990	0.45

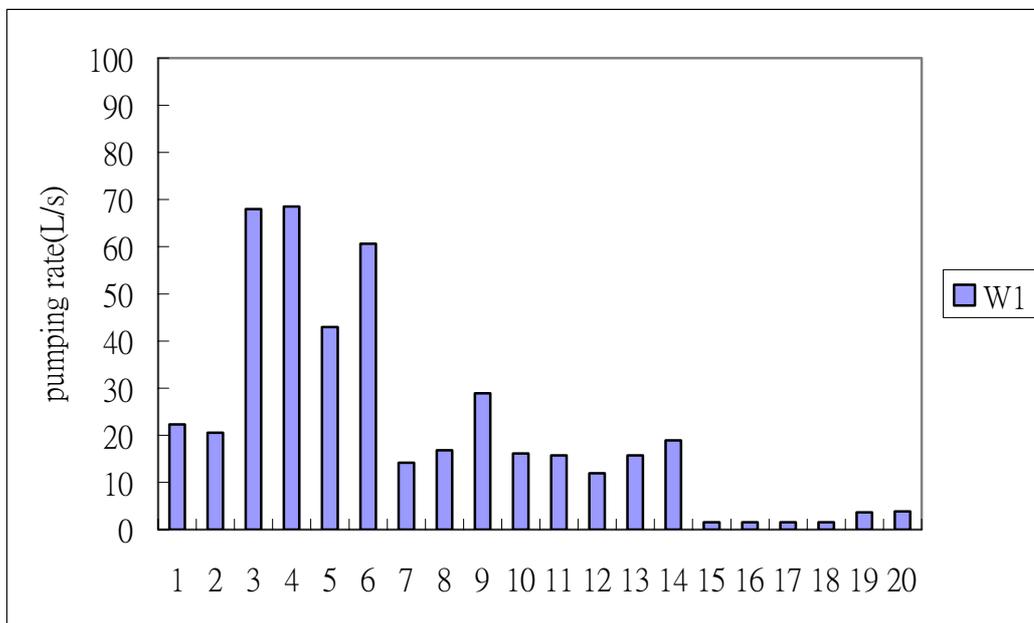


圖 5.16 案例 5-1ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量

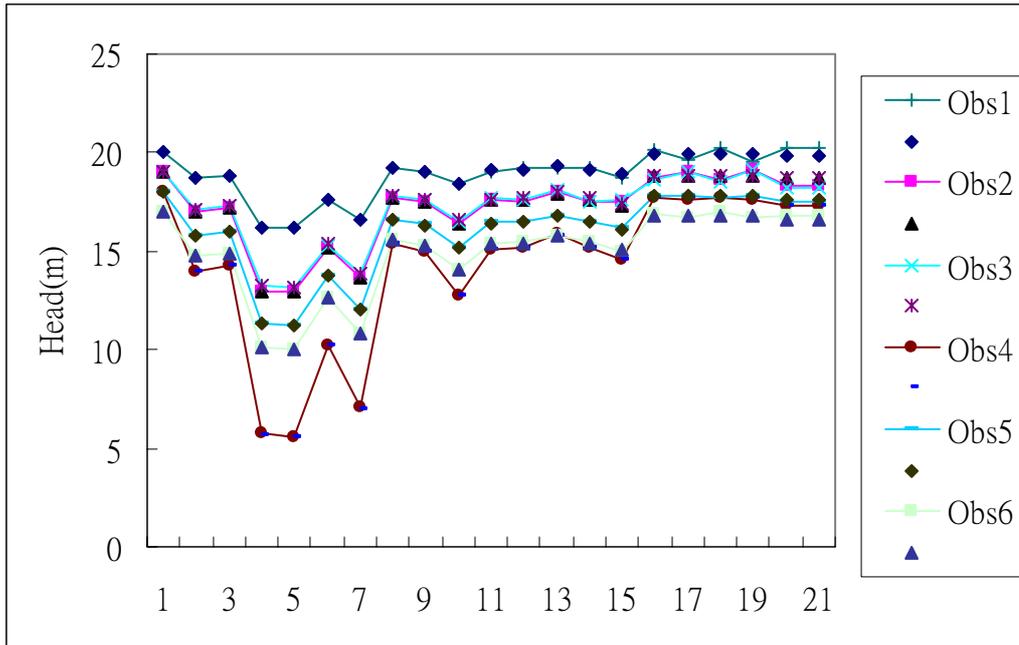


圖 5.17 案例 5-1ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況

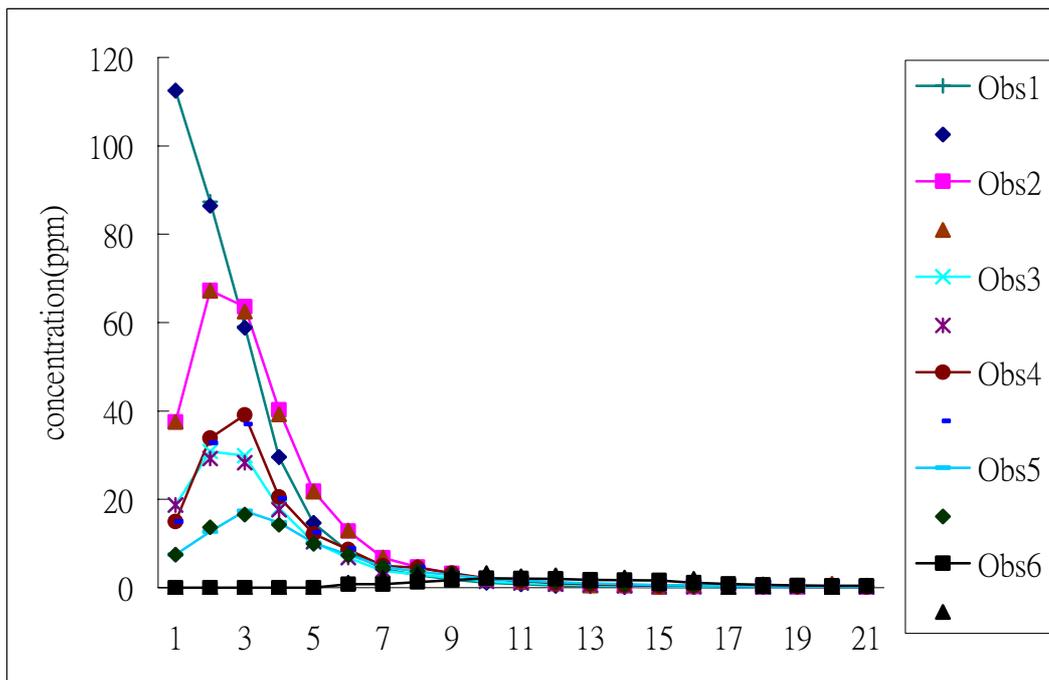


圖 5.18 案例 5-1 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況

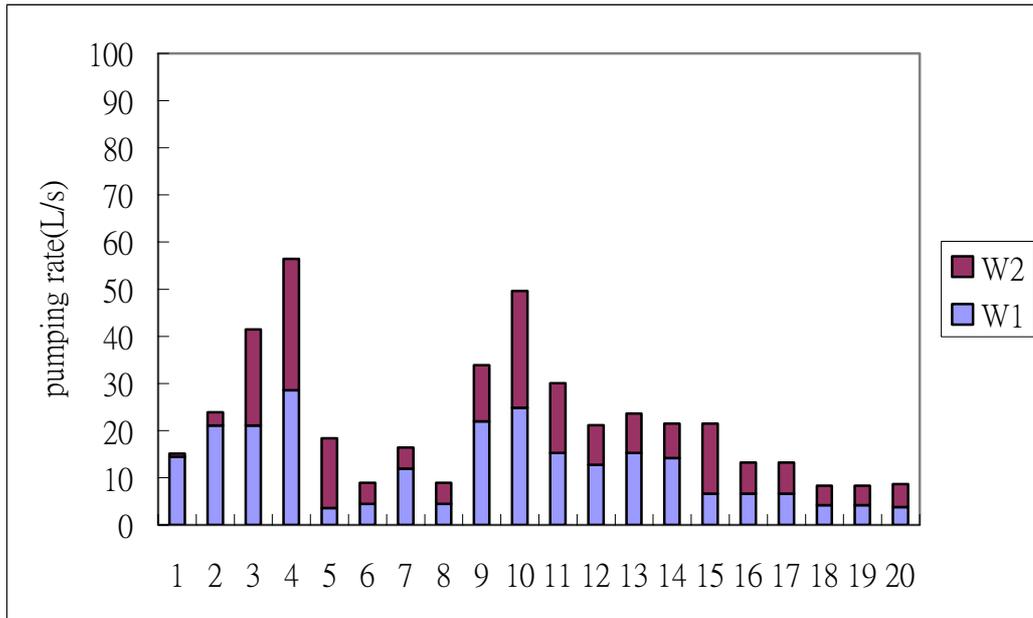


圖 5.19 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量

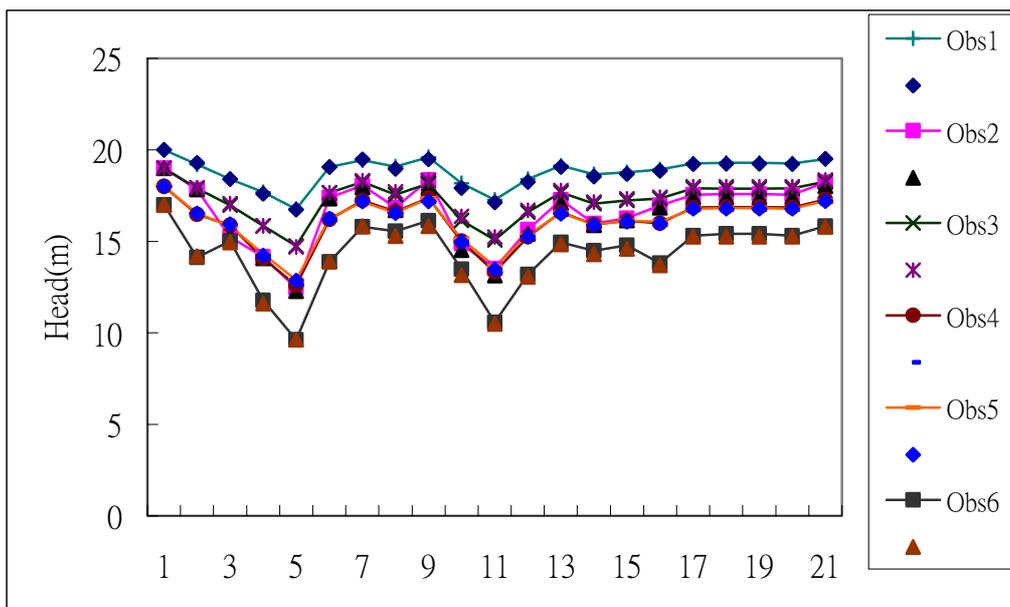


圖 5.20 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況

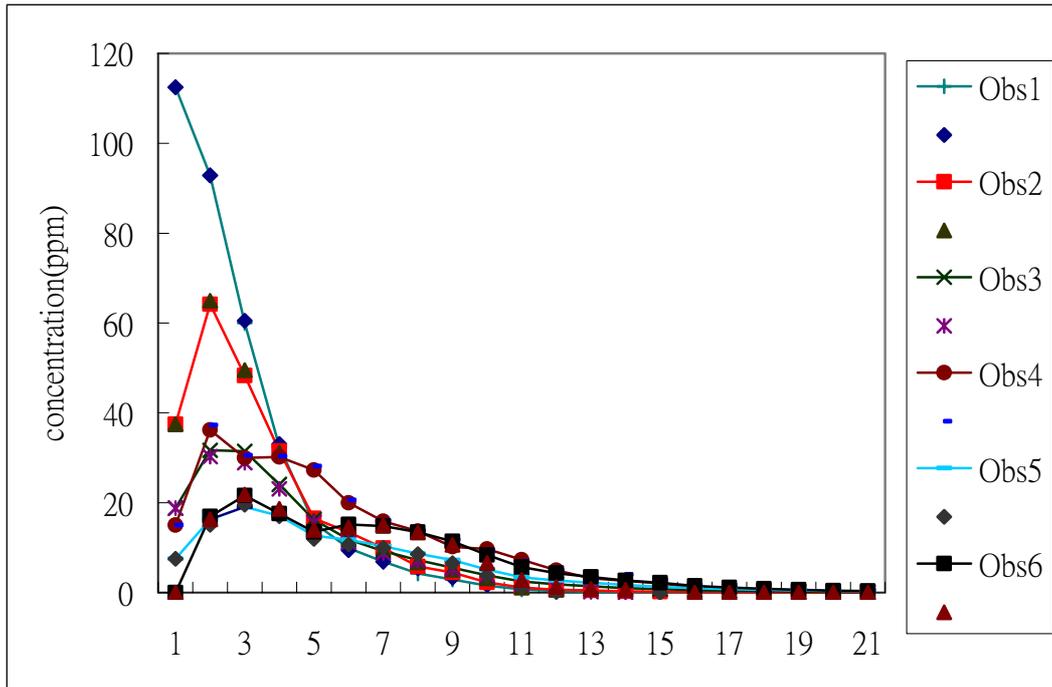


圖 5.21 案例 5-2 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況



### 5.2.2 計算效率之比較

爲了展示本研究ANN-CDDP模式能有效的減少計算量，設計模擬條件相同，但節點與元素數目不同的三個案例，如表5.9所示，地下水流區域大小如圖5.22所示，案例6-1的模擬區域大小爲  $600m \times 1,200m$  (藍)，共有91個節點與72個元素，案例6-2的模擬區域爲  $1000m \times 1600m$  (紅)，共有187個節點與160個元素，案例6-3的模擬區域爲  $1400m \times 2000m$  (綠)，共有315個節點與280個元素，邊界條件方面皆相同，在左、右兩邊爲定水頭邊界，上、下兩邊爲無流量邊界條件，而初始條件爲以上述之邊界條件下之穩定流況，並以  $h_0 = 20m$  爲全區初始水頭。於整治前，發生於上游附近之污染團最大污染值之濃度爲150 ppm，整治的總規劃時期爲5年，每個時刻的時間間距( $\Delta t$ )爲三個月，共有20個規劃時刻，整治後，濃度限制 0.5 ppm。井網佈置爲一口抽水井與四口觀測井，各抽水井最大抽水量限制爲0.1 cms，污水處理廠之污水處理能力限制爲0.15 cms，其中含水層之相關參數，如前述之表5.7所示。

表 5.9 案例 6 之節點與元素

	節點	元素
案例 6-1	91	72
案例 6-2	187	160
案例 6-3	315	280

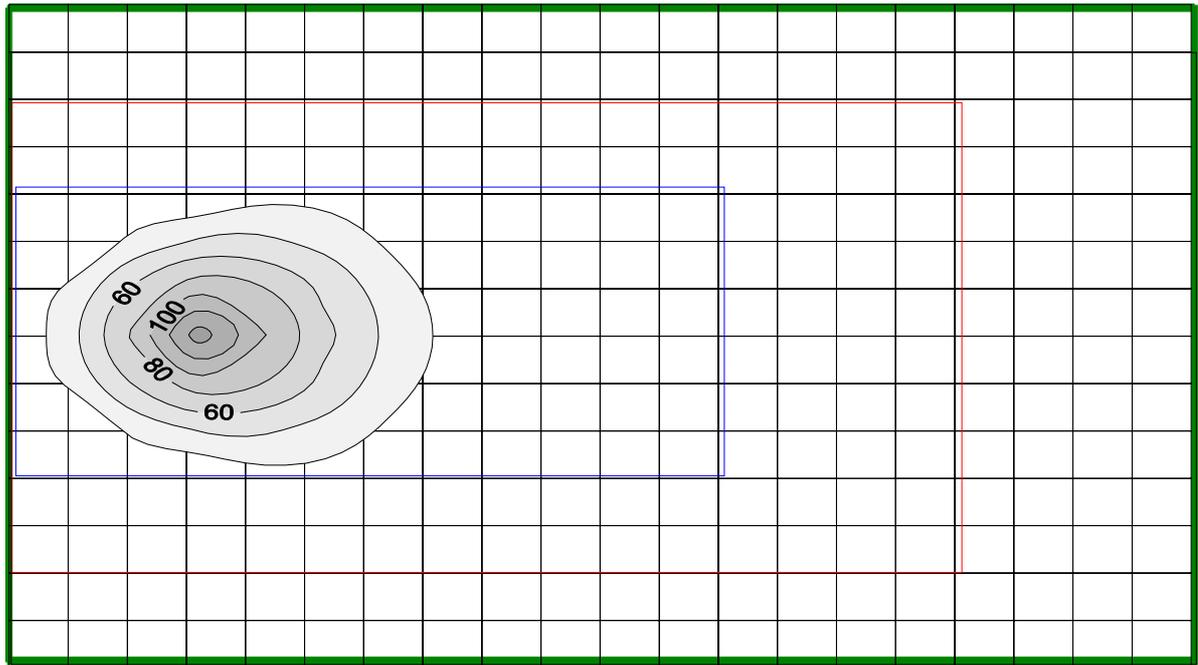


圖 5.22 案例 6 井網配置圖

以 ISOQUAD-CDDP 為驗證基準，比較 ISOQUAD-CDDP 與 ANN-CDDP 操作成本之差異，如表 5.10(a)，顯示 ANN-CDDP 造成 1.1~5.4% 的誤差，其計算量容易受到不同初始軌跡之影響，造成線性搜尋次數不同，變異較大，因此本研究取多次計算的平均時間作為平均計算時間，表 5.10(b) 顯示兩個方法平均計算時間和平均迭代次數，從 ISOQUAD-CDDP 的計算時間與格網數目的關係來看，當格網數目增加，ISOQUAD-CDDP 的計算時間也大幅增加，其計算量為狀態變數的三次方呈正比，與前人的研究相符(Chang and Shoemaker, 1992 ; Mansfield et al., 1998)。

案例 6-1 和 6-2 的模擬範圍較小，ANN-CDDP 對於計算時間的改善並不明顯，但是以案例 6.3 為例，其結果顯示 ANN-CDDP 總計算時間只為 ISOQUAD-CDDP 的 1/12.7 倍，ANN-CDDP 每次迭代的計算時間只為 ISOQUAD-CDDP 的 1/17.9 倍。相較於過去研究(Yong and Minsker(2001), Mansfield and Shoemaker (1998))，如 Yong and Minsker(2001)利用多尺度格網的方式漸進式求出最佳解，以狀態變數數目  $n=429$  為例，其計算時間為原來的 1/1.9 (0.53)倍； Mansfield and Shoemaker (1998)利用稀疏矩陣減少 CDDP 的計算量，以  $n=500$  為例，計算時間僅為原來的 1/3.2 倍，總結來看 ANN-CDDPD 可適度減少狀態變數的維度，計算效率的改善最為顯著。對於大尺度案例的計算量卻有顯著的改善。改善原因主要由於

ANN-CDDP 的狀態變數個數固定不變，計算量不隨格網(節點)數目增加而增加，每次迭代平均計算時間在 10 sec 左右，而每次迭代平均計算時間之所以有些微差距是因為每次迭代內的線性搜尋平均次數有所差異(案例 6-1: 17.48 次，案例 6-2: 16.59 次，案例 6-3: 13.37 次)，若將每次迭代時間除以線性搜尋平均次數，得到每次搜尋的時間都為 0.64 秒，驗證了不論案例模擬格網數目的多寡，只要類神經網路有相同的輸入輸出維度，ANN-CDDP 每次搜尋的時間也會相同。

由兩方法每次迭代平均計算時間比較(圖 5.23)，亦可說明 ANN-CDDP 的狀態變數數目不隨著格網範圍而改變，但是傳統方法(ISOQUAD-CDDP)隨著格網數目增加，計算量卻大幅增加，因此利用 ANN-CDDP 可在兼顧計算精度下，提升計算效率。

表 5.10 案例 6 操作成本與計算時間之比較

(a)操作成本之比較

	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
案例 6-1	\$3,133,620	\$3,097,920	1.14
案例 6-2	\$3,213,360	\$3,092,970	3.75
案例 6-3	\$3,276,630	\$3,097,800	5.45

(b)計算時間之比較(單位: Sec)

		ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對計算時間 欄(3)/欄(4)
案例 6-1	平均計算時間 (平均迭代次數)	84.37 (7)	33.22 (14)	
	每次迭代 平均計算時間	11.32	2.37	1/0.2
案例 6-2	平均計算時間 (平均迭代次數)	160.92 (15)	148.70 (13)	
	每次迭代 平均計算時間	10.62	11.90	1/1.1

案例 6-3	平均計算時間 (平均迭代次數)	130.57 (15)	1659.16(11)	
	每次迭代 平均計算時間	8.43	150.83	1/17.9

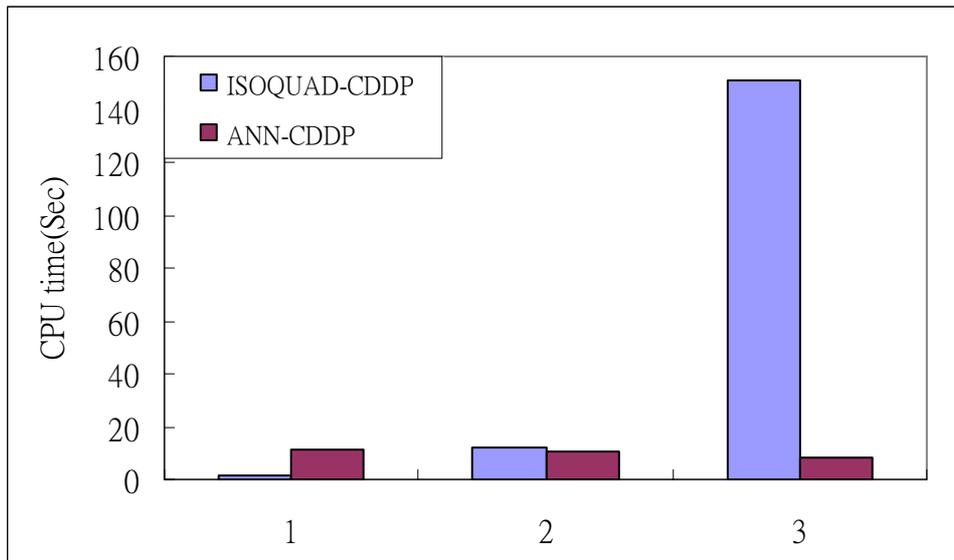


圖 5.23 模式每次迭代平均計算時間比較

### 5.2.3 大尺度案例之考量

傳統演算法(ISOQUAD-CDDP)是將一個地下水數值模式完整嵌入，其計算量容易隨問題的增大而遽增，本節將展示新演算架構(ANN-CDDP)應用於污染整治之實際案例，但是基於污染整治的實際案例資料取得不易，本節仍以數值模擬模式產生的資料作為展示案例。考量更大尺度的模擬案例(案例 7)，其地下水流區域大小為  $650\text{m} \times 1,250\text{m}$ ，包含 364(14\*26)個節點與 325(13\*25)個元素，本案例的網格節點為案例 5 的四倍，邊界條件方面，在左、右兩邊為定水頭邊界，左邊界水頭為  $h = 42\text{m}$ ，右邊界水頭為  $h = 30\text{m}$ ，上、下兩邊為無流量邊界條件，而初始條件為以上述之邊界條件下之穩定流況。於整治前，污染源如圖 5.24 所示，其最大污染值之濃度為 120 ppm。本模式每一個規劃時期之間距( $\Delta t$ )為 10.2 天，共 20 個規劃時刻，整治後，濃度限制 0.5 ppm，其中含水層之相關參數，如前節之表 5.7 所示。設計 4 口抽水井與 10 口觀測井，對稱設井簡化為 2 口抽水井與 5 口觀測井，如圖 5.24 所示，各井的抽水量最大限制為 0.06 cms，污水處理廠之污水處理能力限制為 0.3 cms。

案例 7 利用 ANN-CDDP 優選各時刻抽水量，優選過後，此案例之各時刻的抽水量、水位及濃度變化情況(由於案例設計是上下對稱，只以上排的觀測井為展示)，如圖 5.25~5.27 所示，可證明不論污染團分佈為何，ANN 都可以準確預測各時刻濃度與水位，亦可從濃度變化情況(圖 5.27)可看出達到污染整治的標準。

從表 5.11(a)可知，ANN-CDDP 目標函數值以 ISOQUAD-CDDP 為基準，ANN-CDDP 的相對誤差尚在容許範圍之內(在 5%以下)，ANN-CDDP 所求得是一近似全域最佳解，此可視為為了節省計算量所付出的代價，衡量傳統與新演算法的總計算時間，以案例 7 ( $n=364$ )為例，兩者差異頗大，表 5.11(b)顯示傳統模式總計算時間約為 3 小時，而新演算法只要 2 分鐘多，新演算法總時間約為傳統模式的 1/76.8 倍；若是估算每次迭代的計算時間，則新演算法每次迭代的計算時間約為傳統模式的 1/26.5 倍，從相對誤差與計算量的比較來看，說明了應用新方法除了可兼顧精度要求，又可以節省可觀的計算量。回顧前人提出的方法之改善效率，如採用稀疏矩陣的計算時間為原來的 1/3.2 倍(Mansfield and Shoemaker (1998)，以  $n=500$  為例)；採用多尺度格網的計算時間為原來的 1/1.9 倍(Yong and Minsker(2001)，以  $n=429$  為例)，上述兩方法對於計算效率的改善相當有限，相較

於此，本研究 ANN-CDDP 的計算效率遠遠高出兩方法許多，藉此可證明本研究確實對於計算效率的提升有很大的幫助。

表 5.12 比較兩方法於兩個不同狀態變數數目( $n=91$  與  $n=364$ )之案例，同一模擬範圍下，設定格網邊長比 1:2，使得格網數目 4:1 (狀態變數變數  $n=364$  與  $n=91$ )。從表 5.12 發現狀態變數數目增加了 4 倍，比較計算量的差異，ISOQUAD-CDDP 的每次疊代計算時間增加 140.6 倍，計算量增加倍率極高，約為狀態變數數目的 3.5 次方( $O(n^{3.5})$ )，但本研究 ANN-CDDP 計算時間不隨狀態變數數目增加而有顯著的增加，再次證明本研究確實對於計算效率的提升有很大的幫助。

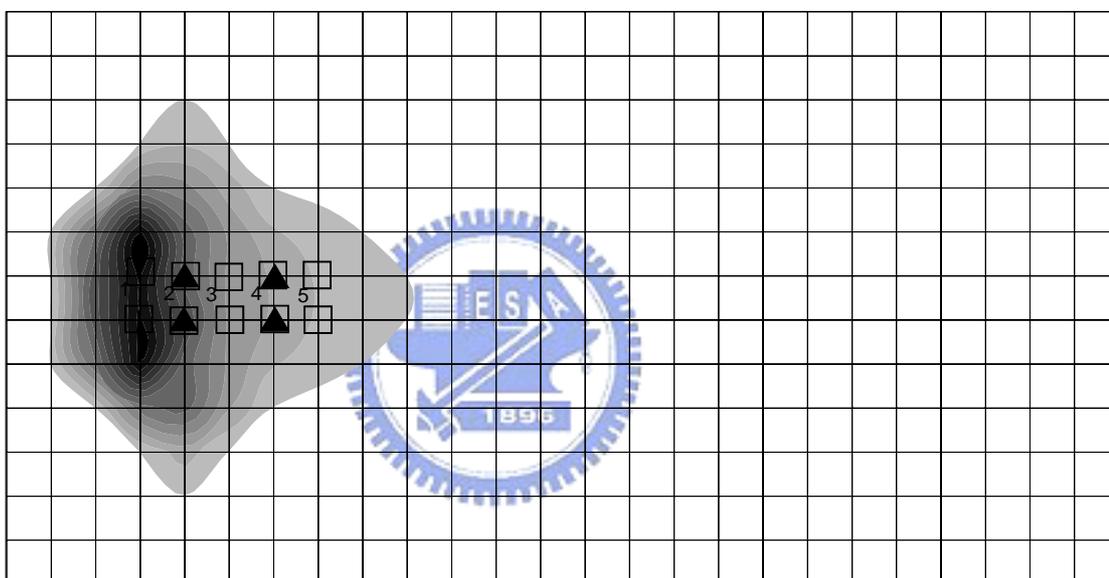


圖 5.24 案例 7 初始污染團位置及井網配置圖

表 5.11 案例 7 操作成本與計算時間比較

(a)操作成本比較

	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對誤差(%)
操作成本	\$13,887,180	\$13,249,080	4.81%

(b)計算時間比較(單位: Sec)

	ANN-CDDP	ISOQUAD-CDDP	相對計算時間 欄(2)/欄(3)
平均計算時間 (平均迭代次數)	133.38(14)	10236.30 (40)	
每次迭代 平均計算時間	9.65	255.90	1/26.52

表 5.12 每次迭代平均計算時間之比較(狀態變數數目 n=91 與 n=364)

	N=91	n=364	相對計算時間 欄(3)/欄(2)
ISOQUAD-CDDP	1.82(Sec)	255.90(Sec)	140.60
ANN-CDDP	9.53(Sec)	9.65(Sec)	1.01

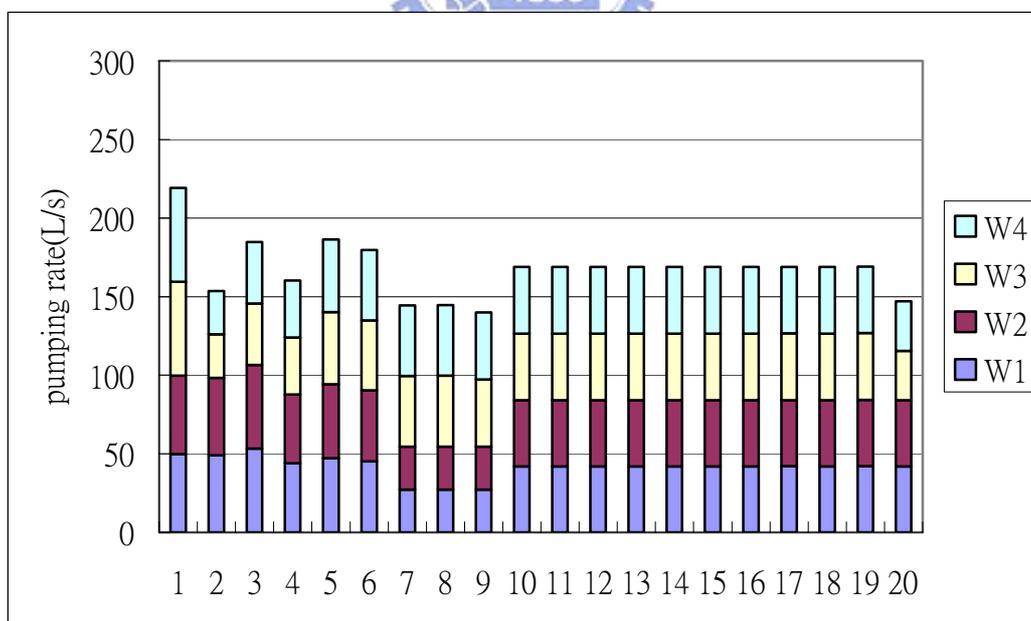


圖 5.25 案例 7 ANN-CDDP 所求得之各時刻的抽水量

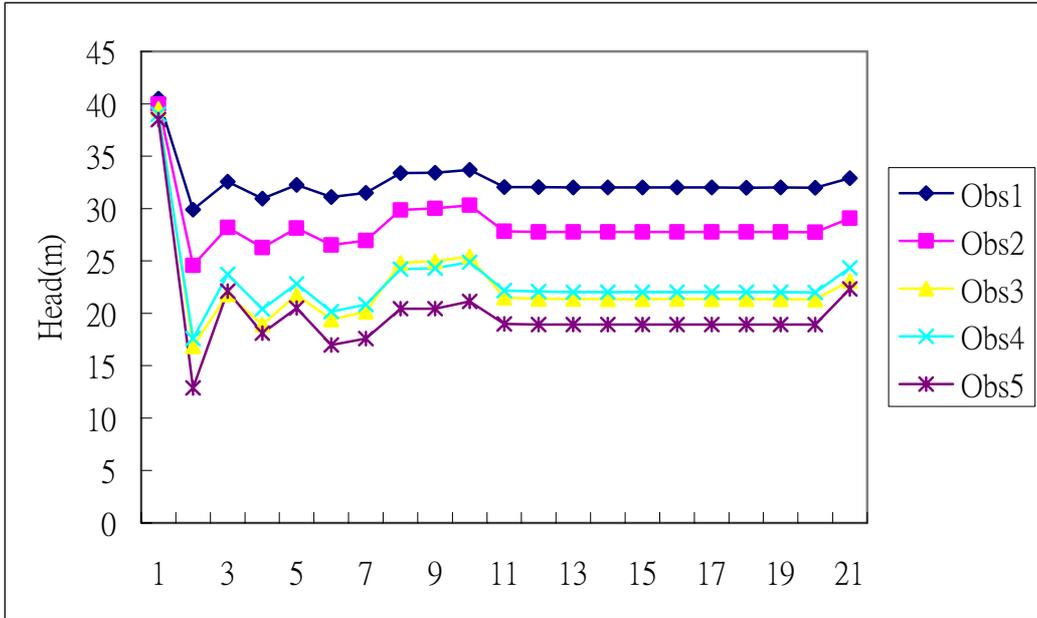


圖 5.26 案例 7 ANN-CDDP 所求得之各時刻的水位變化情況

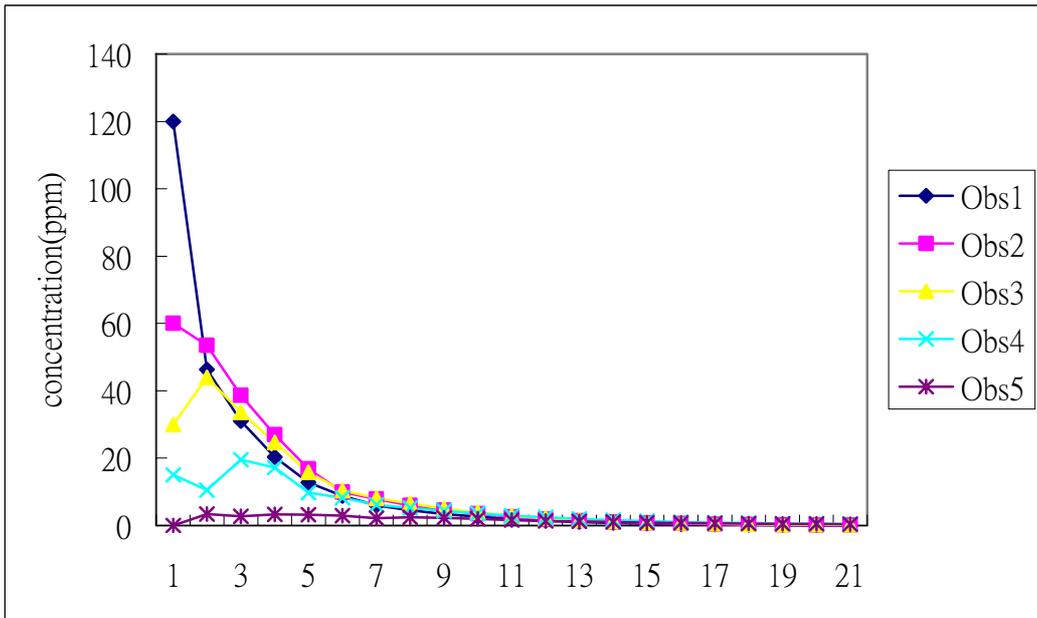


圖 5.27 案例 7 ANN-CDDP 所求得之各時刻的濃度變化情況

## 六、結論與建議

第一章到第五章中，已分別針對地下水管理模式過去相關研究成果、本研究所發展的演算架構與流程、以及模式的驗證、與案例模擬等做詳細之敘述，本章將針對本研究成果作一總結，並提出建議以作為後續相關研究之參考。

### 6.1 結論

近年來由於類神經網路、啟發式演算法等之發展，使得可用之工具大為提昇，尤其是類神經網路已廣泛的應用在水資源之管理規劃上，然而大部份文獻僅採用類神經網路於迴歸或預測，鮮少整合類神經網路與優選模式來求解地下水管理問題。少數整合類神經網路與優選模式(啟發式演算法)於地下水管理模式者，只能優選非時變抽水量，有鑑於此，本研究提出一個新的演算法 ANN-CDDP，此乃為整合類神經網路與動態控制理論來求解地下水管理與污染整治問題，即整合限制型微分動態規劃(CDDP)與類神經網路(ANN)，模式外層為 CDDP，內層嵌入 ANN，此一演算法的決策變數為時變之抽水量，優選出動態且跨時刻之最佳解，可解決動態水量及水質管理之問題。

本研究成功應用類神經網路於地下水水量與水質的長期動態預測上，作為限制型微分動態規劃之系統轉換函數。在給定初始水位及污染濃度，以及各時刻的抽水量之下，經由類神經網路得到各時刻的水位及污染濃度。以類神經網路群之架構來學習地下水流及污染傳輸之機制，即使改變地下水含水層、抽水型態及井網的配置，類神經網路仍然可以有效的預測水位與污染濃度，充分顯示類神經網路長期動態預測之強健性。

再者，過去研究中鮮少看到具梯度型態的最佳化方法與類神經網路之整合，本研究之所以能成功的完成整合，主要因為類神經網路作為微分動態規劃之系統轉換函數，為一可微分函數，透過連鎖律求解其輸出變數對輸入變數之敏感度，該敏感度即為系統轉換函數之微分項。

本研究的價值在於降低模式整體之計算量：過去 CDDP 計算量為狀態變數數目的三次方，缺乏實用的價值，而本研究利用 ANN-CDDP 之方法可大幅度節省計算量，若以地下水水量管理模式 315 個節點為例，其計算時間為傳統演算法

的 1/74 倍，若以水質管理模式 364 個節點為例，其計算時間為傳統演算法的 1/26 倍。

然而，礙於過去 CDDP 演算架構，CDDP 受限於內層模擬模式，無法擴充應用到其他領域，一旦內層模式只能模擬地下水流，整個演算法也只能侷限於求解地下水量管理的相關問題。利用本研究之演算架構將可突破這種內層模式的限制，只須要有可靠的案例資料重新訓練內層類神經網路，外層管理模式幾乎不需要額外修改，即可應用在不同的領域上。

#### 6.1.1、地下水流及水質類神經網路模式

針對同時存在多個狀態變數的複雜系統，如地下水水流及污染傳輸模式，其類神經網路訓練採平行式(類神經網路群)架構，一完整模式分成多個類神經網路獨立訓練，使得模式具有元件化可拆解組裝的彈性，當某一個類神經網路預測有誤，只要針對此有誤的網路重新訓練，不需要將所有的網路都重建，因此建模較為彈性。

本研究發現類神經網路具有強健性，不同觀測井數及抽水量型態等對於類神經網路預測的影響並不大，類神經網路仍然可以準確預測，惟獨過少的觀測井數提供不足的資訊，易造成預測上的困難，尤其是單一口下游的觀測井，其觀測井附近濃度改變對觀測井濃度有較大的影響，使得類神經網路缺少空間上的資訊，而造成預測上有較大的誤差。為了分析不同的抽水量型態對類神經網路的敏感性，先採用隨機函數產生抽水量及所對應的狀態等作為訓練的資料，訓練後，採用各種不同的抽水量型態為輸入進行驗證，驗證的結果皆準確。

#### 6.1.2、地下水水量管理模式

在地下水水量管理之演算範例中，根據本研究之優選結果顯示，操作成本隨著總需求量增加而增加，因此總需求量的決定對於地下水水量管理確實非常重要。本模式亦反應出需水曲線趨勢與成本現值有關，在總需水量皆相同條件下，需求曲線的型態不同也會影響操作成本，由於成本換算為現值的影響，而造成操作成本的差異，需水量成凸函數曲線型態遞增時，其所得之操作成本會最小，需水量成凹函數曲線型態遞減時，其所得之操作成本會最高，過去以 ANN 為模擬

模式且僅考量穩態抽水量的最佳化模式是無法看到這種跨時刻需水量的影響，因此地下水水量規劃前，決策者初步估計未來需求型態之後，將可藉此管理模式先行規劃以減少成本的支出。

### 6.1.3、地下水污染整治規劃模式

對於一個最佳化管理規劃模式而言，污染整治之機制與水量管理有所不同。於水量管理模式中，最主要需要滿足之條件，為每一個時刻之需水量，因此對於模式而言，已經有一基本之抽水量，且每一時刻之最佳總抽水量一定等於每一個時刻之需水量。然而於污染整治模式中，其水井之抽水量將隨污染值之傳輸與擴散而不同，同一水井之抽水量，隨時間之變化頗大，此點與水量管理模式有很大之不同。

根據本研究之優選結果顯示，所優選之時變抽水量皆能根據井網配置與污染團動態而調整，以確保達到整治標準。此結果顯示優選模式未來面對不同的井網設計與污染團分佈等狀況，只須以輸入輸出資料重新訓練類神經網路，管理模式不需要大幅修改，仍然適用，充分顯示模式整體的強健性。



## 6.2 建議

- 1 本研究目前採用類神經網路當作最佳化優選模式之系統轉換函數，本研究的訓練資料來自於地下水數值模式，但是未來應用到地下水水量管理等實際問題前，需要一筆可觀的工作時間進行模式之率定與驗證，因此未來可直接以現地的資料作為訓練類神經網路的資料，將可節省下建模的時間及增進效率。
- 2 本研究的水資源管理問題，其水資源系統僅限於地下水系統，並沒有考量地表水系統，未來可將擴大考量為地表水與地下水系統。如能將地下水資源與地表水資源整合進行聯合營運，將可在水資源運用上獲得更大的效應。
- 3 另外，本研究的地下水污染整治規劃方面，系統僅考量到拘限含水層，然而，地下水污染多發生於非拘限含水層，因此未來計畫將模式擴充為非拘限含水層之污染整治規劃模式。
- 4 本架構結合最佳動態控制理論與類神經網路為一嶄新的概念，選用輸入輸出資料建立類神經網路模式，接著找出系統最佳化之策略，此演算架構比以往規劃模式彈性，且兼具計算精度與效率，建議未來可以擴充應用到其他的領域上。
- 5 目前演算架構內層模擬模式為類神經網路，類神經網路的訓練前考慮結合主成份分析或是集群分析等技術來降低訓練階段的計算量與增加其精度。未來亦可將以倒傳遞類神經網路為主之模式置換為其他學習演算法，如即時回饋學習演算法，或是其他人工智慧的方法，如支援向量機(SVM)等。

## 附錄 A 類神經網路

### A.1 生物神經元模型

生物神經網路是由巨量的神經細胞(neuron, 又稱神經元)所組成, 形成一個高度連結網狀的神經網路, 資訊的處理工作即透過上述之連結來進行。以人腦而言, 人腦大約由  $10^{11}$  個神經元所組成, 而每一個神經元約有  $10^3$  根連結與其他神經元相連, 所以人腦中約有  $10^{14}$  根連結, 因此人腦可以儲存大量而複雜的知識。神經元構造, 其主要構造如下:

1. 神經核(soma): 神經細胞的核心, 為一呈核狀的處理機構。
2. 神經軸(axon): 神經細胞呈軸索狀的輸送機構。
3. 神經樹(dendrites): 神經細胞呈樹枝狀的輸出入機構。
4. 神經節(synapse): 神經細胞神經樹上呈點狀的連結機構。

當神經細胞透過神經節與神經樹從其它神經元輸入脈波訊號後, 經神經核處理, 產生一個新的脈波訊號, 這個訊號再經過神經軸傳送到神經樹, 再透過神經節與神經樹成為其它神經元的輸入脈波訊號, 如果脈波訊號是經過興奮神經節(excitatory synapse), 則會增加脈波訊號的速率(pulse rate), 如果脈波訊號是經過抑制神經節(inhibitory synapse), 則會減少脈波訊號的速率。因此, 脈波訊號的速率是同時取決於輸入脈波訊號的速率, 以及神經節的強度。而神經節的強度可視為神經網路儲存資訊之所在, 神經網路的學習即在調整神經節的強度(葉怡成, 1994)。

## A.2 人工神經元模型

類神經網路理論起源於 1950 年代，當時科學家仿造人類大腦的組織及運作方式，開始提出稱之為「感知機」(perceptron)的神經元模型，這是最簡單也是最早的類神經模型，感知機通常被拿來做分類器(classifier)使用。但是在 1980 年之前，由於專家系統(expert system)則是當時最流行的人工智慧基礎，加上類神經網路的理論仍不成熟，因此類神經網路並沒有受到很大的重視，一直到 1980 年之後，由於霍普菲爾(Hopfield)神經網路(1982 年)被提出，而此時專家系統開始遇到了瓶頸，類神經網路理論才逐漸受到重視。直到今日為止，類神經網路仍然有新的架構及理論不斷的被提出，配合電腦運算速度的增加，使得類神經網路的功能更為強大，運用層面也更為廣泛。

在各個領域中，若要精確的分析輸入與輸出之間的關係，則必須將系統藉由數學的方式做成模型。實際的系統往往是複雜且非線性的，以數學的方式如簡化系統及線性化，容易造成誤差。類神經網路的一個優點在於並不需要瞭解系統的數學模型為何，而直接以神經網路取代系統的模式，而得到輸入與輸出之間的關係。

1943 年由美國心理學家 McCulloch 和數學家 Pitts 共同提出的形式神經元模型，同常稱之為 MP 模型。(謝明富，1999)類神經模型具有將輸入變數與輸出變數間，複雜的內在對映關係充份呈現的功能，其為解決非線性動態問題的最佳工具之一。此模型由許多人工神經元所組成，神經元又稱為節點(node)或臨界值元件(threshold element)，其輸入端輸入各自之訊息，藉由各自權重加權總和後傳入節點，透過閾值的過濾，繼而經由轉換函數轉換後輸出，其數學表示式如下：

$$Y_j = f(\text{net}_j), \text{net}_j = \sum_i W_{ij} X_i - b_j \quad i = 1, 2, \dots, n \dots\dots\dots (A.1)$$

其中：

$Y_j$ :為模仿生物神經元模型的輸出訊號。

$f$ :為模仿生物神經元模型的轉換函數(transfer function)，將輸入值之加權乘積和轉換成處理單元輸出值。

$W_{ij}$ :為模仿生物神經元模型的神經節強度，又稱連結加權值。

$X_i$ :為模仿生物神經元模型的輸入訊號。

$b_i$ :為模仿生物神經元模型的閾值(bias)。

net:為輸入值之加權乘積和。

n：為輸入訊號個數

類神經網路常用之轉換函數有下列四種：

1. 位階臨界轉換函數(Step Threshold Transfer Function)：臨界函數的輸出只隨輸入值的正副號所改變。
2. 線性轉換函數(Linear Transfer Function)：函數輸入值與輸出值呈線性關係。
3. 非線性轉換函數(Nonlinear Transfer Function)：函數輸出的最大值與最小值限制在一個特定的範圍內。
4. 臨界 S 型轉換函數(Sigmoid Threshold Transfer Function)：是最常被應用之函數，因為此種函數型態具有可微分且連續等性質，此特質使網路可以應用到非線性的學習領域中。常用函數有雙彎曲函數(Log sigmoid transfer function) (式 A.2)與雙曲線正切函數(Hyperbolic tangent sigmoid transfer function) (式 A.3)兩種。

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \dots\dots\dots (A.2)$$

$$f(x) = \tanh x = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \dots\dots\dots (A.3)$$

### A.3 類神經網路基本理論

類神經網路的架構乃仿照人類腦部神經網路的模型而發展出來的，一個類神經網路是由許多個人工神經元連結組成，並可以組成各種網路模式。(葉怡成，1994)

類神經網路的總體運作模式有兩種：(1)學習過程(Learning)－網路依學習演算法，從範例中學習，以調整網路權重值的過程，與(2)回想過程(Recalling)－網路依學習演算法，以輸入資料決定網路輸出資料的過程。

此外，學習過程的學習演算法又可分為兩類：

#### (1)監督式學習

從問題領域中取得訓練範例(有輸入變數值，也有輸出變數)，並從中學習輸入變數與輸出變數的內在對映規則，以應用於新的案例(只有輸入變數值，而需推論輸出變數值的應用)。例如感知機網路、倒傳遞網路、機率神經網路、學習向量量化網路與反傳遞網路等五種類神經網路皆屬監督式學習。

#### (2)無監督式學習

從問題領域中取得訓練範例(只有輸入變數值)，並從中學習範例的內在集群規則，以應用於新的案例(有輸入變數值，而需推論它與那些訓練範例屬同一集群的應用)，例如自組特徵映射網路、自適應共振理論網路等兩種類神經網路皆屬無監督式學習。

#### A.4 倒傳遞類神經網路 (BPN)

在監督式學習模式中，由 Rumelhart 等學者於 1986 年所發展的誤差向後推導或稱倒傳遞學習演算法（簡稱 BP）是被廣泛使用的一種學習演算法，因為其具有學習及回想的功能，故可進行定率預測。一般倒傳遞網路可分為三部份，輸入層用以接受外在環境的訊息，其神經元數目則依問題而定；輸出層用以輸出訊息給外在環境，其神經元數目同樣依問題而定；隱藏層將輸入與輸出層各處理單元間的相互關係充份地表現出來，其神經元數目並無標準可決定。倒傳遞網路模式學習訓練方式由所探討問題中取得相當數量之訓練樣本，並從樣本中應用向前饋入與誤差向後推導兩步驟推求輸入變數與輸出變數的內在對映規則，再應用回想功能，進行新案例之輸出變數值推估。下列為倒傳遞網路 (BPN) 之學習與回想過程建立步驟：

##### 一、倒傳遞網路學習過程的建立：

(1) 令輸入層、隱藏層與輸出層節點分別以  $i$ 、 $j$ 、 $k$  為下標符號，建立一輸入層、隱藏層與輸出層節點數分別為  $m$ 、 $n$ 、 $o$  個，以均勻分佈隨機亂數設定加權值矩陣  $W_{ij}$ 、 $W_{jk}$  與閾值  $b_j$ 、 $b_k$  的初始值。

(2) 輸入一個訓練案例的輸入向量  $\vec{X} = [x_i]$   $i = 1, 2, \dots, m$  與目標輸出向量

$$\vec{T} = [T_k] \quad k = 1, 2, \dots, o \text{。}$$

(3) 計算推估輸出向量  $\vec{O}$ 。

(a) 輸入層向量

$$\vec{X} = [x_i] \quad i = 1, 2, \dots, m$$

(b) 計算隱藏層輸出向量  $\vec{H}$

$$H_j = f_h(\text{net}_j), \quad \text{net}_j = \sum_{i=1}^m x_i w_{ij} - b_j \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \text{ ..... (A.4)}$$

其中  $f_h(x)$  為隱藏層轉換函數，可依問題型態挑選適當轉換函數。

(c)計算輸出層輸出向量 $\vec{O}$

$$O_k = f_o(net_k), \quad net_k = \sum_{j=1}^n H_j w_{jk} - b_k \quad k=1,2,3,\dots,o \dots\dots\dots (A.5)$$

其中 $f_o(x)$ 為輸出層轉換函數，可依問題型態挑選適當轉換函數。

(4)計算加權值矩陣修正量 $\Delta w$ ，及閾值修正量 $\Delta b$ 。

因為監督式學習的目的在降低網路輸出單元目標輸出值與推論輸出值之差  
距，所以一般以能量函數（又稱誤差函數或是性能函數）表示學習的品質：

$$E = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^o (O_k - T_k)^2 \dots\dots\dots (A.6)$$

因此網路的學習過程即為使能量函數最小化的過程，通常以最陡坡降法來  
使能量函數最小化，即每輸入一個訓練案例，網路即小幅調整加權值的大小，調  
整的幅度和誤差函數對該加權值的敏感程度成正比，即與誤差函數對加權值的偏  
微分值大小成正比：



$$\Delta w = -\eta \frac{\partial E}{\partial w} \dots\dots\dots (A.7)$$

式中：

$\Delta w$ :加權值調整的幅度。

$\eta$ :學習速率(learning rate)，控制每次以最陡坡降法最小化誤差函數的步  
幅，其範圍為 $0 \leq \eta \leq 1$ ，可視所需狀況自行設定範圍容許內之值。

經由一連串的代入及演算可推得以下各值：

(a)輸出層

$$\Delta w_{jk} = \eta(T_k - O_k) \cdot df_o(net_k) \cdot H_j \dots\dots\dots (A.8)$$

$$\Delta b_k = -\eta(T_k - O_k) \cdot df_o(net_k) \dots\dots\dots (A.9)$$

其中  $df_o(x)$  為輸出層轉換函數之一階導函數，舉例說明：若以雙彎曲函

數  $f_o(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$  為輸出層之轉換函數，其一階導函數則為

$df_o(x) = \frac{e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2}$ 。若以雙曲線正切函數  $f(x) = \tanh x$  為輸出層之轉換

函數，其一階導函數則為  $df_o(x) = \frac{1}{(\cosh x)^2}$ 。

(b)隱藏層

$$\Delta w_{ij} = \eta(T_k - O_k) \cdot df_o(net_k) \cdot w_{jk} \cdot df_h(net_j) \cdot x_i \dots\dots\dots (A.10)$$

$$\Delta b_j = -\eta(T_k - O_k) \cdot df_o(net_k) \cdot w_{jk} \cdot df_h(net_j) \dots\dots\dots (A.11)$$

其中  $df_h(x)$  為隱藏層轉換函數之一階導函數。

(5)更新加權值矩陣與閾值

$$w_{new} = w_{old} + \Delta w \dots\dots\dots (A.12)$$

$$b_{new} = b_{old} + \Delta b \dots\dots\dots (A.13)$$

(6)重覆步驟 2 至步驟 6，直至收斂，即誤差不再有明顯變化且符合所要求的精  
度。

二、倒傳遞網路回想過程的建立:

(1)讀入加權值矩陣與閾值矩陣。

(2)輸入一個欲作檢定或驗證的案例之輸入向量  $\vec{X} = [x_i] \quad i = 1, 2, \dots, m$ 。

(3)計算推估輸出向量  $\vec{O}$ 。

(a)輸入層向量

$$\vec{X} = [x_i] \quad i = 1, 2, \dots, m$$

(b)計算隱藏層輸出向量  $\vec{H}$

$$H_j = f_h(\text{net}_j) , \text{net}_j = \sum_{i=1}^m x_i w_{ij} - b_j \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \dots\dots\dots (A.14)$$

其中  $f_h(x)$  為隱藏層轉換函數，可依問題型態挑選適當轉換函數。

(c)計算輸出層輸出向量  $\vec{O}$

$$O_k = f_o(\text{net}_k) , \text{net}_k = \sum_{j=1}^n H_j w_{jk} - b_k \quad k = 1, 2, 3, \dots, o \dots\dots\dots (A.15)$$

其中  $f_o(x)$  為輸出層轉換函數，可依問題型態挑選適當轉換函數。



### A.5 訓練倒傳遞類神經網路之演算法

在訓練最佳化技巧上可分兩大類，第一大類為一階梯度法，包含(1)最陡坡降法(Steepest Descent Techniques)(2)共軛梯度法；第二大類為二階梯度法，包含(1)牛頓法(Newton's Method) (2)高斯牛頓法(3)擬牛頓法。

本研究採用的最佳化技巧為 LM 法(Levenberg-Marquardt Method)，包含了牛頓法和最陡坡降法，LM 演算法不必直接計算牛頓法中的 Hessian 矩陣，當誤差函數具有平方和的形式時，Hessian 矩陣(H)可以逼近成下式:

$$H = J^T J \dots\dots\dots (A.16)$$

並用下式計算網路的誤差梯度  $f$

$$f = J^T e \dots\dots\dots (A.17)$$

其中  $J$  為 Jacobian 矩陣，它包含網路誤差對於權重值的一階微分； $e$  是網路誤差向量，定義如下:

$$\|e\|^2 = \sum_i \left[ \left( Y_i - \hat{Y}_i \right)^2 \right] \dots\dots\dots (A.18)$$

依據 LM 演算法，第  $k+1$  次疊代的權重向量( $W_{k+1}$ )為:

$$W_{k+1} = W_k - [H^{-1} + \mu I]^{-1} J^T e \dots\dots\dots (A.19)$$

(A.19)中的 Hessian 矩陣近似後，重寫為:

$$W_{k+1} = W_k - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T e \dots\dots\dots (A.20)$$

其中  $W_k$  代表在第  $k$  次疊代的權重向量(包含所有權重與偏權值)， $I$  為單位矩陣， $J$  為 Jacobian 矩陣， $e$  是網路誤差向量， $\mu$  為常數， $\mu$  之選定亦非常重要，關係到收斂次數之多寡。基本上， $\mu$  為一正之參數。當  $\mu$  為零時，式(A.20)則為牛頓法之型式；當  $\mu$  趨近於無限大時，式(A.20)則為最陡坡降法之型式。

## A.6 正規化與反正規化

由於神經元所用的轉換函數之值域固定，其值域為[0,1]，但真實的輸出變數的尺度可能遠大或遠小於此值域，因此在將數據載入網路進行學習前，輸出變數必須先行正規化，以不超過轉換函數之值域。一般而言，可先統計輸出變數的值域  $[Y_{\min}, Y_{\max}]$ ，依下式作正規化(圖 1):

$$y = \frac{Y - Y_{\min}}{Y_{\max} - Y_{\min}} (D_{\max} - D_{\min}) + D_{\min} \quad \dots\dots\dots (A.21)$$

$Y_{\min}, Y_{\max}$  = 正規化前輸出變數的最小值與最大值

$D_{\min}, D_{\max}$  = 正規化後輸出變數的最小值與最大值

$Y$  = 正規化前輸出變數的值

$y$  = 正規化後輸出變數的值

在網路學習完畢後，必須將網路計算所得的輸出變數預測值作反正規化，公式為上式之反運算:

$$Y = \frac{y - D_{\min}}{D_{\max} - D_{\min}} (Y_{\max} - Y_{\min}) + Y_{\min} \quad \dots\dots\dots (A.22)$$

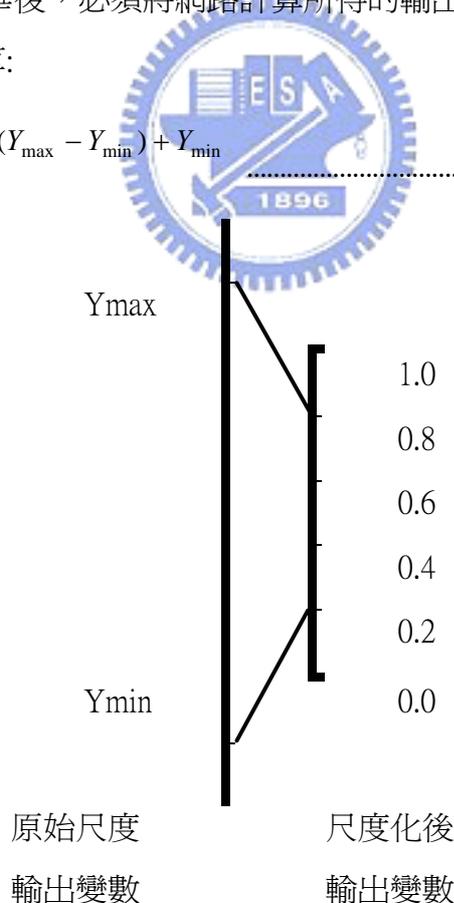


圖 1 輸出變數的正規化

## 附錄 B 微分動態規劃理論

對於地下水管理問題的決策分析方法中，連續近似的微分動態規劃(DDP)是較有效率的方法之一，其最大的優點是可以克服維度的困擾，減少記憶體容量和計算所需時間，以及不需要將決策變數(decision variable)和狀態變數(state variable)離散化。

大部份的地下水管理問題都是可表示成時間間斷的控制問題，因此可對時間區分成幾個階段(stage)，如果時間是由 1 到 t 時刻，則可分為 t 個階段，每一個階段皆有該階段的狀態變數和必須要作決策的決策變數。則此地下水管理最佳化控制問題在求決策變數之最佳值，且必須要能滿足各限制式，而微分動態規劃即為解最佳控制問題的方法之一。

微分動態規劃之解題技巧是以動態規劃為原則，依據動態規劃的最佳性原則，若已知目前的狀態，則剩餘階段的最佳策略與先前階段所採用的策略獨立而無關，最佳的當下決策只與現在的狀態有關，因此將原問題分解為一個個具遞迴關係的次問題，而再以非線性規劃的方法求出每一個次問題的最佳解，如此循環反覆即可求得原問題的最佳解。其問題型態可表示如下：

$$\min_{u_t, t=1, \dots, N} \sum_{t=1}^N L_t(x_t, u_t) \quad (B.1)$$

受限於：

$$x_{t+1} = T(x_t, u_t, t) \quad (B.2)$$

其中(B.2)式為系統轉換函數，可代表不同型態之問題。解題之過程，包含有後掃過程於前掃過程，後掃過程主要求得最佳控制法則，而前掃過程則應用後掃過程之最佳控制法則求得最佳控制值。(B.1)~(B.2)所形成之問題型態為無限制式分動態規劃，而一般自然界之問題皆包含有限制條件，因此，Murry and Yakowitz, [1979]，提出限制型微分動態規劃，於前、後掃過程皆採用二次規劃之方式來處理有限制條件之情形。以下將分別敘述無限制條件微分動態規劃與有限制條件微分動態規劃之解題過程。

### B.1 無限制式微分動態規劃(DDP)

考慮式(B.1)及(B.2)所形成之無限制條件微分動態規劃問題：

1.後掃過程：

a.最後一個時刻(N)：對於最後一個時刻之最佳化問題可表示如下：

$$\min_{u_N} L_N(x_N, u_N) \quad (B.3)$$

受限於：

$$x_{N+1} = T(x_N, u_N, N) \quad (B.4)$$

由於無限制式微分動態規劃並不考慮終端限制條件，因此對於最後時刻之狀態變數會落於何值，並不加以限制。因此可直接對式(B.3)求其最佳化之結果。欲求解式(B.3)，首先將式(B.3)針對初始軌跡(nominal policy)  $\hat{x}_N, \hat{u}_N$  作泰勒展開至二階，然後對展開之近似方程式求最佳化，泰勒展開後之型態可表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{L}_N = & \delta x_N^T A_N \delta x_N + \delta u_N^T B_N \delta x_N + \\ & \delta u_N^T C_N \delta u_N + D_N^T \delta u_N + E_N^T \delta x_N \end{aligned}$$

(B.5)

其中：

$$A_N = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 L_N}{\partial x \partial x} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \right) \quad (B.6)$$

$$B_N = \frac{\partial^2 L_{N-1}}{\partial u \partial x} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (B.7)$$

$$C_N = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 L_{N-1}}{\partial u \partial u} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \right) \quad (B.8)$$

$$D_N = \frac{\partial L_{N-1}}{\partial u} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (B.9)$$

$$E_{N-1} = \frac{\partial L_{N-1}}{\partial x} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (B.10)$$

$$\delta x_N = x_N - \hat{x}_N \quad \delta u_N = u_N - \hat{u}_N \quad (B.11)$$

此近似方程式之最佳解可表示如下：

$$B_N \delta x_N + 2C_N \delta u_N + D_N = 0$$

$$\delta u_N^* = -\frac{1}{2} C_N^{-1} (B_N \delta x_N + D_N) = \alpha_N + \beta_N \delta x_N \quad (\text{B.12})$$

$$\alpha_N = -\frac{1}{2} C_N^{-1} D_N$$

$$\beta_N = -\frac{1}{2} C_N^{-1} B_N$$

將式(B.12)代回式(B.5)，則第 N 階段之遞迴方程式為：

$$f_N^*(x_N) = \delta x_N P_N \delta x_N + Q_N^T \delta x_N + R_N \quad (\text{B.13})$$

其中：

$$P_N = A_N - \frac{1}{4} B_N^T C_N^{-1} B_N \quad (\text{B.14})$$

$$Q_N = -\frac{1}{2} D_N^T C_N^{-1} B_N + E_N^T \quad (\text{B.15})$$

$$R_N = -\frac{1}{4} D_N^T C_N^{-1} D_N \quad (\text{B.16})$$

於無限制條件微分動態規劃之演算過程中， $\alpha_N, \beta_N, P_N, Q_N$  必須儲存起來，已備後續時刻演算使用。

b. 第 N-1 時刻：此個時刻之最佳化問題可表示如下：

$$\min_{u_{N-1}} \{L_{N-1}(x_{N-1}, u_{N-1}) + f_N^*(x_N)\} \quad (\text{B.17})$$

受限於：

$$x_N = T(x_{N-1}, u_{N-1}, N-1) \quad (\text{B.18})$$

其中  $f_N^*(x_N)$  為前一時刻目標函數之近似最佳解。求解此時刻之問題，首先將式(B.18)代入式(B.17)中，形成：

$$\min_{u_i} \{L_{N-1}(x_{N-1}, u_{N-1}) + f_N^*(T(x_{N-1}, u_{N-1}))\} \quad (\text{B.19})$$

故此時刻之問題型態，由式(B.17)、(B.18)變成式(B.19)。求解式(B.19)仍將其針對初始軌跡作泰勒二次近似，其型態如下：

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{N-1} = & \delta x_{N-1}^T \tilde{A}_{N-1} \delta x_{N-1} + \delta u_{N-1}^T \tilde{B}_{N-1} \delta x_{N-1} + \\ & \delta u_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1} \delta u_{N-1} + \tilde{D}_{N-1}^T \delta u_{N-1} + \tilde{E}_{N-1}^T \delta x_{N-1} \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

其中：

$$\tilde{A}_{N-1} = \frac{1}{2} \left[ L_{xx} + 2 \left( \frac{\partial T_N}{\partial x} \right)^T P_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial x} \right) + \sum_{i=1}^n (Q_N)_i (T_{N,i})_{xx} \right]_{\hat{x}_{N-1}, \hat{u}_{N-1}} \quad (\text{B.21})$$

$$\tilde{B}_{N-1} = L_{xu} + 2 \left( \frac{\partial T_N}{\partial x} \right)^T P_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial u} \right) + \sum_{i=1}^n (Q_N)_i (T_{N,i})_{xu} \Big|_{\hat{x}_{N-1}, \hat{u}_{N-1}} \quad (\text{B.22})$$

$$\tilde{C}_{N-1} = \frac{1}{2} \left[ L_{uu} + 2 \left( \frac{\partial T_N}{\partial u} \right)^T P_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial u} \right) + \sum_{i=1}^n (Q_N)_i (T_{N,i})_{uu} \right]_{\hat{x}_{N-1}, \hat{u}_{N-1}} \quad (\text{B.23})$$

$$\tilde{D}_{N-1} = \nabla_u L + Q_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial u} \right) \Big|_{\hat{x}_{N-1}, \hat{u}_{N-1}} \quad (\text{B.24})$$

$$\tilde{E}_{N-1} = \nabla_x L + Q_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial x} \right) \Big|_{\hat{x}_{N-1}, \hat{u}_{N-1}} \quad (\text{B.25})$$

利用一階微分法，式(B.20)之最佳解為：

$$\delta u_{N-1}^* = -\frac{1}{2} \tilde{C}_{N-1}^{-1} (\tilde{B}_{N-1} \delta x_{N-1} + \tilde{D}_{N-1}) = \alpha_{N-1} + \beta_{N-1} \delta x_{N-1} \quad (\text{B.26})$$

$$\alpha_{N-1} = -\frac{1}{2} \tilde{C}_{N-1}^{-1} \tilde{D}_{N-1}$$

$$\beta_{N-1} = -\frac{1}{2} \tilde{C}_{N-1}^{-1} \tilde{B}_{N-1}$$

同第 N 時刻，將式(B.26)代回式(B.20)得第 N-1 時刻之遞迴方程式如下：

$$f_{N-1}^*(x_{N-1}) = \delta x_{N-1}^T P_{N-1} \delta x_{N-1} + Q_{N-1}^T \delta x_{N-1} + R_{N-1} \quad (\text{B.27})$$

其中

$$P_{N-1} = \tilde{A}_{N-1} - \frac{1}{4} \tilde{B}_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1}^{-1} \tilde{B}_{N-1} \quad (\text{B.28})$$

$$Q_{N-1} = -\frac{1}{2} \tilde{D}_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1}^{-1} \tilde{B}_{N-1} + \tilde{E}_{N-1}^T \quad (\text{B.29})$$

$$\tilde{R}_{N-1} = -\frac{1}{4} \tilde{D}_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1}^{-1} \tilde{D}_{N-1} \quad (\text{B.30})$$

$\alpha_{N-1}, \beta_{N-1}, P_{N-1}, Q_{N-1}$  亦須儲存起來，已備後續時刻使用。

c. 任意時刻  $t$ ：任意時刻之最佳化問題皆類似第  $N-1$  時刻，可表示如下：

$$\min_{u_t} \{L_t(x_t, u_t) + f_{t+1}^*(x_{t+1})\} \quad (\text{B.31})$$

受限於：

$$x_{t+1} = T(x_t, u_t, t) \quad (\text{B.32})$$

任意時刻  $t$  之解題過程亦類似第  $N-1$  時刻，所不同者為，遞迴方程式  $f_{t+1}^*(x_{t+1})$  所包含之時刻愈來愈多，直到第 1 個時刻為止。故

任意時刻之最佳控制法則與遞迴方程式可表示如下：

$$\delta u_t^* = -\frac{1}{2} \tilde{C}_t^{-1} (\tilde{B}_t \delta x_t + \tilde{D}_t) = \alpha_t + \beta_t \delta x_t \quad (\text{B.33})$$

$$f_{t+1}^*(x_{t+1}) = \delta x_{t+1}^T P_{t+1} \delta x_{t+1} + Q_{t+1}^T \delta x_{t+1} + R_{t+1} \quad (\text{B.34})$$

為保證微分動態規劃於每一次之疊代過程(疊代之定義說明於後)，目標函數皆有下降，在後掃之每一個時刻，皆須保證  $\tilde{C}_t$  為對稱正定矩陣，若  $\tilde{C}_t$  不為對稱正定矩陣，可強迫令  $\tilde{C}_t$  為對稱正定，即加入一正定矩陣  $\Gamma_t$ 。 $(\tilde{C}_t = \tilde{C}_t + \Gamma_t)$  或  $(\tilde{C}_t = \frac{1}{2}(\tilde{C}_t + \tilde{C}_t^T))$ 。

2. 前掃過程：

由於後掃過程儲存所有時刻之最佳控制法則  $\alpha_t, \beta_t$ ，且此最佳控

制法則可表示成：

$$\delta u_t^* = \alpha_t + \beta_t \delta x_t \quad (\text{B.35})$$

因此若  $\delta x_t$  已知，則  $\delta u_t^*$  可以透過式(B.35)求得。由於  $\delta x_t = x_t - \hat{x}_t$ 。對於第 1 個時刻而言， $x_1$  為初始條件，即  $\delta x_1 = 0$ ，因此  $\delta u_1^* = \alpha_1$ ，當  $\delta u_1^*$  求得後，可由  $\delta u_1^* = u_1 - \hat{u}_1$  之關係，求得  $u_1$ ，然後利用系統轉換函數之關係， $x_2 = T(x_1, u_1)$  可求得  $x_2$ 。當  $x_2$  獲得後，則可如同第 1 時刻之方式求得一連串之狀態變數  $(x_2, \dots, x_N)$  與控制變數  $(u_1, \dots, u_{N-1})$ ，當求得狀態變數與控制變數後，即完成一次的疊代過程。

由於微分動態規劃於每一個時刻皆將原目標函數或系統轉換函數針對初始軌跡作泰勒二階展開，因此其所得之最佳解只為近似函數之最佳解，並非原函數之最佳解。所以必須利用疊代的方式來獲得原問題之最佳解，而完成一次前、後掃過程即為一次疊代，此時可計算目標函數值是否有改善，並判斷是否已達到收斂標準，若目標函數於疊代過程反而增高，則必須進行線性搜尋。線性搜尋的方式為不改變目標函數之下降方向，僅減少搜尋之步伐。其方式如下：

$$\delta u_t^* = \varepsilon \alpha_t + \beta_t \delta x_t \quad (\text{B.36})$$

其中  $\varepsilon < 1$ 。一般而言，線性搜尋於一次疊代過程之次數，以不超過 30 次為限，然針對不同之問題可斟酌增減。

## B.2 限制型微分動態規劃(CDDP)

限制型微分動態規劃與無限制條件微分動態規劃最大之不同為，除考慮式(B.1)、(B.2)之問題型態外，又多加了一種型態之限制條件，即不等號限制條件。

$$\bar{A}_t x_t + \bar{B}_t u_t \leq b_t \quad (\text{B.37})$$

在整個限制型微分動態規劃之演算過程中，本研究對於此三種型態之限制條件採用不同之處理方式，其理由如下。(B.37)包含有狀態變數，而狀態變數之求得，必須透過系統轉換函數，因此欲決定狀態變數之值比較不容易，對於此種型態之限制條件本研究採用處罰函數(penalty function)或二次規劃來處理。茲簡述其處理方式如下：

### 1. 採用處罰函數處理限制條件：

若最佳化之系統有包含狀態變數之不等號限制條件時，可直接利用處罰函數之方式將限制型微分動態規劃之問題，模式化成無限制條件型態之微分動態規劃，其過程說明如下：其中式(B.37)為包含有狀態變數與控制變數之不等號限制條件，其可為線性或是非線性。首先定義處罰函數之數學型態(Lin,1990)：

$$y_i = \begin{cases} \xi_i & \text{if } \xi_i \leq 1 \\ a_5 \xi_i^2 + a_6 \sqrt{\xi_i} + a_7 & \text{if } \xi_i > 1 \end{cases} \quad (\text{B.38})$$

其中

$$\xi_i = (w_i^2 f_i^2 + \varepsilon_i^2)^{1/2} + w_i f_i$$

$$f_{i,t} = g_{i,t} - b_{i,t}$$

於處罰函數中  $w_i$  為第  $i$  條限制條件之權重係數(weighting coefficient)， $\varepsilon_i$  為  $\xi_i$  雙曲線函數之形狀參數(shape parameter)， $a_5$ ， $a_6$ ， $a_7$  為處罰函數係數，需滿足  $a_5 + a_6 + a_7 = 1$  之要求。當處罰函數獲得後，可將處罰函數併入於目標函數式(B.3)可改寫成：

$$\min_{u_t, t=1, \dots, N} \left\{ \sum_{t=1}^N \left[ L_t(x_t, u_t) + \sum_{i=1}^r y_{i,t} (f_{i,t}(x_t, u_t, w_i)) \right] \right\} \quad (\text{B.39})$$

2. 採用二次規劃處理限制條件：

所謂二次規劃的方式，乃是於限制型微分動態規劃之每一個時刻皆採用二次規劃的方式來處理限制條件。而二次規劃所考慮之問題型態可表示如下：

$$\min_{x \in R^n} g^T x + \frac{1}{2} x^T H x \quad (\text{B.40})$$

受限於：

$$\vec{A}_1 x = b_1 \quad (\text{B.41})$$

$$\vec{A}_2 x \geq b_2 \quad (\text{B.42})$$

二次規劃之求解過程，乃是利用疊代的方式，於每一次之疊代過程皆採用等號限制集合(Active set method)的方式來求解，並且不斷的修正等號限制式，直到獲得最佳值。等號限制條件之二次規劃問題說明如下：

$$\min_{x \in R^n} g^T x + \frac{1}{2} x^T H x$$

受限於：

$$\vec{A} x = b$$

此問題之最佳解非常簡單，可利用拉格朗日方法(Lagrange method)，將等號限制式乘上拉格朗日乘子(Lagrange multipliers)，然後與目標函數相加而型成：

$$\min_{x, \lambda} \eta(x, \lambda) = g^T x + \frac{1}{2} x^T H x + \lambda^T (\vec{A} x - b)$$

利用一階微分法分別對  $x, \lambda$  微分得：

$$\nabla_x \eta(x, \lambda) = H x + g + \vec{A}^T \lambda = 0$$

$$\nabla_\lambda \eta(x, \lambda) = \vec{A}^T x - b = 0$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} H & \bar{A}^T \\ \bar{A} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -g \\ b \end{bmatrix}$$

故最佳解為[Luenberger,1984]

$$\begin{cases} x^* = -H^{-1}[I - \bar{A}^T(\bar{A}H^{-1}\bar{A}^T)^{-1}\bar{A}H^{-1}]g + H^{-1}\bar{A}^T(\bar{A}H^{-1}\bar{A}^T)^{-1}b \\ \lambda^* = -(\bar{A}H^{-1}\bar{A}^T)^{-1}[\bar{A}H^{-1}g + b] \end{cases}$$

令

$$\begin{cases} R^* = (\bar{A}H^{-1}\bar{A}^T)^{-1}\bar{A}H^{-1} \\ S^* = H^{-1}(I - \bar{A}^T R^*) \end{cases} \quad (B.43)$$

故

$$\{x^* = -S^*g + R^*b \quad (B.44)$$

對二次規劃有了解後，考慮如下之限制型微分動態規劃問題：

$$\min_{u_t, t=1, \dots, N} \sum_{t=1}^N L_t(x_t, u_t) \quad (B.45)$$

受限於：

$$x_{t+1} = T(x_t, u_t, t) \quad (B.46)$$

$$\bar{A}_t x_t + \bar{B}_t u_t \leq b_{1,t} \quad (B.47)$$

$$\bar{B}_t u_t \leq b_{2,t} \quad (B.48)$$

a.後掃過程：

(1).最後一個時刻(N)：

原問題之目標函數

$$\min_{u_N} \ddot{L}_N = \{L_N(x_N, u_N)\} \quad (B.49)$$

受限於：

$$x_{N+1} = T(x_N, u_N, N) \quad (B.50)$$

$$\bar{A}_t x_t + \bar{B}_t u_t \leq b_{1,t} \quad (B.51)$$

$$\bar{B}_t u_t \leq b_{2,t} \quad (\text{B.52})$$

求解式(B.49)~(B.52)之問題，首先亦需將式(B.49)針對初始試驗軌跡作泰勒二次展開，其型態如同式(B.5)~(B.10)，並採用相同之符號表示，則展開後之目標函數亦可表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{L}_N = & \delta x_N^T A_N \delta x_N + \delta u_N^T B_N \delta x_N + \\ & \delta u_N^T C_N \delta u_N + D_N^T \delta u_N + E_N^T \delta x_N \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

其中各係數亦類似式(B.6)~(B.10)：

$$A_N = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 L_N}{\partial x \partial x} \right)_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (\text{B.54})$$

$$B_N = \frac{\partial^2 L_{N-1}}{\partial u \partial x} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (\text{B.55})$$

$$C_N = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 L_{N-1}}{\partial u \partial u} \right)_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (\text{B.56})$$

$$D_N = \frac{\partial L_{N-1}}{\partial u} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (\text{B.57})$$

$$E_{N-1} = \frac{\partial L_{N-1}}{\partial x} \Big|_{\hat{x}_N, \hat{u}_N} \quad (\text{B.58})$$

$$\delta x_N = x_N - \hat{x}_N \quad \delta u_N = u_N - \hat{u}_N \quad (\text{B.59})$$

雖然式(B.51)與式(B.5)相似，然求解式(B.51)必須考慮不等號限制條件式(B.50)之影響，重寫此近似方程式之最佳化問題如下：

$$\min_{u_N} \{ \delta x_N^T A_N \delta x_N + \delta u_N^T B_N \delta x_N + \delta u_N^T C_N \delta u_N + D_N^T \delta u_N + E_N^T \delta x_N \} \quad (\text{B.60})$$

受限於：

$$\bar{B}_N \delta u_N \leq \delta b_{2,N} \quad (\text{B.61})$$

式(B.60)、(B.61)所形成之最佳化問題，包含了狀態變數與決策變數，其問題型態與二次規畫不相吻合，因此需要進一步處理才可使用二次規畫求解。本研究

對於此一情況，作了一個假設，即假設  $\delta x_N = 0$ ，則式(B.58)變成

$$\min_{u_N} \{ \delta u_N^T C_N \delta u_N + D_N^T \delta u_N \} \quad (B.62)$$

由式(B.60)、(B.61)即可採用二次規劃求解此系統中之等號限制條件如下：

$$\bar{B}_N \delta u_N = \delta b_{2,N} \quad (B.63)$$

由於此階段之二次規劃所獲得之  $\delta u_N^*$  無法直接應用於後續之運算，欲形成目標函數之遞迴方程式，必須將  $\delta u_N^*$  拆成  $\delta u_N^* = \alpha_N + \beta_N \delta x_N$  之型態，因此重新推導式(B.60)受限於式(B.63)之最佳化問題如下：

$$\min_{u_N} \{ \frac{1}{2} (\delta u_N^T 2C_N \delta u_N) + (B_N \delta x_N + D_N^T) \delta u_N \} \quad (B.60)$$

受限於：

$$\bar{B}_N \delta u_N = \delta b_{2,N} \quad (B.63)$$

式(B.60)、(B.63)之問題型態即為標準之等號限制條件二次規劃問題，故最佳控制變數值可表示如下：

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 2C_N & \hat{B}_N^T \\ \hat{B}_N & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta u_N \\ \lambda_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -(B_N \delta x_N + D_N^T) \\ \delta b_{2,N} \end{bmatrix} \quad (B.64)$$

$$\begin{cases} R_N^* = (\hat{B}_N C_N^{-1} \hat{B}_N^T)^{-1} \hat{B}_N C_N^{-1} \\ S_N^* = \frac{1}{2} C_N^{-1} (I - \hat{B}_N^T R_N^*) \end{cases}$$

故

$$\delta u_N^* = (-S_N^* D_N + R_N^{*T} \delta b_{2,N}) + (-S_N^* B_N) \delta x_N = \alpha_N + \beta_N \delta x_N \quad (B.65)$$

式(B.63)之獲得是基於  $\delta x_N = 0$  之假設情況下，式(B.62)、(B.63)發生等號限制條件之二次規劃結果，此一  $\delta x_N = 0$  之假設是否可行將說明於後之前掃過程。如同無限制條件微分動態規劃，將式(B.65)代回式(B.60)可得此階段之最佳遞迴方程式如下：

$$f_N^*(\delta x_N) = \delta x_N P_N \delta x_N + Q_N^T \delta x_N \quad (B.66)$$

其中：

$$P_N = A_N - \beta_N^T C_N \beta_N + \beta_N^T B_N \quad (B.67)$$

$$Q_N = E_N^T + \alpha_N^T B_N + 2\alpha_N^T C_N \beta_N + D_N^T \beta_N \quad (B.68)$$

(2).第 N-1 時刻：此個時刻之最佳化問題可表示如下：

$$\min_{u_{N-1}} \{L_{N-1}(x_{N-1}, u_{N-1}) + f_N^*(x_N)\} \quad (B.69)$$

受限於：

$$x_N = T(x_{N-1}, u_{N-1}, N-1) \quad (B.70)$$

$$\bar{A}_{N-1} x_{N-1} + \bar{B}_{N-1} u_{N-1} \leq b_{1,N-1} \quad (B.71)$$

$$\bar{B}_{N-1} u_{N-1} \leq b_{2,N-1} \quad (B.72)$$

其中  $f_N^*(x_N)$  為前一時刻目標函數之近似最佳解。求解此時刻之問題，首先亦將式(B.70)代入式(B.69)中，則目標函數形成：

$$\min_{u_i} \{L_{N-1}(x_{N-1}, u_{N-1}) + f_N^*(T(x_{N-1}, u_{N-1}))\} \quad (B.73)$$

故此時刻之問題型態變成式(B.69)受限於式(B.70)，仍針對初始軌跡作泰勒二次近似，其型態完全類似式(B.22)，表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{N-1} = & \delta x_{N-1}^T \tilde{A}_{N-1} \delta x_{N-1} + \delta u_{N-1}^T \tilde{B}_{N-1} \delta x_{N-1} + \\ & \delta u_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1} \delta u_{N-1} + \tilde{D}_{N-1}^T \delta u_{N-1} + \tilde{E}_{N-1}^T \delta x_{N-1} \end{aligned} \quad (B.74)$$

其中之  $\tilde{A}_{N-1}$ ， $\tilde{B}_{N-1}$ ， $\tilde{C}_{N-1}$ ， $\tilde{D}_{N-1}$ ， $\tilde{E}_{N-1}$  亦類似式(B.23)~(B.27)，其型態可表示如下：

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{N-1} = & \frac{1}{2} L_{xx} + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial f_{N-1}}{\partial x_{N-1}} \right)^T (y_{N-1})_{ff} \left( \frac{\partial f_{N-1}}{\partial x_{N-1}} \right) + \left( \frac{\partial T_N}{\partial x_{N-1}} \right)^T P_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial x_{N-1}} \right) \\ & + \frac{1}{2} \left( \sum_{i=1}^n (Q_{N-1})_i (T_{N,i})_{xx} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{N-1} = & L_{xu} + \left( \frac{\partial f_{N-1}}{\partial u_{N-1}} \right)^T (y_{N-1})_{ff} \left( \frac{\partial f_{N-1}}{\partial x_{N-1}} \right) + 2 \left( \frac{\partial T_N}{\partial x_{N-1}} \right)^T P_N \left( \frac{\partial T_N}{\partial u_{N-1}} \right) \\ & + \sum_{i=1}^n (Q_N)_i (T_{N,i})_{xu} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{C}_{N-1} &= \frac{1}{2}L_{uu} + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial f_{N-1}}{\partial u_{N-1}}\right)^T (y_{N-1})_{ff} \left(\frac{\partial f_{N-1}}{\partial u_{N-1}}\right) + \left(\frac{\partial T_N}{\partial u_{N-1}}\right)^T P_N \left(\frac{\partial T_N}{\partial u_{N-1}}\right) \\ &\quad + \frac{1}{2}\left(\sum_{i=1}^n (Q_{N-1})_i (T_{N,i})_{uu}\right)\end{aligned}$$

$$\tilde{D}_{N-1} = \nabla_u L + Q_N \left(\frac{\partial T_N}{\partial u}\right)$$

$$\tilde{E}_{N-1} = \nabla_x L + Q_N \left(\frac{\partial T_N}{\partial x}\right)$$

故此階段所考慮之近似問題型態如下：

$$\begin{aligned}\min_{u_N} \{ &\delta x_{N-1}^T \tilde{A}_{N-1} \delta x_{N-1} + \delta u_{N-1}^T \tilde{B}_{N-1} \delta x_{N-1} + \delta u_{N-1}^T \tilde{C}_{N-1} \delta u_{N-1} + \\ &\tilde{D}_{N-1}^T \delta u_{N-1} + \tilde{E}_{N-1}^T \delta x_{N-1} \}\end{aligned} \quad (B.73)$$

受限於：

$$\tilde{B}_{N-1} \delta u_{N-1} \leq \delta b_{2,N-1} \quad (B.74)$$

觀察式(B.73)、(B.74)完全相似於式(B.58)、(B.59)，故式(B.75)、(B.76)之解法完全與第 N 階段相同，故此階段之最佳控制變數值可表示為：

$$\begin{aligned}\Rightarrow \begin{bmatrix} 2\tilde{C}_{N-1} & \hat{B}_{N-1}^T \\ \hat{B}_{N-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta u_{N-1} \\ \lambda_{N-1} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} -(\tilde{B}_{N-1} \delta x_{N-1} + \tilde{D}_{N-1}^T) \\ \delta b_{2,N-1} \end{bmatrix} \\ \begin{cases} R_{N-1}^* = (\hat{B}_{N-1} \tilde{C}_{N-1}^{-1} \hat{B}_{N-1}^T)^{-1} \hat{B}_{N-1} \tilde{C}_{N-1}^{-1} \\ S_{N-1}^* = \frac{1}{2} \tilde{C}_{N-1}^{-1} (I - \hat{B}_{N-1}^T R_{N-1}^*) \end{cases} &\end{aligned} \quad (B.77)$$

故

$$\begin{aligned}\delta u_{N-1}^* &= (-S_{N-1}^* \tilde{D}_{N-1} + R_{N-1}^{*,T} \delta b_{2,N-1}) + (-S_{N-1}^* \tilde{B}_{N-1}) \delta x_{N-1} \\ &= \alpha_{N-1} + \beta_{N-1} \delta x_{N-1}\end{aligned} \quad (B.78)$$

此階段之最佳遞迴方程式如下：

$$f_{N-1}^*(\delta x_{N-1}) = \delta x_{N-1}^T P_{N-1} \delta x_{N-1} + Q_{N-1}^T \delta x_{N-1} \quad (B.79)$$

其中：

$$P_{N-1} = \tilde{A}_{N-1} - \beta_N^T \tilde{C}_{N-1} \beta_N + \beta_N^T \tilde{B}_{N-1} \quad (\text{B.80})$$

$$Q_{N-1} = \tilde{E}_{N-1}^T + \alpha_N^T \tilde{B}_{N-1} + 2\alpha_N^T \tilde{C}_{N-1} \beta_N + \tilde{D}_N^T \beta_N \quad (\text{B.81})$$

(3).任意時刻  $t$ ：任意時刻之最佳化問題皆類似第  $N-1$  時刻，可表示如下：

$$\min_{u_t} \{L_t(x_t, u_t) + f_{t+1}^*(x_{t+1})\} \quad (\text{B.82})$$

受限於：

$$x_{t+1} = T(x_t, u_t, t) \quad (\text{B.83})$$

$$\bar{A}_t x_t + \bar{B}_t u_t \leq b_{1,t} \quad (\text{B.84})$$

$$\bar{B}_t u_t \leq b_{2,t} \quad (\text{B.85})$$

任意時刻  $t$  之解題過程亦類似第  $N-1$  時刻，所不同者為，遞迴方程式  $f_{t+1}^*(x_{t+1})$  所包含之時刻愈來愈多，直到第 1 個時刻為止。故任意時刻之最佳控制法則與遞迴方程式可表示如下：

$$\delta u_t^* = \alpha_t + \beta_t \delta x_t \quad (\text{B.86})$$

$$f_{t+1}^*(x_{t+1}) = \delta x_{t+1}^T P_{t+1} \delta x_{t+1} + Q_{t+1}^T \delta x_{t+1} \quad (\text{B.87})$$

於後掃過程中必須紀錄每一時刻之目標函數泰勒展開時之各係數  $\tilde{A}_t$ ， $\tilde{B}_t$ ， $\tilde{C}_t$ ， $\tilde{D}_t$ ， $\tilde{E}_t$  已備前掃使用。

b.前掃過程：

於限制型微分動態規劃之前掃過程，並不同於無限制式之微分動態規劃之前掃過程。無限制式微分動態規劃之前掃過程，乃直接採用後掃過程所得之  $\alpha_t, \beta_t$  來計算最佳控制變數值，而限制型微分動態規劃之前掃過程，本研究亦採用不等號限制條件之二次規劃來求得最佳控制變數值。回顧限制型微分動態規劃之後掃過程，本研究假設任一時刻之  $\delta x_t = 0$ ，並在此條件下，使用不等號限制條件之二次規劃來求得等號限制條件之型態，然後在應用此等號限制條件來求得最佳控制法則，以便能計算每一時刻之遞迴方程式。然而於前掃過程中，由於第 1 個時刻之狀態變數為初始條件，因此第 1 個時刻之  $\delta x_1 = 0$ ，且其隨後之任意階段  $t$ ， $\delta x_t$

已不在是未知數，因此前掃過程並無假設  $\delta x_t = 0$  之困擾。然而後掃過程之假設，是否會影響問題之解答，回答此問題需從微分動態規劃之演算過程來看，微分動態規劃是採用疊代的方式，不斷的修正初始試驗軌跡，而  $\delta u_t$ ， $\delta x_t$  之表示方式為：

$$\delta u_t = u_t - \hat{u}_t$$

$$\delta x_t = x_t - \hat{x}_t$$

當隨這疊代過程之進行，其計算所得之  $x_t$ ， $u_t$  會愈來愈接近  $\hat{x}_t$ ， $\hat{u}_t$ ，因此若微分動態規劃收斂時，任一時刻之  $\delta u_t = 0$ ， $\delta x_t = 0$ 。故當模式接近收斂點時，此一假設為正確可行的。以下將說明前掃之計算過程：

(1).前掃第 1 個時刻所考慮之問題如下：

$$\min_{u_1} \left\{ \frac{1}{2} (\delta u_1^T \tilde{C}_1 \delta u_1) + (\delta x_1 \tilde{B}_1^T + \tilde{D}_1^T) \delta u_1 \right\} \quad (\text{B.88})$$

受限於：

$$\bar{B}_N \delta u_1 \leq \delta b_{2,1} \quad (\text{B.89})$$

式(B.88)、(B.89)為標準之不等號限制之二次規劃問題，故可直接應用不等號限制之二次規劃求解最佳控制值  $\delta u_1$ 。當第 1 個時刻之最佳控制值  $u_1$  求得後，可將其代入系統之轉換函數中，計算下一個時刻之狀態變數值( $x_2$ )，並計算( $\delta x_2$ )：

$$x_2 = T(x_1, u_1) \quad \delta x_2 = x_2 - \hat{x}_2$$

(2).任一時刻  $t$  所考慮之問題如下：

當  $\delta x_2$  計算獲得後，則第二個時刻之最佳化問題變成與第 1 個時刻相同，且任意時刻  $t$  之問題亦具有相同之型態：

$$\min_{u_N} \left\{ \delta u_t^T \tilde{C}_t \delta u_t + (\delta x_t \tilde{B}_t^T + \tilde{D}_t^T) \delta u_t \right\} \quad (\text{B.90})$$

受限於：

$$\bar{B}_t \delta u_t \leq \delta b_{2,t} \quad (\text{B.91})$$

經式(B.90)、(B.91)可計算出所有時刻之  $\delta u_t$  與  $\delta x_t$ ，如此完成一次之疊代過

程。

### (3).線性收尋：

無限制式微分動態規劃之線性收尋方式，是採用式(B.38)的方式來避免目標函數於疊代過程中反而有增大情形。然而於限制型微分動態規劃中，根據 Murry and Yakowitz, [1979]之論述，式(B.38)並不能適用於有限制條件之情形，因此他們建議採用處罰項之方式來達到線性收尋之目的，其方式為當目標函數於疊代過程中有增大之情形時，則於前掃過程中之目標函數中加入一正定、對稱之矩陣  $\Gamma$ ，以達到線性收尋之目的，其型態可表示如下：

$$\min_{u_N} \{ \delta u_t^T (\tilde{C}_t + \Gamma) \delta u_t + (\delta x_t \tilde{B}_t^T + \tilde{D}_t^T) \delta u_t \} \quad (B.92)$$

由於採用式(B.92)之線性收尋方式，必須重新計算前掃過程之每一個時刻，因此會大幅增加計算量，因此根據最佳化理論，可採用以下之方式來達到線性收尋之目的：

$$\delta u_{t,k+1} = \varepsilon \delta u_{t,k} \quad (B.93)$$

其中指標  $k$  為線性收尋之疊代數。由本研究實際之應用情形，採用式(B.93)或式(B.92)之方式皆可獲得滿足限制條件之最佳控制值  $u_t$ 。

## B.3 計算效率的提升

最後介紹過去研究中(Culver and Shoemaker (1992); Mansfield et al. (1998); Yong and Minsker (2001))提升微分動態規劃計算效率的方法。

### 改善方法一、降低規劃時期數目

Culver and Shoemaker (1992)利用減少規劃時期數目來減少計算量，拉長優選模式每一規劃時間間距，以減少規劃時刻數，使得優選模式的轉換函數由數個模擬模式的轉換函數組合。同時，推導出優選模式與模擬模式系統轉換函數之間的轉換關係，假設優選模式中有  $k$  個規劃時期，每一個規劃時期可分為  $d$  個模擬時刻，定義  $k$  個規劃時期的狀態變數  $X_k = x_t$  和控制變數  $U_k = u_t$ ， $t = (k-1)d + 1$ ，優選模式系統轉換函數為： $X_{k+1} = Y(X_k, U_k(y), k)$ ，where  $k = 1, 2, \dots, K$ ， $y \in \Omega$

其中優選模式之系統轉換函數，可描述為一遞迴關係：

$$Y(X_k, U_k(y), k) = T(T(\dots T(T(x_t, u_t(y), t), u_{t+1}(y), t+1) \dots), u_{t+d-1}(y), t+d-1) \quad (\text{B.94})$$

因此第  $k$  個規劃時期的系統轉換函數對狀態變數之微分，可由模擬模式每個時刻之系統轉換函數之微分項相乘合成，

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial X}\right)_k = \prod_{t=(k-1)d}^{kd} \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_t \quad (\text{B.95})$$

第  $k$  個規劃時期的系統轉換函數對控制變數之微分，亦可由模擬模式每個時刻之系統轉換函數之微分項相加合成

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial U}\right)_k = \left(\frac{\partial T}{\partial u}\right)_{(k-1)d+1} + \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_{(k-1)d+1} \left(\frac{\partial T}{\partial u}\right)_{(k-1)d+2} + \dots + \left[ \prod_{t=(k-1)d+1}^{kd} \left(\frac{\partial T}{\partial x}\right)_t \right] \left(\frac{\partial T}{\partial u}\right)_{kd} \quad (\text{B.96})$$

其中  $k$ : 規劃時期,  $k = 1, 2, \dots, K$ ,  $K$ : 總規劃時期

$t$ : 模擬時刻,  $t = 1, 2, \dots, N$ ,  $N$ : 總時刻數

改善方法二、稀疏矩陣

Mansfield et al. (1998) 曾對 ISOQUAD-CDDP 中各微分項之計算量加以比較，本文節錄相關如下：

表 1：ISOQUAD-CDDP 微分項之方程式與計算量比較

項目	方程式	計算量	維度
$\tilde{A}_t$	$\left(\frac{\partial T}{\partial x_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T}{\partial x_t}\right)$	$16n^3$	$R^{2n \times 2n}$
$\tilde{B}_t$	$\left(\frac{\partial T}{\partial x_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T}{\partial u_t}\right)$	$8n^2m$	$R^{2n \times m}$
$\tilde{C}_t$	$\left(\frac{\partial T}{\partial u_t}\right)^T P_{t+1} \left(\frac{\partial T}{\partial u_t}\right)$	$4n^2m + 2nm^2$	$R^{m \times m}$

$\tilde{D}_t$	$\left(\frac{\partial T}{\partial u_t}\right)^T Q_{t+1}$	$4nm$	$R^{m \times l}$
$\tilde{E}_t$	$\left(\frac{\partial T}{\partial x_t}\right)^T Q_{t+1}$	$4n^2$	$R^{2n \times l}$

表 1 中之  $n$  為狀態變數之個數， $m$  為控制變數之個數。由第三欄之計算量分析可知，形成目標函數之係數矩陣中，只有  $\tilde{A}_t$  為  $O(n^3)$ ，且  $n^3 \gg mn^2$ ， $mn^2 \gg m^3$ ，故計算  $\tilde{A}_t$  佔整個演算非常大之份量，因此若能減少  $\tilde{A}_t$  之計算量，則對整個演算法之效率會有很大之幫助。重寫  $\tilde{A}_t$  之型態如下：

$$\tilde{A}_t = \frac{1}{2} \left[ L_{xx} + 2 \left( \frac{\partial T}{\partial x_t} \right)^T P_{t+1} \left( \frac{\partial T}{\partial x_t} \right) \right] = \frac{1}{2} L_{xx} + \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}^T}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial h_r} \\ \frac{\partial h_{t+1}^T}{\partial c_r} & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial c_r} \end{pmatrix} P_{t+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_r} & \frac{\partial h_{t+1}}{\partial c_r} \\ \frac{\partial c_{t+1}}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}}{\partial c_r} \end{pmatrix} \quad (\text{B.97})$$

其中  $L_{xx}$  包含有目標函數與處罰函數對狀態變數之二次微分，其計算量相對於式中之其他項顯得非常之小，因此就減少計算量之觀點來看可將之忽略，因此本文將有關係統轉換函數微分項之部分加以探討。並令

$$\hat{A}_t = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}^T}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial h_r} \\ \frac{\partial h_{t+1}^T}{\partial c_r} & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial c_r} \end{pmatrix} P_{t+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_r} & \frac{\partial h_{t+1}}{\partial c_r} \\ \frac{\partial c_{t+1}}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}}{\partial c_r} \end{pmatrix} \quad (\text{B.98})$$

由前述系統轉換函數微分之說明可知，不管是拘限含水層或非拘限含水層，其水頭對濃度之微分皆為 0，即：

$$\frac{\partial h_{t+1}}{\partial c_t} = [0]$$

因此整個系統轉換函數對狀態變數之微分可表示成稀疏矩陣：

$$\hat{A}_t = \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}^T}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial h_r} \\ 0 & \frac{\partial c_{t+1}^T}{\partial c_r} \end{pmatrix} P_{t+1} \begin{pmatrix} \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_r} & 0 \\ \frac{\partial c_{t+1}}{\partial h_r} & \frac{\partial c_{t+1}}{\partial c_r} \end{pmatrix} \quad (\text{B.99})$$

有關以上各微分項之推導過程，可參閱Chang[1990]及薛[2000]，本文不作詳細之推導。由Mansfield and Shoemaker(1998)之演算經驗，採用稀疏矩陣之特性於限制型微分動態規劃中，以N=500為例，計算時間只為未採用稀疏矩陣的1/3.2倍。

### 改善方法三、多尺度(multiscale)格網

微分動態規劃的初始軌跡影響收斂的速度，Yong and Minsker (2001)利用多尺度格網的漸進搜尋最佳解，以上一層級尺度格網的最佳操作策略作為下一層級的初始軌跡，以加快初始軌跡搜尋的速度及整體收斂的速度，進而提升計算效率。

多尺度格網的概念即是優選模式格網由粗到細，使得解的精細度逐漸增加，初始層級0(Level 0)利用CDDP得到每個時刻的最佳操作策略及最佳成本以及節點上的狀態變數，再由初始層級的最佳操作策略作為第二層級的初始軌跡，以及初始層級粗格網的狀態變數經由二元線性內插後作為細格網初始值，然後重新計算每個時刻的最佳操作策略及最佳成本，簡而言之，上一層級優選得到的最佳操作策略作為下一層級的初始軌跡，以及上一層級的狀態變數經由二元線性內插後作為下一層級初始值，其流程如圖 1所示。其研究中內插方法為二元線性內插法(bilinear interpolater)，如圖 2中原本只有(2×2)個狀態變數，透過內插後，產生出(3×3)個狀態變數。其中+為格網之已知值，經由規劃模式計算出，而×為格網之未知值。於內插的第一階段，如圖(a)所示：上、下兩列的未知值(×)由第一欄(+)與第三欄的已知值(+)由二元線性內插得之，內插的第二階段，如圖(b)所示：中間列的未知值(×)由上列已知值(+)與下列已知值(+)內插得之。

雖然上述的研究演算演算格網隨著層級的增加由粗到細，不斷地加密格網，使得解的精細度逐漸增加，但是在相同的層級下，其規劃模式的狀態變數的個數固定不變，所以節省計算量是有限的。

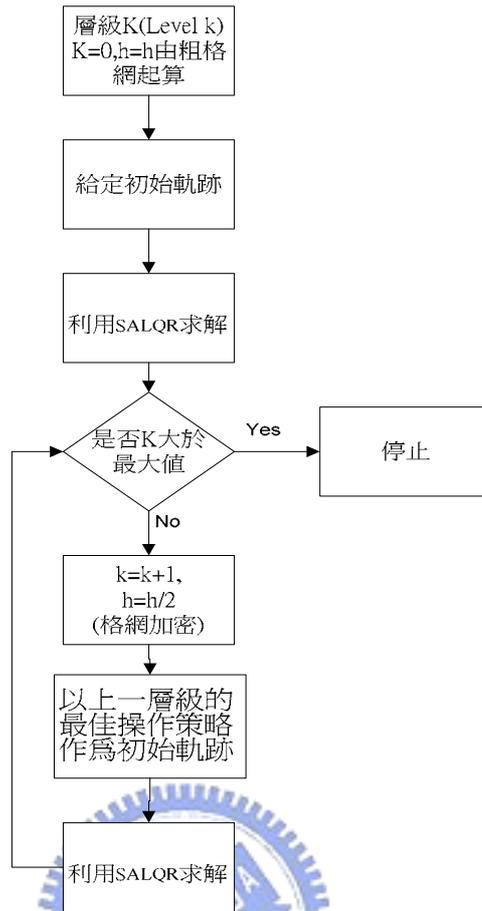


圖 1 多尺度格網優選模式之流程圖

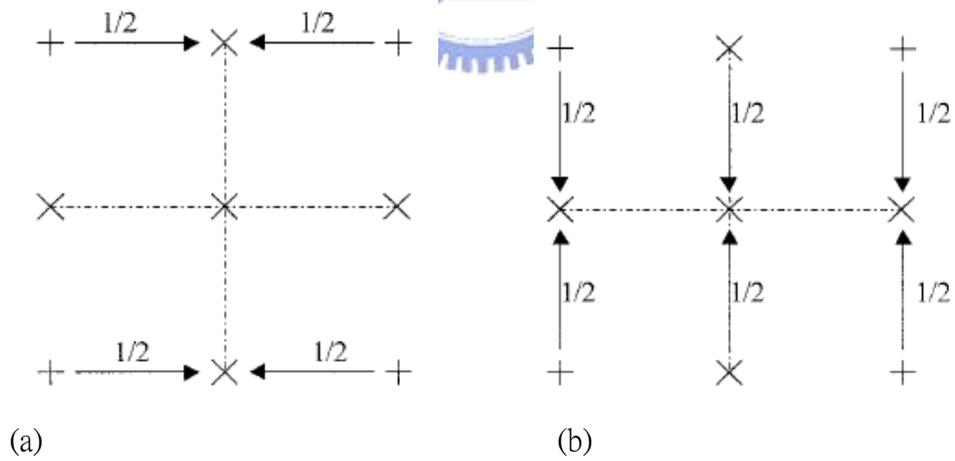


圖 2 二元線性內插方法說明圖

## 附錄 C 資料分析

### C1 敏感度分析

本研究測試案例 2.1 及案例 2.2 等訓練資料，分別進行敏感度分析與相關性分析，其中敏感度分析的部份，本研究採用解析法求得當下時刻狀態變數(水位、濃度)或是抽水量的改變對下一時刻狀態變數之敏感度矩陣。

於第二章已說明，本研究利用 ISOQUAD 作為地下水流與污染傳輸之模擬模式來產生 ANN 模式的訓練資料，ISOQUAD 經由空間項之 Galerkin 有限元素法與時間項之隱式有限差分法來處理，拘限含水層之地下水水流及污染傳輸方程式可分別表示成：

$$([A] + [B]/\Delta t)\{h_{t+1}\} = \frac{[B]}{\Delta t}\{h_t\} - \{F_h\} + [L_h]\{u_t\} \quad (C.1)$$

$$([N(h_{t+1}, u_t)] + [M]/\Delta t)\{c_{t+1}\} = \frac{[M]}{\Delta t}\{c_t\} - \{F_c\} + [L_c(u_t)]\{c' - c_{t+1}\} \quad (C.2)$$

相關符號及矩陣定義請參閱第二章。

式(C.1)、(C.2)分別對  $h_t, c_t, u_t$  微分可得：

$$\frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_t} = \left( [A] + \frac{[B]}{\Delta t} \right)^{-1} \frac{[B]}{\Delta t} \quad (C.3)$$

$$\frac{\partial h_{t+1}}{\partial c_t} = [0] \quad (C.4)$$

$$\frac{\partial c_{t+1}}{\partial h_t} = \left( [N(h_{t+1}, u_t)] + \frac{[M]}{\Delta t} + [L_c(u_t)] \right)^{-1} \cdot (-[W(h_{t+1})]) \left[ \frac{\partial h_{t+1}}{\partial h_t} \right] \quad (C.5)$$

$$\frac{\partial c_{t+1}}{\partial c_t} = \left( [N(h_{t+1}, u_t)] + \frac{[M]}{\Delta t} + [L_c(u_t)] \right)^{-1} \frac{[M]}{\Delta t} \quad (C.6)$$

$$\frac{\partial h_{t+1}}{\partial u_t} = \left( [A] + \frac{[B]}{\Delta t} \right)^{-1} [L_h] \quad (C.7)$$

$$\frac{\partial c_{t+1}}{\partial u_t} = \left( [N(h_{t+1}, u_t)] + \frac{[M]}{\Delta t} + [L_c(u_t)] \right)^{-1} \cdot (-[W(h_{t+1})]) \left[ \frac{\partial h_{t+1}}{\partial u_t} \right] \quad (C.8)$$

其他詳細推導請參見 Chang and shoemaker(1992)，非拘限含水層之系統轉換函數以及其微分項之推導請見蕭(2001)。其中式(C.6)為測試案例中敏感度分析之依據，以此求得下一時刻濃度對當下時刻濃度之敏感度。

## C2 相關係數分析

面對真實資料屬性結構上的錯綜複雜，有必要分析資料中的兩個或兩個以上的變數，以決定是否可以從其他的變數衡量預測另一主要變數的情形。相關分析是利用來衡量兩個隨機變數之間“直線關係”的方向與強弱程度，以相關分析來決定二變數之間關係的強度。

相關係數(correlation coefficient)用來描述相關分析的結果，相關係數的值恆介於-1 與+1 之間。+1 表示  $X$  與  $Y$  為完全正向線性相關；則表示所有的點落於斜率為正的直線上。-1 表示  $X$  與  $Y$  為完全負向線性相關；所有的點落於斜率為負的直線上。若相關係數的值非常接近零，則表示  $X$  與  $Y$  無線性關係。

對樣本資料而言，皮爾森積矩相關係數(Pearson Product Moment correlation coefficient)的定義如下：

$$\gamma_{XY} = \frac{s_{XY}}{s_X s_Y} \quad (C.9)$$

其中

$\gamma_{XY}$  = 樣本相關係數

$s_{XY}$  = 樣本共變異數

$s_X$  =  $X$  的樣本標準差

$s_Y$  =  $Y$  的樣本標準差

(C.9)式顯示樣本資料的皮爾森積矩相關係數(一般簡稱為樣本相關係數)為樣本共變異數除以  $X$  的標準差與  $Y$  的標準差之乘積。樣本共變異數(sample covariance)，定義式如下：先計算  $x_i$  對其樣本平均數  $\bar{x}$  之離差與所對應的  $y_i$  對其

樣本平均數  $\bar{y}$  之離差的乘積，然後對這些乘積加總，最後再除以  $n-1$ 。

$$s_{XY} = \frac{\sum (X_i - \bar{X})(Y_i - \bar{Y})}{n-1} \quad (\text{C.10})$$

計算樣本的相关係數時，(C.9)式與(C.11)式在代數上是相等的，我們較常用(C.11)式。因為在該式中，不需要計算各個  $x_i - \bar{x}$  與  $y_i - \bar{y}$  之離差，使得計算上四捨五入所產生的誤差較少。

$$r_{XY} = \frac{\sum X_i Y_i - (\sum X_i \sum Y_i)/n}{\sqrt{\sum X_i^2 - (\sum X_i)^2/n} \sqrt{\sum Y_i^2 - (\sum Y_i)^2/n}} \quad (\text{C.11})$$



## 附錄 D 參考文獻

1. 張斐章,張麗秋,黃浩倫, (2003), 類神經網路理論與實務, 東華書局
2. 傅怡釗, “多湖區系統最佳地表地下聯合操作之研究”, 國立交通大學土木工程研究所碩士論文, (2006)。
3. 張雅婷, “調適性網路模糊推論系統於水庫操作之研究”, 國立臺灣大學生物環境系統工程學研究所碩士論文, (2006)。
4. 黃浚璋, “應用遺傳演算法與類神經網路於地表地下聯合營運”, 國立交通大學土木工程研究所碩士論文, (2005)。
5. 羅建洲, “模糊理論在區域水資源運用之研究-以寶山水庫及攔河堰為例”, 國立成功大學水利工程系暨海洋工程研究所碩士論文, 2002。
6. 葉恩仲, “模擬退火演算法在地下水復育優選問題之應用”, 國立中興大學環境工程學所碩士論文, (2002)。
7. 林師檀, “禁忌搜尋法與遺傳演算法混合模式在地下水復育優選問題之應用”, 國立中興大學環境工程學所碩士論文, (2001)。
8. 羅健榕, “平行運算於地下水管理模式之應用”, 國立交通大學土木工程研究所碩士論文, (2001)。
9. 蕭金財, “動態控制理論與遺傳演算法應用於地下水之管理與污染整治”, 國立交通大學土木工程研究所博士論文, (2001)。
10. 王銘熙, “應用人工補注法改善海水入侵現象之探討”, 中原大學碩士論文, (2000)。
11. 金孝忠, “考慮容量擴張之非拘限含水層水量管理規劃模式”, 國立交通大學土木工程研究所碩士論文, (2001)。
12. 薛安聿, “應用遺傳演算法與最佳控制於非拘限含水層之水量管理營運”, 國立交通大學土木工程研究所碩士論文, (2000)。
13. 謝明富, “應用倒傳遞網路模擬非線性遲滯動力行爲”, 國立交通大學土木

工程研究所碩士論文，(1999)。

14. 陳宇文，”類神經網路於入滲池最佳化設計之應用“，國立交通大學土木工程研究所碩士論文，(1999)。

15. 黃義銘，”類神經網路在調配區域水資源之應用“，國立成功大學水利及海洋工程學系碩士論文，(1996)。

16. 張良正、蕭金財，“非拘限含水層之最佳抽水量管理規劃”，中國土木水利工程學刊，Vol 14, No 3, 477-487, (2002)。

17. 張良正、蕭金財，“應用動態控制理論與遺傳演算法於地下水之管理營運”，中國土木水利工程學刊，Vol 14, No 2, 287-295, (2002)。

Aly, A.H., and P.C. Peralta, Optimal design of aquifer cleanup systems under uncertainty using a neural network and a genetic algorithm, *WATER RESOURCES RESEARCH*, 35 (8): 2523-2532, (1999).

Aly, A.H., and P.C. Peralta, Comparison of a genetic algorithm and mathematical programming to the design of groundwater cleanup systems, *Water Resources Research*, 35(8): 2415-2425, (1999).

Basagaoglu, H., and M.A. Marino, Joint management of surface and ground water supplies. *Ground Water*, 37(2), 214-222, (1999).

Bear, J., and Y.W. Sun, Optimization of pump-treat-inject (PTI) design for the remediation of a contaminated aquifer: multi-stage design with chance constraints. *Journal of Contaminant Hydrology*, 29(3), 225-244, (1998).

Cao, T., and T.Li, A combination of numeric genetic algorithm and tabu search can be applied to molecular docking, *Computational Biology and Chemistry*, 28, (2004).

Chang, L. C., and C. T. Hsiao, Dynamic optimal Groundwater Remediation including fixed and operation costs. *Ground Water*, 40(5): 481-490. (2002).

Chang, L. C. and F. J. Chang, Intelligent Control for Modeling of Real Time Reservoir Operation, *Hydrological Processes*, 15(9): 1621-1634. (2001).

Chang, L.C., and C.A. Shoemaker, Optimal time-varying pumping for groundwater remediation application of a constrained optimal control algorithm. *Water Resources Research*, 28(12), 3157-3173 (1992)

- Cieniawski, S. E., J. W. Eheart, and S. Ranjithan, Using genetic algorithm to solve a multiobjective groundwater monitoring problem. *Water Resources Research*, 31(2), 399 – 409, (1995).
- Coppola E, Szidarovszky F, Poulton M, et al., Artificial neural network approach for predicting transient water levels in a multilayered groundwater system under variable state, pumping, and climate conditions, *Journal of hydrologic Engineering*, 8 (6), 348-360, (2003).
- Culver, T.B.,and G.W. Shenk ,Dynamic optimal ground water remediation by granular activated carbon, *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 124 (1): 59-64, (1998).
- Culver, T. B., and C. A. Shoemaker, Dynamic optimal ground-water reclamation with treatment capital costs. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 123(1), 23-29, (1997).
- Culver, T. B., and C. A. Shoemaker, Optimal control for groundwater remediation by differential dynamic programming with quasi-Newton approximations. *Water Resources Research*, 29(4), 823-831. (1993).
- Culver, T. B., and C. A. Shoemaker, Dynamic optimal control for groundwater remediation with flexible management periods. *Water Resources Research*, 28(3), 629-641, (1992).
- Diaz, G. M. Sen, K.T. Yang et al., Dynamic prediction and control of heat exchangers using artificial neural networks, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 44 (9): 1671-1679, (2001).
- Espinoza, F.P., B.S. Minsker, and D.E. Goldberg, Adaptive hybrid genetic algorithm for groundwater remediation design, *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 131(1), (2005).
- Gorelick, S. M., A Review of distributed parameter groundwater management modeling methods, *Water Resources Research*, 19 (2): 305-319, (1983).
- Gorelick, S. M.,and C.I. Voss, Aquifer reclamation design: the use of contaminant transport simulation combined with nonlinear programming. *Water Resources Research*, 20 (4): 415-427, (1984).
- Guan, J., and M.M. Aral, Optimal remediation with well locations and pumping rates

selected as continuous decision variables. *Journal of Hydrology*, 221 (1): 20-42, (1999).

Hilton, A.B.C., and T.B. Culver, Constraint handling for genetic algorithms in optimal remediation design. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 126 (3) 128-137, (2000).

Hoffman, F, Ground-water remediation using “smart pump and treat”, *Ground Water*, 31(1), (1993).

Huang, C., and A. S. Mayer, Pump-and-treat optimization using well locations and pumping rates as decision variables. *Water Resources Research*, 33(5), 1001-1012, (1997).

Hsiao, C. T., and L. C. Chang, Dynamic optimal groundwater management with inclusion of fixed costs. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 128 (1), 57-65 ,(2002).

Hsiao, C. T., and L. C. Chang, Optimization of fixed and operating costs in groundwater remediation using optimal control and genetic algorithm. *Journal of Hydroscience and Hydraulic Engineering- JSCE*, 19(2): 11-30., (2001).

Jones, L., R. Willis and W. W.-G. Yeh, Optimal control of nonlinear groundwater hydraulics using differential dynamic programming. *Water Resources Research*, 23(11), 2097-2106, (1987).

Larson, K.J., H, Basagaoglu, and M.A. Marino, Prediction of optimal safe ground water yield and land subsidence in the Los Banos-Kettleman City area, California, using a calibrated numerical simulation model, *JOURNAL OF HYDROLOGY*, 242 (1-2), (2001).

Liu, Y., and B S. Minker, One-way spatial multiscale method for optimal bioremediation design, *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 127(2), (2001).

Mansfield, C. M., C. A. Shoemaker and L. Z. Liao, Utilizing sparsity in time-varying optimal control of aquifer cleanup. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 124(1): 15-21, (1998).

Mansfield, C. M., and C. A. Shoemaker, Optimal remediation of unconfined aquifers: Numerical applications and derivative calculations, *Water Resources Research*, 35(5):

1455-1469, (1999).

Marryott, R.A, D.E. Dougherty, and R.L. Stollar, Optimal ground water -management  
2. Application of Simulated Annealing to a field-scale contamination site, *Water Resources Research*, 29 (4): 415-427, (1993).

McKinney, D. C., and M. D. Lin, Pump-and-treat ground-water remediation system optimization. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 122(2): 128-136, (1996).

McKinney, D. C., and M. D. Lin, Approximate mixed-integer nonlinear programming methods for optimal aquifer remediation design. *Water Resources Research*, 31 (3): 731-740 ,(1995)

Misirli, F., and H. Yazicigil, Optimal ground-water pollution plume containment with fixed charges. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 123 (1): 2-14(1997)

Murray, D. M., and S. J. Yakowitz, Constrained differential dynamic programming and its application to multireservoir control, *Water Resour. Res.*, 15(5): 1017-1027, (1979).

Nishikawa, T., Water resources optimization model for Santa Barbara, California, *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 124(5), (1998).

Pinder, G. F., Galerkin finite element models for aquifer simulation, *Rep. 78-WR-5*, Dept. of Civ. Eng., Princeton Univ., Princeton, N. J., (1978).

Randall, D, Cleland, L., Kuehne, C. S., Link, G. W.,and Sheer, D. P., Water supply planning simulation model using mixed-integer linear programming, *J. of Water Resources Planning and Management*,123,(2)116-124, (1997).

Rao, S.V.N., S.M. Bhallamudi, B.S. Thandaveswara, and V.Sreenivasulu, Planning groundwater development in coastal deltas with paleo channels, *Water Resour. Mgmt.*, 19, 625-639, 2005

Rao, S.V.N., B.S. Thandaveswara, S.M. Bhallamudi et al, Optimal groundwater management in deltaic regions using simulated annealing and neural networks, *Water Resources Research*, 17 (6), (2003).

Rogers, L.L., Dowla, F.U., and Johnson V.M. Optimal field scale groundwater

remediation using neural network and the genetic algorithm, *Envir Sci and Technol*, 29(5), 1145-1155, 1995

Rogers, L.L., Dowla, F.U., Optimization of Groundwater Remediation using Artificial Neural Networks with Parallel Solute Transport Modeling, *Water Resources Research*, 30( 2): 457-481, 1994

Rizzo, D.M, and Dougherty D.E, Design optimization for multiple management period groundwater remediation, *Water Resources Research*, 32(8): 137-148, (1996).

Shieh, H.J. and R. C. Peralta, Optimal In Situ Bioremediation Design by Hybrid Genetic Algorithm-Simulated Annealing, *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 131(1), (2005).

Shin, D.J., J.O. Kim, T.K. Kim, J.-B. Choo, and C.Singh, Optimal service restoration and reconfiguration of network using Genetic-Tabu algorithm, *Electric Power Systems Research*, 71, (2004).

Taghavi, S. A., R. E. Howitt, and M. A. Marino, Optimal control of ground-water quality management: nonlinear programming approach. *Journal of Water Resources Planning and Management-ASCE*, 120(6), 962-982, (1994).

Takahashi, S., and R. C. Peralta, Optimal perennial yield planning for complex nonlinear aquifers: Methods and examples, *Advances in Water Resources*, 18(1), 49-62, (1995).

Wang, J.C., J.R. Booker, and J.P. Carter, Analysis of the remediation of a contaminated aquifer by a multi-well system. *Computers and Geotechnics*, 25(3): 171-189, (1999).

Yang ,C.C., L.C. Chang, C.H. Yeh and C.S. Chen, Multiobjective planning of Surface Water Resources by multiobjective genetic algorithm with constrained differential dynamic programming, *Journal of Water Resources Planning and Management, ASCE*, Vol. 133, No. 6, pp 499-508, (2007).

Zheng, C., and P. P. Wang, Parameter structure identification using tabu search and simulated annealing, *ADVANCES IN WATER RESOURCES*, 19 (4): 215-224 , (1996).

Zheng, C., and P. P. Wang, An integrated global and local optimization approach for remediation system design, *Water Resources Research*, 35(1): 137-148, (1999).