國 立 交 通 大 學 土木工程研究所 博士論文

結合抽水與監測容量擴張之地下水量即時管理模式

Coupled pumping and monitoring designs for real-time groundwater supply management considering system capacity expansion

18

研 究 生:葉明生

指導教授:張良正博士

中華民國九十八年七月

結合抽水與監測容量擴張之地下水量即時管理模式

Coupled pumping and monitoring designs for real-time groundwater supply management considering system capacity expansion

研究生:葉明生指導教授:張良正

Student : Ming Sheng Yeh

Advisor : Liang Cheng Chang

土木工程研究所 博士論文 A Dissertation Submitted to Institute of Civil Engineering College of Engineering National Chiao Tung University

國立交通大學

in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of

Doctor of Philosophy

in

Civil Engineering

July, 2009

Hsinchu, Taiwan, Republic of China

中華民國九十八年七月

結合抽水與監測容量擴張之地下水量即時管理模式

研究生:葉明生 指導教授:張良正

國立交通大學土木工程研究所

摘要

地下水系統的描述或數值模式,因各種簡化假設與水文地質參數而有不確定 性存在。雖然愈準確之地下水系統描述,可以設計出更有效率之抽水策略,但仍 需進一步評估監測資訊對於規劃抽水策略之助益是否合乎經濟成本。因此完備之 地下水管理應同時考量抽水策略與監測策略之規劃設計,且應以容量擴張分階段 設井型態,使得在即時操作過程中,經由監測資訊對系統狀態更新後,可再調整 抽水與監測井網。雖然以往之地下水管理研究中亦有同時考量抽水量及監測井 網,但並未考量抽水井網之最佳化,更無抽水井網與監測井網即時調整之相關研 究。本研究目的為建立一地下水量即時管理模式,可隨系統之操作對抽水策略(抽 水井網及抽水量)及監測策略(監測井網)即時進行重新規劃調整,即時優選容量 擴張型態之抽水策略及監測策略。

本研究整合遺傳演算法與退火演算法,優選容量擴張型態之井網及離散化時 變抽水量,並以卡門濾波進行即時更新及水位誤差推估。利用遺傳演算法本身隱 平行之特性,以分配染色體為計算量切割,在平行電腦大量計算資源下,克服所 需大量計算。最後以一拘限含水層為簡例,驗證所發展之模式可應用於地下水量 管理問題上。由數值結果顯示,經由考量抽水與監測相互影響機制所設置之監測 井網,雖然佔總成本之比例並不高,但在地下水模擬模式經由監測資訊更新後, 再重新調整井網,可有效降低總成本。

I

Coupled pumping and monitoring designs for real-time groundwater supply management considering system capacity expansion

Student : Ming Sheng Yeh

Advisor : Liang Cheng Chang

Institute of Civil Engineering National Chiao Tung University

Abstract

The uncertainty of simulation modeling is resulted from the simplified assumptions of reality and uncertainty of parameter estimation. With more information regarding aquifer characterization, the devised pumping strategy will be more cost-effective. The pumping and the monitoring strategies must be designed simultaneously, so that the trade-off between the cost of monitoring strategy and the value of information, i.e. pumping cost saving, could be appraised. For the flexibility of adjusting the well networks after updating the groundwater system, the well networks should be with capacity that expands with time.

In this study, a real-time management model for jointly optimizing the pumping and monitoring stratgies of groundwater supply problem considering the system capacity expansion is presented. The proposed approcah hybridizes a Genetic algorithm (GA) and Simulation annealing (SA). The chromosomes of the GA represent a possible design alternative, a pumping and monitoring network with capacity that expands with time. The SA is then used to compute the optimal pumping policy associated with the chromosome. The information obtained through monitoring network is used to update the hydraulic head and which covariance matrix with Kalman filtering. The hybrid algorithm can be effectively parallelized by the implicit parallel characteristic of GA. This study implements the parallel computation to overcome the increasing computational requirements due to the complexity of the problem as well as using GA and SA. A hypothetical confined aquifer is included to demonstrate the proposed apparoch and to illustrate the interaction between pumping and monitoring strategies. Results show that the ratio of monitoring cost to total cost is relatively small. Through integrating the pumping and monitoring designs and redesign the well networks with time, the monitoring strategy could significantly reduce the pumping cost.



誌謝

感謝吾師張良正教授對於本論文的細心指導及求學階段中對學生的待人處 事與學問研究的啟發,使得學生受益匪淺。承蒙口試委員台灣大學生物環境系統 工程學系劉振宇教授、林裕彬教授、台灣大學土木工程學系徐年盛教授、成功大 學資源工程學系徐國錦教授、交通大學環境工程研究所葉弘德教授、交通大學土 木工程學系單信瑜教授細心認真審閱,並於口試期間提出相當寶貴的意見,使本 文更加完備,在此謹致衷心謝意,並感謝國家高速網路與計算中心提供軟硬體資 源,使本研究得以順利進行。

此篇論文之研究方向,是起源自已工作時接觸地下水監測井網規劃與設計, 而當初研究室之研究方向著重於地下水抽水供水及污染整治規劃,因此才有將抽 水與監測整合優選之想法。看似單純之整合,卻發現抽水策略與監測策略之間有 著複雜相互影響關係,因此相對需要整合不同之理論與解題工具,加上需處理大 量計算量,而步上平行運算之途,一路走來,需要感謝的人太多,衷心感謝研究 室多年來所有成員的陪伴及鼎力相助,才能完成此篇論文。

最後要感謝我的家人,因為有你們的全力支持,我才能順利取得博士學位, 僅將此論文獻給我的妻子、岳母及母親。

	頁次
中文摘要	I
英文摘要	II
誌謝	IV
目錄	V
表目錄	VII
圖目錄	VIII
第一章 緒論	1
1.1 研究動機與目的	1
1.2 文獻回顧	
1.3 問題結構與解決方式	10
1.4 數學符號定義	
第二章 地下水量即時管理模式發展	
2.1 地下水量即時管理模式問題定義	
2.2 地下水量規劃模式發展1.2.26	
2.3 參數推估及系統狀態更新	
第三章 平行化程式開發及運算平台	
3.1 地下水量規劃管理模式平行化	
3.2 平行運算平台	50
第四章 模式範例演算	51
4.1 計算範例	55
4.1.1 各項參數設定	55
4.1.2 計算結果	58
4.2 有無考量容量擴張之影響	
4.3 不同利率之影響	
4.4 平行運算及演算法效能分析	
第五章 結論與建議	
5.1 結論	

5.2 建議	
參考文獻	
附錄 A 遺傳演算法(Genetic algorithm) .	
附錄 B 退火演算法(Simulation annealing)
附錄 C 地下水流數值模式-MODFLOW	
附錄 D 克利金法(Kriging)	
附錄 E 卡門濾波(Kalman filtering)	
附錄 F 平行運算(Parallel computation)	



表目錄

	頁次
表 4.1-1 地下水系統參數表	61
表 4.1-2 時間參數表	61
表 4.1-3 抽水與監測井網相關參數	62
表 4.1-4 GA 參數	62
表 4.1-5 SA 參數	63
表 4.1-6 抽水與監測策略之規劃成本(第1階段初最佳策略)	64
表 4.1-7 抽水與監測策略之規劃成本(第2階段初最佳策略)	64
表 4.1-8 抽水與監測策略之規劃成本(第3階段初最佳策略)	64
表 4.1-9 抽水與監測策略之真實成本(第1階段初最佳策略)	65
表 4.1-10 抽水與監測策略之真實成本(第2 階段初最佳策略)	65
表 4.1-11 抽水與監測策略之真實成本(第3階段初最佳策略)	65
表 4.2-1 抽水與監測策略之真實成本(不考慮容量擴張)	80
表 4.3-1 抽水與監測策略之真實成本(第3階段初最佳策略,年利率 6%)	
表 4.4-1 計算時間統計	88

圖目錄

	頁次
圖 2.1-1 容量擴張間距與時刻示意圖	
圖 2.1-2 目標函數(Z_{α})定義示意圖	
圖 2.1-3 水位之機率型限制條件示意圖	
圖 2.1-4(a) 降低 $E[Z]$ 以減少目標函數 (Z_{α}) 示意圖	
圖 2.1-4(b) 降低標準偏差以減少目標函數(Z_{α})示意圖	
圖 2.1-5 地下水量即時管理模式架構示意圖	
圖 2.2-1 地下水量規劃模式演算流程圖	
圖 2.2-2 染色體解碼後對應於設井位置及設井階段示意圖	
圖 2.2-3 時間分割示意圖	
圖 2.2-4 隨機產生新的鄰近狀態示意圖	
圖 2.3-1 參數推估及系統狀態更新流程圖	
圖 3.1-1 地下水量規劃管理模式之程式流程圖	
圖 3.1-2 子族群切割示意圖	46
圖 3.1-3 地下水量規劃管理模式平行化程式架構圖	49
圖 4-1 地下水即時管理模式演算流程示意圖	53
圖 4-2 地下水真實系統與演算流程示意圖	53
圖 4-3 地下水虛擬系統與演算流程示意圖	54
圖 4.1-1 計算範例之地下水區域示意圖	66
圖 4.1-2 計算範例之地下水含水層示意圖	66
圖 4.1-3 真實 K 值分佈圖(單位: m/day)	67
圖 4.1-4 起始水位之標準偏差分佈圖(單位:m)	67
圖 4.1-5 計算範例之時間參數設定示意圖	68
圖 4.1-6 波茲曼機率分布圖(第1階段初規劃模式)	68
圖 4.1-7(a) 抽水井網優選結果分佈圖(第1階段初最佳策略)	69
圖 4.1-7(b) 監測井網優選結果分佈圖(第1階段初最佳策略)	69
圖 4.1-7(c) 抽水與監測井網優選結果分佈圖(第1階段初最佳策略)	
圖 4.1-8 各抽水期距之每口抽水井抽水量(第1 階段初最佳策略)	

ς.

圖 4.1-10 時刻 t=36 推估 K 值之標準偏差分佈圖(第1 階段初最佳策略) 71 圖 4.1-11 時刻 t=36 敏感度矩陣之主對角線值分佈圖(第1 階段初最佳策略) .72 圖 4.1-12 時刻 t=36 之更新水位標準偏差(sd[h,])分佈圖(第1 階段初最佳策略) 圖 4.3-1(c) 抽水與監測井網優選結果分佈圖(第 3 階段初最佳策略,年利率 6%)85 圖 4.4-1 各代染色體之目標函數收斂情形(4.1 節計算範例之第1階段初規劃模式) 圖 4.4-3 各代染色體(佈井方案)於退火演算法之最後溫度(4.1 節計算範例之第1 圖 4.4-4 退火演算法之熵及温度變化(4.1 節計算範例之第1 階段初最佳策略) 91

第一章 緒論

1.1 研究動機與目的

地下水是人類重要的淡水資源之一,近年來由於經濟發展用水需求日益增加,地下水的管理儼然成為一個重要的課題,為使寶貴的地下水資源能永續利用,地下水的保育管理工作實在刻不容緩。

地下水的管理不論是為了地下水供水或含水層抽水污染整治,其實際執行皆 需要有一合適的抽水策略,即適當的抽水井網及抽水型態。惟在規劃設計抽水策 略及評估抽水對含水層之後續影響時,往往需要對地下水系統進行某種量化描述 或數值模擬,以便於進行各種抽水策略之評估,而模式的建立又須有充分的資 料,因而又需要合適的監測策略,以蒐集水文地質參數、地下水位及邊界條件等 資訊,以作為建立地下水模式之基礎。因此,地下水管理原則上需要擬定合適的 抽水策略與監測策略。

惟進一步而言,地下水系統的描述或數值模式,常因各種簡化假設與水文地 質參數之不確定性,而有一定程度的誤差。雖然愈準確之地下水系統描述,可以 設計出更有效率之抽水策略,但仍需進一步評估監測資訊對於規劃抽水策略之助 益是否合乎經濟成本。因此,完備的地下水管理不只需要合適的抽水策略與監測 策略,且二者應同時整合考量,以達到節省成本之目的。

在地下水即時操作過程中,則可利用即時監測資訊對地下水系統描述或數值 模式本身進行更新,進而降低其對水位或水質的推估誤差。又因抽水策略之規劃 設計乃基於地下水模式本身,若更新了地下水模式,則應再重新調整設計後續之 抽水策略。惟因抽水策略為地下水系統之一部份,若重新調整設計後續之抽水策 略,則依原先之地下水系統而規劃之監測策略,此時亦應進行適度調整,使得監 測策略所得之資訊能更精確的反應地下水系統的狀態。由上述可知,抽水策略與 監測策略二者相互影響,因此原則上最佳的地下水的管理應隨操作之進行,即時 的調整抽水策略與監測策略。惟在實務上,因為抽水井或監測井,一旦設置完成 其井位即已存在,因此抽水策略與監測策略於操作過程中彈性調整,乃是一個井 數逐漸增加的系統容量擴張問題。 綜合上述所言,因對地下水系統之描述有不確定性,完備之地下水管理應同時考量抽水策略與監測策略之規劃設計,且應考量容量擴張設井型態,使得在即時操作過程中,經由監測資訊對系統狀態更新後,可再調整抽水井網與監測井網。

雖然以往之地下水管理研究中亦有同時考量抽水量及監測井網,但並未考量 抽水井網之最佳化,更無抽水井網與監測井網即時調整之相關研究。因此,本研 究目的為建立地下水量即時管理模式,可隨系統之操作對抽水策略(抽水井網及 抽水量)及監測策略(監測井網)即時進行重新規劃調整,即時優選容量擴張型態 之抽水策略及監測策略。



1.2 文獻回顧

地下水管理問題往往以最低成本考量,滿足如地下水量供水或污染整治之目 的,而為了最佳化管理,前人研究運用各種優選工具解題,所考量成本從只有動 態抽水操作成本,進而至抽水井設置成本,問題也由動態規劃延伸至整數規劃與 動態規劃之混合。但完備之地下水管理除了規劃設計抽水策略,也應把監測納入 考量,且應考慮即時操作過程之系統更新問題。本節之文獻回顧探討,將著重於 問題成本考量、抽水與監測之整合規劃、容量擴張概念於水資源應用與地下水參 數推估及更新等相關研究,其中包含各種優選工具於地下水管理之應用。

1.地下水管理

在地下水管理規劃問題裡,有許多學者採用不同規劃方法解決問題,如線性 規劃(Linear Programming, LP) [Aquado and Remson, 1974; Molz and Bell, 1977]、 非線性規劃(Nonlinear Programming, NLP) [Murtagh and Saunders, 1982; Ahlfeld et al., 1988a,b]、混合整數規劃[Rosenwald and Green, 1974]、退火演算法(Simulation Annealing, SA) [Dougherty and Marryott, 1991; Kuo et al., 1992; Marryott et al., 1993]、遺傳演算法(Genetic Algorithm, GA) [Mckinney and Lin, 1995; Wang and Zheng, 1998]、微分動態規劃 (Differential Dynamic Programming, DDP) [Jones et al., 1987]、整合遺傳演算法及限制型微分動態規劃 (Hybrid algorithm: Genetic Algorithm and Constrained Differential Dynamic Programming (CDDP)) [Hsiao and Chang, 2002; Chang and Hsiao, 2002; Hsiao and Chang, 2005; Chang et al., 2007]。在這些方法之中,微分動態規劃的方法可大幅減少地下水非線性動態問 題之維度 [Jones et al., 1987],且在地下水整治方面對於非穩態問題,微分動態規 劃可大幅降低計算量 [Chang et al., 1992; Culver and Shoemaker, 1992]。

退火演算法又可稱為模擬退火演算法,屬於最常見啟發式演算法之一,最早 是S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt與M. P. Vecchi等人在 1983 年所發明[Kirkpatrick et al., 1983]。「退火」是屬於冶金學中的專有名詞,是將金屬材料加熱後經由特定速率 冷卻,可以增大晶粒的體積,並且減少晶格中的缺陷,透過緩慢退火與淬火過程, 將可獲得其最低能量狀態,數學家則利用前述之退火與淬火之物理現象,發展出 退火演算法。Dougherty and Marryott [1991]將SA應用於地下水管理問題之離散抽 水率優選,其研究結果指出SA 應用於最佳化問題的確較傳統的梯度式搜尋法有 較優的搜尋能力。Dougherty and Marryott [1993]將上述的研究結合地下水數值模 式,應用於真實的地下水污染整治案例。Kuo et al.[1992]於地下水污染整治問題 中,應用SA優選抽取-處理(Pump-and-Treat)最佳策略。Rizzo and Dougherty [1996] 應用SA於求解之地下水污染整治問題上,其問題目標考量了:抽水井與灌水井之 設置與操作成本、管線與污水處理廠成本,並以處罰函數來處理整治水質濃度限 制。Skaggs et al. [2001]將SA整合記憶與方向搜尋(Memory and directional search),應用於地下水污染整治問題。Rao et al. [2004] 以SA為優選工具,配合 類神經(Artificial Neural Networks, ANN)取代地下水流模式以節省計算時間,求解 實際之地表地下聯合營運問題。Ricciardi et al. [2009] 將SA整合Downhill simplex 方法,應用於地下水污染整治問題上。

遺傳演算法自 1970 年發展至今已經成為一種能力很強的優選方法,由於遺 傳演算法為一強健(Robustic)的演算法,它能有效率的搜尋問題的整個解空間, 大幅提高收斂至整體最佳值(Global optimum)的機會,並已廣泛地應用在各領 域。應用 GA 於地下水管理方面有 Rogers and Dowla [1994]利用 GA 結合類神經 (Artificial Neural Networks, ANN)方式應用在地下水污染整治的問題上,以求出最 佳抽水井數與井位,但其抽水井的抽水量僅為穩態; McKinney and Lin [1994]應用 GA 於地下水之管理營運,並考慮三種型態之目標函數,分別為:含水層之最大 抽水量、滿足供水最小成本與污染整治最經濟成本。Ritzel et al. [1994]應用 GA 考慮多目標之地下水污染整治問題,其目標函數考量如何使模式偵測到系統污染 質之可靠度(System reliability)最大與如何使系統所需之成本最小,求得最佳之設 井位置、設井數與抽灌水量。Mckinney and Lin [1995]應用 GA 及 MINLP(Mixed-integer nonlinear programming)求解包含設井成本及操作成本的水 量管理問題,但其地下水模擬亦僅為穩態; Huang and Mayer (1997)採用 GA 來搜 尋在動態地下水污染整治中的最佳抽水率及設井位置。Wang and Zheng [1998]應 用 GA 和 SA,並結合 MODFLOW 模式處理包括營運和固定成本的問題,惟其 模式並未妥善的處理動態問題,其操作時段最大僅為四個時期,對於操作時段較 多的動態地下水管理問題,其計算量將大為增加。Zheng and Wang [1999]結合搜

4

尋的方法和線性規劃計算地下水整治的最佳成本,惟其亦僅模擬穩態地下水流。 Shieh and Peralta [2005] 整合 GA 及 SA,應用於地下水污染場址之生物整治系統 規劃。

Hsiao and Chang [2002]整合遺傳演算法及限制型微分動態規劃,完整考量包括固定成本及操作成本的系統總成本,由於微分動態規劃考慮設井成本有其先天 之限制,而簡單遺傳演算法本身即採用 0-1 編碼方式來獲得問題之解答,其本身 之解題空間即為離散型態,故可容易的算出地下水營運管理之設井成本。

前述之地下水量營運管理問題,大部分研究注重於考慮抽水策略之固定成本 與操作成本最少及洩降量最小等問題上,但完整之地下水管理不只需要合適的抽 水策略,應也要納入監測策略,且二者應同時整合考量,才能達到節省成本之目 的。

2.同時考量地下水抽水及監測之研究

以往亦有相關研究建議地下水管理抽水策略及監測策略應整合規劃 [Mclaughlin and Wood, 1988; Graham and Mclaughlin, 1989; Andricevic and Kitanidis, 1990]。惟實作上同時考量抽水策略及監測策略研究並不多,若欲兩者 同時考量,如何在給定之監測策略下求得最佳抽水策略為其中關鍵,而此部份有 採用 Dual control 優選動態抽水量 [Andricevic, 1990; Andricevic, 1993],及利用機 率型限制式(Chance constraint)建構抽水量優選模式[Wagner, 1999]兩種方法。

Dual control 概念在 1960 年代首先由 Feldbaum [1960,1961]提出,其主要概 念為,控制一個考量不確定性因素之系統時,不只是依目標函數要求來進行控 制,同時亦考量如何經由控制對系統之刺激,以改進系統參數推估[Filatov and Unbehauen, 2004]。Andricevic and Kitanidis [1990]參考 Tse et al. [1973]之 dual control 推導,考量水文地質參數不確定性,進行地下水污染整治之最佳即時操 作,優選時變抽水量。Andricevic [1990]延續上述之研究,其基本理念為在給定 監測井網下,經由 dual control 優選出各監測井網相對應之動態抽水量及抽水成 本,Andricevic [1990]之研究並以試誤法從 30 組給定之監測井網中,決定整體較 佳之監測井網及抽水量。Andricevic [1993]更進一步在地下水水量之即時操作問 題中,在給定之抽水井網下,以時序之方式於每時刻遞增一口監測井並逐時刻優 選各自對應之抽水型態,此研究抽水井網並未優選且監測井網及抽水型態亦可能 是局部最佳解。上述 Andricevic 及 Kitanidis 之研究,雖然發展出在給定監測策 略之情形下以 dual control 優選動態抽水量之方法,但因未再搭配其它優選工具 進行抽水井網與監測井網優選,因此,嚴格而言並沒有對抽水井網及監測井網同 時進行優選。

Wagner [1999]以監測井網優先設計,配合監測井網及整治抽水量之疊代優選 計算,在給定之抽水井網下,進行穩態抽水量與監測井網之優選。在其研究問題 中,水質推估誤差(model prediction uncertainty)為監測井網優選模式之目標函 數,其並為抽水整治優選模式中機率型限制式中項目之一,藉以將監測井網對最 佳整治水量之影響反映至抽水整治優選模式中。整體疊代優選過程為在給定不同 監測成本條件下,反覆地分別運用抽水整治優選模式及監測井網優選模式,得出 在不同之監測成本下之最佳抽水量及監測井網,最後再決定出抽水操作成本與監 測井網成本總合最小之方案。Wagner [1999]研究中,雖有進行穩態抽水量量及監 測井網之優選,但仍未考慮抽水井網之最佳化。且雖經由水質推估誤差(model prediction uncertainty)連結污染整治抽水優選模式及監測井網優選模式二者,惟 其每次疊代計算僅只單向的考量監測井網對最佳抽水量的影響,而最佳抽水量對 監測井網之影響並未回饋至監測井網優選中。

由以上之研究發現,即使有同時考量抽水及監測之整合規劃,但限於其問題 建構方式或優選工具之限制,對抽水策略及監測策略之考量仍不夠完善,尤其在 抽水系統之考量往往只是在給定抽水井網條件下(即抽水井位、井數量固定)優 選最佳抽水量。為了能完整考量抽水策略及監測策略之總成本,本研究將同時考 量抽水及監測之井網設計,在即時操作過程中,配合監測資訊之更新,即時的更 新最佳時變抽水量,並以容量擴張的觀念,在給定的期距重新調整設計監測井網 及抽水井網。因此系統逐步擴張容量之設計理念亦為其中重要之一環,以下將對 容量擴張應用於水資源管理之相關研究作介紹。

3.考量容量擴張之水資源管理相關研究

系統之容量擴張,乃是隨著時間增加應如何擴充系統容量之棑程問題。系統

容量擴張問題之決策變數包含不連續變數,造成問題不易求解,但真實世界之系統容量規劃設計卻往往需面對容量擴張之問題。(但系統容量隨著時間而擴張之 方式,卻又是實際上所需面對之問題。)由於對水資源需求量隨著人口及時間增 加而遞增,所以水資源系統容量擴張問題日益顯示出其重要性[Basagaoglu and Yazicigil, 1994; Watkins and McKinney, 1998; Voivontas et al., 2003; Mahmoud, 2006]。

有關於地表水資源管理容量擴張之研究有 Voivontas et al. [2003] 及 Mahmoud [2006]。Voivontas et al. [2003]建立整體水資源容量擴張模式,在其研究 問題中考量地表地下聯合營運,並包含了抽水井群、水庫及海淡廠之容量擴張。 Mahmoud [2006]整合 Objective Space Dynamic Programming (OSDP) 及混合整數 規劃(Mixed Integer Programming) 對海淡廠之容量擴張問題進行最佳化。不過, 上述二者之研究不是忽略地下水系統,就是以忽略地下水位空間變化之地下水庫 來簡化地下水系統。

對地下水容量擴張問題而言,其決策變數包含井網設計及擴張階段,也就是 需決定設井時期、設井位置與設井數等複雜因素。另外,由於時空上地下水位變 化之影響,地下水容量擴張問題之複雜度及所需計算量,遠比地表水容量擴張問 題來得高。

有關地下水容量擴張問題研究,Basagaoglu and Yazicigil [1994]其模式為混合 整數規劃模式整合響應矩陣方法(Response matrix method),以在其容量擴張模式 之目標函數中考慮抽水井之設置成本及操作成本,但其目標函數的操作成本為非 線性而無法採用混合整數規劃求解,所以另外運用三種方法來簡化其目標函數中 之非線性項,其三種方法分別為假設當水位洩降(drawdown)最小其相對的操作成 本也是最小、水位洩降進行線性化處理、抽水量與洩降利用簡單的數學式轉換取 代。並探討在不同的需水容量擴張曲線如凹曲線(concave)、線性曲線(linear)與凸 曲線(convex)之抽水井數、總洩降量及總成本。但其模擬區域只考慮少數候選井, 且其地下水洩降量為採用響應矩陣方法計算抽水量與水位關係而得,因此若候選 井數變多及模擬時刻增加時,則模式計算量將會增大。Watkins and McKinney [1998]考慮地表地下聯合營運之容量擴張問題,決策變數包含了抽水井網設計及 擴張階段,但僅考慮穩態抽水量,且採用響應矩陣方法計算地下水位。Chang et al. [2009]延續 Hsiao and Chang [2002]之研究,目標函數中同時考慮容量擴張之抽水 井網設置成本與操作成本,其中抽水井網的設井位置、設井數與設井時期,皆採 用遺傳演算法求解,採用動態規劃理論求解抽水量,並採用崁入法(Embedding method)由數值模式求解洩降。

由於遺傳演算法之解空間即為離散型態,因此本研究將參照 Chang et al. [2009]之研究,以遺傳演算法優選容量擴張型態之抽水及監測井網。優選出容量 擴張型態之抽水及監測井網,可配合即時監測資訊更新後之地下水模擬模式,可 重新調整已規劃但未真正設置之抽水及監測井網。以下將對運用監測資訊對參數 推估與系統狀態更新之相關研究進行介紹。

4.参數推估與系統狀態更新之研究

在地下水管理問題中,因經費考量,常需以有限監測點所得之水文地質參數 及水位監測值,進行全區參數推估與地下水系統描述。在過去已有許多的研究, 多利用地質統計之克利金法(Kriging method)或聯合克利金法(Co-kriging method) 為理論基礎, 推估水文地質參數。克利金推估為一種利用區域性變數理論基礎 之方式,首先由 Matheron [1971]於 1971 年提出。克利金法除了提供最佳推估外, 同時可求出一量化數值,即克利金變異數(Kriging variance),以表示推估結果 之不確定性。克利金法自發展以來曾先後被多位學者應用於地下水有關領域內, 例如以地質統計分析進一步顯示經過對數轉換後之導水係數(Transmissivity, T 值),在常態分佈下具有較原值更佳之空間變異結構[Delhomme, 1976],克利金之 異向性理論[David, 1977; Isaads and Srivastava, 1989],探討監測井網分佈均勻度 或密度改變導致推估誤差之變化[Sophocleous et al., 1982] 及應用在地下水之最 佳之井綱佈置[Carrera et al., 1984; Rouhani, 1985]。

聯合克利金推估首先由 Journal and Huijbregts [1978]提出,其研究中描述了 聯合克利金推估利用不同參數間之相關性,以採樣較多之參數來推估採樣少之參 數。其後尚有聯合克利金矩陣公式及複半變異元模式之研究[Myers, 1982],以多 變數進行地下水監測井網之規劃[Benjemaa et al., 1994]。

8

另外,卡門濾波(Kalman filtering)在模式的參數推估(Estimating)、模擬 (Simulation)和預測(Forecasting)上是一強而有力的工具,自 1960年 Kalman 發表後,已被廣泛的應用在各種研究領域上,而應用於地下水相關研究有,推估 更新地下水位及設計監測井網[Van Geer et al., 1991; Zhou,1991],使用卡門濾波 於參數推估問題[Ferraresi et al., 1996],整合卡門濾波與空間推估應用於參數推估 [Mardia et al., 1998; Cahill et al., 1999],應用擴展式卡門濾波於含水層參數之檢定 [Leng and Yeh, 2003; Yeh and Huang, 2005]。其中,Van Geer et al. [1991]及 Zhou et al. [1991]整合卡門濾波理論與美國地質調查局(U.S.G.S.)發展之地下水流數值模 式 MODFLOW [McDonald and Harbaugh, 1988],此整合程式(KALMOD)可推估 經監測值更新後之水位,以改善地下水數值模式之不確定性,同時亦可作為水位 監測井網之設計評估。Eigbe et al. [1998]對於卡門濾波應用於地下水之相關研究 有一完整回顧與探討,其指出卡門濾波應用在系統更新比其它工具有明顯之優 勢,但也指出因系統嗓音之難以量化,在沒有精確之系統嗓音情況下,卡門濾波 之效能有待商權。

本研究將運用克利金法推估全區之透水係數(Hydraulic conductivity, K值), 且為了能量化系統噪音,將以一階二矩法(First-order second moment method, FOSM) 推估地下水模式不確定性[Dettinger and Wilson, 1981; Glasgow et al., 2003],再利用卡門濾波推估經監測值更新後之地下水位及其推估誤差。

1.3 問題結構與解決方式

由上述之文獻回顧可知,同時考量抽水與監測之整合規劃,以及容量擴張觀 念,二者雖已各自的應用在水資源或地下水最佳管理問題上,惟尚未有整合上述 兩者之相關研究。另外,以往同時考量抽水與監測之管理問題,由於問題建構方 式或採用優選工具之限制,使得未能同時考量抽水策略與監測策略之設井成本與 操作成本。有鑑於此,本研究以地下水井網容量擴張觀念,同時考量抽水策略與 監測策略之規劃設計,再配合以監測資訊更新地下水模擬模式,建立一地下水量 即時管理模式,並以抽水與監測策略之設井成本加上操作成本之總成本為目標函 數。

為了建立地下水量即時管理模式,以同時對容量擴張型態抽水策略及監測策 略進行規劃,其解題之關鍵如下所示:

1.抽水策略及監測策略應包含井網設計

過去同時考量抽水與監測之整合規劃的相關研究中[Andricevic, 1990; Andricevic, 1993; Wagner, 1999],雖有考量監測井網之設計,但並沒有對抽水井 網及監測井網同時進行優選。井網設計為抽水策略及監測策略關鍵之一環,不管 是抽水井或監測井,一但設置後其井位就無法變動。尤其,對抽水策略而言,雖 然尚能隨時調整各抽水井之抽水量,但可能會因給定之抽水井網並非最佳,而造 成抽水操作成本增加或抽水後水位洩降過大之問題。另外,以成本角度考量,未 考慮設井之位置與成本,所獲得之答案事實上並非總成本(固定成本+操作成本) 之最佳解,而忽略設井成本之結果通常會導致設置過多之抽水井與某些井之抽水 量太小之缺點[McKinney and Lin, 1995]。

本研究為能考量完整之抽水策略及監測策略,以容量擴張之方式將井網設計 納入優選問題之中,以期能在即時操作過程中,重新調整設計抽水井網及監測井 網。

2.如何整合考量抽水策略及監測策略

抽水策略及監測策略整合規劃設計之關鍵,在於如何於給定監測策略下求得

最佳抽水策略。雖然應用 Dual control [Andricevic, 1990; Andricevic, 1993]能在給 定監測井網條件下,優選出動態抽水量,但此方法之最大限制在於求解過程需要 對目標函數取 3 次微分項,增加解題因難度,且若要考慮如水位下限或各抽水井 之抽水水量上、下限之不等號限制式,則只能以權重方式且至少須為 4 次方型態 考量於目標函數之中。相對的,Wagner[1999]之研究中,以監測井網優先設計, 配合監測井網及整治抽水量之疊代優選計算,在給定之抽水井網下,進行穩態抽 水量與監測井網之優選。抽水量與監測井網以上述疊代方式,分別由機率型限制 方式(Chance-constrained)抽水整治優選模式及監測井網優選模式得出。雖然而非 將抽水量與監測井網之設計整合於同一優選模式,但以機率型限制式建構優選問 題時,在目標函數及限制條件所受之限制較少。

考量問題之目標函數及限制條件更能符合真實情況,因此本研究以機率型限 制式建構地下水量即時管理模式,於目標函數中考量抽水與監測之設井成本與操 作成本,再配合適當優選工具,同時進行抽水策略及監測策略之最佳化。

3.如何求解同時考量抽水策略及監測策略之優選問題

本研究問題所優選之決策變數包含:容量擴張型態之抽水井網及監測井網, 與時變抽水量。對於前者,其決策變數乃是不同的井網設計方案,其中包含井的 數目與各自之位置,基本上乃是是不連續型的變數,而對此種決策變數型態的優 化問題,傳統以微分為基礎的數學規劃方法並不能直接應用,而遺傳演算法則相 當適合解此類問題。至於在給定抽水井網及監測井網下各抽水井時變抽水量之優 選,基本上乃屬於動態規劃問題之範疇,雖然微分動態規劃一般上為處理此類較 有效之優選工具,惟若以微分動態規劃解此之優選問題,則需將遭遇類似以 Dual control [Andricevic, 1990; Andricevic, 1993]解題時所面對之因難。因此,為簡化演 算法之複雜度,本研究將以退火演算法優選時變抽水量。所以,為了能求解同時 考量抽水策略及監測策略之優選問題,本研究將以遺傳演算法優選容量擴張型態 之抽水井網及監測井網,再以退火演算法優選時變抽水量。類似遺傳演算法及退 火演算法這類啟發式演算法,在於其容易應用於各種類型的問題。

經由上述之考量,本研究利用機率型限制式建立考量抽水策略與監測略之地

下水即時管理模式。其中以遺傳演算法與退火演算法,分別優選具備容量擴張型 態之井網及離散化時變抽水量,並以卡門濾波進行地下水模擬模式即時更新及水 位誤差推估。遺傳演算法為優選之主體架構,每條染色體代表容量擴張型態之抽 水與監測井網,且在每條染色體給定下,以退火演算法進行時變抽水量優選。並 利用遺傳演算法本身隱平行之特性,以分配染色體為計算量切割,在平行電腦大 量計算資源下,克服所需大量計算。



1.4 數學符號定義

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。

1.地下水系統與抽水策略相關符號

Ω :	地下水管理區域中,所有可能設抽水井井位之集合
<i>I</i> :	地下水管理區域中,設置抽水井井位置之集合(為Ω之子集合)
<i>i</i> :	代表某一設置抽水井井位置
h_t :	時刻t之地下水位真值
a_1 :	設置抽水井單位長度成本
<i>a</i> ₂ :	抽水井單位抽水成本,表示成 $a_2 = \rho g \times a_3 \times \Delta t$
<i>a</i> ₃ :	單位用電功率成本
ho :	水密度 ES A
<i>g</i> :	重力加速度
u_{t}^{i} :	抽水井i於時刻t之抽水量396
D^i :	為在i點抽水井設井深度
L':	在 i 點之地表高程。
$L^i - \frac{h^i_{r-1} + h_i}{2}$; t- : 抽水揚程
T :	地下水系統轉換函數
d_t :	時刻t之用水需
u_{\min} :	每一口抽水井的抽水下限
$u_{\rm max}$:	每一口抽水井的抽水上限
$h_{ m min}$:	水位下限
Pr <i>ob</i> []	: 機率
E[] :	期望值
<i>sd</i> [] :	標準偏差

$F^{-1}\{ \}$		標準常	宫熊分佈	累積機率	函數之	反函數
---------------	--	-----	------	------	-----	-----

- π : 可靠度(reliability level)
- \hat{K} : 推估K值
- P_{KK} : K值之共變異矩陣, $E[(K-\hat{K})(K-\hat{K})]$
- D_t^h : 時刻 t 水位對時刻 t +1 水位之敏感度矩陣
- D_t^K : K值對時刻t+1水位之敏感度矩陣
- h; : 時刻t之地下水模式模擬水位

2. 監測系統策略相關符號

3.時	間相關	符號	
	D^{j}	:	為在 j 點監測井設井深度
	j	:	於目標函數中,代表某一設置監測井井位置
	J	:	地下水管理區域中,設置監測井井位置之集合(為Φ之子集合)
	Φ	:	地下水管理區域中,所有可能設監測井井位之集合
	e_2	:	監測成本(NT/口/次)
	e_1	:	設置監測井單位長度成本

- - P; : 為在i點設抽水井之容量擴張設階段,其中每一個容量擴張間距 (Wells installing interval)可分為n個時刻,容量擴張間距與時刻之 示意如圖 2.1-1 所示。
 - P_i : 為在 j 點設監測井之容量擴張設階段
 - Δt : 為時刻 t 至時刻 t+1 之時間間隔。
 - *R* : 每個時刻利率值

4.卡門濾波相關符號

- *w*, : 系統噪音(System noise)
- *y_t* : 監測資訊
- O_t : 監測矩陣(Measurement matrix)
- *x*_t : 監測參數真值

- *v_t* : 監測誤差
- Q₁ : 系統噪音共變異矩陣

*R*_t : 監測誤差共變異矩陣

- *G*_t : 卡門權重
- $P_{hh}(t|t-1)$: 系統預測之時刻^t水位 (\bar{h}_t) 之共變異矩陣, $E[(h_t \bar{h}_t)(h_t \bar{h}_t)]$
- \hat{h}_{t} : 時刻 t 經過水位監測值修正之水位
- h_t : 時刻t之系統預測水位



第二章 地下水量即時管理模式發展

本研究發展之地下水量即時管理模式之目標函數為使抽水策略與監測策略 之總成本為最小,其中抽水井網與監測井網為以容量擴張之方式逐漸設置。由於 所求解問題為考慮監測資訊之地下水量即時管理,因此發展之模式為可由因應新 資訊之各時刻抽水策略與監測策略重新規劃設計,與地下水系統參數及水位之重 新推估二部份所組成。即管理模式除了優選新策略之外,尚需利用即時監測資訊 更新地下水系統之描述。以下本章內容將對所考慮問題之解題架構分析與演算流 程作詳細說明。

2.1 地下水量即時管理模式問題定義

地下水量即時管理模式是以考慮抽水及監測之總成本最小為目標函數,而總 成本則包括抽水與監測之設井成本與操作成本,且考慮利率影響下之總成本現 值。抽水井及監測井為以容量擴張方式逐步設井,因此其規劃上需求得不同階段 之最佳設井位置及井數,本研究且進一步考量在操作過程中每個時刻即時隨新的 資訊,對後續階段之設井位置及井數(即原先已規劃但尚未設置之抽水井及監測 井)進行即時調整。

前述地下水量即時管理模式之限制條件,可分為等號及不等號二類限制式, 其中等號限制式包含:地下水系統轉換函數及監測式程式;而不等號限制式包含: 地下水位下限、滿足需水量與各抽水井能力上、下限。由於所解問題包含監測方 程式,因此可經由監測資訊可對地下水模擬模式進行更新。而考量地下水位下限 之目的是希望抽水所引致之水位下降不致危害環境生態,而抽水能力則是滿足一 般工程對抽水井之要求。

另本研究將以地下水位之機率型限制式考量地下水模擬模式之不確定性,整個問題之數學表示式如下所示:

目標函數

$$\begin{split} \min_{\left\{ \left\{ I \subset \Omega, u_{t}^{i}(I), i \in I, t=1, \dots, N \right\} \right\}} & Z_{\alpha} \\ Z = \sum_{i \in I} \left\{ a_{1} D^{i} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{i}-1)}} + \sum_{t=n(P_{i}-1)+1}^{N} \left[a_{2} u_{t}^{i} \left[L^{i} - \frac{h_{t-1}^{i} + h_{t}^{i}}{2} \right] \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \\ &+ \sum_{j \in J} \left\{ e_{1} D^{j} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{j}-1)}} + \sum_{t=n(P_{j}-1)+1}^{N} \left[e_{2} \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\}$$

$$(2.1-1)$$

限制條件

$$h_t = T(h_{t-1}, u_t^i, t, I) + w_t, \quad t = 1, 2, ..., N$$
 (2.1-2)

 $y_t = O_t(J)x_t + v_t, \quad t = 1, 2, ..., N$ (2.1-3)

$$\sum_{i \in I} u_t^i \ge d_t, \quad t = 1, 2, \dots, N$$
(2.1-4)

$$u_{\min} \le u_{t}^{i} \le u_{\max}, \quad t = 1, 2, ..., N, I \subset \Omega$$
 (2.1-5)

Pr
$$ob[h_t \ge h_{\min}] \ge \pi$$
, $t = 1, 2, ..., N$ (2.1-6)
:

其中:

- Z_{α} : 為總成本(Z)於累積機率為 α 時之值
- Ω : 地下水管理區域中,所有可能設置抽水井位置之集合
- Ι: 地下水管理區域中,設置抽水井位置之集合(為Ω之子集合)
- *i* : 代表某一設置抽水井位置
- : 地下水管理區域中,所有可能設置監測井位置之集合
- J : 地下水管理區域中,設置監測井位置之集合(為Φ之子集合)
- *j* : 代表某一設置監測井位置
- P_i: 為在i點設抽水井之容量擴張設階段,其中每一個容量擴張間距
 (Wells installing interval)可分為n個時刻,容量擴張間距與時刻之
 示意如圖 2.1-1 所示。
- P_i : 為在 j 點設監測井之容量擴張設階段

- R : 每個時刻利率值
- Dⁱ : 為在i點抽水井設井深度
- u': 抽水井i於時刻t之抽水量
- *a*₁ : 設置抽水井單位長度成本
- a_2 : 抽水井單位抽水成本,表示成 $a_2 = \rho g \times a_3 \times \Delta t$
- a3 : 單位用電功率成本
- ρ : 水密度
- g : 重力加速度
- Δt : 為時刻 t 至時刻 t +1之時間間隔(Time step)

抽水揚程

29

- L^{i} : ti : ti : ti :
- ht : 時刻t之地下水位真值

:

- $L^i \frac{h^i_{t-1} + h^i_t}{2}$
- e₁ : 設置監測井單位長度成才
- e₂ : 監測成本(NT/口/次)
- D^j : 為在 j 點監測井設井深度
- T: 地下水系統轉換函數
- *w_t* : 系統噪音(System noise)
- *Y_t* : 監測資訊
- O_t : 監測矩陣(Measurement matrix)
- *x_t* : 監測參數真值
- *V_t* : 監測誤差
- Prob[] : 機率值
- π : 水位限制條件之可靠度(Reliability level)
- d_t : 時刻t之用水需
- u_{min} : 每一口抽水井的抽水下限
- u_{max} : 每一口抽水井的抽水上限
- h_{min}: 水位下限



圖 2.1-1 容量擴張設井間距與時刻示意圖

目標函數如式(2.1-1)所示,為考率利率下之總成本現值最小,可分為二大部 份,第一部份為抽水之設井成本及操作成本,第二部份為監測之設井成本及操作 成本。由於本研究考量地下水水系統不確定性,使得為水位(h_i)為隨機變數。因 所考量之目標函數包含了抽水揚程計算($L^i - \frac{h_{i-1}^i + h_i^i}{2}$),使得原目標函數(Z)亦為 一隨機變數,惟隨機變數本身無法直接優選,一般最常見的為優選其期望值。本 研究為同時降低原總成本(Z)之期望值及Z本身之不確定性(標準偏差),乃以最小 化 Z_{α} (總成本Z於累積機率為 α 時之值)為目標,由圖 2.1-2 所示,減小 Z_{α} 之值可 有兩種方式;一為減小其平均值,另一為減小標準偏差使機率分佈更中。



而由式(2.1-1)~式(2.1-6)所組成之序率優選問題之決策變數包含了: 抽水與 監測之容量擴張設井方案(包含不同階段之設井位置及井數),以及各抽水井之時 變抽水量。亦即式(2.1-1)容量擴張下之抽水井設置方案(I)及監測井設置方案(J) 中,每個設置方案代表了一種隨階段擴增之井網設計,而每個井網設計包含各階 段之設井位置及井數。

式(2.1-2)為地下水系統轉換函數,其中系統噪音(w,)代表地下水模式之不確 定性。換言之,就是系統方程式之誤差項,當一地下水模式模擬真實情況時,必 有其假設之簡化條件及輸入參數之誤差,而會造成模式上之誤差,此乃不確定性 之來源之一。本研究中目前假設地下水模式之誤差主要乃由透水係數(K值)之推 估誤差所造成。

式(2.1-3)為監測方程式,監測矩陣(O_t)代表各時刻之監測位置, y_i為監測位 置之監測資訊,於地下水量問題中y_i可為水位或水文地質參數之監測值, x_i為 監測參數之真值, v_i為監測誤差,並假設w_i及v_i為期望值均為零且相互獨立之 白噪音 (White noise)。式(2.1-4)為每一個時刻之需水量限制,式(2.1-5)為抽水井 抽水能力限制條件,式(2.1-6)為地下水位之機率型限制條件,其概念如圖 2.1-3 所示。





(z:標準常態隨機變數,平均值為0,標準偏差為1) 圖 2.1-3 水位之機率型限制條件示意圖

式(2.1-6)為水位之機率型限制條件若假設其機率分佈為常態分佈(Normal distribution),則式(2.1-6)可表示為[Wagner and Gorelick, 1987]:

$$\Pr{ob}\left\{z = \frac{h_t - E[h_t]}{sd[ht]} \ge \frac{h_{\min} - E[h_t]}{sd[h_t]}\right\} \ge \pi$$
(2.1-7)

得

$$\frac{h_{\min} - E[h_t]}{sd[h_t]} \le F^{-1}(1 - \pi)$$

$$(2.1-8)$$

$$E[h_t] + F^{-1}\{1 - \pi\} sd[h_t] \ge h_{\min}$$
(2.1-9)

$$E[h_t] - F^{-1}\{\pi\} sd[h_t] \ge h_{\min}$$

$$E[h_t] - F^{-1}\{\pi\} sd[h_t] \ge h_{\min}$$

$$E[h_t] = h_{\min}$$

其中:

z:標準常態隨機變數,平均值為0,標準偏差為1 E[]:期室值 sd[]:標準偏差 $F^{-1}{}$:標準常態分佈累積機率函數之反函數 $E[h_i] - F^{-1}{\pi}sd[h_i]$:信賴水位,在相同之 $E[h_i]$ 及 $sd[h_i]$ 條件下,信賴 水位($E[h_i] - F^{-1}{\pi}sd[h_i]$)受可靠度(π)影響,其值需大於水位下限(h_{\min})。

式(2.1-10)與一般之定率型水位限制條件不同,其意義為相同可靠度(π)之條 件下,若地下水模擬模式不確定性愈高,即sd[h,]值愈大,則水位限制式會變得 愈嚴苛,對抽水策略之影響為需設置更多之抽水井,以避免因抽水井過少,抽水 集中而造成較大之水位洩洚。相反地,若地下水模擬模式不確定性低,即sd[h,]值 小,則水位限制式會變得寬鬆,對抽水策略而言,則可設置較少之抽水井數,以 節省抽水設井成本。但為了降低地下水模擬模式不確定性,則需更多之監測資 訊,以更新地下水模擬模式,也就是需設置更多監測井數,如此將會增加監測成 本。

經由水位之機率型限制條件定率化推導後得出之式(2.1-10)後,可再進行目 標函數之定率化。由於總成本(Z)中只有水位為隨機變數,且先前已假設水位之 機率分佈為常態分佈,因此總成本(Z)之機率分佈亦為常態分佈,原目標函數(Z) 對應之Z。可表示為:

$$Z_{\alpha} = E[Z] + F^{-1}\{\alpha\} sd[Z]$$

$$= \sum_{i \in I} \left\{ a_{1}D^{i} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{i}-1)}} + \sum_{t=n(P_{i}-1)+1}^{N} \left[a_{2}u_{t}^{i} \left[L^{i} - \frac{(E[h_{t-1}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\} sd[h_{t-1}^{i}]) + (E[h_{t}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\} sd[h_{t}^{i}])}{2} \right] \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\}$$

$$+ \sum_{j \in J} \left\{ e_{1}D^{j} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{j}-1)}} + \sum_{t=n(P_{j}-1)+1}^{N} \left[e_{2} \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\}$$

(2.1-11)

在固定 α 值之條件下,若要降低目標函數 (Z_{α}) 之方式有二,一為降低E[Z]; 另為降低sd[Z],圖 2.1-4(a)為降低E[Z]之示意,而圖 2.1-4(b)為降低sd[Z]之示 意。換言之,本研究問題之目標函數 (Z_{α}) ,不僅考量總成本期望值之最小化,亦 考量了降低推估總成本之不確定性。

綜合上述,式(2.1-10)及式(2.1-11)中信賴水位($E[h_t] - F^{-1}\{\pi\}sd[h_t]$)不僅需大 於水位下限,同時也是目標函數中計算抽水揚程之依據。亦即信賴水位 ($E[h_t] - F^{-1}\{\pi\}sd[h_t]$)反應了監測資訊之價值(影響抽水之成本),對監測系統而 言,優選模式則將在監測資訊價值與監測成本間取得最佳平衡[Wagner, 1999]。



圖 2.1-4(a) 降低E[Z]以減少目標函數 (Z_{α}) 示意圖



圖 2.1-4(b) 降低標準偏差以減少目標函數(Z_{α})示意圖

雖然目標函數及水位限制式皆已表達為對應之定率型式,惟於式(2.1-2)及 (2.1-3)之中尚包含隨機變數(Random variable) w,與v,,因此仍需進一步處理才能 進行優選。

式(2.1-2)及(2.1-3)恰為一般序率系統中之系統方程式與觀測方程式,而卡門 濾波[Eigbe et al., 1998]能整合系統方程式(式 2.1-2)及監測方程式(式 2.1-3),得出 經由監測值更新後之水位及誤差。因此,本研究將以卡門濾波對狀態變數(*h_i*)之 期望值進行最佳推估,亦即以卡門濾波表達式(2.1-2)及(2.1-3)之定率型式,說明 如下:

$$E[h_t] = \mathrm{KF}(\mathrm{E}[h_{t-1}], u_t^i, t, I, y_t, O_t, Q_t, R_t), \quad t = 1, 2, \dots, N$$
(2.1-12)

其中:

Q₁ : 系統噪音共變異矩陣

R, : 監測誤差共變異矩陣

重整式(2.1-1)~式(2.1-6)之問題,表示如下:

$$\begin{cases} \min_{\{J \in \Phi, j \in J\}} Z_{\alpha} \\ Z_{\alpha} = E[Z] + F^{-1}\{\alpha\} sd[Z] \\ = \sum_{i \in I} \left\{ a_{1}D^{i} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{i}-1)}} \\ + \sum_{i=n(P_{i}-1)+1}^{N} \left[a_{2}u_{i}^{i} \left[L^{i} - \frac{(E[h_{i-1}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\} sd[h_{i-1}^{i}]) + (E[h_{i}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\} sd[h_{i}^{i}])}{2} \right] \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \\ + \sum_{j \in J} \left\{ e_{1}D^{j} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{j}-1)}} + \sum_{i=n(P_{j}-1)+1}^{N} \left[e_{2} \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\}$$

(2.1-13)



 $E[h_t] - F^{-1}\{\pi\} sd[h_t] \ge h_{\min}, \quad t = 1, 2, ..., N$ (2.1-17)

其中 $sd[h_t]$ 可表示為:

 $sd[h_t] = f(O_t(J), u_t^i, I, J), \quad t = 1, 2, ..., N, I \subset \Omega, J \subset \Phi$ (2.1-18)

由式(2.1-18)可知 sd[h,]項將同時受抽水策略及監測策略所影響,由卡門濾波 更新水位之共變異矩陣得出。原式(2.1-1)~式(2.1-6)之問題,在經由卡門濾波對式 (2.1-2)及(2.1-3)進行定率化後,由式(2.1-13)~式(2.1-17)所組成之即時管理模式優 選問題,於每一個時刻將包含了更新、規劃、操作及之三個程序(如圖 2.1-5 所示)。

在某一時刻t=k之更新、規劃及操作程序說明如下:
1.参數推估及系統狀態更新

以監測值(y_k)進行參數推估與狀態變數(h_k)更新,即求解式(2.1-14),其求解 過程詳見 2.3 節。

$$E[h_t] = \mathrm{KF}(\mathrm{E}[h_{t-1}], u_t^i, t, I, y_t, O_t, Q_t, R_t), \quad t = k$$
(2.1-19)

2. 抽水策略及監測策略之規劃設計

以經由時刻t = k之監測值 (y_k) 更新後之地下水模擬模式,對後續時刻 $(t = k + 1 \sim N)$ 之抽水策略 $(u_{k+1} \sim u_N)$ 及監測策略 $(O_{k+1} \sim O_N)$ 重新進行規劃調整,對某一時刻k規劃模式數學式之定義如下:

$$\begin{split} & \min_{\substack{\{l = \Omega, u_{i}^{i}(l), i \in l, l \neq k+1, \dots, N\} \\ \{J = \Phi, j \in J\}}} Z_{\alpha} \\ & Z_{\alpha} = \sum_{\substack{i \in I, \\ n(p_{i}-1) < k}} \left\{ \sum_{t=k+1}^{N} \left[a_{2}u_{t}^{i} \left[L^{i} - \frac{(E[h_{t-1}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\}sd[h_{t-1}^{i}]) + (E[h_{t}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\}sd[h_{t}^{i}])}{2} \right] \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \\ & + \sum_{\substack{i \in I, \\ n(p_{i}-1) < k}} \left\{ \sum_{t=k+1}^{N} \left[e_{2} \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \\ & + \sum_{\substack{i \in I, \\ n(p_{i}-1) > k}} \left\{ a_{1}D^{i} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{i}-1)}} + \sum_{t=n(p_{i}-1)+1}^{N} \left[a_{2}u_{t}^{i} \left[L^{i} - \frac{(E[h_{t-1}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\}sd[h_{t-1}^{i}]) + (E[h_{t}^{i}] - F^{-1}\{\alpha\}sd[h_{t}^{i}])}{2} \right] \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \\ & + \sum_{\substack{j \in J, \\ n(p_{j}-1) \geq k}} \left\{ e_{1}D^{j} \frac{1}{(1+R)^{n(P_{j}-1)}} + \sum_{t=n(p_{j}-1)+1}^{N} \left[e_{2} \frac{1}{(1+R)^{t}} \right] \right\} \end{split}$$

(2.1-20)

限制條件

$$E[h_t] = \mathrm{KF}(\mathrm{E}[h_{t-1}], u_t^i, t, I, y_k, O_t, Q_t, R_t), \quad t = k+1, \dots, N$$
(2.1-21)

$$\sum_{i \in I} u_t^i \ge d_t, \quad t = k + 1, \dots, N$$
(2.1-22)

$$u_{\min} \le u_t^i \le u_{\max}, \quad t = k + 1, ..., N, I \subset \Omega$$
 (2.1-23)

$$E[h_t] - F^{-1}\{\pi\} sd[h_t] \ge h_{\min}, \quad t = k+1, \dots, N$$
(2.1-24)

其中

$$sd[h_t] = f(O_t(J), u_t^i, I, J), \quad t = k+1, ..., N, I \subset \Omega, J \subset \Phi$$
 (2.1-25)

而由式(2.1-20)~式(2.1-24)所組成規劃優選問題之決策變數包含了:後續時刻 ($t = k + 1 \sim N$)之抽水與監測之容量擴張設井方案(包含不同階段之設井位置及井 數),以及各抽水井之時變抽水量。因此上述規劃模式之目標函數(式(2.1-20)), 只需考量後續時刻之抽水策略與監測策略總成本現值。若於時刻k之前已設置之 抽水井及監測井,只需考量其操作成本,即式(2.1-20) 第1、2項所代表;而於時 刻k之後所設之井,也就是後續容量擴張期距再設置之井(即 $n(p_i - 1) \ge k$ 與 $n(p_j - 1) \ge k$),則需考量其設井成本與操作成本,即式(2.1-20) 第3、4項所代表。

而式(2.1-21)代表之卡門濾波推估式,由於尚未有後續時刻之監測值可參 考,因此只需以經由時刻t=k之監測值y_k更新後之地下水模擬模式進行模擬, 並以時刻t=k更新後之水位作為其初始條件,以模擬水位作為後續時刻之水位 推估值(E[h_i],t=k+1~N)。對於式(2.1-22)~式(2.1-24)分別所代表量後續時刻 (t=k+1~N)之需水量、各抽水井上下限及水位下限。對於時刻t=k而言,後 續時刻之監測值還無法取得,因此尚無有後續時刻之監測值可用來更新水位,但 經由卡門濾波仍可計算出經更新後之水位標準偏差(sd[h_i])。式(2.1-25)代表之意 義,為後續時刻之水位標準偏差(sd[h_i])同時受到抽水策略及監測策略之影響。

本研究以嵌入法(Embedding method) [Gorelick,1983],由 MODFLOW 2000 計算水位與其敏感度矩陣(Sensitivity matrix),並以克利金法推估監測井網對應之 參數推估誤差,再由一階二矩法(FOSM)計算地下水模式不確定性,配合卡門濾 波即可推求各時刻更新後之水位標準偏差(*sd*[*h*,])。

綜合上述所言,各限制條件處理方式進行說明如下:式(2.1-21)代表經由監測 值(y_k)更新後之地下水模擬模式,乃以 MODFLOW 2000 進行建模。有關於抽水

27

量需滿足之需水量(式 2.1-22)與各抽水井抽水量上下限(式 2.1-23),則於退火演算 法中考量。式(2.1-24)代表之水位機率型限制條件,則採用懲罰函數方法(Penalty function method),乘上一個懲罰因子(Penalty factor),合併於目標函數中考量。 式(2.1-25)之 sd[h,],則由卡門濾波計算得出。

經由上述規劃問題定義及解題構想說明,式(2.1-20)~式(2.1-24)為一定率化可 解之優選問題,下一節將就此規劃模式之解題演算流程及使用工具詳細說明。

3以規劃之抽水策略及監測策略進行操作

再以優選抽水策略進行抽水井設置及抽水 (u_{k+1}) ,並依規劃之監測策略,於 監測位置 (O_{k+1}) 設置監測井,對抽水後之真實水位 (h_{k+1}) 進行監測,得到時刻 t = k + 1之監測值 (y_{k+1}) 。

各時刻經由上述更新、規劃及操作及之三個程序,即可完整求解式(2.1-13)~ 式(2.1-17)所組成之即時管理模式優選問題。



圖 2.1-5 地下水量即時管理模式架構示意圖

2.2 地下水量規劃模式發展

經由 2.1 節之問題定義及解題架構分析,式(2.1-13)~式(2.1-17)代表之地下水 量即時管理模式,可由參數推估與系統狀態更新及地下水量規劃模式之二部份問 題組成,本節(2.2 節)將先對地下水量規劃模式之演算流程進行說明。

由式(2.1-20)~式(2.1-24)所組成規劃優選問題之決策變數包含了:後續時刻 (t=k+1~N)之抽水與監測之容量擴張設井方案(包含不同階段之設井位置及井 數),以及各抽水井之時變抽水量。本研究以遺傳演算法為主架構,優選抽水與 監測之容量擴張設井方案,再以退火演算法優選時變抽水量。

在本研究中,目標函數包含抽水策略與監測策略之固定成本與操作成本現 值。雖然抽水與監測之容量擴張設井方案乃是不連續型的變數型態,遺傳演算法 中每一條染色體可以二位元編碼,很容易的表達某一抽水與監測之容量擴張設井 方案。根據每一染色體中抽水與監測設井方案中之設井位置、設井期程與數量可 計算抽水與監測之固定成本,且對每一抽水井方案,可再以退火演算法優選此方 案中各井之時變抽水量,計算出抽水操作成本。同時,對每一監測井方案,可由 各時刻之監測矩陣計算出各監測操作成本。96

以下將說明演算流程(圖 2.2-1)所應用之理論及工具:



1.以遺傳演算法優選容量擴張設井方案

遺傳演算法為一種隨機的搜尋過程,並應用自然界中淘汰和演化的觀念所發 展出的演化搜尋法。因此它可處理非凸函數、高度非線性或複雜型態之問題,且 有可能獲得全域之最佳解。遺傳演算法主要機制包含了複製(Reproduction)、交配 (Crossover)及突變(Mutation)等過程,其詳細之理論介紹請參考附錄A。以下將就 以遺傳演算法優選容量擴張設井方案之染色體編碼方式,及為節省計算量對染色 體進行篩選方式作一說明。

(1)設井方案編碼及初始族群之產生

應用遺傳演算法求解時,需先決定染色體編碼方式。就本研究之問題而言, 容量擴張設井方案與單純之設井編碼方式(即0代表不設井,1代表設井)不同處, 在於染色體編碼方式需包含設井位置及其設井時期,以圖2.2-2 為例,假設若有 一研究區域共有 21 個抽水候選井位,20 個監測候選井位,且考量有三個設井容 量擴張期距。則每個候選井位可以用 2 個位元(bit)表示,則每一條染色體皆為 82 個 0-1 二進位位元組成之字串,前 42 個位元(bit)代表抽水容量擴張設井方案,後 前 40 個位元(bit)代表監測容量擴張設井方案。解碼時根據每一條染色體上之編 碼。每一候選井位對應 4 種情形以 2 個位元(bit)表示,當其為 00 時代表此候選 井位不設井,01 代表在第 1 設井階段之初始時刻設井,10 及 11 代表在第 2 及第 3 設井階段之初始時刻設井。演算初始時以隨機的方式產生多條的染色體(設井方 案),每一組設井方案決定不同設井時期之設井位置與設井數目。

在演算中候選井位會隨著時間設井之佔用而變少,且剩餘之設井間距也會變 少。

(2)染色體篩檢

由於式(2.1-23)之總需水量及式(2.1-24)各抽水井之抽水量上、下限制條件之存在,為避免遺傳演算法之染色體所代表之設井方案無法滿足前述之限制,造成時變抽水量無解之情形,因此於優選時變抽水量前,必須檢核每一設井方案是否有解存在,即是否滿足最小抽水井數要求,抽水設井數量最小值可表示如下:

最小抽水設井數 = $\max(d_t)/u_{\max}$ (2.2-1)

一旦染色體不滿足上述限制,此染色體將被給予一個大的總成本值(相當小 之適合度值),且對應之抽水量優選過程將被省略,避免以退火演算法優選時變 抽水量時無法收斂。

31



圖 2.2-2 染色體解碼後對應於設井位置及設井階段示意圖

(3)計算各染色體之適合度值(Fitness)

對通過篩檢的染色體(設井方案),因其已決定抽水與監測井網之設井位置與 數目,配合設井單位成本及利率,即可計算出抽水與監測之設井固定成本現值。 對每個抽水井網可再由退火演算法,來求得其中各抽水井之最佳時變抽水量,及 其抽水操作成本現值(詳見步驟 2.退火演算法優選時變抽水量)。

本研究假設每一口監測井設置時,即取得監測井位置之 K 值,並於後續時刻皆進行水位監測,因此由每次水位監測單位成本及各時刻之監測井數,可計算得出各時刻監測操作成本現值。

將上述之抽水策略及監測策略之設井固定成本現值加上操作成本現值,得出 總成本現值,最後再加上水位限制式之懲罰函數值(詳見步驟 6. 卡門濾波計算水 位誤差),即為此染色體(設井方案)之目標函數值。由於本研究為最小化目標函數 之問題,適合度函數則需由目標函數經適當的轉換而產生,因此以一極大值減去 目標函數值,即為此染色體(設井方案)之適合度值(Fitness)。

(4)遺傳演算法收斂條件判斷

本研究問題設定收斂條件為滿足繁衍代數,且連續至少5代最佳染色體之適 合度不變。若仍未收斂,則再進行演化機制包括染色體的複製、交配及突變,產 生出更佳的下一代染色體群。在複製選取時,使用了菁英政策,如此不僅能夠確 保最好的染色體不會被遺漏,亦使得每代的最佳解不會造成震盪的情形而不能收 斂。另外,為節省計算量,亦採用筆記本法,減少相同染色體之計算量。筆記本 法原理為,各個染色體為獨立的個體而且相同的染色體對應的適合度也相同,因 此在程式開始計算時,就開始記錄每條染色體以及其對應的適合度,在產生子代 的染色體後,比對之前已經計算過的染色體,若染色體之編碼完全相同,則直接 輸出其適合度,不再對其做適合度計算。

2. 退火演算法優選時變抽水量

退火演算法又可稱為模擬退火演算法,屬於最常見啟發式演算法之一。退火 演算法是應用溫度來調整接受較差結果的機率,藉由反覆的進行求解,直至達到 均衡的狀態。退火演算法在演算過程中,若搜尋到較佳之鄰近解,則予以接受; 反之,若搜尋到較差之鄰近解,被接受與否為某一機率,因此本演算法具有跳脫 局部最佳解,進而求取全域最佳解之可能性。關於退火演算法詳細之理論介紹請 參考附錄 B。以下將就本研究以如何運用退火演算法優選時變抽水量進行說明:

(1)決定變數數目及產生初始狀態(解)

由於本研究問題之井網為容量擴張型態,因此各時刻之抽水井數可能會不 相同,所以各時刻待優選之抽水量數目也會不同。所有時刻抽水井數之總合,即 為待優選之時變抽水量變數數目,也就是退火演算法之求解維度。

考量待求解之時變抽水量之變數數目不少,本研究為簡化問題,將連續之 解空間範圍離散化成不連續,換言之,將抽水量上、下限範圍(式 2.2-4)切割數個 等間距抽水量,而各時刻之抽水量只能在此限個間距內選擇。同時,為決定退火

33

演算法之初始狀態(即各時刻時變抽水量之初始解),將由此有限個抽水間距中, 選出最接近且不小於各時刻平均抽水量(需水量/抽水井數)之抽水量為初始狀態。

另外,為增加問題設定之彈性及減少計算量,抽水期距(Pumping period)與 模擬時距(Time step) 可不一致,其可介於設井間距(Wells installing interval)與模 擬時距之間(如圖 2.2-3 所示)。



退火演算法中,隨著溫度降低不斷搜尋新的狀態(解),狀態之好壞則以狀態 能量(熵, Entropy)為代表。在本研究問題中,能量函數即為抽水操作成本現值, 加上水位限制式之懲罰函數值(詳見步驟 5.卡門濾波計算水位誤差)。經由狀態能 量(熵)之計算,即可判斷此狀態(解)之好壞與否。本研究利用 MODFLOW 2000 根據時變抽水量模擬各時刻水位值(詳見步驟 3. MODFLOW 2000 計算水位及敏 **感度矩陣**)及計算抽水揚程,再配合抽水單位成本得出抽水操作成本。

(3)取得新的鄰近狀態與判斷接受與否

為確保新的鄰近狀態(解)符合抽水量上、下限及滿足各時刻需水量之限制條 件,若隨機產生之鄰近狀態,不在抽水量上下限範內或不滿足各時刻需水量,則 再重新隨機產生,直到新的鄰近狀態位於合理解空間範圍內。

以某時刻 t 為例,若此時刻之抽水井網只包含二口抽水井,當由 $(u_{t}^{1}, u_{t}^{2})^{o}$ 隨 機產生新的鄰近狀態 (u_t^1, u_t^2) 時,因 (u_t^1, u_t^2) 無法满足時刻t之需水量,因此須再 重新隨機產生(u¹,u²)"(如圖 2.2-4 所示),直到各井抽水量位於上、下限範圍(式 2.2-4)且滿足時刻^t之需水量(式 2.2-3)。重複上述程序,直到各時刻各井之抽水量 皆位於解空間範圍內,如此才完整的產生新的鄰近狀態。在產生新的鄰近狀態 後,即可根據能量變化,決定是否接受新的鄰近狀態。



圖 2.2-4 隨機產生新的鄰近狀態示意圖

(4) 退火演算法收斂條件判斷

退火演算法要满足的收斂條件為溫度必須降至最終溫度以下,除此之外, 為避免過多之計算時間,本研究問題設定最大疊代次數,若滿足最大疊代次數, 則中止退火演算法之演算。

3.MODFLOW 2000模擬水位及計算敏感度矩陣

本研究以嵌入法利用MODFLOW 2000(Harbaugh et al., 2000; Hill et al., 2000) 模擬地下水位,及計算K值對水位之敏感度矩陣。MODFLOW是美國地質調查局 (U.S. Geological Survey)發展之地下水模擬程式,該程式可求解二維及三維之飽 和層地下水流問題。MODFLOW 2000 與之前版本最大不同處在於,MODFLOW 2000 除了能進行模擬地下水流 (Ground-water flow process),也能進行敏感度分析 (Sensitivity process)與參數推估 (Parameter-estimation processes)。關於 MODFLOW 2000 求解之差分式之推導,請參考附錄C。

(1)模擬地下水位

以 MODFLOW 2000 建構問題之地下水系統方程式(式 2.1-22),並以其地下 水流處理程序(Ground-water flow process),配合退火演算法產生之時變抽水量, 抽水後之模擬地下水位,以供計算抽水揚程,同時亦為水位機率型限制條件 (Chance constraint)(式 2.1-25)之推估水位 *E*[*h*,]之用。

(2)計算K值對水位之敏感度矩陣

以 MODFLOW 2000 之敏感度分析處理程序(Sensitivity process),配合退火 演算法產生之時變抽水量,計算 K 值對水位之敏感度矩陣,此敏感度矩陣將作 為推估 MODFLOW 2000 地下水模式不確定性之用。

4. 克利金法(Kriging method) 推估 K 值誤差

根據步驟 1.遺傳演算法產生之染色體(設井方案),因其已決定監測井網(包括 各設井時期之設井位置與設井數目),亦即決定了各時刻之監測矩陣。本研究假 設地下水模擬模式之不確定性,主要由K值之不確定性造成。而克利金法(Kriging method)能在不需要有監測值之情況下,計算出監測矩陣相對應之K值推估誤 差。本研究利用使用 Geostatistical Software Library (GSLIB) (Deutsch and Journel, 1992)發展之克利金法程式 KTB3D,計算各時刻監測井網對應之K值推估誤差 共變異矩陣(P_{KK})。關於克利金法詳細之介紹,請參考附錄 D。

5.卡門濾波(Kalman filtering)推估更新後之水位誤差

卡門濾波能在沒有監測值情況下,評估監測策略對水位推估誤差之影響,推 估出各時刻考量監測值更新後水位之標準偏差(*sd*[*h*,])。本研究以一階二矩法 (FOSM)[Dettinger and Wilson, 1981; Andricevic, 1993]推求地下水模式之不確定 性,再由卡門濾波推估更新後之水位誤差,其推估式如下所示:

$$P_{hh}(t \mid t-1) = A_t P_{hh}(t-1 \mid t-1) A_t^T + D_{t-1}^K P_{KK} D_{t-1}^{K^T}$$
(2.2-2)

$$G_{t} = P_{hh}(t \mid t-1)O_{t}^{T} \left[O_{t}P_{hh}(t \mid t-1)O_{t}^{T} + R_{t}\right]^{-1}$$
(2.2-3)

$$P_{hh}(t \mid t) = [I - G_t O_t] P_{hh}(t \mid t - 1)$$
(2.2-4)

其中

$$P_{hh}(t|t)$$
 : 經過水位監測值(y_t^h)更新後水位(\hat{h}_t)之共變異矩陣 ,

 $E[(h_t - \hat{h}_t)(h_t - \hat{h}_t)]$
 $P_{hh}(t|t-1)$
 : 糸統預測之時刻^t水位(\hat{h}_t)之共變異矩陣 ,

 P_{KK}
 : K值之共變異矩陣 ,

 P_{KK}
 : K值之共變異矩陣 ,

 P_t^h
 : 時刻 t 水位對時刻 t +1 水位之敏感度矩陣

 D_t^K
 : K值對時刻 t +1 水位之敏感度矩陣

 A_t
 : 即 $[A_{1,t}]^{-1}A_{2,t}$ (請參考附錄 C)

 Q_t
 : 監測矩陣(Measurement matrix)

 R_t
 : 監測誤差共變異矩陣 ES

 G_t
 : 卡門權重

 I
 : 單位矩陣

由式(2.2-10)推求出之 P_{hh}(t)t),取其對角線上之平方根,即為各時刻考量監 測值更新後水位標準偏差(sd[h_i])。上述式(2.2-2)~式(2.2-4)之推導過程,請參考 下一節(2.3節)之式(2.3-5)~式(2.3-9)之內容。

2.3 參數推估及系統狀態更新

...

經由 2.1 節之問題定義及架構分析,式(2.1-13)~式(2.1-17)之地下水量即時管 理模式,可由地下水量規劃模式及參數推估與系統狀態更新之二部份組成。本節 (2.3 節)將對參數推估及系統狀態更新之流程進行說明。本研究所考慮問題中假 設每一口監測井之監測值包含:

(1)每一口監測井設置時,即所取得監測值,由於不考慮監測誤差,直接由 監測井位之真實K值作為監測K值。

(2)每一口監測井設置後,每一時刻皆進行水位監測。

因此,問題中之監測方程式(2.1-3),可表示由式(2.3-1)及式(2.3-2)所組成。

$$y_t^{\kappa} = O_t K + v^{\kappa} \tag{2.3-1}$$

 $y_t^h = O_t h_t + v_t^h \tag{2.3-2}$

式(2.3-1)代表時刻 t 之監測 K 值(y^K_t),並以,由各監測井於設置時所取得之 K 值所組成。式(2.3-2)代表時刻 t 之水位監測值。而v^K,v^h_t分別代表 K 值及水位 之監測誤差,於本研究問題中皆假設忽略不計。經由 K 值及水位之監測值,可 對進行 K 值推估及系統狀態更新,其更新流程如圖 2.3-1 所示,而各步驟說明如 下:



1.由監測K值 (y_t^K) 經由克利金法更新全區格網之K值 (\hat{K})

根據時刻t之監測井位置及監測 K 值 (y_t^K) ,經由 GSLIB (Deutsch and Journel, 1992)克利金法程式 KTB3D,推估全區所有格網之 K 值及推估誤差。

2.由更新之全區格網K值,經由MODFLOW 2000模擬時刻t之水位值 $(\overline{h_t})$

以 MODFLOW 2000,配合步驟 1.更新後之全區格網 K 值(*K̂*),根據優選出 之時刻 t 抽水量(u_t),模擬抽水後之水位值(*h̄*_t)。同時,計算 K 值對水位之敏感 度矩陣,此敏感度矩陣將作為推估 MODFLOW 2000 地下水模式不確定性之用。 3.由水位監測值(y^h_t),經由卡門濾波更新時刻t之水位值(*ĥ*_t)

利用時刻 t 之水位監測值(y^h_t),可經由卡門濾波對時刻 t 之水位進行更新,同時,亦可推估出更新後之水位誤差。當卡門濾波要應用於 MODFLOW 2000 時,

要先找出其系統方程式及監測方程式。系統方程式可由地下水流控制方程式的數值解(附錄 C 之式(C-8))而得,如下所示:

$$h_t = A_t h_{t-1} + B_t q_t + w_t \tag{2.3-3}$$

而由監測井之位置,可得水位監測方程式,如下所示:

$$y_t^h = O_t h_t + v_t^h \tag{2.3-4}$$

其中

$$h_t$$
 :
 時刻 t 之地下水位真值

 A_i
 :
 即 $[A_{1,t}]^{-1}A_{2,t}$ (請參考附錄式(C-8))

 B_t
 :
 即 $[A_{1,t}]^{-1}A_{3,t}$ (請參考附錄式(C-8))

 w_t
 :
 系統嗓音(System noise)

 y_t^h
 :
 水位監測值(Measurement head)

 O_t
 :
 監測矩陣(Measurement matrix)

 v_t^h
 :
 水位監測誤差(Measurement error)

 q_t
 :
 為已知之向量,即由源匯項所組成

有了系統方程式與監測方程式之後,可結合卡門濾波與 MODFLOW,而得 到以下之運算流程,詳細卡門濾波理論請參考附錄 E。

$$\overline{h_t} = A_t \stackrel{\wedge}{h_{t-1}} + B_t q_t \tag{2.3-5}$$

$$P_{hh}(t \mid t-1) = A_t P_{hh}(t-1 \mid t-1)A_t^T + Q_t$$
(2.3-6)

$$G_{t} = P_{hh}(t \mid t-1)O_{t}^{T} \left[O_{t}P_{hh}(t \mid t-1)O_{t}^{T} + R_{t}\right]^{-1}$$
(2.3-7)

$$\hat{h}_t = \bar{h}_t + G_t \left[y_t^h - O_t \bar{h}_t \right]$$
(2.3-8)

$$P_{hh}(t \mid t) = [I - G_t O_t] P_{hh}(t \mid t - 1)$$
(2.3-9)

其中

 h_t : 時刻t經過水位監測值修正之水位

 h_t : 時刻t之系統預測水位

 $P_{hh}(t|t)$: 經過水位監測值(y_t^h)更新後水位(\hat{h}_t)之共變異矩陣,

 $E[(h_t - \hat{h}_t)(h_t - \hat{h}_t)]$
 $P_{hh}(t|t-1)$: 系統預測之時刻t水位(\hat{h}_t)之共變異矩陣, $E[(h_t - \bar{h}_t)(h_t - \bar{h}_t)]$
 Q_t : 系統噪音共變異矩陣

 R_t : 監測誤差共變異矩陣

 G_t : 卡門權重

 I : 單位矩陣

因本研究之問題忽略監測誤差之影響,因此式(2.3-7)中之水位監測誤差共變 異矩陣(*R_t*)不計,但式(2.3-6)中之系統噪音共變異矩陣(*Q_t*)仍待推求。本研究參 考一階二矩法 (FOSM)推求式(2.3-6)。因本研究問題假設地下水模擬模式之不確 定性,只由K值之不確定性所造成,根據Dettinger and Wilson(1981)推導結果, 在無任何監測資訊進行即時更新情況下,非穩態地下水模式(Transient model)之 不確定性可由下式所示:

$$P_{hh}(t) \stackrel{1}{=} E[\{D_{t-1}^{K}(K-\hat{K}) + D_{t-1}^{h}(h_{t-1}-h_{t-1}')\}\{D_{t-1}^{K}(K-\hat{K}) + D_{t-1}^{h}(h_{t-1}-h_{t-1}')\}^{T}]$$

= $D_{t-1}^{h}P_{hh}(t-1)D_{t-1}^{h^{T}} + D_{t-1}^{h}P_{hK}(t-1)D_{t-1}^{K^{T}} + D_{t-1}^{K}P_{Kh}(t-1)D_{t-1}^{h^{T}} + D_{t-1}^{K}P_{KK}D_{t-1}^{K^{T}}$
(2.3-10)

其中

$$P_{KK}$$
: K值之共變異矩陣, $E[(K-\hat{K})(K-\hat{K})]$

 $P_{hK}(t)$: 時刻^t水位與K值之共變異矩陣, $P_{hK}(t) = P_{Kh}(t)^{T}$

 h'_{t} : 時刻t之地下水模式模擬水位

D^h: 時刻t水位對時刻t+1水位之敏感度矩陣

$$D_t^K$$
: K值對時刻 $t+1$ 水位之敏感度矩陣

由於式(2.3-10)為不考慮水位監測值更新下之水位誤差,本研究參考 Andricevic[1993]在有監測資訊進行水位更新之推估方式,則式(2.3-10)可改寫為:

$$P_{hh}(t \mid t-1) = D_{t-1}^{h} P_{hh}(t-1 \mid t-1) D_{t-1}^{h^{T}} + D_{t-1}^{h} P_{hK}(t-1 \mid t-1) D_{t-1}^{K^{T}} + D_{t-1}^{K} P_{kK}(t-1 \mid t-1) D_{t-1}^{K^{T}} + D_{t-1}^{K} P_{KK} D_{t-1}^{K^{T}}$$
(2.3-11)

本研究忽略 $P_{hK}(t-1|t-1)$ 之影響,則式(2.3-11)可進一步簡化為:

$$P_{hh}(t \mid t-1) = D_{t-1}^{h} P_{hh}(t-1 \mid t-1) D_{t-1}^{h^{T}} + D_{t-1}^{K} P_{KK} D_{t-1}^{K^{T}}$$
(2.3-12)

根據地下水系統方程式(式 2.3-3)及 D_{t-1}^h 定義,式(2.3-13)可表示如下:

$$P_{hh}(t \mid t-1) = A_t P_{hh}(t-1 \mid t-1)A_t^T + D_{t-1}^K P_{KK} D_{t-1}^{K^T}$$
(2.3-13)

經過上述之推導, $P_{KK} 與 D_{t-1}^{K}$ 可分別由步驟 1.克利金法及步驟 2.MODFLOW 2000 計算得知,因此即可由式(2.3-13)取代式(2.3-6),如此,即可計算時刻 t 更新後之水位值 (\hat{h}_{t}) ,以及相對應之水位推估誤差 $(P_{hh}(t|t))$ 。



第三章 平行化程式開發及運算平台

整個地下水量即時管理模式中,計算量集中於 2.2 節之地下水量規劃模式, 其是以遺傳演算法為優選之主體架構,每條染色體代表容量擴張型態之抽水與監 測井網,且在每條染色體給定下,以退火演算法進行時變抽水量優選。然而利用 遺傳演算法及退火演算法處理時變問題,將會產生計算量的問題。因此本研究利 用遺傳演算法本身隱平行之特性,以分配染色體為計算量切割,在平行電腦大量 計算資源下,克服所需大量計算。

3.1 地下水量規劃管理模式平行化

一般而言循序程式平行化之好壞,除了取決於循序程式的演算流程及特性 外,亦與所使用之平行電腦有關,平行運算詳細說明請參照附錄F。在此節中, 將針對平行運算與地下水規劃管理模式之結合做一說明,其平行化之步驟如下:

1.平行化架構規劃

由圖 3.1-1 之為地下水規劃管理模式之程式流程圖,可概括地看出,整個模 式分成三個主要部分,即資料的讀取、染色體迭代計算及結果輸出。在資料讀取 方面,此模式須開啟多個資料檔,包含含水層厚度、單位設井成本、各時期之需 水量、抽水量上下限、水位下限...等等。為求資料的一致性,及避免日後平行程 式的維護困難,所有 CPU 皆進行輸入資料檔之讀取,以減少 CPU 間之訊息傳遞。 而在產生染色體方面,選擇將編號為 0 的 CPU 來進行染色體之複製、交配、突 變,再利用集體通訊副程式將產生之整個族群染色體廣播(Broadcast)給各個 CPU。Broadcast 的用法如下:

CALL MPI_BCAST(DATA,ICONT,DATA_TYPE,IROOT,

MPI_COMM_WORLD, MPIERROR)

- ICOUNT 為要送出去的資料數量
- DATA_TYPE 為要送出去的資料類別

IROOT 為要送出去的 CPU 代號

MPI_COMM_WORLD MPI 內定的 (default) communicator,參與該 程式平行計算的全部 CPU 都是屬於同一個 communicator。屬於同一個 communicator 的

各個 CPU 之間才可以傳送資料。

MPIERROR

為 MPI 引數,平行程式發生錯誤時輸出錯誤訊息。



圖 3.1-1 地下水量規劃管理模式之程式流程圖

各顆 CPU 接收到從 CPU 0 傳來的各種參數後,即可進行子族群之同步運算,最後各子族群再將運算結果傳回給 CPU 0,由 CPU 0做輸出的動作,如此完成平行化的動作。

2.MODFLOW 2000 之 I/O 方式修改

本研究以嵌入法(Embedding method)由 MODFLOW 2000 計算水位與計算水 位及敏感度矩陣。但 MODFLOW 2000 以 ASCII 檔案方式作為資料之輸入/輸出 方式,當各 CPU 計算而每條染色體適合度,皆會呼叫 MODFLOW 2000 進行計 算,也就是,各 CPU 同時且非常頻繁地讀取及寫入 MODFLOW 2000 輸入/輸出 檔案,雖然平行電腦之檔案系統允許多 CPU 同時讀取相同檔案,但無法同時寫 入相同檔案,且當多 CPU 對檔案系統頻繁地讀取及寫入 ASCII 檔案,會造成檔 案系統負荷過重,降低平行運算效能。

因此,為克服上述之平行電腦檔案系統負荷過重問題,本研究修改 MODFLOW 2000 之 I/O 方式,以存取記憶體作為 MODFLOW 2000 輸入/輸出方 式。使各 CPU 在平行運算過程中,降低檔案系統負荷,增加平行運算效能,但 需對修改後之 MODFLOW 2000 程式碼進行驗證,以確保其計算結果與原始之 MODFLOW 2000 相同。

3.循序程式之微調

一般而言,若循序程式本身有良好的結構(Structure)及性能表現(Absolute Performance),則其平行處理過程將會變得較容易且獲得較高之平行效率。由於 Fortran 語言採用的記憶體配置方式為 Column wise,也就是第一維 Index 變動得 最快而最後一維變動得最慢的順序,因此,將循序程式中的巢式迴圈(Nested loop) 做了適當的調整,亦即將陣列最後一維的迴圈指標改置在最外迴圈。如以下所表 示:

原本迴圈結構為

DO I=1,M

DO J=1,N

H(I,J)=計算部份

ENDDO

ENDDO

將 I, J 順序調換為

DO J=1,N

DO I=1,M

H(I,J)=計算部份

ENDDO

ENDDO

4.族群切割

遺傳演算法具有隱平行的特性,也就是說染色體之間是彼此獨立的,每條染 色體對應一個自己的適合度,並不會受到其他染色體之影響,因此將染色體以條 數的方向做切割。將染色體均匀切割給幾個 CPU 做計算並不是在程式中內定 的,而是在下執行命令決定,因而可將染色體很彈性地切割成 N 等份,交付給 N 顆 CPU 執行。以圖 3.1-2 為例,乃以 10 顆 CPU 參與計算,並且將族群數為 100 1896



圖 3.1-2 子族群切割示意圖

在遺傳演算法中雖然每條染色體是彼此獨立之個體,可是在一代內全部的染色體計算完畢後,仍然要做適合度排序、複製、交配、突變的工作,如此一來則必須將各個染色體的適合度傳回 CPU0 以進行前述的工作,其適合度傳送之副程式用法如下:

(1)由代號不為0的 CPU 傳送

CALL MPI_SEND(OBJ_V(ISTART),KOUNT, DATA_TYPE,IDEST,

ITAG,MPI_COMM_WORLD,MPI_ERR)

引數 OBJ_V(ISTART) 為要送出去的陣列起點

KOUNT	為要送出去的資料數量
DATA_TYPE	為要送出去的資料類別
IDEST	為接收之 CPU 代號(在這裡為 0)
ITAG	為要送出去的資料標籤
	1896

(2)由代號為0的CPU接收

CALL MPI_RECV(OBJ_V(ISTART1),KOUNT1, DATA_TYPE,ISRC,

ITAG,MPI_COMM_WORLD,MPI_ERR)

引數	OBJ_V(ISTART)	為要接收的陣列起點
	KOUNT1	為要接收的資料數量
	DATA_TYPE	為要送出去的資料類別
	IDEST	為傳送之 CPU 代號
	ITAG	為要送出去的資料標籤

6.平行程式之完成

經由上述之步驟1至步驟5,我們確定了I/O之處理、切割方式以及傳送適

合度資料後,即可將循序程式進行切割、加入平行副程式語法(Parallel Routine), 以完成平行化之地下水量規劃管理模式。

圖 3.1-3 所示為此地下水量規劃管理模式之平行化程式架構圖,由此圖 可看出,在平行處理過程中,採用計算切割而資料不切割方式,亦即利用迴圈 (Loop)上不同指標執行不同區段的方法來完成子族群之計算,而計算所須之資料 則經由 CPU 0 傳送給各 CPU。資料不切割的平行程式好處在於其陣列的描述與 循序程式完全相同,程式容易閱讀也容易維護,反之,資料切割的平行程式雖可 節省記憶體的用量,但陣列描述方式與循序程式差異很大,程式不易閱讀,由於 現在的機器的記憶體都非常大,因此在平行化時,選擇計算切割而資料不切割是 較好之抉擇。





圖 3.1-3 地下水量規劃管理模式平行化程式架構圖

3.2 平行運算平台

所使用平台為國家國家高速網路與計算中心之 IBM Cluster 1350A,其包含 IBM System x3550 計算節點 128 台,每一計算節點之硬體配備如下,單一節點 之 core 數由為 8;記憶體容量為 2GB/core。

(1)中央處理器: Intel X5450 Processor 3.0GHz Quad core 2 顆。

(2) 主記憶體: 16GB, 採用 PC2-5300 667MHz FBD 240-pin ECC DDR2-SDRAM。

(3)網路:2個(含)以上之 Gigabit Ethernet 埠。

(4)硬碟: 3.5" 146GB 15k rpm SAS 硬碟 2 顆。

IBM Cluster 1350A 計算節群組分成 3 個類,1 支平行程式最多可使用至 128 顆 CPU。



第四章 模式範例演算

為驗證所發展考慮抽水與監測之容量擴張管理模式,能應用在地下水量管理 上,本章節將採用簡化之地下水流區域作為模式範例演算,經由範例之計算結 果,展示考量抽水與監測之容量擴張井網設計之效益。

首先對本研究發展之地下水即時管理模式之演算流程進行說明(圖 4-1),首 先於第1階段初之演算流程包含:

(1)規劃所有階段之井網及抽水量:運用 2.2 節之規劃模式,優選所有階段之 容量擴張設井方案及各抽水井抽水量。

(2)設置第1階段之抽水井與監測井:依(1)之優選設井方案,建置第1階段之 抽水井與監測井。

(3)更新K值:此時已設置監測井網包含原有之監測井及(2)所設置之第1階段 監測井。由已設置監測井位之真實K值作為監測K值,經由克利金法重新推估 全區所有格網之K值。

在完成第1階段初之設井及K值更新後,即進入第1階段各時刻之即時操作,於各時刻將重覆(4)~(6)之演算流程:

(4)進行抽水:依(1)之優選之抽水量,進行已設置抽水井之抽水操作。

(5)進行水位監測:經由已設置之監測井網,得出水位監測值。

(6)水位更新:以(5)之水位監測值,經由卡門濾波更新此時刻之水位值。

當第1 階段之各時刻依序完成(4)~(6)之演算流程後,時間則進入第2 階段 初,於第2 階段初之演算流程包含:

(7)規劃後續所有階段之井網及抽水量:優選及後續所有階段(包含第 2 階段) 之容量擴張設井方案及各抽水井抽水量。

(8)設置第2階段之抽水井與監測井:依(7)之優選設井方案,建置第2階段 之抽水井與監測井。 (9)更新K值:此時已設置監測井網包含原有之監測井、(2)所設置之第1階 段監測井及(8)所設置之第2階段監測井。由已設置監測井位之真實K值作為監 測K值,經由克利金法重新推估全區所有格網之K值。

在完成第2階段初之設井及K值更新後,即進入第2階段各時刻之即時操作,即再重覆(4)~(6)之演算流程即可。各設井階段重覆上述之演算流程,如此反 覆進行,直至最後階段結束。

本章內容所提到之「第1階段初最佳策略」為代表於第1階段初由規劃模式 得出之抽水與監測策略(包含抽水井網、監測井網及各井抽水量)。而「第2階段 初最佳策略」為於第2階段初,由規劃模式優選出後續階段之抽水與監測策略, 但也包含了之前已設置之井網及已操作之抽水量。

為了能展示圖4-1之地下水即時管理模式之演算流程,需要以最佳策略對「地 下水真實系統」進行抽水與監測,以提供水位及K值監測值(圖4-2)。本研究建 立一「地下水虛擬系統」取代「地下水真實系統」,以期能驗證所發展即時管理 模式之效益(圖4-3)。不管是「地下水虛擬系統」或是「地下水模擬模式」皆是 由 MODFLOW 模式建立。二者不同處為,前者輸入之K值為真實K值,而嵌 入規劃模式之地下水模擬模式所使用之推估K值,則是由已設監測井位之真實 K值推估而得。其中真實K值是應用GSLIB之地質統計條件模擬程式SASIM (Deutsch and Journel, 1992),配合給定之變異元模式(Variogram model)所產生。為 了能進一步比較各種條件下(如有無容量擴張、不同利率)最佳策略之佈井與成本 差異,以最佳策略配合地下水真實系統,計算出「真實成本」,作為相互比較之 基準。

52



圖 4-2 地下水真實系統與演算流程示意圖



圖 4-3 地下水虛擬系統與演算流程示意圖



4.1 計算範例

本研究之計算範例採用圖 4.1-1 之簡化地下水流區域做為地下水量即時管理 模式之演算案例,此地下水流區域之大小為 4,500×5,500 m,每個格網大小為 500×500,東西方向分為 9 行,南北方向分為 11 列,總共 99 個格網,並有 21 個抽水井候選井位,20 個監測井候選井位及 3 口原有監測井。抽水井與監測井 之候選井位以均勻分散為原則,而未能作為候選井位之格網,則假設因用地取得 等因素而無法設井。

計算範例為考量拘限含水層(圖 4.1-2),其邊界條件,南北兩邊為定水頭邊 界,東西兩邊為無水流動邊界條件,詳細之各種參數設定,將於下一小節說明。

4.1.1 各項參數設定及假設條件

除了描述地下水系統之各項參數之外,尚需設定模擬時刻、抽水與監測之設 井單位成本及所運用演算法之內部參數等。以下將分類說明計算範例之各項參數 值。

1.地下水系統參數

計算範例之地下水系統各項參數如表 4.1-1 所示,其中需特別說明的是透水 係數(K值)及起始水頭之共變異矩陣(P_{hh}(0|0))。首先,應用 GSLIB 之地質統計 條件模擬程式 SASIM 配合給定之變異元模式,產生圖 4-2 所提及真實地下水系 統之真實 K值。SASIM 程式在本研究中僅產生一組隨機 K 值作為真實 K 值,而 SASIM 程式之所需輸入資料包含:變異元模式、控制點值及最大最小值,其詳細 之使用說明可參考 GSLIB (Deutsch and Journel, 1992)。於範例中採用指數模式 (Exponential model)(式(4.1-1)),基值(sill)設定為 25.0(*m*/*day*)²,而影響範圍(range) 設定為 1667.0(m),所產生真實 K 值分佈如圖 4.1-3 所示。

$$r(h) = 25.0[1 - \exp(-\frac{h}{1667.0})]$$
(4.1-1)

而所考量拘限含水層之儲水係數(Specific storage, Ss)假設為已知,且各格網

之 S_s 值皆設定為 $1.0 \times 10^{-4}(1/m)$ 。

為了驗證所發展模式之程式撰寫正確性,於產生真實 K 值過程中,原有 3 口監測井位之真實 K 值皆設定為2.0(m/day)(圖 4.1-3)。使得由原有 3 口監測井 之已知 K 值,推估所得 K 值亦為均值。如此,範例之問題設定為對稱,以便驗 證優選所得之井網是否亦為對稱佈設。接著,以無抽水行為之 MODFLOW 穩態 地下水模擬模式,經由 FOSM 計算,得出起始水位之共變異矩陣(P_{hh}(0|0)),起 始水位之標準偏差分佈如圖 4.1-4 所示。

2.時間參數

由於本研究優選模式考量了容量擴張設井方式,因此除了模擬時距(Time step, Δt)之外,尚需設定容量擴張之設井間距(Wells installing interval)與抽水期距 (Pumping period)之時間長度(圖 4.1-5)。計算範例之總規劃時間為9年,每個設井 間距3年,共分為3階段設井,3個抽水期距與36個模擬時距,其各種時間參 數之設定值如表 4.1-2 所示。

3.抽水井網與監測井網相關參數

抽水井網與監測井網之各種成本係數與其他相關之參數設定值如表 4.1-3 所 示。本節之計算範例將考量年利率為12% 之情況,後續再配合年利率為6% 之案 例(4.3 節),以評估年利率對優選結果之影響。需水量則依不同抽水期距而遞增, 分別為4500,7500,12000(CMD)。

4.演算法之內部參數

如圖 2.2-1 之演算流程圖所示,本研究發展之優選模式所運用演算法有 GA 及 SA 二種。其中 GA 之內部參數,如表 4.1-4 所示,為配合執行平行運算之 CPU 數目,每代族群數訂為 128 條染色體,繁衍代數為 200 代。

而SA之內部參數,如表4.1-5所示,其中,降溫條件(即能量改變閾值, ΔE_{limit}) 之設定,隨著即時操作進行到各設井間距而重新優選井網時,以 try and error 方 式選定合適之能量改變閾值,使各代最佳之染色體在最大疊代次數內(2000次), 能儘量降至最終溫度(1.0度)。而波茲曼常數(K_b)則依式(4.1-2)決定:

$$K_{b} = \frac{-\Delta E_{\lim it}}{T_{0} \ln(C)}$$

$$(4.1-2)$$

其中,C為常數,一般建議為0.5,而T₀為初始溫度。而在決定了能量改變 閥值與波茲曼常數,則可依式(4.1-3)決定不同溫度之波茲曼機率(P_b),計算範例 於第1階段規劃模式之波茲曼機率分佈如圖4.1-6所示。

$$P_b = e^{\frac{-\Delta E}{K_b T}} \tag{4.1-3}$$

其中: ΔE 為變化前後之能量(熵, Entropy)差值, K_b 代表波茲曼常數,T則是當時溫度。

5.假設條件

綜合上述,本研究開發之管理模式假設條件如下:

(1)假設地下水數值模式之誤差主要乃由透水係數(K值)之推估誤差所造

成。

(2)水位機率分佈假設為常態分佈。

(3)K值及水位之監測誤差,皆假設忽略不計

另外,計算範例之假設條件如下:

(1)計算範例之變異元模式假設為已知。

(2) 儲水係數(Specific storage, Ss) 假設為已知,且各格網之 S_s 值皆相同。

4.1.2 計算結果

以下將以計算範例之優選結果,進行井位與成本之分析。

1.抽水策略與監測策略相互影響探討

以下將以第1階段初之井網規劃結果,來說明抽水井網與監測井網如何相互 影響,及為何抽水策略與監測策略應一起考量。

由第1階段初優選之抽水井網分佈如圖 4.1-7(a)所示,在第1階段設置3 口 之抽水井(抽水井位編號 1,2,3)為最鄰近北方之定水頭邊界,且其抽水量皆達抽水 量上限(1,500CMD)(圖 4.1-8),雖然愈偏北方格網之設井深度愈長,但因愈接近 定水頭邊界,水位洩降會較小,也就是揚程較小,將可節省較多操作成本。在第 2 階段增設 2 口之抽水井(抽水井位編號 6,7),其中 6 號抽水井離北方之定水頭 邊界較近,而 7 號抽水井卻與 6 號抽水井並非對稱設井,應是 GA 演算法僅找到 接近全域最佳解。至於第 3 階段共增設 4 口之抽水井(抽水井位編號 5,9,19,21), 且其抽水量皆未達抽水量上限(1500CMD),原因為水位限制式發生作用。就圖 4.1-9 所示,在 5,6,7,9,19,21 號抽水井之位置,其信賴水位(E[h_i]-F⁻¹{π}sd[h_i]) 已接近水位下限值(62.5m),最低為 19 號抽水井之 62.60m,使得原本只需再增設 3 口抽水井即可滿足需水量 12,000CMD,需再增設至 4 口抽水井才能同時滿足需 水量與水位限制式。

圖 4.1-9 之信賴水位($E[h_i] - F^{-1}\{\pi\}sd[h_i]$)不僅需大於水位下限,同時也是目標函數中計算抽水揚程之依據,然而,計算信賴水位所用到之更新水位標準偏差 $(sd[h_i])$ 卻同時受抽水行為與監測井網之影響,根據監測井網可推估出 K 值之推估誤差,再配合地下水模式之敏感度矩陣,經由 FOSM 及卡門濾波之計算,即可推求各時刻更新水位之標準偏差 $(sd[h_i])$ 。

圖 4.1.1-7(b)為第1階段優選出之監測井網分佈,而圖 4.1-10 為時刻 t=36 之 K 值推估誤差分佈圖,可明顯看出在監測井位上之K 值推估誤差為0。圖 4.1-11 為時刻 t=36 之 K 值對水位之敏感度矩陣主對角線值之分佈,因抽水行為會對增 加 K 值對水位之敏感度,所以在抽水井位之敏感度值會比鄰近格網之值偏高 (Glasgow et al. [2003])。圖 4.1-12 為經由卡門濾波配合監測井網,計算出時刻 t=36 更新水位之標準偏差(sd[h_t])分佈,可看出在抽水井位上之標準偏差(sd[h_t]),經 由監測井網之佈設,已控制在 0.96m~2.34m 之範圍。

綜合上述,抽水井位之選定會考量設井成本及抽水揚程(即水位洩降),但增 加抽水井及抽水量會增加敏感度矩陣之值,進而增加地下水模擬模式之不確定 性。而增設監測井,可降低水位之推估誤差,其目的可使信賴水位變高,更容易 大於水位下限值,可使抽水更集中,並設置較少之抽水井數即可滿足需水量與水 位限制式,另一方面亦可降低目標函數中之抽水操作成本(式 2.1-11)。

2.系統更新與重新調整井位

經由上述之第1階段初最佳策略佈井結果分析,以下將說明於第2階段初及 第3階段初,地下水模擬模式更新後重新規劃井位之結果。

圖 4.1-13 為第1階段增設3口監測并後,推估K值之更新結果,其在東北 方區域之K值較高。以第1階段初規劃之抽水井網(圖 4.1-7(a))與第2階段初規 劃之抽水井網(圖 4.1-14(a))相互比較,可發現原來第1階段初規劃設置之5號及 7號抽水井,分別移至12號及17號抽水井,經第2階段初之重新調整後之抽水 井位較集中東北方區域,因其K值相對較大,且又相鄰北方定水頭邊界,地下 水容易由定水頭補充,進而減少水位洩降。

圖 4.1-16 分別為第1 階段初與第2 階段初規劃模式之最佳策略,於時刻 t=36 模擬水位分佈。就整個區域而言,可看出第2 階段初規劃模式之模擬水位較高。 也因此,第2 階段初之最佳策略,不需要設置較多之監測井數來降低更新水位之 標準偏差(sd[h_i])就能滿足水位限制式,圖 4.1-14(b) 為第2 階段初優選得出之監 測井分佈,由原先第1 階段初規劃增設 12 口監測井,降為6 口。在抽水井網與 監測井網重新調整時,規劃模式同時亦會優選出對應之最佳抽水量(圖 4.1-15)。

最後階段(即第3階段)重新調整之井網及抽水量分別如圖 4.1-17 及圖 4.1-18 所示,以第2階段初規劃之抽水井網(圖 4.1-14(a))與第3階段初規劃之抽水井網 (圖 4.1-17(a))相互比較,於第3階段增設井之數目皆為4口,但其中只有9號抽 水井相同,其它需增設3口之抽水井之位置不相同。

根據 Andricevic [1990, 1993]之研究結果,不管是以試誤法決定之監測井網,

或是以時序之方式於每時刻遞增一口監測井,設有抽水井之格網亦會優先設置監測井。比較第3階段初規劃之抽水與監測井網(圖 4.1-17(c)),在抽水井位之鄰近格網亦會設置監測井(因本研究之抽水井及監測井之候選點並不重疊)。其原因有二:先就目標函數(式 2.1-13)而言,抽水井位置之洩降大,為減少抽水揚程,則可在抽水井鄰近位置設置監測井,以降低sd[h,],進而降低抽水成本。另外,就水位限制式(式 2.1-17)而言,抽水井位置之洩降大,為能符合水位下限要求,則可在抽水井鄰近位置設置監測井,以降低sd[h,],進而使信賴水位(E[h,]-F⁻¹{π}sd[h,])大於水位下限。雖然監測井網有伴隨著抽水井位而設置之趨勢,但監測井之設置數量仍需由目標函數(總成本)、需水量大小與水位限制式而定。

3.有無重新調整井網之成本比較

本研究與過去相關研究最大不同的是,完整考量抽水與監測之固定成本與操 作成本。表 4.1-6 至表 4.1-8 分別為各階段初規劃模式優選出之設置井數及規劃 成本(目標函數值)。由於第1 階段初至第3 階段初所進行之3 次優選,為建立在 不同之地下水模式模式(不同之推估 K 值分佈),因此其經由規劃模式所得之規劃 成本並無法直接進行比較。

因此,依據圖 4-2 所示,本研究分別計算第1 階段初至第3 階段初最佳策略 之真實成本(表 4.1-9 至表 4.1-11)。由第 3 階段初最佳策略之真實成本分析(表 4.1-11),在抽水與監測之單位設井成本為 6400:1600(NT)之條件下,雖然監測總 成本之比例只佔所有真實成本之 8%,但卻能有效降低水位標準偏差(sd[h,]),以 減少抽水成本。

為比較有無重新調整後續階段井網設計對真實成本之差異,如圖 4.1-19 所 示,第1階段初最佳策略與第2階段初最佳策略之真實成本相差 7.68%,而第2 階段初最佳策略與第3階段初最佳策略之真實成本僅相差 0.17%。第1階段初最 佳策略與第3階段初最佳策略之真實成本總計相差 7.85%,而此成本差異,可視 為皆以容量擴張方式設井,但經由水位與K值更新後,重新調整井網之效益。

60

參數值	值		
透水係數(Hydraulic conductivity, K 值)	由 GSLIB SASIM 程式產生(圖 4.1-3)		
儲水係數(Specific storage, Ss)	$1.0 \times 10^{-4} (1/m)$		
含水層頂部高程	30 <i>m</i>		
含水層底部高程	- 20 <i>m</i>		
地表高程	85 <i>m</i> ~110 <i>m</i>		
起始水位	MODFLOW 穩態模式產生		
起始水位之共變異矩陣 $(P_{hh}(0 0))$	MODFLOW 穩態模式,配合 FOSM 產生 (圖 4.1-4)		
水位下限	62.5 m		
水位下限可靠度(Reliability level) 95%			
ES 4.1-2 時間參數表			
參數值	值		
總規劃時間(Planning horizon)	9(years)		
設井間距(Wells installing interval)	3(years)		
抽水期距(pumping period)	3(years)		
模擬時距(Time step, Δt)	0.25(<i>year</i>)		

表 4.1-1 地下水系統參數表
參數值	值
年利率	12%
設置抽水井單位長度成本	6400(<i>NT</i> / <i>m</i>)
單位功率成本(Electric power cost)	$2.0 \times 10^{-6} (NT/J)$
每一口抽水井的抽水下限	0(<i>CMD</i>)
每一口抽水井的抽水上限	1500(<i>CMD</i>)
設置監測井單位長度成本	1600(<i>NT</i> / <i>m</i>)
監測水位單位成本	500(NT/次)
需水量	4500(CMD)(第1個抽水期距)
	7500(CMD)(第2個抽水期距)
	12000(CMD)(第3個抽水期距)
表 4	1896 1-4 GA 冬數
參數值	值
族群數	128
繁衍代數	200
突變率	0.015
交配率	0.7
水位懲罰函數權重	$5.0 \times 10^{5} (NT/m)$

表 4.1-3 抽水與監測井網相關參數

參數值	值
降溫梯度	0.95
初始溫度	100.0
最終溫度	1.0
降溫條件(能量改變閥值, /	ΔE _{limit}) 5.0×10 ⁶ (第1階段初規劃模式)
	7.5×10 ⁵ (第2階段初規劃模式)
	5.0×10 ⁵ (第3階段初規劃模式)
波茲曼常數 (K_b)	$K_b = \frac{-\Delta E_{\lim it}}{T_0 \ln(C)}$,C為 0.5, T_0 為初始溫度
收斂條件	最大疊代次數 2000 次

表 4.1-5 SA 參數

•			· H · · · · · ·	-1
	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III
	各階段總設井數	3	5	9
th ak	抽水固定成本	2400000	1088542	1456124
当人	抽水操作成本	景作成本 2054048 28122 ²	2812270	3536584
	抽水總成本	4454048	3900811	4992707
	各階段總設井數*	3	7	12
医泪	監測固定成本	580000	538660	438805
 	監測操作成本	29862	34908	36725
	監測總成本	609862	573568	475530
總成本			15	006526(NT)

表 4.1-6 抽水與監測策略之規劃成本(第1階段初最佳策略)

*:不含原有3口監測井。

· 农 +.1-7 · 加尔兴 血闪 水 哈 < 池 画 成 4 (尔 4) 伯 牧 忉 取	衣 4.1-/	41. 牙 4 偕权彻取住來哈/
---------------------------------------------------	---------	------------------

	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III
	各階段總設井數	3	5	9
オート	抽水固定成本		1054875	1440382
当日ント	抽水操作成本		2264741	2931326
_	抽水總成本	4 S	3319616	4371708
	各階段總設井數*	3	4	6
赴 11	監測固定成本		126248	181032
监测	監測操作成本	896	13963	14690
	監測總成本		140211	195722
總成本			8	027257(NT)

*:不含原有3口監測井

表 4.1-8 抽水與監測策略之規劃成本(第3階段初最佳策略)

	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III
	各階段總設井數	3	5	9
	抽水固定成本			1487608
祖八	抽水操作成本			3118804
	抽水總成本			4606412
	各階段總設井數*	3	4	5
臣、国门	監測固定成本			88548
监测	監測操作成本			12242
	監測總成本			100790
總成本				4707202(NT)

*:不含原有3口監測井

农 4.	.1-9 抽小兴监测艰哈	~具貝风平()	h 1 偕权初耳	又住 宋 哈)	
	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III	總計
	各階段總設井數	3	5	9	9
++ +	抽水固定成本	2400000	1088542	1456124	4944666
油水	抽水操作成本	1078901	1549833	2032552	4661286
	抽水總成本	3478901	2638375	3488676	9605952
	各階段總設井數*	3	7	12	12
时间	監測固定成本	580000	538660	438805	1557465
监例	監測操作成本	29862	34908	36725	101495
	監測總成本	609862	573568	475530	1658960
	總成本			11:	264912(NT)
*:不含原有3口監测	则井				
表 4.	1-10 抽水與監測策略	之真實成本(第2階段初3	最佳策略)	
	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III	總計
	各階段總設井數	3.///	5	9	9
抽水	抽水固定成本	2400000	1054875	1440382	4895257
油小	抽水操作成本	E 1078901	1471730	2084596	4635227
設井階段 各階段總設井載 抽水 抽水 抽水 抽水總成本 各階段總設井載 監測固定成本 監測固定成本 監測總成本 總成本 總成本 總成本 総成本 *:不含原有3口監測井 表 4.1-10 抽水園定成本 整井階段 各階段總設井載 抽水 超井階段 各階段總設井載 抽水 超水際作成本 監測周定成本 総成本 総成本 総成本 急調調 監測固定成本 総成本 総成本 総成本 急防 整測 監測 整用 基 4.1-11 抽水園定成本 急応本 総成本 海水園 基別 基 4.1-11 抽水 基次總成本 海市 基別 基小階段 各階段總設	抽水總成本	3478901	2526605	3524978	9530484
	各階段總設井數*	3	4	6	6
臣之间	監測固定成本	1 380000	126248	181032	887280
監測	監測操作成本	14931	13963	14690	43584
	監測總成本	594931	140211	195722	930864
總成本 10461348(NT					461348(NT)
*:不含原有3口監測	则井				
表 4.	1-11 抽水與監測策略	之真實成本(第3階段初3	最佳策略)	
	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III	總計
	各階段總設井數	3	5	9	9
++ +V	抽水固定成本	2400000	1054875	1487608	4942483
抽水	抽水操作成本	1078901	1471730	2115709	4666340
T 古 原 月 3 山 監測 表 4.1-1 抽水 監測 (約) (約) (約) (約) (約) (約) (約) (約) (約) (約)	抽水總成本	3478901	2526605	3603317	9608823
	各階段總設井數*	3	4	5	5
医いる	監測固定成本	580000	126248	88548	794796
监测	監測操作成本	14931	13963	12242	41136
	監測總成本	594931	140211	100790	835932
	總成本			10	444755(NT)
ч А 	-1 -1				

表 4.1-9 抽水與監測策略之真實成本(第1階段初最佳策略)

*:不含原有3口監測井



圖 4.1-2 計算範例之地下水含水層示意圖



圖 4.1-4 起始水位之標準偏差分佈圖(單位:m)



圖 4.1-5 計算範例之時間參數設定示意圖



圖 4.1-6 波茲曼機率分佈圖(第1階段初規劃模式)



圖 4.1-7(b) 監測井網優選結果分佈圖(第1階段初最佳策略)



圖 4.1-8 各抽水期距之每口抽水井抽水量(第1階段初最佳策略)



圖 4.1-10 時刻 t=36 推估 K 值之標準偏差分佈圖(第1 階段初最佳策略)



圖 4.1-12 時刻 t=36 之更新水位標準偏差(sd[h,])分佈圖(第1 階段初最佳策略)



圖 4.1-14(a) 抽水井網優選結果分佈圖(第2階段初最佳策略)



圖 4.1-14(c) 抽水與監測井網優選結果分佈圖(第2階段初最佳策略)

各抽水期距之各抽水井抽水量



圖 4.1-15 各抽水期距之每口抽水井抽水量(第2 階段初最佳策略)



圖 4.1-16 時刻 t=36 之模擬水位分佈圖



圖 4.1-17(b) 監測井網優選結果分佈圖(第3階段初最佳策略)



圖 4.1-18 各抽水期距之每口抽水井抽水量(第3 階段初最佳策略)



4.2 有無考量容量擴張之影響

本節進一步探討有無考慮容量擴張對井網設計及總成本等之影響。有無考慮 容量擴張之差異在於,考慮容量擴張之設井方式,為因應需水量增加而採分 3 階段設井,如 4.1 節之計算範例;未考慮容量擴張設井方式,為總規劃時間(9 years) 並未區分設井階段,設井方式為在第 1 個時刻初即完成所有井網之設置,而地下 水模擬模式在後續時刻更新後,僅能重新調整各抽水井之抽水量。

圖 4.2-1(a)為未考慮容量擴張之抽水井網優選結果,抽水井數與考慮容量擴 張之最後設置抽水井數(圖 4.1-17(a))相同,均為 9 口。圖 4.2-1(a)其抽水井網為對 稱方式佈設,原因為問題之設定皆為對稱,且初始之推估K值為均值。而圖 4.2-1(b) 為未考慮容量擴張之監水井網優選結果,僅 17 號與 19 號監測井二者為不對稱佈 設,共增設 10 口監測井,比考慮容量擴張增設之監測總井數(圖 4.1-17(b))多 5 口。

由未考慮容量擴張之抽水與監測井網分佈(圖 4.2-1(c))看來,其規劃模式之 優選結果應已非常接近最佳解。然而,因未考慮容量擴張而無法分階段設井,且 一開始就完成所有井網設置,使得井網之設井成本現值偏高,另外,在地下水模 擬模式更新後,沒有重新調整抽水與監測井網之彈性,而僅能調整抽水量,造成 其真實成本(表 4.2-1)與有考慮容量擴張 (表 4.1-11)相差達 28%。圖 4.2-2 為二者 各時刻之真實成本累加,二者成本之差異,可視為因考慮容量擴張設井方式,而 使得井網可重新調整所獲得之效益。

	設井間距	Interval I	
	每個間距總設井數	9	
林水	抽水固定成本	6912000	
一个	抽水操作成本 4512170 抽水總成本 11424170	4512170	
	抽水總成本	11424170	
每個	每個間距總設井數*	10	
E III	監測固定成本	1864000	
鱼风	監測操作成本	109161	
	監測總成本	1973161	
	總成本	13397331(NT)	

表 4.2-1 抽水與監測策略之真實成本(未考慮容量擴張)

*:不含原有3口監測井



圖 4.2-1(a) 抽水井網優選結果分佈圖(未考慮容量擴張)



圖 4.2-1(c) 抽水與監測井網優選結果分佈圖(未考慮容量擴張)



圖 4.2-2 有無考慮容量擴張之各時刻真實成本累加



4.3 不同利率之影響

本節進一步探討不同利率對井網設計及總成本等之影響。圖 4.3-1(a)為在年 利率 6%條件下,於第3階段初規劃所得之抽水井網,抽水井數共為8口,各設 井階段之抽水井數分別為第1階段初設置4口,第2階段初再設2口,第3階段 初再設2口。而圖 4.3-1(b)為年利率 6%條件下,於第3階段初規劃之監測井網, 各設井階段之監測井數分別為:第1階段初設置6口,第2階段設置1口,第3 階段不再增設監測井。與4.1節之年利率為12%之井網(圖 4.1-17)比較,年利率 6%之抽水井與監測井在第1階段初設置之井數較多,尤其是監測井數就比年利 率 12%多了3口。利率較低時,不同階段設井之成本現值差異較小,且提早設置 抽水井,可分散抽水量,使各抽水井之抽水揚程較少,減少抽水操作成本;而提 早設置監測井,可提早降低水位推估誤差,減少目標函數中之抽水操作成本(式 2.1-11),因此,利率較低時抽水與監測井網皆有提前設置之趨勢。

在年利率 6%條件下,第3階段初最佳策略之真實成本如表 4.3-1所示,由 於真實成本為採用終值換成現值方式計算,年利率 6%之總成本(13,002,618NT) 會比年利率 12%(10,444,755NT)增加。

	設井階段	Interval I	Interval II	Interval III	總計
	各階段總設井數	4	6	8	8
th ak	抽水固定成本	3088000	1177633	1108078	5373711
抽水	抽水操作成本	1158943	1908041	3219937	6286921
	抽水總成本	4246943	3085675	4328014	11660632
	各階段總設井數*	6	7	7	7
胜 、111	監測固定成本	1120000	150550	0	1270550
监测	監測操作成本	29862	24435	17138	71436
	監測總成本	1149862	174985	17138	1341986
	總成本			130	002618(NT)

表 4.3-1 抽水與監測策略之真實成本(第3階段初最佳策略,年利率 6%)

*:不含原有3口監測井



圖 4.3-1(a) 抽水井網優選結果分佈圖(第3階段初最佳策略,年利率 6%)



圖 4.3-1(c) 抽水與監測井網優選結果分佈圖(第3 階段初最佳策略,年利率 6%)

4.4 平行運算及演算法效能分析

本節將對規劃模式平行運算效能,與整合遺傳演算法及退火演算法之**演算法** 收斂性進行探討。

1. 規劃模式之平行運算時間分析

由於本研究以遺傳演算法優選不連續變數(井位),再以退火演算法優選連續 變數(時變抽水量),會造成計算量大增,因此需將程式移植至平行運算平臺,所 使用機器為國家高速網路與計算中心之 IBM Cluster 1350A(請參照 3.2 節說明)。

表 4.4-1 為計算範例之計算時間統計,以第1階段初規劃模式為例,在代數 200代,染色體族群數為 128 條情況下,使用 64 顆 CPU 進行運算(即每代各 CPU 負責 2 條染色體之計算量),計算時間為 70.13 (hr),每條染色體需耗時 0.175 (hr)。 而同時使用 128 顆 CPU 進行運算(即每代各 CPU 只負責 1 條染色體之計算量), 計算時間為 47.08(hr),計算時間加快 1.5 倍。若不採用平行化程式,只由單 CPU 執行所有運算,以每條染色體需耗時 0.175 (hr)估算,約需耗時 4488.55(hr)。

由於計算範例共分3階段設井,因此需進行3次規劃模式計算,依表4.4-1 之統計,同時使用128顆CPU 需耗時99.73(hr)。

2.優選模式之收斂性

由於規劃模式所使用之遺傳演算法及退火演算法,皆屬於啟發式演算法,可 得到近似全域最佳解,但無法確保可得到全域最佳解。為驗證第2、3 階段初最 佳策略之真實成本較低之原因,是因為經由水位與 K 值更新後,可重新調整井 網之效益,或是在第1 階段初優選出之策略較差所造成。本研究將4.1 節計算範 例之第2、3 階段初優選出之策略,代入第1 階段初規劃模式,比較此3 種策略 之目標函數值,而第1 階段初最佳策略之目標函數值仍是最低。此代表第2、3 階段初最佳策略之真實成本較低之原因,並非是在第1 階段初之規劃模式優選出 之策略較差所造成。

圖 4.4-1 為各代最佳染色體適合度之變化情形(計算範例之第1 階段初規劃模式),其繁衍代數 200 及加入精英政策,並保留上一代最佳 3 條染色體之條件下, 在前 60 代最佳染色體之適合度有明顯降低,而各代排序第 25 條染色體之適合 度,在第80代後變化就不明顯。圖4.4-2為各代染色體編碼之情形,同一條染色 體之前42個位元(bit)代表抽水井網,而後40個位元(bit)代表監測井網(圖2.2-2)。 在第10代(圖4.4-2(a))尚未有染色體同質化現象,但至第50代(圖4.4-2(b))前半 段染色體(代表抽水井網)就有同質化現象,但後半段染色體(代表監測井網)在第 100代((圖4.4-2(c))才有較明顯同質化現象。

由於模式演算架構為每條染色體代表一種佈井方案,因此每條染色體會由退 火演算法計算各抽水井之最佳時變抽水量。在退火演算法中,促使跳脫局部最佳 解進而求得全域最佳解之機制,是由降溫條件(能量改變閾值,ΔE_{limit})及波茲曼 (Boltzmann)機率決定是否接受較差之鄰近解。

由於各染色體之佈井方案不同,其疊代過程中之能量(抽水操作成本及水位 懲罰函數總合)差值變化幅度不一,因此單一能量改變閥值難以適用於所有染色 體,不易決定合適之能量改變閥值。圖 4.4-3 為 4.1 節範例之第1 階段初規劃模 式各代染色體之最後溫度。在退火演算法最大疊代次數 2,000 次之限制下,第1 代染色體多數無法達到最終溫度(1度),而至第200 代中有 54%染色體可達到最 終溫度(1度)。而圖 4.4-4 為第1 階段初規劃模式最佳染色體(最佳井網)之熵及溫 度變化,由圖中可看出,疊代過程因有接受較差之鄰近解,造成能量增加。

規劃模式	規劃時刻數 (Time step)	CPU 數	代數	族群數	計算時間(hr)
第1階段初規劃模式	36	64	200	128	70.13
第1階段初規劃模式	36	128	200	128	47.08
第2階段初規劃模式	24	128	200	128	32.75
第3階段初規劃模式	12	128	200	128	19.91
總計					99.73

表 4.4-1 計算時間統計



圖 4.4-1 各代染色體之目標函數收斂情形(4.1 節計算範例之第1 階段初規劃模式)



圖 4.4-2 各代染色體編碼(4.1 節計算範例之第1 階段初規劃模式)



圖 4.4-3 各代染色體(佈井方案)於退火演算法之最後溫度(4.1 節計算範例之第1 階段初規劃模式)



圖 4.4-4 退火演算法之熵及溫度變化(4.1 節計算範例之第1 階段初最佳策略)



第五章 結論與建議

5.1 結論

本研究提出一個完整考量抽水與監測成本之地下水量即時管理模式,其特點為:

- 目標函數考量抽水及監測之總成本,即包含了抽水設井成本、抽水操作成本、監 測設井成本及監測操作成本。
- 所發展模式乃以總成本(Z)於累積機率為α時之值(Z_α)為目標函數,而非一般最常見的期望值為目標函數。如此,優選問題能同時降低總成本之期望值及其不確定性(標準偏差)。
- 抽水井網與監測井網皆考量容量擴張設井方式,因此在地下水模擬模式經由監測 資訊更新後,不僅可調整各井抽水量,並能有重新調整井網之彈性。
- 4. 決策變數包括了抽水策略(抽水井網及各井抽水量)與監測策略(監測井網),因此 在解題上也考慮了抽水策略與監測策略二者相互影響之機制。決策變數包含了不 連續變數(抽水與監測井位),與連續變數(時變抽水量),本研究以遺傳演算法(GA) 優選不連續變數(井位),再以退火演算法(SA)優選離散化之時變抽水量,並運用 遺傳演算法可平行運算之特性,經由平行運算解決計算量大增之問題。

經由各種不同情況下之案例計算結果,可發現:

- 雖然監測井網有伴隨著抽水井位而設置之趨勢,但監測井之設置數量仍需由目標 函數(總成本)、需水量大小與水位限制式而定。
- 2. 由目標函數來看,監測井所佔之比例並不高,但監測策略會透過與抽水策略之相 互影響,進而影響抽水井網之設計,而使得抽水與監測之總成本為最小。因所發 展之模式考慮抽水策略與監測策略二者之互動,因此,增加監測成本,可能會降 低抽水成本,反之,增加抽水成本,可能會降低監測成本。抽水策略與監測策略 二者相互影響之機制為:抽水井位之選定會考量設井成本及抽水揚程(即水位洩 降),而增加抽水井及抽水量會增加敏感度矩陣之值,進而增加地下水模擬模式

之不確定性。而增設監測井,可降低水位之推估誤差,其目的可使信賴水位變高, 更容易大於水位下限值,可使抽水更集中,並設置較少之抽水井數即可滿足需水 量與水位限制式。

- 比較在經監測資料及地下水模擬模式更新前後之井網規劃結果,可發現,配合地 下水模擬模式更新後,重新進行井網設計,能有效降低總成本。
- 就未考量容量擴張之設井方案而言,除了一開始就完成所有井網設置,使得井網 之設井成本現值偏高,另外,即使後續地下水模擬模式經監測資料重新更新,惟 因已無法重新調整抽水與監測井網,使其無法進一步降低總成本。因此,相對於 考量容量擴張之設井方案而言,未考量容量擴張之設井方案之成本將相對偏高。
- 5. 因模式考慮成本現值,因此利率高低會影響井網設計結果,利率較低時,不同階段設井之成本現值差異較小,且提早設置抽水井,可分散抽水量,使各抽水井之抽水揚程較少,減少抽水操作成本;而提早設置監測井,可提早降低水位推估誤差,減少目標函數中之抽水操作成本。因此,利率較低時抽水與監測井網皆有提前設置之趨勢。
- 6. 以 4.1 節範例之第1階段初規劃模式為例,在繁衍代數 200代,染色體族群數為 128條情況下,使用 64 顆 CPU 進行運算,計算時間為 70.13 (hr),每條染色體需 耗時 0.175 (hr)。而同時使用 128 顆 CPU 進行運算,計算時間加快 1.5倍。若不 採用平行化程式,只由單 CPU 執行所有運算,以每條染色體需耗時 0.175 (hr) 估算,約需耗時 4488.55(hr)。

5.2 建議

- 本研究發展之地下水量即時管理模式,可進一步發展為污染整治管理模式。因對 於水質問題,污染物濃度因受抽水行為影響,應採用同時考慮抽水與監測之容量 擴張方式設井。
- 本研究以遺傳演算法(GA)優選不連續變數(井位),再以退火演算法(SA)優選連續 變數(時變抽水量),類似遺傳演算法及退火演算法這類啟發式演算法,在於其容 易應用於各種類型的問題,且能同時優選連續與不連續變數,再配合平行運算, 將可應用於求解各類複雜地下水管理問題上。
- 可將地下水模擬模式不確定性視為另一目標函數,建立同時考量系統不確定性及 總成本二個目標函數之優選模式,並可由多目標遺傳演算法進行解題。
- 4. 建議於地下水模擬模式之更新機制中,加入由水位監測值逆推水文地質參數。
- 5. 本研究發展之模式可作為決定原有監測井網設置之工具,可先依第1階段初規劃 策略,先設置第1階段之監測井,以作為原有之監測井網,使得初始條件之原有 監測井網有較合理之佈設。
- 6. 本模式在實際應用上,可能會有因考量利率甚低,而提早設置較多之抽水井與監 測井,為以避免提早設置過多之抽水井與監測井,而失去重新調整井網之彈性, 可增加各抽水井之抽水量下限值,以限制模式在早期設井階段不會設置過多之抽 水井。

- Ahlfeld, D. P., J. M. Mulvey, and G. F. Pinder (1988), Contaminated Groundwater Remediation Design using Simulation, Optimization, and Sensitivity Theory .2. Analysis of a Field Site, Water Resour. Res., 24, 443-452.
- Ahlfeld, D. P., J. M. Mulvey, G. F. Pinder, and E. F. Wood (1988), Contaminated Groundwater Remediation Design using Simulation, Optimization, and Sensitivity Theory .1. Model Development, Water Resour. Res., 24, 431-441.
- Andricevic, R. (1990), A Real-Time Approach to Management and Monitoring of Groundwater Hydraulics, Water Resour. Res., 26, 2747-2755.
- 4. Andricevic, R. (1993), Coupled Withdrawal and Sampling Designs for Groundwater Supply Models, Water Resour. Res., 29, 5-16.
- 5. Andricevic, R. and P. K. Kitanidis (1990), Optimization of the Pumping Schedule in Aquifer Remediation Under Uncertainty, Water Resour. Res., 26, 875-885.
- 6. Aquado, E. and I. Remson (1974), Groundwater hydraulics in aquifer management, J. hydr. Div., ASCE, 100, 103-118.
- Basagaoglu, H. and H. Yazicigil (1994), Optimal Capacity-Expansion Planning in Multiaquifer Systems, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 120, 836-856.
- Benjemaa, F., M. A. Marino, and H. A. Loaiciga (1994), Multivariate Geostatistical Design of Groundwater Monitoring Networks, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 120, 505-522.
- Cahill, A. T., F. Ungaro, M. B. Parlange, M. Mata, and D. R. Nielsen (1999), Combined spatial and Kalman filter estimation of optimal soil hydraulic properties, Water Resour. Res., 35, 1079-1088.
- Carrera, J., E. Usunoff, and F. Szidarovszky (1984), A Method for Optimal Observation Network Design for Groundwater-Management, J. Hydrol., 73, 147-163.
- 11. Chang, L. C. and C. T. Hsiao (2002), Dynamic optimal ground water remediation including fixed and operation costs, Ground Water, 40, 481-490.
- Chang, L. C., C. A. Shoemaker, and P. L. F. Liu (1992), Optimal Time-Varying Pumping Rates for Groundwater Remediation - Application of a Constrained Optimal-Control Algorithm, Water Resour. Res., 28, 3157-3173.

- 13. Chang, L. C., H. J. Chu, and C. T. Hsiao (2007), Optimal planning of a dynamic pump-treat-inject groundwater remediation system, J. Hydrol., 342, 295-304.
- 14. Chang, L. C., Y. W. Chen, and M. S. Yeh (2009), Optimizing System Capacity Expansion Schedule for Groundwater Supply, Water Resour. Res. (accepted)
- 15. Culver, T. B. and C. A. Shoemaker (1997), Dynamic optimal ground-water reclamation with treatment capital costs, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 123, 23-29.
- David, M. (1977), Geostatistical Ore Reserve Estimation, Elsevier Publishing Co., New York.
- Delhomme, J. P. (1976), Applications de la théorie des variables régionalisées dans les sciences de l'eau (in French), Thése de Docteur-Ingénieur, 160pp., Université Pierre et Marie Curie, Paris.
- Dettinger, M. D. and J. L. Wilson (1981), 1st-Order Analysis of Uncertainty in Numerical-Models of Groundwater-Flow .1. Mathematical Development, Water Resour. Res., 17, 149-161.
- 19. Deutsch C. V. and A. G. Journel (1992), Geostatistical Software Library and User's Guide. New York, USA, Oxford University Press.
- Dougherty, D. E. and R.¹⁸ A. Marryott (1991), Optimal Groundwater-Management .1. Simulated Annealing, Water Resour. Res., 27, 2493-2508.
- Eigbe, U., M. B. Beck, H. S. Wheater, and F. Hirano (1998), Kalman filtering in groundwater flow modelling: problems and prospects, Stoch. Hydrol. Hydraul., 12, 15-32.
- 22. Feldbaum, A. A. (1960a), Dual control theory, I, Autom. Remote Control, 21, 1240-1249.
- 23. Feldbaum, A. A. (1960b), Dual control theory, II, Autom. Remote Control, 21, 1453-1464.
- 24. Feldbaum, A. A. (1961a), Dual control theory, III, Autom. Remote Control, 22, 3-6.
- 25. Feldbaum, A. A. (1961b), Dual control theory, IV, Autom. Remote Control, 22, 129-143.
- 26. Ferraresi, M., E. Todini, and R. Vignoli (1996), A solution to the inverse problem

in groundwater hydrology based on Kalman filtering, J. Hydrol., 175, 567-581.

- 27. Filatov, N. and H. Unbehauen (2004), Adaptive Dual Control, Lecture Notes in Control and Information Sciences, Springer Verlag, Berlin.
- 28. Glasgow, H. S., M. D. Fortney, J. J. Lee, A. J. Graettinger, and H. W. Reeves (2003), MODFLOW 2000 head uncertainty, a first-order second moment method, Ground Water, 41, 342-350.
- 29. Gorelick, S. M. (1983), A Review of Distributed Parameter Groundwater-Management Modeling Methods, Water Resour. Res., 19, 305-319.
- Graham, W. and D. Mclaughlin (1989), Stochastic-Analysis of Nonstationary Subsurface Solute Transport .1. Unconditional Moments, Water Resour. Res., 25, 215-232.
- Graham, W. and D. Mclaughlin (1989), Stochastic-Analysis of Nonstationary Subsurface Solute Transport .2. Conditional Moments, Water Resour. Res., 25, 2331-2355.
- 32. Harbaugh A.W., E.B. Banta, M.C. Hill, and G. McDonald (2000), MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -User guide to modularization concepts and the Ground-Water Flow Process: U.S. Geological Survey Open-File Report 00-92, 121 p.
- 33. Hill, M.C., E.R. Banta, A.W. Harbaugh, and E.R. Anderman (2000), MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey modular ground-water model -User guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter-Estimation Processes and three post-processing programs: U.S. Geological Survey Open-File Report 00-184, 210 p.
- 34. Hsiao, C. T. and L. C. Chang (2002), Dynamic optimal groundwater management with inclusion of fixed costs, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 128, 57-65.
- 35. Hsiao, C. T. and L. C. Chang (2005), Optimizing remediation of an unconfined aquifer using a hybrid algorithm, Ground Water, 43, 904-915.
- 36. Huang, C. L. and A. S. Mayer (1997), Pump-and-treat optimization using well locations and pumping rates as decision variables, Water Resour. Res., 33, 1001-1012.
- 37. Isaaks, E. H. and R. M. Srivastava (1989), An Introduction to Applied Geostatistics", Oxford University Press Inc.
- Jones, L. D., R. Willis, and W. W. G. Yeh (1987), Optimal-Control of Nonlinear Groundwater Hydraulics using Differential Dynamic-Programming, Water Resour. Res., 23, 2097-2106.
- 39. Journel, A. G. and C. J. Huijbregts (1978), Mining geostatistics: Academic Press, New York.
- 40. Kirkpatrick, S., C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi (1983), Optimization by Simulated Annealing, Science, 220, 671-680.
- 41. Kuo, C. H., A. N. Michel, and W. G. Gray (1992), Design of Optimal Pump-And-Treat Strategies for Contaminated Groundwater Remediation using the Simulated Annealing Algorithm, Adv. Water Resour., 15, 95-105.
- 42. Leng, C. H. and H. D. Yeh (2003), Aquifer parameter identification using the extended Kalman filter, Water Resour. Res., 39, 1062.
- 43. Mahmoud, M. R. (2006), High dimension dynamic programming model for water resources expansion projects, Eng. Optimiz., 38, 371-389.
- 44. Mardia, K. V., C. Goodall, E. J. Redfern, and F. J. Alonso (1998), The Kriged Kalman filter, Test, 7, 217-252.
- 45. Marryott, R. A., D. E. Dougherty, and R. L. Stollar (1993), Optimal Groundwater-Management .2. Application of Simulated Annealing to a Field-Scale Contamination Site, Water Resour. Res., 29, 847-860.
- 46. Matheron, G. (1971), The Theory of Regionalized Variables and its Applications, Paris School of Mines, Cah. Cent. Morphologic Math., Fontainnebleau, France.

- 47. McDonald, M.G. and A.W. Harbaugh (1988), A modular three- dimensional finite-difference ground-water flow model: U.S. Geological Survey Techniques of Water-Resources Investigations, book 6, chap. A1, 586 p.
- 48. Mckinney, D. C. and M. D. Lin (1994), Genetic Algorithm Solution of Groundwater-Management Models, Water Resour. Res., 30, 1897-1906.
- Mckinney, D. C. and M. D. Lin (1995), Approximate Mixed-Integer Nonlinear-Programming Methods for Optimal Aquifer Remediation Design, Water Resour. Res., 31, 731-740.
- Mclaughlin, D. and E. F. Wood (1988), A Distributed Parameter Approach for Evaluating the Accuracy of Groundwater Model Predictions .1. Theory, Water Resour. Res., 24, 1037-1047.

- 51. Molz, F. J. and L. C. Bell (1977), Head Gradient Control in Aquifers used for Fluid Storage, Water Resour. Res., 13, 795-798.
- 52. Myers, D. E. (1982), Matrix Formulation of Co-Kriging, Journal of the International Association for Mathematical Geology, 14, 249-257.
- 53. Rao, S. V. N., S. M. Bhallamudi, B. S. Thandaveswara, and G. C. Mishra (2004), Conjunctive use of surface and groundwater for coastal and deltaic systems, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 130, 255-267.
- 54. Ricciardi, K. L., G. F. Pinder, and G. P. Karatzas (2009), Efficient Groundwater Remediation System Designs with Flow and Concentration Constraints Subject to Uncertainty, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 135, 128-137.
- 55. Ritzel, B. J., J. W. Eheart, and S. Ranjithan (1994), Using Genetic Algorithms to Solve a Multiple-Objective Groundwater Pollution Containment-Problem, Water Resour. Res., 30, 1589-1603.
- 56. Rizzo, D. M. and D. E. Dougherty (1996), Design optimization for multiple management period groundwater remediation, Water Resour. Res., 32, 2549-2561.
- 57. Rosenwald, G. W. and D. W. Green (1974), A method for determining the optimum location of wells in a reservoir using mixed-integer programming, Society of Petroleum Engrs. J., 14, 44-54.
- 58. Rouhani, S. (1985), Variance Reduction Analysis, Water Resour. Res., 21, 837-846.
- Shieh, H. J. and R. C. Peralta (2005), Optimal in situ bioremediation design by hybrid genetic algorithm-simulated annealing, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 131, 67-78.
- 60. Skaggs, R. L., L. W. Mays, and L. W. Vail (2001), Simulated annealing with memory and directional search for ground water remediation design, J. Am. Water Resour. Assoc., 37, 853-866.
- 61. Sophocleous, M., J. E. Paschetto, and R. A. Olea (1982), Groundwater Network Design for Northwest Kansas, using the Theory of Regionalized Variables, Ground Water, 20, 48-58.
- 62. Tse, E., Y. Bar-Shalom, and L. Meier (1973), Wide sense dual control for nonlinear stochastic system, IEEE Trans. Autom. Control, 18, 98-108.
- 63. Van Geer, F. C., C. B. M. Testroet, and Y. X. Zhou (1991), Using Kalman Filtering

to Improve and Quantify the Uncertainty of Numerical Groundwater Simulations .1. the Role of System Noise and its Calibration, Water Resour. Res., 27, 1987-1994.

- 64. Voivontas, D., G. Arampatzis, E. Manoli, C. Karavitis, and D. Assimacopoulos (2003), Water supply modeling towards sustainable environmental management in small islands: the case of Paros, Greece, Desalination, 156, 127-135.
- 65. Wagner, B. J. (1999), Evaluating data worth for ground-water management under uncertainty, J. Water Resour. Plan. Manage. -ASCE, 125, 281-288.
- 66. Wagner, B. J. and S. M. Gorelick (1987), Optimal Groundwater Quality Management Under Parameter Uncertainty, Water Resour. Res., 23, 1162-1174.
- 67. Wang, M. and C. Zheng (1998), Ground water management optimization using genetic algorithms and simulated annealing: Formulation and comparison, J. Am. Water Resour. Assoc., 34, 519-530.
- 68. Watkins, D. W. and D. C. McKinney (1998), Decomposition methods for water resources optimization models with fixed costs, Adv. Water Resour., 21, 283-295.
- 69. Yeh, H. D. and Y. C. Huang (2005), Parameter estimation for leaky aquifers using the extended Kalman filter, and considering model and data measurement uncertainties, J. Hydrol., 302, 28-45.
- 70. Zhou, Y. X., C. B. M. Testroet, and F. C. Vangeer (1991), Using Kalman Filtering to Improve and Quantify the Uncertainty of Numerical Groundwater Simulations .2. Application to Monitoring Network Design, Water Resour. Res., 27, 1995-2006.

附錄 A 遺傳演算法(Genetic algorithm)

● 遺傳演算法之介紹

遺傳演算法的理論基礎可回溯自 1859 年達爾文 (Charles Darwin)的「物種 演化」(On the Origin of Species by Means of Nature Selection)書中的「物競天擇, 適者生存」的演化及淘汰觀念。在這種由自然選擇的演化機制中,生物界中的每 個個體會把它們的特徵傳遞到下一代,而生物的特徵是由生物細胞內的染色體來 決定的(染色體即是由基因所組成的基因鏈),由於每個個體的特徵都不大相同, 因此不同特徵的個體對環境的適應力也不大一樣,同時生物的突變及交配也會使 得上下代個體之特徵不相同,而適應力較高的個體,即它們的特徵較適合於目前 的環境,在後代的數目上由於競爭的緣故,適應力較高的個體的後代數目會比適 應力較低的後代數目多,因此這會把整個族群的特徵引導向更適合生存於自然環 境的方向發展,在長時間中,這種引導所發生的變異會越來越累積,最後演變至 產生一整個特徵能適應於特別生態環境下的種族。

將這種自然界的選擇方法系統化並發展一可用之模式最早是由密西根大學 的 John Holland 教授在 1975 年於 Adaption in Natural and Artificial System 文中所 提出,發展出遺傳演算法搜尋技術的基本架構,並且由其學生 David Goldberg 成 功地運用在工程問題上。之後,有許多研究亦證實了遺傳演算法在最佳化問題的 求解上是十分有效率的,其有以下幾個優點:

- 1. 其可優選連續(continuous)及不連續(discrete)的參數。
- 2. 在優選的過程中,不需要求得目標函數的導數。
- 搜尋的方式不同於以往的單點搜尋方式,而是採用多點搜尋,因此不容易掉入局部解(local optimum)。
- 4. 可以處理多參數的優選問題。
- 5. 具有隱平行運算的能力,若在平行電腦中,可大量節省運算的時間。
- 6. 在優選複雜非線性的問題中,其演算機制可跳脫局部最佳解(local optimum)。
- 7. 演算優選的結果,可提供一組最佳解,而非只有單一最佳解。
- 參數優選需經由解碼的過程,而整個演算的機制是在解碼後的參數集合中進行,不是在參數集合本身,因此演算的機制不受問題函數型態的影響。

以上的優點,使得我們發現當傳統的最佳化方法無法解決一個問題或得到令 人滿意的優選結果時,遺傳演算法便是一個很有趣且擁有很大潛力去替代部份傳 統的優選法。

對所有的問題而言,遺傳演算法並非都是一個最佳的方法,例如當在處理一 具有凸函數型態,且僅有少量變數之問題時,一般傳統以微積分為基礎的搜尋 法,即可比遺傳演算法快速的找到最佳解,別外一些簡單優選的問題,傳統的演 算法亦都能很快的解決,然而當我們在處理實際的問題時,經常會遇見的是非凸 函數且多變數型態或更複雜的問題,這是一般演算法不易解決的,而遺傳演算法 就有解決此類問題的能力,且可得到近以全域最佳解。

● 遺傳演算法之架構

遺傳演算法將欲求解的問題變數或參數以一種類似染色體的資料結構 (Chromosome-Like Data Structure)來編碼,並應用一些遺傳運算元(Operators) 如交換(Crossover)、突變(Mutation)對大量的染色體作運算,運算後產生的 子代除了保存親代中具優勢的特質外,也有可能因為基因的交換與突變而比親代 的表現更佳。基本的遺傳演算法包含下列幾個步驟;

一、將問題的變數編碼:

例如可以二進位字串(Binary String)的形式來表示變數,其間的轉換為二進位與十進位的對應,如將二進位字串 1001 解碼,則可對應於十進位的變數值 9,而1100 對應於 12,1001 與 1100 可看作是兩條染色體。

二、產生初始群集(Initial Population)

以隨機的方式產生多條染色體作為初始解。

三、計算目標函數值(Evaluation)

將初始群集大量的染色體解碼後對應的變數值一一代入問題模式中,計算函 數或目標函數值。

四、計算適合度

適合度愈高表示該染色體具有較優的特質,將來被複製(Reproduction)的 機會也較大,以搜尋最大化目標值的問題來說,適合度可以目標函數來表示,若 是應用於最小化目標函數之問題時,適合度函數則需由目標函數經適當的轉換而 產生。

五、複製(Reproduction)或選取(Selection)

為演化出更優良的個體,必須從原來族群中篩選出較佳的個體,組成下一代 的族群,這就是複製。因此,擁有較高適應值的染色體,便有較高的機率被選擇 出來進行複製。茲以下列兩種常用的方式說明:

1.輪盤法(Roulette wheel)

所謂輪盤法是假設一個可轉動的輪盤,在輪盤上劃分許多扇形區塊,區塊 的面積大小正比於個體被複製的機率。因此,個體的適應值越高,適應值佔有族 群適應值總和的比例也越高,在輪盤上所佔的面積也越大,而被選上的機率也越 大。輪盤法的示意圖如圖 A-1 所示。詳細步驟則如下所示:





圖 A-1 輪盤法

(1) 計算總適應值;為第一個個體適應值至最後一個個體適應值之總和。

(2) 求個體適應值的份量;為個體適應值除以總適應值。

(3) 繪製輪盤;在盤上劃分扇形區塊,區塊大小正比於個體適應值的份量。

(4) 射靶; 隨機亂數產生 0 至 1 的數字, 此數落於何區, 則該區個體被複製一次。

(5) 重複4, 直到複製總數等於族群大小。

2. 比較選取法(Tournament selection)

比較選取法,即是模仿自然界的生物彼此競爭情形,當某一個體的適應值愈高,其經由比較選取後,存活下來而被複製的機會愈高,此選取法有一好處,即 是染色體被複製下來的機率與染色體間適合度的相對值大小無關而是取決於相 對大小,因此較適合於個體間適合度值相對變化很大之問題,一般做法如下:

(1) 依每代總數,設定一個合理的比較個數,假設為2個。

(2) 每次從母代隨機選取2個染色體,比較其適合度較優者複製至子代。

(3) 重複2, 直到複製總數等於族群大小。

六、基因交配(Crossover)或重組(Recombination)

進行完複製的步驟之後,便接著要進行交配的程序。在基因演算法運作的過 程中,程式會隨機產生一個交配的機率值,若是此值小於事先所定義的交配率, 染色體便會進行交配的程序。將再前一步驟中所複製的個體,依亂數任意取出兩 個,將其基因排列作重新的組合,以產生新的兩個染色體,這就是交配的目的。 基本上,交配的方式有三種,分別是單點交配、雙點交配和均一化交配。下面分 別對這三種方式作介紹。

1. 單點交配

在進行單點交配時,程式會先依亂數決定一個切斷點,利用這個切斷點,將 原先挑選出欲進行交配兩個的染色體切成兩部分,再將切開的部分重新組合成一 對新的染色體。

2.雙點交配

雙點交配的步驟與單點交配類似,唯一的不同處是在進行雙點交配時,程式 會先依亂數決定兩個切斷點,利用這兩個切斷點,將原先挑選出欲進行交配的染 色體切成三部分,再將切開的部分重新組合成新的染色體。

3.均一化交配

使用均一化方式進行交配時,首先會產生一個和染色體長度相等的二進位陣 列,在這個二進位陣列中,每一個位元均會依亂數決定此位元的值為0或1,如 此一個完整的二進位陣列稱之為面具(mask)。利用這個面具,可以決定染色體 交配的位置。若是在面具中的位元值為1時,就進行染色體在此位元的互換;反 之面具中的位元值為0時,則不進行互換。和單點交配、雙點交配不同處是,利 用單雙點交配時,每次交配切斷點的位置不是固定的,而均一化交配則是利用面 具的方式,使得同一世代之所有個體在固定的位置交配。

三種交配方式的示意圖如圖 A-2~圖 A-4。



圖 A-2 單點交配



圖 A-3 雙點交配



圖 A-4 均一化交配

七、突變

演化過程最後一個步驟是突變。在遺傳演算法的運作過程中,程式會隨機產 生一個突變的機率值,若是此值低於事先所定義的突變率,染色體便會進行突變 的程序。所謂突變,是隨機選定染色體的某些位元,將此些位元的值作 0 與 1 的互換,此步驟對染色體上的每個位元皆存在有突變的機率,可對染色體上各分 段所代表的參數進行突變,將染色體的體質作一立即的改變,使搜尋的點更為零 散,以防止過早收歛於局部最佳值,而無法獲得整體最佳解。突變示意圖則如圖 A-5 所示。

圖 A-5 突變示意圖

八、精英政策

為防止遺傳演算法在演算的過程中,最佳值之收斂過程發生震盪情形,本研 究期望每一代之最佳值皆能慢慢的趨近於真正之收斂點,因此本研究於簡單遺傳 演算法中加入精英政策。所謂精英政策即是保留上一代最佳染色體,當遺傳演算 法完成複製、交配、突變之過程後,將上一代最佳染色體直接複製至新產生出的 子代中。

雖然遺傳演算法具有強健性,可求得非凸函數之全域最佳解。然而由於其隨 機搜尋之方式,其所得之答案無法保證一定為真正之最佳解,且其收斂之效率與 每代之染色體數(population size)、總搜尋代數(number of generations)、交配率 (crossover probability)、突變率(mutation probability)有關(McKinney and Lin, 1994)。Goldberg(1989)曾建議,一個高效率之遺傳演算法,必須選擇高交配率、 低突變率與一適中之人口數,至於如何選擇這些參數必須視所解決之問題而定。 雖然遺傳演算法無法保證一定可求得真正之最佳解,然而它卻可很容易得與其他 最佳化理論或模式結合。



附錄 B 退火演算法(Simulation annealing)

● 蒙地卡羅(Monte Carlo Simulation)模擬法

時代越來越進步,所探討之問題亦越來越複雜,隨著問題變數逐漸增加, 他的複雜度以驚人的速度在增加。過去對這一類問題根本是束手無策,但隨著電 腦的出現,人們可以發展更有效的演算法,並且在電腦上模擬,使得尋找這類問 題的答案變成為可能。

最早期發展中的一個演算法是人們稱之為蒙地卡羅(Monte Carlo)演算法, 是 Metropolis[1]等人在一九五三年提出。雖然已經有了五十年的歷史,但是因為 它的簡單性跟實用性,它還是被廣泛運用在各種最佳化問題中。

當所求解問題是探討某隨機事件之出現機率,或者是某個隨機變數之期望 值時,可以通過大量「實驗」的方式,以此一事件出現頻率推估這隨機事件的實 際機率,或者得到這個隨機變數的推估特徵,並將其作為問題的解。因此,應用 蒙地卡羅模擬法時主要有兩部分工作:

1. 利用大量採樣、實驗等方式,取得某一模型之大量資料。

2. 利用統計方法推估模型的統計特徵,從而得到實際問題的統計特性。

若使用蒙地卡羅模擬法來分析分子模擬計算,則必須加入波茲曼(Boltzmann) 概率分布函數之概念,其演算步驟如下所述:

- 使用均匀分布隨機函數隨機決定各粒子之空間座標,亦即決定了初始 分子構型。
- 2. 將粒子坐標做依據隨機函數隨機移動,產生另一個新的分子構型。
- 3. 計算新的分子構型的能量(entropy, 熵)。
- 4. 比較改變前後之能量變化,判斷是否接受該分子構型。
 - A. 若新的分子構型能量低於原分子構型能量,則接受新的構型,使用 這個構型重複再做下一次迭代。
 - B. 若新的分子構型能量高於原分子構型的能量,此構型被接受的機率

小於波茲曼常數。常見作法是利用隨機函數產生一數值,若數值小 於波茲曼常數則表示接受;反之則表示放棄。

B.1 若放棄這個構型,則重新產生另一構型。

B.2 若接受這個構型,則利用這個構型再做下一次迭代。

 反覆進行迭代計算,直至最後搜索出低於所給能量條件的分子構型才 停止。

上述為蒙地卡羅模擬法之概念,退火演算法將由此延伸。

● 退火演算法概念

退火演算法又可稱為模擬退火演算法,屬於最常見啟發式演算法之一,最 早是S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt與M. P. Vecchi等人在 1983 年所發明。「退火」是屬 於冶金學中的專有名詞,是將金屬材料加熱後經由特定速率冷卻,可以增大晶粒 的體積,並且減少晶格中的缺陷。在冶金學中,如果將金屬緩慢冷卻,其金屬結 構能緩慢地變換為最小能量之分子構型;反之,若將金屬急速冷卻,則無法達至 最小能量之分子構型。因此透過緩慢退火與淬火過程,將可獲得其最低能量狀 態,數學家則利用前述之退火與淬火之物理現象,發展出退火演算法。

實際退火過程是應用高溫熔化金屬或是玻璃,然後慢慢冷卻這物質,最後 會變換為低能量之穩定狀態。在這過程中,任何溫度(T)之下,物質中的分子構 型能量是不斷地上下起伏波動的,但是其長期趨勢是向下減低的,這些改變是隨 機變化的。但是在同樣之溫度下,能量向上躍升之機率則與波茲曼機率呈正比。

由其概念可知,退火演算法是應用溫度來調整接受較差結果的機率,藉由 反覆的進行求解,直至達到均衡的狀態。因此,當某一溫度下之均衡狀態達成後, 溫度將降至下一階段,反覆重複以上的流程,直到溫度達到結束溫度時,演算方 為結束。

退火演算法在演算過程中,若搜尋到較佳之鄰近解,則予以接受;反之, 若搜尋到較差之鄰近解,被接受與否為某一機率,因此本演算法具有跳脫局部最 佳解,進而求取全域最佳解之可能性。

在退火演算法中,促使跳脫局部最佳解進而求得全域最佳解之機制,係其 可以接受較差之鄰近解。然而,若無限制之接受較差之鄰近解,則與隨機搜尋法 一致,其演算效率較差。因此本演算法則以波茲曼(Boltzmann)機率作為接受與否 之判斷。由圖 B-1 所示,在同樣之能量降低量下,當溫度較高時,其接受較差解 的機率較大,隨著溫度降低後,其接受較差解的機率則隨之變小。波茲曼機率分 布函數由式(B-1)所示,其中ΔE 為變化前後之能量(熵, Entropy)差值, K_b 代表波 茲曼常數,T則是當時溫度。

實際分子模擬問題中,波茲曼常數有其實際意義,其數值亦可由教科書查 得,不可隨便給定。然而本問題係以模仿退火行為,來作為最佳化問題之求解, 因此在此可以依據問題型態而有不同之給予值。可依據所選定之初始溫度與可接 受之能量差值,以符合下列方程式(式(B-2))來推求,C為常數,一般建議為 0.5(亦 有部分說法為 0.999)。

$$P_{b} = e^{-\Delta E_{/K_{b}T}} \dots (B-1)$$

$$K_{b} \leq \frac{-\Delta E_{\lim it}}{T_{0} \ln(C)} \dots (B-2)$$



圖 B-1 波茲曼機率分布示意圖

● 演算流程

圖 B-2 為退火演算法之演算流程圖,其模擬步驟包含設定相關參數、產生 初始狀態、鄰近狀態之產生、計算狀態之能量、溫度變化以及狀態接受與否等步 1896 驟,以下將以相同例題進行說明。

例題:

$$\max \quad \sin\left(\frac{x}{3}\right) \times e^{-\frac{x}{10}} \times \cos\left(\frac{y}{4}\right) + \frac{x}{50} \dots (B-3)$$

s.t. $0 \le x \le 31$
 $0 \le y \le 63$



A. 設定相關參數

表 B-1 為退火演算法之相關參數表,前三個變數是與溫度相關之參數,在 此初始溫度與最終溫度分別為100度與1度,其降溫梯度為0.85,意即演算將由 100 度開始,每次以85%的幅度遞減降溫,最終降至1度時才停止。其降溫條件 係以能量變化幅度需要大於 0.1,才進行降溫過程。另外,本次模擬之波茲曼常 數則設定為 0.003, 其最大疊代次數為 1000 次。

項次	符號	參數含意	數值
1	α	降溫梯度	0.85
2	T_o	初始温度	100
3	T_{final}	最終溫度	1
4	$\Delta E_{\lim it}$	降溫條件	0.05
5	K_{b}	波茲曼常數	0.003
6	$iter_{\lim it}$	最大疊代次數	1000

表 B-1 退火演算法相關參數表

B. 產生初始狀態

在退火演算法中,係以隨機方式產生初始狀態,即傳統作業研究方法之起 始點。由式(B-3)所示,問題受到0≤x≤31與0≤y≤63之限制,因此在此一範圍 中隨機選擇一初始狀態。由表 B-2 所示,其為初始狀態之產生表,目前產生點為 (30.039,40.32)。

變數	隨機值	初始狀態
Х	0.969	$= 0.969 \times 31 + 0 = 30.039$
у	0.640	$= 0.640 \times 63 + 0 = 40.32$

表 B-2 退火演算法初始狀態產生表

C. 計算狀態能量

退火演算法中,隨演算流程不斷搜尋新的狀態(解),狀態之好壞則以狀態能量(熵,Entropy)為代表,因此能量函數即為目標函數,透過目標函數之計算,即可訂定狀態(解)之好壞與否。

此外,由於退火演算法是模仿冶金學之退火行為,因此溫度是由高往低遞 減,狀態能量亦是由高往低逐步改變,因此若套用於最大值問題,則需修改目標 函數,乘上一負值即可將最大值問題修改為最小值問題(如式(B-4)所示),式(B-5) 為例題修改後之能量函數,使問題變為最小值問題,且其函數變換範圍為正值。 表 B-3 係初始狀態與能量計算表,其係以初始狀態代入能量函數(式 B-5),其能 量為 0.377。

min
$$fit(\vec{x}) = \max -obj(\vec{x})$$
....(B-4)
min $1-1 \times \left(sin\left(\frac{x}{3}\right) \times e^{-\frac{x}{10}} \times cos\left(\frac{y}{4}\right) + \frac{x}{50} \right)$(B-5)

表 B-3 狀態與能量計算表

狀態	狀態能量
(30.039, 40.32)	0.377

D. 取得新的鄰近狀態

不同於傳統梯度型演算法與遺傳演算法,退火演算法是以隨機形式搜尋下 一個解(狀態),其以常態分布之隨機函數來決定下一個狀態。如圖 B-3 與圖 B-4 所示,當 x 位於 0 時,其發生機率最高,在本圖上即為平均值之所在,其函數圖 形為鐘形,因此又稱為鐘形分布,因此位於平均值之出現機率最大,隨距離逐漸 變大,其出現機率亦隨之降低。

另外,控制常態分布之另一重要參數為標準偏差,如圖 B-3 與圖 B-4 為不 同標準偏差下之分布圖形,在相同 x 數值之分布範圍下,較小標準偏差之常態分 布圖形,則較往中央集中。以圖 B-3 為例,當 x=0 與 x=25 相較下,其出現機率 差異極大,x=25 之出現機率已趨近於 0。然而在圖 B-4 中,x=0 之出現機率約為 x=25 之兩倍,由此可知標準偏差值之大小,可以控制隨機函數分布之集中與否。

因此取得新的鄰近狀態之方法則採用式(B-6)與式(B-7), x_{max}與x_{minx}分別為 變數之上限值與下限值,在此取變數變動範圍之六分之一為標準偏差,並以此標 準偏差建立常態分布隨機函數,將前一次狀態變數疊加此隨機擾動值,新的鄰近 狀態即產生,詳細過程如表 B-4 與表 B-5 所述。

 $\sigma_{x} = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{6} \dots (B-6)$ $x^{(n+1)} = x^{(n)} + N(0, \sigma_{x}) \dots (B-7)$

	常態分 布亂數	標準偏差	狀態擾動值
Δx	0.506	=(31-0)/6=5.167	$=(0.506-0.5)\times 5.167=0.031$
Δy	0.261	=(63-0)/6=10.5	$=(0.261-0.5)\times10.5 = -2.510$

表 B-4 狀態擾動值計算表



常態分布



圖 B-4 常態分布機率密度函數(標準偏差較大)

E. 鄰近狀態接受與否

應用退火演算法搜尋最佳化問題時,並非所有的鄰近狀態均會被接受,若 所有鄰近狀態均被接受,如此演算法本質則與隨機搜尋法類似,因此退火演算法 以能量變化判斷接受與否,接受與否流程圖如圖 B-5 所示。若狀態能量往下變 化,則無條件接受此一新狀態,意即有找到更佳之解答,如表 B-5 第一次運算。

若狀態能量往上變化,為有條件接受,首先觀察狀態能量變化幅度是否高 於冷卻門檻值,若變化幅度高於冷卻門檻值,此狀態被接受的機率為當時溫度之 波茲曼機率,其算式如(B-8)所示,將能量變化量、波茲曼常數與當時溫度代入 式中,即可求得波茲曼機率,意即該狀態被接受與否之機率。

在退火演算法中如何決定該數值呢?可運用均勻分布隨機函數於0至1之 值域中產生一隨機數值,若此一數值小於前述之波茲曼機率,則表示可接受此一 狀態;反之,若該隨機數值大於前述之波茲曼機率,則不予接受。

若狀態能量變化幅度低於冷卻門檻值,則此狀態不被接受,並降低演算溫 度,其降溫方式如式(B-9)所示,每次降溫過程以前次溫度乘上降溫梯度,如此 溫度會隨之遞減,進而影響波茲曼機率之分布方式。因此隨演算進行,溫度隨之 遞減,相同能量增加量之可接受機率亦隨之降低。當溫度低於最終溫度後,則直 接使用最終溫度為當時溫度,且不再降溫,並可以開始收斂與否之判斷。

 $P_b = e^{-\Delta E/K_b T} \dots (B-8)$

$T^{(n+1)} = T^n \times \alpha $.(E	3-9	9))
----------------------------------	-----	-----	----	---



原狀態	原能量	新狀態	新能量	判斷
0.039, 40.32)	0.377	(30.07, 37.81)	0.371	能量下降(接受)
(30.07, 37.81)	0.371	(28.63, 42.98)	0.426 .	能量上升(另行判斷)
(30.07, 37.81)	0.371	(29.88, 36.10)	0.373	能量上升(另行判斷)

表 B-6 能量上升判斷表(初始溫度 100 度,降溫梯度 0.85)

變化幅度	降溫與否	波茲曼 機率	隨機函 數值	判斷
0.426 - 0.371 = 0.055	0.055>0.005	0.242	0.177	隨機函數低於波茲曼機 率(接受)
0.426 - 0.371 = 0.055	0.055>0.005	0.242	0.389	隨機函數高於波茲曼機 率(不接受)
0.373-0.371 = 0.002	0.002<0.005	-	-	能量上升(不接受) 溫度下降 (100→100×0.85=85)

117

F. 收斂判斷

首先,退火演算法第一個要滿足的收斂條件為溫度必須降至最終溫度以下,以本範例而言,本研究之初始溫度為100度,最終溫度為1度,降溫梯度為 0.85,因此至少需經過30次降溫過程才能滿足此一,圖 B-6 為本範例之降溫過 程圖。

另外,由於溫度變化型態均是使用者自行設定,因此不同設定方式之變化 型態與到達最終溫度之速度均不一樣,因此不可僅以此為收斂與否之判斷,則需 搭配其他收斂條件。

若知道最佳目標函數值之概略範圍,可以搭配若能量(即目標函數值)若降低 至某一門檻,即表示本問題已經收斂。除此之外,為避免過多之計算時間,可以 設定最大疊代次數,若滿足最大疊代次數,亦可稱之為收斂。



圖 B-6 退火降溫過程示意圖

附錄C 地下水流數值模式-MODFLOW

MODFLOW為美國地質調查局(U.S.G.S.)發展之程式。該程式可解二維及三 維之地下水流問題,含水層之種類可為自由、受壓、半受壓含水層,依地質特性 分類可為均質、非均質及等向性、非等向性含水層。MODFLOW 程式乃利用有 限差分法(Block Centered Finite Difference Approach)解水流控制方程式,數值求 解方法有多種選擇,如乃採用疊代技巧強制隱式法(SIP)及鬆弛疊代法(SSOR) 等。程式包括之重要單元有水井、區域性補注量、蒸發散、河川之滲流及定水頭 邊界。以下就對MODFLOW程式發展作一介紹:

三維地下水流在孔隙介質中的運動行為可以下列之偏微分方程式來表示:



W: 單位 體 積 的 體 積 流 率 (Volumetric Flux), 代 表 源 匯 項

(Sources/Sinks)(T^{-1})

Ss: 孔隙介質的比儲水量(Specific Storage) (L^{-1})

t:表時間(T)

上述式(C-1)若結合了含水層系統邊界情況、起始條件等資訊,可組成一 地下水流系統的數學表示式。但由於其解析解難以求得,故必須用數值方法來作 推導,在此我們以有限差分法作離散化來求得其數值解。

若以有限差分方式來表達地下水流方程式,則必須利用連續性方程式(所有 進入及流出 cell 的流量必定等於在cell中儲蓄量的改變率),且假設地下水流之 密度(P)為一定值。所以對於一個cell(i,j,k)來說,若考慮本身及其鄰近的六個含水 層的 cells((i-1,j,k),(i+1,j,k),(i,j-1,k),(i,j+1,k),(i,j,k-1),(i,j,k+1))。如圖C-1所示:

假設在列 (row) 方向的 cell(j,j-1,k) 流進 cell(i,j,k) 的流量為:

$$q_{i,j-1/2,k} = KR_{i,j-1/2,k} \Delta c_i \Delta v_k \frac{\left(h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}\right)}{\Delta r_{j-1/2}}$$
(C-2)

上式中:

h_{i,j,k} 及 *h_{i,j-1,k}* 分別代表在節點 (i,j,k);(i,j-1,k)水頭。

 $q_{i,j-1/2,k}$ 為通過介於cell(i,j,k)和(i,j-1,k) 間界面體積的流量 ($L^{3}t^{-1}$)。

 $KR_{i,j-1/2,k}$ 為在列 (row)方向介於節點 (i,j,k) 和 (i,j-1,k) 間的透水係數。

$$\begin{split} \Delta c_{i}\Delta v_{k} & 為 \pm i \lambda \neq j \ (row) \neq homogeneous cell momenta is a distributed and the set of the set o$$

若 $CR = KR \times \frac{M}{L}$,則連續性方程式可表示為:

$$CR_{i,j-1/2,k}(h_{i,j-1,k} - h_{i,j,k}) + CR_{i,j+1/2,k}(h_{i,j+1,k} - h_{i,j,k}) + CC_{i-1/2,j,k}(h_{i-1,j,k} - h_{i,j,k})$$

$$+ CC_{i+1/2,j,k}(h_{i+1,j,k} - h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k-1/2}(h_{i,j,k-1} - h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k+1/2}(h_{i,j,k+1} - h_{i,j,k})$$

$$= S_{s_{i,j,k}} \frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \Delta r_{j} \Delta c_{i} \Delta v_{k}$$

$$(C-3)$$

上式中:

S_{si,j,k}:cell(i,j,k) 的比儲水量

$$\Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k$$
:cell(i,j,k) 的體積

現在若在多加以考慮源、匯 (Sources、Sinks),則連續性方程式變為:

$$CR_{i,j-1/2,k}(h_{i,j-1,k}-h_{i,j,k})+CR_{i,j+1/2,k}(h_{i,j+1,k}-h_{i,j,k})+CC_{i-1/2,j,k}(h_{i-1,j,k}-h_{i,j,k}) + CC_{i+1/2,j,k}(h_{i+1,j,k}-h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k-1/2}(h_{i,j,k-1}-h_{i,j,k}) + CV_{i,j,k-1/2}(h_{i,j,k+1}-h_{i,j,k})$$
(C-4)
+ $QS_{i,j,k} = S_{s_{i,j,k}} \frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t} \Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k$
- $gmn = , QS_{i,j,k} = \sum_{n=1}^{N} a_{i,j,k,n} = \sum_{n=1}^{N} P_{i,j,k,n} h_{i,j,k} + \sum_{1}^{N} q_{i,j,k,n}$
此處: $a_{i,j,k,n}$: 第 n 個外在的源流進 cell(i,j,k) 的流量。
 $P_{i,j,k,n}(L^2T^{-1}); q_{i,j,k,n}(L^3T^{-1})$ 均等於常數。

而在我們所應用的模式 MODFLOW 中所採用的為後向差分 (Backward Difference),所以對於 cell(i,j,k)來說,若以 t_m 和 t_{m-1} 之間來代表 Δt ,則:

$$\left(\frac{\Delta h_{i,j,k}}{\Delta t}\right) = \frac{h_{i,j,k}^m - h_{i,j,k}^{m-1}}{t_m - t_{m-1}}$$
(C-5)

將方程式(C-5)代入式(C-4)中,則可得:

$$\begin{split} & CR_{i,j-1/2,k} \Big(h_{i,j-1,k}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) + CR_{i,j+1/2,k} \Big(h_{i,j+1,k}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) + CC_{i-1/2,j,k} \Big(h_{i-1,j,k}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) \\ & + CC_{i+1/2,j,k} \Big(h_{i+1,j,k}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) + CV_{i,j,k-1/2} \Big(h_{i,j,k-1}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) + CV_{i,j,k+1/2} \Big(h_{i,j,k+1}^{m} - h_{i,j,k}^{m} \Big) \\ & + P_{i,j,k} h_{i,j,k}^{m} + Q_{i,j,k} = S_{s_{i,j,k}} \frac{(h_{i,j,k}^{m} - h_{i,j,k}^{m-1})}{t_m - t_{m-1}} \Delta r_j \Delta c_i \Delta v_k \end{split}$$

(C-6) 所以將有含 $h_{i,j,k}^{m}$ 的項全移至左邊,而含 $h_{i,j,k}^{m-1}$ 的項移至右邊,則可得:

$$\begin{split} & CV_{i,j,k-1/2}h^{m}{}_{i,j,k-1} + CR_{i,j-1/2,k}h^{m}{}_{i,j-1,k} + CC_{i-1/2,j,k}h^{m}{}_{i-1,j,k} + (-CR_{i,j-1/2,k} - CC_{i-1/2,j,k} \\ & - CR_{i,j+1/2,k} - CC_{i+1/2,j,k} - CV_{i,j,k-1/2} - CV_{i,j,k+1/2} + HCOF_{i,j,k})h^{m}{}_{i,j,k} + CV_{i,j,k+1/2}h^{m}{}_{i,j,k+1} \\ & + CR_{i,j+1/2,k}h^{m}{}_{i,j+1,k} + CC_{i+1/2,j,k}h^{m}{}_{i,j,k} = RHS_{i,j,k} \end{split}$$

(C-7)

其中:

$$HCOF_{i, j, k} = P_{i, j, k} - SCI_{i, j, k} / (t_m - t_{m-1})$$

$$RHS_{i, j, k} = -Q_{i, j, k} - SCI_{i, j, k} h_{i, j, k}^{m-1} / (t_m - t_{m-1})$$

$$SCI_{i, j, k} = S_{s_{i, j, k}} \Delta r_j \Delta c_i \Delta V_k$$

而式(C-7)即是 MODFLOW 程式所解之差分式,可將式(C-7)簡化可得如下式 所示:

$$A_{1,k}h'_{k} = A_{2,k}h'_{k-1} + A_{3,k}u_{k}$$
 (C-8)
其中:
 $A_{1,k}, A_{2,k}, A_{3,k}$:與水文地質、模擬格網及模擬時間有關之矩陣。
 h'_{k} :為Time step k 時網格中心點之水頭。

 h'_{k-1} :為 Time step k-1 時網格中心點之水頭。

 \mathbf{u}_k :為已知之向量,即源匯項。

由對式(C-8) 求解,可計算出 MODFLOW 模式之模擬水位值,對非穩態模式之時刻=m,式(C-8)可以矩陣方式表示為:

$$\underline{A}(m)\underline{h}(m) = \underline{B}(m)\underline{h}(m-1) + \underline{f}(m) \qquad m > 0 \tag{C-9}$$

對敏感度矩陣(Sensitivity matrix)之計算,則採用 sensitivity-equation method。在非穩態時刻=m之 sensitivity equation 表示如下:

$$\underline{A}(m)\frac{\partial\underline{h}(m)}{\partial b_l} = -\frac{\partial\underline{A}(m)}{\partial b_l}\partial\underline{h}(m) + \frac{\partial\underline{f}(m)}{\partial b_l} + \frac{\partial\underline{B}(m)}{\partial b_l}\partial\underline{h}(m-1) + \underline{B}(m)\frac{\partial\underline{h}(m-1)}{\partial b_l} \quad m \ge 1$$
(C-9)

由對式(C-9) 求解,可計算出 MODFLOW 模式之敏感度矩陣。



附錄 D 克利金法(Kriging)

● 區域性變數理論

地質統計學上常以一種空間隨機函數Z(X)表示任何與地質有關之參數,稱為區域性變數(以下簡稱Re.V.),其中X=(x,y,z)代表點所在之空間位置。一般而言,Re.V.所呈現的兩大特質可歸納如下:

- 1、隨機性(randomness),即在所分析區域中任一點值,皆具不確定性。
- 2、結構性(structure),對任一研究區域而言,Re.V.除具有上述的隨機性,亦同時具有某種統計上的結構性,如Re.V.於空間上可能具有某種趨勢(trend),又稱為空間傾向值(drift);以及Re.V.於不同位置的觀測值之間亦可能具有某種程度的相關性(correlation)。在區域性變數理論中,則以半變異元(semivariogram)作為此相關性之量化表示式。

半變異元亦稱為半變異數(semi-variance),其可以Re.V.沿特定方向但不同 位置間之隨機函數或其殘數值(residual)之差的變異程度來表示,其定義式如 下:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2} E \Big[(Z(x) - Z(x+h))^2 \Big]$$
(D-1)

其中,h為相異兩點間之分離向量;若Re.V.具等向性(isotropic),則h為任兩點之分離距離。以下則假設Re.V.為等向性。

就計算上而言,半變異元亦可由下列經驗式求得:

(1)假設Re.V.符合穩定(stationary),亦即Re.V.之平均值為常數,則半變異元可由下式估算[Journel, 1984]:

$$\gamma(h) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left[Z(x) - Z(x+h) \right]^2$$
(D-2)

 (2)假設Re.V.呈現非穩定(nonstationary)狀態,可將隨機函數Z(x)視為一定常 數項m(x) - 稱之空間傾向值(drift),與一隨機項R(x)- 稱之殘數值(residual)
 之和;亦即

$$E[Z(x)] = m(x)$$
$$Z(x) = m(x) + R(x)$$

則半變異元可以由下式估算:

$$\hat{\gamma}(h) = \frac{1}{2n} \sum_{i=1}^{n} \left[R(x) - R(x+h) \right]^2$$
(D-3)

其中,式(D-2)與式(D-3)中之n為落於間距h內之任相異兩樣本點的組合配對數 (pairs) •

有了以上半變異元的推算公式,可計算出各間距內之半變異元值,而最後 半變異元模式之建立則由h對 $\gamma(h)$ 之關係圖中以迴歸法或觀察方式決定。

繼續並介紹三個與半變異元相關之名詞: 1、基值(sill):

在對 $\gamma(h)$ 關係圖中,當 $\gamma(h)$ 漸增且收斂至一定值C,則此C值稱之為基 值。

2、影響範圍(range):

在對 $\gamma(h)$ 關係圖中,基值所對應之分離距 h=r,稱之為影響範圍 (range) 或影響半徑(radius of influence)。 3、金塊效應(nugget effect)

就式(D-1)而言,Z(x)應有
$$\gamma(0) = 0$$
,惟在實際應用上,常有當h=0時,

$$\gamma(0) = C_0 \neq 0$$
的情況發生,此稱為金塊效應。

一般而言,半變異元模式以以下三種模式為最常見,其分別為:

(1) 指數模式(Exponential model):

$$\gamma(h) = C_0 + Sill[1 - \exp(-3h/Range)]$$
(D-4)

(2) 高斯模式(Gaussian model):

$$\gamma(h) = C_0 + Sill \left\{ 1 - \exp\left[-\left(\frac{3h}{Range}\right)^2\right] \right\}$$
 (D-5)

(3) 球狀模式(Spherical model):

$$\gamma(h) = C_0 + Sill\left[\frac{3}{2}(h | Range) - \frac{1}{2}(h | Range)^3\right]$$
 (D-6)

Re.V除了本身之結構性之外,在不同的Re.V之間,可能也有某種程度上之 空間的相關性。在區域性變數理論中,則以複半變異元(Cross-Semivariogram)作 為此相關性化之表示。

如同前述之半變異元之定義, 複半變異元可定義如下:

$$\gamma_{KK'}(h) = \frac{1}{2} E\left[\left(Z_K(x) - Z_K(x+h) \right) \left(Z_{K'}(x) - Z_{K'}(x+h) \right) \right]$$
(D-7)

然而,在真正計算複半變異元時,將會發現複半變異元大多無法如同半變 元一般能夠由前述之模式來建立。因此Myers[1982]提出了一個方法,可由二個 變數之半變異元模式及二個變數和之半變異元模式之關係來推估出此二變數之 複半變異元模式。其關係式如下:

$$\gamma_{kk'}(h) = \frac{1}{2} \Big[\gamma^{+}_{k,k'}(h) - \gamma_{k}(h) - \gamma_{k'}(h) \Big]$$
(D-8)

其中 $\gamma_{kk'}(h)$:變數k 與 k' 之複半變異元

- $\gamma^{+}_{kk'}(h)$:變數k 與 k' 之和之半變異元
- $\gamma_{k}(h)$: 變數k 之半變異元
- $\gamma_{\mu}(h)$: 變數k' 之半變異元

JUL

● 克利金推估

克利金法為一種由地質統計學為理論基礎所發展出來的內插方法,其具有 最佳線性不偏性推估(BLUE)之特質,可對有限區域內的Re.V.進行推估。此外, 不同特性的Re.V.,有不同的克利金推估方法,針對Re.V.為非定常性時,我們 介紹通用克利金法(Universal Kriging)。當Re.V.為非定常性時,

$$m(x) = \sum_{I=1}^{k} a_I f_I(x)$$
 (D-9)

其中, $f_{I}(x)$ 為已知函數, a_{I} 為未知係數。

克利金推估乃是以已知點推估未知點 X_0 之值,其可以表示為線性的形式:

$$Z^*(X_0) = \sum_{i=1}^n \lambda_{i0} Z(X_i)$$
 (D-10)

其中, $Z^*(X_0)$ 為位置 X_0 之推估值, $Z(X_i)$ 為位置 X_i 之觀測值, λ_0 為位置 X_i 推估 X_0 之權重。

上式之 λ_0 需满足不偏性(unbiasedness)及最小推估方差(minimum squared error),這些條件可寫成:

$$E[Z^{*}(X_{0}) - Z(X_{0})] = 0$$
 (D-11)

$$\operatorname{Var}[Z^{*}(X_{0}) - Z(X_{0})] = \min.$$
 (D-12)

將式(D-9)及式(D-10)代入式(D-11)可進一步寫成:

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_{i0} f_{i}(x_{i}) = f_{i}(x_{0})$$
 (D-13)

其中1=1,...,k

而式(D-13)可利用標準拉格蘭茲法,加入k個拉格蘭茲參數 μ_l ,並對 λ_l 作 偏微分使等於零,則可得到下式:

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_{i0} \gamma_{ij} + \sum_{l=1}^{k} \mu_l f_l (X_j) = \gamma_{j0}$$
 (D-14)

其中 *j*=1,...,*n*

聯合式(D-13)及式(D-14)即是通用克利金系統,並可表為下列之矩陣式:

而式(D-7)所述的克利金變異數(Kriging variance)可進一步寫為

$$\boldsymbol{\sigma}_{uk}^{2} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_{i0} \gamma_{i0} + \sum_{l=1}^{k} \mu_{l} f_{l} (X_{0}) - \gamma_{00}$$
 (D-16)

附錄E 卡門濾波(Kalman filtering)

所謂濾波依 R.E.Kalman 氏定義:「濾波為一種數學上之運作,為一已知動態 系統上根據過去既有的資料或監測值而對現在、未來或該系統過去之變數,做 更精確的描述。」

在推估及預測的理論中,目前應用最為廣泛莫過於1960年發表之卡門濾波 理論,此理論之特性如下:

- 卡門濾波理論之構成,為將系統所推估之狀態變數,經監測系統即時校 正,此為卡門濾波理論之一大特徵。
- (2) 當演算時,無需保存以往之資料,在施以逐項計算後,即可求得最適宜之 解答。是故適合電子計算機之計算,尤其對於線上計算(on-line),更能發揮 其功能。
- (3) 卡門濾波理論能於演算過程中可即時校正參數及預測輸出量。

卡門濾波理論因具有以上之特徵,故已被廣泛的應用在控制工學及其他各項領域。

1896

● 卡門濾波理論基礎

卡門濾波理論基礎建立在最小線性變異量誤差估計法(LMV 估計法)與正 交法則(Orthogonality Principle)之上,在此分別作一介紹:

1.最小線性變異量誤差估計法(Linear Minimum Variance of Error Estimation, LMV Estimator):

LMV Estimator 的推估問題可以看做 Bayes Estimator 的最佳化,其目的即是 使貝貽風險 (Bayes risk)達到最小,其主要有三個步驟:

(1) 選定平方差損失函數(Squared-error loss function)為損失函數(Loss function),其定義如下所示:

$$L(X, \hat{X}) = \left\| X - \hat{X} \right\|^{2} = (X - \hat{X})^{T} (X - \hat{X})$$
(E-1)

其中

X:真值

(2) 定義貝貽風險 (Bayes risk
$$\beta(e)$$
):

選用 loss function 的期望值,作為貝貽風險可得下式:

$$\beta(e) = E\{[x - e(Y)]^{T}[x - e(Y)]\}$$

= $\int_{Y} \int_{X} [a - e(Y)]^{T}[a - e(Y)]f_{x,Y}(a, Y)dadY$ (E-2)
= $\int_{Y} \{\int_{X} [a - e(Y)]^{T}[a - e(Y)]f_{x|Y}(a, Y)da\}f_{Y}(Y)dY$

其中

 $f_{x,Y}(a, Y)$: 為 X Y 共同機率分佈函數(The joint probability density function) $f_{x|Y}(a, Y)$: 為 X 之條件機率分佈函數(The conditional probability density function) $f_{Y}(Y)$: 為 Y 之機率分佈函數(The probability density function)

- (3) 根據貝貽法則,選擇最佳的線性估計,使貝貽風險為最小,即使步驟(1) 中的損失函數之期望值為最小。
- 2.正交法則(Orthogonality Principle)

1



 $S = span\{1, y_1\}$

由LMV 估計法所求之推估值為如下之型式:

$$e_0(Y) = \stackrel{\wedge}{x} = a_0 + b_0^T Y$$
 (E-3)

則由上圖可明顯看出 e₀(Y) 會滿足下列兩點:

(1) LMV 估計法所得最佳推估值 $e_0(Y)$ 為不偏估(Unbiased),即:

或
$$E(x) = E[e_0(Y)]$$

 $E[x - (a_0 + b_0^T Y)] = 0$ (E-4)

即[x-e₀(Y)]與1正交。

(2) LMV 估計所得最佳推估值 e₀(Y)之誤差與資料 Y(即 Y=[y₁....,y_m])成正交。

$$E\{[(x - e_0(Y)]Y] = E\{[x - (a_0 + b_0^T Y)]Y\} = 0_{m \times 1}$$
(E-5)

● 卡門濾波理論之假設及推導

 1.卡門濾波理論之假設

 在具備了LMV估計法與正交法則理論基礎之後,考慮時間不連續的系統,

 其系統方程式與監測方程式分別如下所示:

 系統方程式:

 1896

 $x_t = \phi_t x_{t-1} + \theta_t w_t$

 t = 1, 2.....

 (E-6)

監測方程式:

$$y_t = O_t x_t + v_t$$
 $t = 1, 2, \dots$ (E-7)

其中

t:表時刻(Time step)

 X_t :時刻 t 之系統狀態向量 (System state vector at t-th time step)

 ϕ_t :時刻 t 之狀態轉移矩陣 (State transition matrix at t-th time step)

 O_t :時刻 t 之監測矩陣(Measurement matrix at t-th time step)

 W_t :時刻 t 之狀態誤差向量 (Random noise signal from the system process noise random process)

- v_t :時刻t之監測誤差向量 (Random noise signal from the system measurement process noise random process)
- y_t :時刻 *t* 之監測向量(Vector representing the measurement of the system at *t*-*th* time step)

 θ_t :時刻 t 之系統關連矩陣 (System associated matrix at t-th time step) 並假設:

(1) w_t, v_t 為不相關期望值均為零且相互獨立之白噪音 (White noise)。其共變量 如下所示:

$$E(w_{k}w_{l}^{T}) = \begin{cases} Q_{t} & k = l \\ 0_{p \times p} & \text{otherwise} \end{cases}$$

$$E(v_{k}v_{l}^{T}) = \begin{cases} R_{t} & k = l \\ 0_{m \times m} & \text{otherwise} \end{cases}$$
(E-8)
$$E(w_{k}v_{l}^{T}) = 0_{p \times m} & \text{for all } k, l \end{cases}$$
(2) 起始狀態之X₀為一隨機向量,與系統過程和監測嗓音皆不相關。
(3) X₀之期望值為 \overline{X}_{0} ,其定義如下: 1896

$$\overline{X}_{0} = E(x_{0})$$
(E-9)

且其共變量為

$$\operatorname{Cov}(\mathbf{x}_0) = \operatorname{E}[(\mathbf{x}_0 - \overline{\mathbf{x}}_0)(\mathbf{x}_0 - \overline{\mathbf{x}}_0)^{\mathrm{T}}] \quad (\text{E-10})$$

2.卡門濾波理論之推導

(1) \mathbf{x}° 為 LMV 估計法利用 $y_t - y_t$, 估算 $x_t - x_t$ 所得之最佳推估值。

則
$$\hat{\mathbf{x}^{c}} = b_{x} + G(y_{t} - \overline{y_{t}})$$
 (E-11)

^ 由正交法則可得 X [°] 為不偏估值,所以

$$E(x^{c}) = E(x - \overline{x}_{t})$$
(E-12)

且y_k-y_k與1正交

可得
$$E(y_t) = E(\overline{y}_t)$$
 (E-13)

$$b_x = E(x^c) = E(x - x_t) = 0_{n \times t}$$
 (E-14)

則

$$\hat{x}^{c} = \mathbf{G}(\mathbf{y}_{t} - \overline{\mathbf{y}}_{t})$$
(E-15)

(2) 由(1)之推導可得

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x}^{\prime} + \mathbf{x}^{c} \tag{E-16}$$

所以

(4)由於 $K_t(y_t - y_t)$ 為 LMV 估計法利用 $(y_t - y_t)$ 資料,估算 $(x_t - x_t)$ 所得之最 佳估值,故由正交法則可得下式:

$$E\left\{\left[x_{t}-\overline{x}_{t}-G_{t}\left(y_{t}-\overline{y}_{t}\right)\right]\left(y_{t}-\overline{y}_{t}\right)^{T}\right\}=0_{n\times m} \quad (E-20)$$

(5)由於

$$y_t - \overline{y}_t = O_t(x_t - x_t) + v_t$$
 (E-21)

所以

$$E[(x_t - \overline{x}_t)(y_t - \overline{y}_t)^T]$$

$$= E\{(x_t - \overline{x}_t)[O_t(x_t - \overline{x}_t) + v_t]^T\}$$

$$= E\{(x_t - \overline{x}_t)[(x_t - \overline{x}_t)^T O_t^T + v_t]^T\}$$

$$= E[(x_t - \overline{x}_t)(x_t - \overline{x}_t)^T]O_t^T$$

(E-22)

定義 $P(t \mid t-1)$

$$E[(x_{t} - \bar{x}_{t})(x_{t} - \bar{x}_{t})^{T}]^{\Delta} = P(t | t - 1)$$
 (E-23)

所以

(6)同理

$$E[(x_{t} - \bar{x}_{t})(y_{t} - \bar{y}_{t})^{T}] = P(t | t - 1)O_{t}^{T}$$
(E-24)
$$E[(y_{t} - \bar{y}_{t})(y_{t} - \bar{y}_{t})^{T}]$$
$$= O_{t}E[(x_{t} - \bar{x}_{t})(x_{t} + \bar{x}_{t})^{T}]O_{t}^{T} + E(v_{t}v_{t}^{T})$$
$$= O_{t}P(t | t - 1)O_{t}^{T} + R_{t}$$
(E-25)

(7) 由 (4)、(5)、(6) 可得

$$G_{t} = P(t | t - 1)O_{t}^{T} \left[O_{t}P(t | t - 1)O_{t}^{T} + R_{t}\right]^{-1}$$
(E-26)

(8) 根據 M_t 之定義與

$$x_t - x_t = \phi_k (x_{t-1} - x_{t-1}) + \theta_t w_t$$
 (E-27)

且定義
$$P(t | t) = E[(x_t - \hat{x}_t)(x_t - \hat{x}_t)^T]$$
 (E-28)
$$P(t | t - 1) = \phi_k P(t - 1 | t - 1)\phi_k^T + \theta_t Q_t \theta_t^T$$
(E-29)

(9)由於

可得

$$\hat{x}_{t} = \overline{x}_{t} + G_{t}(y_{t} - \hat{y}_{t})$$
 (E-30)

所以

$$P(t \mid t) = E[(x_{t} - \hat{x}_{t})(x_{t} - \hat{x}_{t})^{T}]$$

$$= E\{ [x_{t} - \overline{x}_{t} - G_{t}(y_{t} - \overline{y}_{t})][x_{t} - \overline{x}_{t} - G_{t}(y_{t} - \overline{y}_{t})]^{T} \}$$

$$= P(t \mid t - 1) - P(t \mid t - 1)O_{t}^{T}G_{t}^{T} - G_{t}O_{t}P(t \mid t - 1)$$

$$+ G_{t} [O_{t}P(t \mid t - 1)O_{t}^{T} + R_{t}]G_{t}^{T}$$
(E-31)

又因為

$$G_{t} = P(t \mid t-1)O_{t}^{T} [O_{t}P(t \mid t-1)O_{t}^{T} + R_{t}]^{-1}$$
(E-32)

即

$$G_t \left[O_t P(t \mid t-1) O_t^T + R_t \right] = P(t \mid t-1) O_t^T$$
 (E-33)

所以

$$P(t \mid t) = P(t \mid t-1) - P(t \mid t-1)O_t^T \left[O_t P(t \mid t-1)O_t^T + R_t\right]^{-1} O_t P(t \mid t-1)O_t^T + P(t$$

$$= P(t | t-1) - G_t \left[O_t M_t O_t^T + R_t \right] \left[O_t M_t O_t^T + R_t \right]^{-1} O_t P(t | t-1)$$

$$= P(t | t-1) - G_t O_t P(t | t-1)$$

$$= (I - G_t O_t) P(t | t-1)$$
(E-34)

由以上推導可得如下之卡門濾波運算過程:

$$\overline{x}_t = \phi_t \hat{x}_{t-1} \tag{E-35}$$

$$P(t | t-1) = \phi_t P(t-1 | t-1) \phi_t^T + \theta_t Q_t \theta_t^T$$
(E-36)

$$G_{t} = P(t | t - 1)O_{t}^{T} (O_{t}P(t | t - 1)O_{t}^{T} + R_{t})^{-1}$$
(E-37)

$$\hat{x}_t = x_t + G_t(y_t - O_t x_t)$$
 (E-38)

$$X_t$$
:為系統推估值
 \hat{X}_t :為卡門濾波修正值
 M_k :為系統推估值之共變異矩陣
 G_t :為卡門權重(Kalman gain)
 $P(t|t)$:為卡門濾波修正值之共變矩陣
 $I:單位向量$

附錄 F 平行運算(Parallel computation)

自從西元 1944 年世界第一台電腦 MARKI 問世以來,隨著科技的進步工程 師和科學家對電腦計算速度需求也日益增加。雖然電腦硬體方面的技術不斷提 升,但提高單一處理器(CPU)運算速度仍受到限制。因此為了解決日趨龐大的電 腦計算量,平行運算是目前解決此問題的可行途徑之一。簡而言之,平行處理即 相當於人們彼此之間分工合作的道理。以個人電腦叢集(PC Cluster)為例,就是藉 由網路技術的進步,吾人可將多台電腦連接起來,將一份工作有效地分配給多顆 CPU 同時執行,來突破單一處理器運算速度之限制以提高效率。

平行運算操作環境與所使用之軟體

現階段的多處理器系統每個處理器(CPU)可以同時進行資料處理及數值計算 的工作,即所謂平行電腦(Parallel Computer)。常用的平行電腦分類,可以根據計 算過程中不同處理器間資料傳輸及記憶體的存取方式,將其分類成共享式記憶體 平行電腦和分散式記憶體平行電腦兩種。以下將分別對此兩種平行電腦的運作方 式做一簡介。

1.共享式記憶體平行電腦

共享式記憶體平行電腦(Shared Memory Parallel System),簡稱 SMP,是由多 個同型的 CPU 共用一個記憶體,每個 CPU 和公用記憶體之間透過十字交叉網 (Crossbar)或用系統巴士(System bus)連接即可進行資料的傳輸,如圖 F-1 所示。 此類平行電腦有 CRAY Y-MP C90、Covex C4、HP SPP2000 及 SGI Origin3800 等。

1896

目前 SMP 電腦系統大多備有自動平行化 Fortran 或 C 語言編譯器, 而欲使用 SMP 電腦進行平行運算,只要在編譯選項內選用平行項目,即可自動將程式平 行化。程式執行時再臨時決定要使用的 CPU 個數,且系統會自動地將所指定的 工作平均分配給各顆 CPU,以達到 CPU 之間負載的均勻分佈(Load Balancing)。 由於程式所使用的資料都存放在公用記憶體內,且每一個 CPU 皆到共享記憶體 內讀存取資料,因此沒有 CPU 之間資料傳輸問題。



圖 F-1 共享式記憶體平行電腦架構圖

2.分散式記憶體平行電腦

所謂分散式記憶體平行電腦系統(Distributed Memory Parallel System),是指 多個獨立電腦的集合體中每一個處理器有其自己記憶體及操作系統,不同處理器 間無法直接相互存取資料,唯有透過 Massage Passing 的方式,不同 CPU 之間才 能傳遞資料,亦即透過乙太網路(Ethernet)或光纖分散數據介面(Fiber Distributed Data Interface, FDDI)網路,即可將工作站群(Workstation Clusters)連接起來,形成 一平行電腦,如圖 F-2 所示。此類電腦系統可以連結的 CPU 的個數可以達到 512 個、1024 個或更多,所以又叫大量平行電腦系統(Massive Parallel Processors),簡 稱 MPP。常見的分散式記憶體平行電腦有 IBM Cluster 1350、IBM P690、HP Superdome 及 HP XC6000 Cluster 等。

由於 MPP 電腦沒有自動平行的編譯器,欲在此系統進行平行運算,使用者 必須先學會訊息傳送語言,才能將循序程式及其所使用的資料做適當的切割、重 組,以形成平行程式,並將不同的區塊資料分別傳送到各顆 CPU 之記憶體,每 顆 CPU 再根據平行程式的命令來執行運算。常用的訊息傳送語言有 PVM 及 MPI 兩種。



圖 F-2 分散式記憶體平行電腦架構圖



圖 F-3 PVM 主僕程式演算流程示意圖

PVM(Parallel Virtual Machine) 於 1989 年由美國 Oak Ridge 實驗室所發展。PVM 具有簡單易學,且分散處理能力強的特性,並可免費取得,因而成為第一個受歡迎的分散式計算軟體。PVM 係將程式分成 Master 及 Slave 二大計算模組,Master 主要負責啟動 Slave,傳送資料給 Slave 與整合各 Slave 間之計算結 果及輸出。而 Slave 則主要負責可平行計算之運算工作,本研究若以 PVM 執行 其平行化方式將如圖 F-3 所示。

MPI(Massage Passing Interface)則是第一個標準化的 Message Passing 平行語言,1992年由美國 Argonne 國家實驗室發展而成,內容較 PVM 豐富,且其平行語法亦獲得 NPB(NAS Parallel Benchmark)的承認,有逐漸取代 PVM 的趨勢,

成為平行運算軟體的主流。其通訊模式為 SPMD(Single Program Multiple Data), SPMD 程式中每顆 CPU 皆使用同一個程式,但所不同的是每顆 CPU 有自己的 ID,利用執行條件或用不同指標(Index)的起迄位置來執行迴圈(Do loop)的某一 段,藉由此種方法即可達到染色體分群的平行方式如圖 F-4 所表示。

本研究所使用的平行處理機器為國家高速網路與計算中心之分散式平行電腦 IBM Cluster 1350A,其機型屬於分散式記憶體平行電腦。使用的程式語言為 Fortran,平行化所須之訊息傳送語言為 MPI。



圖 F-4 MPI 程式架構圖

● 循序程式(Sequential Program)之平行化

要將一循序程式(Sequential Program)改寫為平行程式(Parallel Program) 之前,除了須先針對欲求解之問題有一通盤了解外,對程式之計算流程及所使用 之數值方法亦需加以分析,以得知其可平行化程度,且將一問題分給多顆 CPU 同步執行時,亦須考量到各顆 CPU 之間的負載均勻度,以免造成平行效能的降 低。以下對平行處理的步驟作一說明:

1.耗時分析

耗時分析的目的在於得知程式中哪個副程式(Subroutine)及程式迴圈(Loop) 最佔用 CPU 處理時間,以作為平行化之參考。通常對耗時最多的副程式或迴路 進行平行化會得到較良好的效果,但必須考慮其被呼叫(Call)的次數。若其被呼 叫次數非常多,表示此副程式每次執行的時間非常短,若將其平行化則資料傳遞 時間可能大於 CPU 之計算時間,造成 CPU 的閒置反而降低了平行效能。

2. 族群切割(Population Decomposition)

在平行程式中每顆 CPU 皆有各自身份代號,將一迴圈(Loop)分割成多段後, 1896 每顆 CPU 將依本身的代號及指標執行迴圈的某一段,而沒區隔的部分則每一顆 CPU 都要執行,藉由此種方法即可進行族群切割之運算。對於族群切割的原則 及方法說明如下:

(1) 關聯分析(Dependency Analysis)

關聯分析的目的在於探討將模擬的問題分解成多個子問題之後,各個子問題 彼此之間的關聯性。一般而言,平行化之可行與否,視問題之演算流程及特性而 定。各子問題彼此之間的獨立性愈高者,就愈適合進行平行化。在遺傳演算法中 具備了『隱平行』的特性,也就是說對每條染色體而言都有其對應之適合度,而 染色體與染色體之間並不會影響彼此之適合度,也就滿足我們之前所提到的『彼 此的獨立性越高,就越適合進行平行化』。

(2)一維切割

由於 Fortran 語言在記憶體上配置陣列元素時是採用 Column wise 順序,也

就是第一維 Index 變動得最快而最後一維變動得最慢的順序,所以切割最後一維的效率最好,否則就會產生不連續位址存取的現象使得傳輸效率較差。考慮一個 簡單案例,族群大小為 10 條染色體,若欲對求解問題進行平行化,將 J 方向等 切割拆解 2 顆 CPU 處理,亦即 J 方向單迴圈拆解成 2 個迴圈,也就是將一串程 式碼分成 2 個程式碼然後交付給 2 顆 CPU 同時運算處理,則每顆 CPU 處理的族 群數為 5 條染色體。在程式執行迴圈(Do loop)的運算流程中,利用不同 CPU 有 不同迴圈指標(Index)的特性,來分工合作完成整個族群的適合度計算,其可由下 列平行程式表示為:

DO J=J_START , J_END



如此便可完成 2 顆 CPU 的平行運算。如果是 10 顆 CPU 之平行處理,則將 其分成 10 等分以此類推。

3.資料整合處理

由 CPU0 所產生親代的染色體後,經由廣播(Broadcast)給全部的 CPU,等所 有 CPU 都計算完子族群後,再將所所有的適合度傳回 CPU0,再由 CPU0 判斷是 否收斂,如果收斂就輸出結果。假使不滿足收斂條件就再進行複製、交配、突變 等工作,再分配給各個 CPU 繼續計算適合度。

4.均匀負載之分析

分工合作乃是平行運算的基本精神,但若參與平行計算之電腦中有計算速度

快慢不一且工作量分配不均的情況發生時,則平行運算的效能將會大打折扣。目 前分散式記憶體平行電腦之 CPU 因屬於同一型號,其運算速度相等,所以進行 平行運算時,族群切割後各子族群的工作量分配便成了研究重點。各個子族群分 配的工作量愈均匀,其平行效率愈好。而一個程式須要使用多少顆 CPU 及 CPU 的身份排列順序均不是在程式內預先設定,而是在下執行命令時決定,這也是平 行運算具有不因加入平行處理之 CPU 數目而需改變程式內容之可擴充性 (Scalability)特點。利用 MPI 裏的副程式 mpi_comm_size 和 mpi_comm_rank 可以 得知參與平行計算的 CPU 數目及其身份順序,在程式裏再將全部工作量除以 CPU 數目,即可決定出子族群之均勻工作量,稱此為動態負載均勻。

