

Moduli PEST-a za ubrzavanje automatske kalibracije sa regularizacijom kod hidrodinami kih modela

DUŠAN M. POLOM I , Univerzitet u Beogradu,
Rudarsko-geološki fakultet, Beograd
DRAGOLJUB I. BAJI , Univerzitet u Beogradu,
Rudarsko-geološki fakultet, Beograd
JELENA M. MOŠEVIĆ , Univerzitet u Beogradu,
Rudarsko-geološki fakultet, Beograd

Stručni rad
UDC:556.34:531.731
DOI:10.5937/tehnika1506952P

Kalibracija hidrodinami kog modela, u praksi, naj eše se radila manuelno, „probanjem“ sa razli itim vrednostima hidrauli kih parametara i hidrauli kih karakteristika grani nih uslova. Upotrebom programa PEST uvodi se automatska kalibracija modela kojom se znatno smanjuje subjektivni uticaj autora modela na rezultat. Relativno novim pristupom u PEST-u, odnosno uvo enjem tzv. „pilot points“, prevazilazi se koncept homogenih zona sa vrednostima parametara hidrogeološke sredine ili zona sa zadatim grani nim uslovima. Me utim, posledica ovakvog na ina automatske kalibracije je znatno vreme potrebno za obavljanje prora una. Vreme trajanja kalibracije na ovaj na in meri se asovima, nekada i danima. PEST sadrži dva modula koja omogu avaju skra enje vremena tog procesa - Parallel PEST i BeoPEST. U radu su prikazani izvedeni eksperimenti i analiza razli itih slu ajeva upotrebe PEST modula, na osnovu kojih se vrši redukcija vremena potrebnog za kalibraciju modela.

Ključne reči: PEST sa regularizacijom, etaloniranje modela, Parallel PEST, BeoPEST, dužina trajanja automatske kalibracije

1. UVOD

Kalibracija (etaloniranje, tariranje) modela predstavlja najdelikatniju fazu tokom izrade modela tokom koje se uskla uju rezultati simulacije nekog procesa (npr. kretanja podzemnih voda) sa podacima registrovanim u prirodi (stanja pijezometarskog nivoa i elementi bilansa podzemnih voda). Pored toga što predstavlja osetljiv i naporan proces, on naj eše zahteva dosta vremena za uspešnu realizaciju.

Kalibracija modela naj eše se obavlja manuelno (ru no). Poslednjih godina u širu upotrebu ulazi automatska kalibracija modela koja podrazumeva upotrebu namenskih programa. U doma oj praksi znatno je zastupljeniji proces manuelne kalibracije koji se zasniva na nizu probanja sa razli itim kombinacijama vrednosti parametara modela u procesu usaglašavanja prora unatih vrednosti parametara modela sa onim registrovanim u prirodi. Ovakav pristup etaloniranju mo-

dela podrazumeva veliko iskustvo i znanje autora modela, pri emu kona no rešenje ima jasno prisutnu subjektivnu notu.

Kako bi se smanjilo u eše subjektivnog suda autora modela nastala je automatska kalibracija modela kojom se optimizuju vrednosti izabranih parametara hidrogeološkog sistema, pri emu je podrazumevani kriterijum, odnosno ciljna funkcija, minimiziranje razlika izme u registrovanih vrednosti i rezultata simulacije na modelu [1].

U svetu se kao standard za automatsko etaloniranje modela koristi program PEST (Model-Independent Parameter Estimation and Uncertainty Analysis). Ovo je najnapredniji programski paket za optimizaciju parametara bilo kojeg simulacionog modela i analizu nezvesnosti prognoznih prora una. PEST se uspešno koristi u mnogim nau nim oblastima, kao što su: hidrodinamika, hidraulika, hidrologija, geofizika, geomehanika, hemija, aeronautika, mašinsko inženjerstvo, biologija, itd. [2, 3]

Program PEST podrazumeva zadavanje kriterijuma za prora une, posle ega se u znatnom broju iteracija menjaju parametri modela sve dok se izlazni rezultati simulacije približno ne poklope sa merenim

Adresa autora: Dušan Polom i , Univerzitet u Beogradu, Rudarsko-geološki fakultet, Beograd, ušina 7

Rad primljen: 02.11.2015.

Rad prihva en: 10.11.2015.

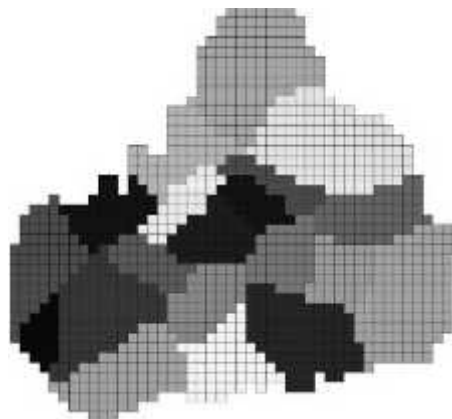
podacima u prirodi (nivoi, proticaji) [4]. Metoda optimizacije koja se koristi u programu PEST zasniva se na Gaus-Markar-Levenbergovom algoritmu pronalazjenja minimuma sumu kvadrata reziduala (razlika između u merenih podataka i rezultata simulacije modela).

PEST omogućava određivanje optimalnih numeričkih vrednosti velikog broja parametara modela za postavljene kriterijume: za neograničeni broj zona hidrogeoloških parametara (vrednosti horizontalne i vertikalne komponente koeficijenta filtracije, specifično izdašnost izdani, specifično uskladištenje, i za neograničeni broj vrsta, karakteristika grančnih uslova (intenzitet infiltracije i evapotranspiracije, dubina evapotranspiracije, proticaji, piježometarski nivoi, konduktiviteti grančnih „head-dependent“ uslova itd.).

Primenom „klasičnog“ programa PEST, dobijeni rezultat etaloniranja modela i dalje sadrži određenu subjektivnu notu autora modela. To se odnosi na dimenzije, oblik i broj zona nekog parametra koje tokom proračuna ostaju nepromenjene. Jedan od rezultata etaloniranja modela koji se ovde analizira su vrednosti parametara modela (npr. koeficijenta filtracije) unutar unapred definisanih zona. U određenoj zoni, jedan parametar modela, bez obzira na dimenzije zone, ima konstantnu vrednost. Ovo za posledicu ima da su unapred definisane zone sa homogenim vrednostima zadatih parametara, što u prirodi nije slučaj (slika 1).

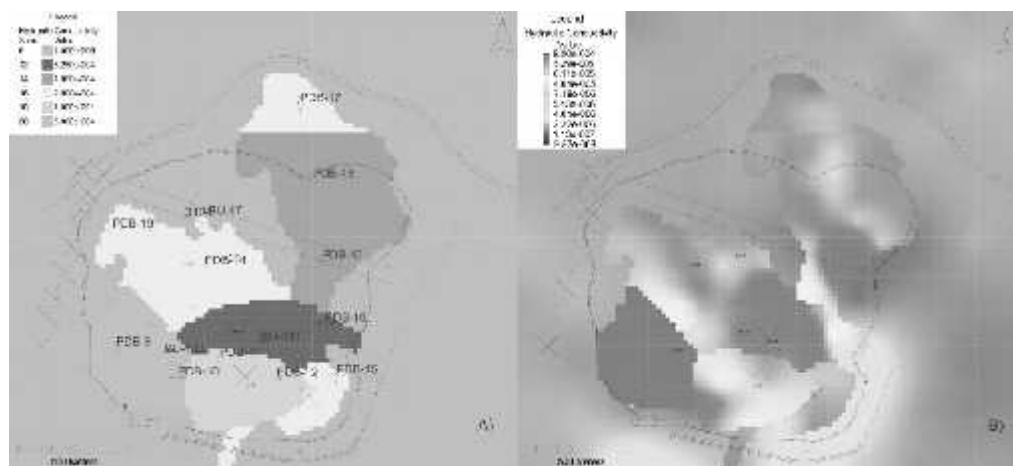
U cilju prevazilaženja i dalje prisutnog subjektivnog karaktera rezultata etaloniranja modela napravljen je potpuno nov koncept koji se zasniva na geostatistici koj obradi podataka i primeni kriging

metode u interpolaciji između tzv. kontrolnih tačaka [5].



Slika 1 - Prikaz homogenih zona parametara hidrodinamičkog modela koji se određuje

Te tačke ne označavaju nužno fiktivne tačke, mada su znatno ređe u pitanju tačke u kojima su vrednosti parametara koji se određuju poznati. Primena kontrolnih tačaka u PEST-u naziva se regularizacija odnosno regulisanje distribucije određenih parametara i/ili vrednosti grančnih uslova. Kod PEST-a svaka kontrolna tačka predstavlja parametar koji se mora odrediti tokom iterativnih proračuna [6]. Kao rezultat ovakvog načina rada dobija se rezultat koji uključuje heterogenost sredine po pitanju distribucije parametara sredine koji su određivani [7]. Na slici 2 su prikazani tradicionalni rezultat kalibracije modela (manuelna ili upotrebom „klasičnog“ PEST-a) i PEST sa regularizacijom.



Slika 2 - Zone homogenih vrednosti parametara modela: a) klasičan PEST b) heterogenost sredine kao rezultat primene PEST-a sa regularizacijom

2. MODULI PEST-A ZA UBRZAVANJE AUTOMATSKE KALIBRACIJE MODELA

Jedan od najvećih problema sa upotrebom kontrolnih tačaka u PEST-u je potrebno vreme za proračune. Povećanje broja kontrolnih tačaka koje se unose u model uslovljava produženje vremenskog perioda koji je

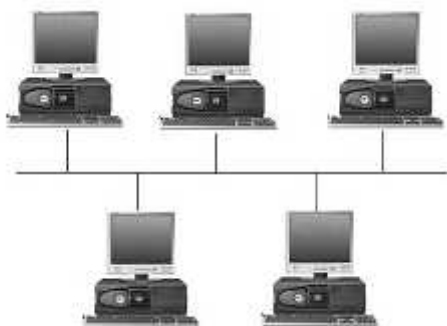
potreban za etaloniranje modela. Svaku kontrolnu tačku PEST posmatra kao parametar ija se optimalna vrednost određuje. Svaki parametar u PEST-u zahteva jednu ili dve simulacije po iteraciji. Ako npr. u modelu ima 1000 pilot tačaka, onda je potrebno 1000 simulacija (ili 2000, ako se primenjuje centralno diferenciranje) samo po jednoj iteraciji. Veći broj iteracija je

esto potreban za svaki prolaz prora una tokom kalibracije modela. Ako svaki prolaz prora una traje nekoliko minuta, onda je potrebno mnogo vremena da se ceo proces završi. Vreme trajanja kalibracije na ovaj na in meri se asovima, nekada i danima.

PEST omogu ava dva na ina ubrzanja prora una: Parallel PEST i BeoPEST. Oba na ina se zasnivaju na simultanoj kalibraciji povezivanjem više ra unara sa osnovnom idejom pove anja procesorske snage koja se koristi u prora unima. Osnovni ra unar naziva se „Master“, a svi drugi „Slave“. Na svakom „Slave“ ra unaru mora postojati direktorijum u kome su smeštene identiti ne polazne datoteke za prora une kao što su na „Master“ ra unaru. U aktuelnoj verziji PEST-a podržano je do 100 „Slave“ ra unara. Posledica ovakvog pristupa prora unima je redukcija vremena potrebnog za etaloniranje modela.

2.1. Parallel Pest

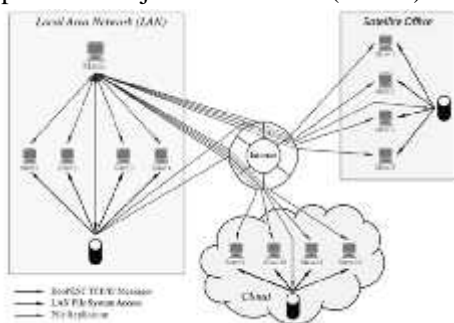
Parallel PEST omogu ava povezivanje više ra unara kroz mrežu, kao što je šematski prikazano na slici 3.



Slika 3 - Primer povezivanja ra unara za primenu Parallel PEST-a

2.2. BeoPest

BeoPEST obezbe uje da se prora uni obavljaju simultano koriste i internet i udaljene povezane ra unare (tzv. Cloud Computing) [8]. „Slave“ ra unari sa kojima se preko interneta povezuje „Master“ ra unar mogu biti na poznatim lokacijama ili se mogu iznajmiti ra unari pod komercijalnim uslovima (slika 4).



Slika 4 - Šema „parallel computing on the cloud“ koriš enjem BeoPEST-a [9]

3. EKSPERIMENT

U cilju analize smanjenja dužine prora una primenom Parallel PEST-a i BeoPEST -a napravljen je eksperiment. „Master“ ra unar na kome je izvršen eksperiment se sastoji od: procesora Intel i 7 3,6 GHz, 12 GB DDRAM III, motherboard Asus-E-Evo i SSD Kingston 128 GB. „Slave“ ra unari su Desktop sa procesorom Intel i3 2.6 GHz 8 GB DDRAM III, dva Laptop ra unara sa procesorom Intel i5 2,6 GHz 8 GB DDRAM III i jedan laptop sa procesorom Pentium Dual Core 1,8GHz.

Za potrebe simulacije rada modula BeoPEST navedeni ra unari su povezani koriš enjem akademske mreže fakulteta i privatnih internet naloga. Prora uni su sprovedeni u Centru za modeliranje podzemnih voda Departmana za hidrogeologiju Rudarsko-geološkog fakulteta (Beograd) u novembru 2013. god.

Hidrodinami ki model koji je etaloniran primenom PEST-a sa regularizacijom karakteriše se strujnom oblaš u dimenzija 22 x 17 km, koja se sastoji od 4 modelska sloja sa ukupno 348.674 elija. Prvo je ra ena stacionarna kalibracija modela. Broj kontrolnih ta aka za prvu kalibraciju modela iznosio je po 157 za horizontalne i vertikalne vrednosti koeficijenta filtracije.

Propustljivost re nog dna kod grani nog uslova reka je podeljena u 16 zona, dok je provodljivost u grani nom uslovu opšteg pijezometarskog nivoa podeljena u 6 zona u modelskim elijama u kojima je zadat ovaj uslov (ukupno 447 elije). U modelu je zadato 14 bunara, a pijezometarski nivoi su registrovani u 28 pijezometara.

Za nestacionarno etaloniranje opisanog modela primenom PEST-a sa kontrolnim ta kama koriš eno je ukupno 157 kontrolnih ta aka za specifi no uskladištenje (Ss), 4 zone za efektivnu infiltraciju sa ukupno 12 kontrolnih ta aka. Vremenski interval od 12 meseci podeljen je na osnovni vremenski korak od 5 dana, koji je na nižem nivou iteracija podeljen na 10 delova, nejednakog trajanja (faktor 1.2).

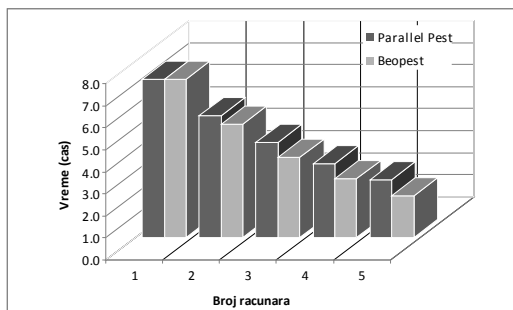
Sprovedenim eksperimentom analizirana je dužina trajanja automatske kalibracije uz pomo programa PEST sa regularizacijom, za slu ajeve rada jednog ra unara i maksimalno do pet ra unara.

4. REZULTATI I DISKUSIJA

Dužina trajanja procesa automatske kalibracije modela za stacionarne i nestacionarne uslove preko Parallel PEST -a i BeoPEST - prikazana je na slikama 5 i 6.

Etaloniranje hidrodinami kog modela u stacionarnim uslovima preko PEST-a sa regularizacijom na jednom ra unaru („Mater“ ra unar) trajalo je 7.2 asa.

Preko Parallel PEST-a uz pet umreženih računara unara navedenih karakteristika proraun je trajao 2.6 asova, odnosno 2.74 puta krae u odnosu na kalibraciju modela samo na jednom računaru. Upotrebom modula BeoPEST isti model je etaloniran za 1.9 as, što je u odnosu na Parallel PEST krae za 0.7 asa.



Slika 5 - Vreme potrebno za automatsku kalibraciju modela u stacionarnim uslovima za sluaj primene Parall PEST -a i BeoPEST-a



Slika 6 - Vreme potrebno za automatsku kalibraciju modela u nestacionarnim uslovima za sluaj primene Parall PEST -a i BeoPEST -a

Nestacionarna automatska kalibracija sa regularizacijom trajala je 19.4 asa na „Master“ računaru, dok je primenom modula Parallel Pest uz „Master“ i etiri „Slave“ računara za kalibraciju modela bilo potrebno 59% manje vremena za istu operaciju, odnosno 8 asova. U sluaju modula BeoPEST ukupno trajanje prorauna na pet računara bilo je 6.1 as. U odnosu na modul Parallel PEST ovo je skraenje vremena etaloniranja modela za 1.9 as.

Veoma veliki modeli sa brojnim parametrima koji se određuju, uključuju i ve i broj kontrolnih taaka, u uslovima nestacionarne automatske kalibracije modela, prakti no ne bi mogli da se izvedu bez koriš enja ve eg broja procesora računara, ili bi ovakva operacija bila krajnje neprakti na.

Potencijalna opasnost koja se javlja kod ovakvog nainarada sa programom PEST (zbog dužine trajanja etaloniranja modela) je nestanak elektri ne energije. Kod Parallel PEST-a ovo bi uzrokovalo potpuni prekid procesa etaloniranja modela, dok kod BeoPEST-a pod uslovom da Master računaru nije ostao bez napajanja,

proraun se i dalje odvijaju, bez obzira da li je nekom „Slave“ računaru ostalo bez elektri ne energije.

Preko BeoPEST-a mogu e je iznajmiti računare znatno ja ih karakteristika u odnosu na one kojima su eksperimenti izvedeni, što omoguava dodatno skraenje vremena potrebno za automatsku kalibraciju modela primenom ovog modula PEST-a.

Sprovedeni eksperiment pokazao je da upotrebom BeoPEST modula u odnosu na modul Parallel PEST dolazi do nešto ve e redukcije dužine trajanja automatske kalibracije modela. Potrebno je naglasiti da eksperiment nije obuhvatio i razli ite vrste (kvalitete) mrežnog povezivanja računara unara u modulu Parallel PEST, kao ni razli ite brzine interneta za modul BeoPEST. Obzirom na isti hardver, dobijeni razlike mogu ukazivati na lošije performanse mreže u odnosu na brzinu interneta, ili na bolju optimizaciju rada modula BeoPEST.

5. ZAKLJU AK

Program PEST se koristi za optimizaciju parametara tokom procesa automatske kalibracije modela, odnosno rešavanja inverznih problema. Program ima široku primenu koja prevazilazi modeliranje podzemnih voda. Razvojem programa PEST uveden je koncept kontrolnih taaka kojim se prevazilazi koncept homogenih zona sa vrednostima parametara sredine ili zona sa zadatim grani nim uslovima. Posledica ovakvog pristupa je znatno vreme potrebno za izvo enje prorauna. Vremenom su u okviru programa PEST ugraena dva modula kojim se može skratiti vreme prorauna (Parallel PEST i BeoPEST) preko me usobnog povezivanja više računara (mrežnim kablovima i preko interneta) odnosno, iskoriš avanjem ve eg procenta angažovane procesorske snage računara.

Za postavljene uslove u eksperimentu koji se odnose na primenu umreženih računara unara u proraunima, vreme trajanje procesa etaloniranja hidrodinami kog modela primenom Parallel PEST-a je 2.74 puta krae i kod simulacije stacionarnih uslova režima podzemnih voda i 2.43 puta krae za nestacionarne uslove. Primenom BeoPEST-a vreme trajanje procesa etaloniranja modela je 3.79 puta krae za stacionarne uslove, odnosno 3.18 puta krae za nestacionarnu simulaciju.

6. ZAHVALNICA

Autori se zahvaljuju Ministarstvu prosvete, nauke i tehnološkog razvoja Republike Srbije za finansiranje projekata „OI-176022“, „TR-33039“ i „III-43004“.

LITERATURA

- [1] Polom i D, Baji D, Risti -Vakanjac V. & okorilo Ili M, Automatic calibration of hydrodynamic

- models using PEST program. Zapisnici Srpskog Geološkog Društva, 13-27, 2014.
- [2] Doherty J. Addendum to the PEST Manual. Brisbane, Australia: Watermark Numerical Computing, pp.1-294, 2013.
- [3] Doherty E. J. & Hunt J. R, Approaches to Highly Parameterized Inversion: A Guide to Using PEST for Groundwater-Model Calibration, Scientific Investigations Report 2010–5169. Reston, Virginia: U.S. Geological Survey, 2010.
- [4] Doherty J. PEST - Model-Independent Parameter Estimation, User Manual: 5th Edition. Brisbane, Australia: Watermark Numerical Computing, pp. 1-336, 2010.
- [5] Tonkin J. M. & Doherty J, A hybrid regularized inversion methodology for highly parameterized environmental models. Water Resources Research, DOI: 10.1029/2005WR003995, 2005.
- [6] Doherty J, Groundwater model calibration using pilot points and regularization. Ground Water, 41(2): 170-177, 2003.
- [7] Doherty E. J, Hunt J. R. & Fienen N.M. Approaches to Highly Parameterized Inversion: Pilot-Point Theory, Guidelines and Research Directions. Scientific Investigations Report 2010-5168. Reston, Virginia: U.S. Geological Survey, 2010.
- [8] Hunt J. R., Luchette J, Schreuder A. W, Rumbaugh J. O, Doherty J, Tonkin J.M. & Rumbaugh D. B. Using a Cloud to Replenish Parched Groundwater Modeling Efforts. Groundwater, 48(3): 360-365, 2010.
- [9] Schreuder W. A. Running BeoPEST. In Proceedings of the 1st PEST Conference, Potomac, Maryland, 2009.

SUMMARY

PEST MODULES WITH REGULARIZATION FOR THE ACCELERATION OF THE AUTOMATIC CALIBRATION IN HYDRODYNAMIC MODELS

The calibration process of hydrodynamic model is done usually manually by "testing" with different values of hydrogeological parameters and hydraulic characteristics of the boundary conditions. By using the PEST program, automatic calibration of models has been introduced, and it has proved to significantly reduce the subjective influence of the model creator on results. With the relatively new approach of PEST, i.e. with the introduction of so-called "pilot points", the concept of homogeneous zones with parameter values of porous media or zones with the given boundary conditions has been outdated. However, the consequence of this kind of automatic calibration is that a significant amount of time is required to perform the calculation. The duration of calibration is measured in hours, sometimes even days. PEST contains two modules for the shortening of that process - Parallel PEST and BeoPEST. The paper presents performed experiments and analysis of different cases of PEST module usage, based on which the reduction in the time required to calibrate the model is done.

Key words: model calibration, PEST, Parallel Pest, Beopest, the duration of the automatic calibration