

水环境系统模拟

汪家权 钱家忠 编著

合肥工业大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

水环境系统模拟/汪家权,钱家忠编著. —合肥:合肥工业大学出版社,2005.9

ISBN 7-81093-310-8

I. 水... II. ①汪...②钱... III. 水环境—模拟系统 IV. X21

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 109877 号

水 环 境 系 统 模 拟

汪家权 钱家忠 编著

责任编辑 陆向军

出 版	合肥工业大学出版社	开 本	787×1092 1/16
地 址	合肥市屯溪路 193 号	印 张	19.125 字 数 465 千字
邮 编	230009	发 行	全国新华书店
电 话	总编室:0551-2903038	印 刷	合肥现代印务有限公司
	发行部:0551-2903198	网 址	www.hfutpress.com.cn
版 次	2005 年 10 月第 1 版	E-mail	press@hfutpress.com.cn
印 次	2005 年 10 月第 1 次印刷	纸 张	山东光华纸业有限公司

ISBN 7-81093-310-8/X·5

定价:36.00 元

如果有影响阅读的印装质量问题,请与出版社发行部联系调换

前 言

水环境系统模拟是水环境系统科学评价、水环境系统规划与管理的前提条件。我国的环境问题相当严峻,在经历了社会经济高速发展的同时,水资源短缺、水环境恶化、水污染加剧等环境问题日益突出,因此,对水环境系统科学地仿真和污染控制是我国当前一项十分迫切的任务,具有理论和现实意义。

本书依据水环境系统自身特点,结合编者主持的国家自然科学基金(No. 50379003)(No. 40202027)、安徽省自然科学基金(No. 03045306)、合肥工业大学创新群体基金项目部分研究成果以及现场应用结果,介绍了水环境系统模拟方法。

本书共九个部分,包括水环境系统模拟概述、水环境系统模拟模型、水环境系统最优化方法的理论基础、水质模拟、水环境系统模拟数值方法、水环境系统管理模型、随机模拟模型及求解方法、Matlab 在水环境系统模拟中的应用以及地下水环境污染与修复技术,较详细地阐述了水环境模拟模型的基本理论和方法,论述了水环境模型模拟存在问题及最新进展。全书注重理论与应用结合研究,紧紧围绕水资源短缺、水污染加剧、水环境恶化这一当今世界所面临的普遍问题,注重反映国内外研究进展和成果,具有多学科交叉的特点。

本书的编写,得到了陈天虎教授、孙世群副教授的支持和帮助;在编写和编辑过程中,武君、蒙媛女士付出了辛勤的劳动,在此一并表示感谢。

本书可用作高等院校与水资源及环境科学与工程有关专业的高年级或研究生教材或参考书,也可供从事水资源、水环境保护与管理研究工作的专业人员参考。

限于编者的学识水平,书中难免存在不当之处,殷望读者不吝赐教。

编 者

2005 年 6 月于合肥

目 录

绪论.....	(1)
一、水环境系统模拟的目的、任务和内容.....	(1)
二、水环境系统模拟研究现状	(2)
三、水环境系统模拟及污染控制的发展前景	(6)
参考文献.....	(8)
第一章 水环境系统模拟模型	(11)
第一节 水环境系统数值模拟模型	(11)
第二节 水环境系统物理模拟模型	(44)
参考文献	(56)
第二章 水环境系统最优化方法的理论基础	(58)
第一节 概述	(58)
第二节 系统分析的理论基础	(63)
第三节 最优化方法的理论基础	(70)
参考文献	(92)
第三章 水质模拟	(93)
第一节 概述	(93)
第二节 地表水水质模拟.....	(104)
第三节 地下水水质模拟.....	(134)
参考文献.....	(142)
第四章 水环境系统模拟数值方法.....	(144)
第一节 概述.....	(144)
第二节 有限差分法.....	(144)
第三节 有限单元法.....	(150)
第四节 水环境系统模拟实例.....	(172)
参考文献.....	(186)
第五章 水环境系统管理模型.....	(188)
第一节 概述.....	(188)
第二节 线性规划管理模型.....	(188)
第三节 非线性规划管理模型.....	(198)

第四节 动态规划管理模型.....	(204)
第五节 遗传算法管理模型.....	(214)
参考文献.....	(224)
第六章 随机模拟模型及求解方法.....	(225)
第一节 概述.....	(225)
第二节 马尔可夫法.....	(226)
第三节 人工神经网络.....	(232)
第四节 混沌预测法在水质模拟预测中的应用.....	(241)
第五节 分形理论.....	(252)
参考文献.....	(260)
第七章 MATLAB 在水环境系统模拟中的应用	(262)
第一节 概述.....	(262)
第二节 MATLAB 的应用举例	(276)
参考文献.....	(289)
第八章 地下水环境污染与修复技术.....	(290)
第一节 地下水环境污染概述.....	(290)
第二节 地下水环境污染修复技术.....	(295)
参考文献.....	(299)

绪 论

一、水环境系统模拟的目的、任务和内容

在现代科学技术发展中,模拟(Simulation)也称为仿真,是一种科学认识客观现实世界的重要方法,已经在物理学、化学、生物学、构造学、地貌学、动力学、水力学、环境科学与工程等不同科学领域中得到了广泛的应用。

就一般意义来说,模拟是指采用某种方法反映或再现客观存在的现实,以便研究它所具有的客观规律性。为了能够客观正确且较逼真地反映客观现实,常需要建立一定的模型,也即模型是模拟的重要反映形式和手段。通过建立模型并经过实践检验就可以对各种现象进行实时模拟、控制、回溯过去状态、预测未来变化趋势,从而为制订方案、全局统筹规划提供依据。

对于水环境系统而言,模拟占有很重要的地位。例如在某一水环境系统(如河流或湖泊系统)的污染控制和规划管理研究中,为了研究污染物在该水环境系统中的变化,我们不会采取向其倾倒大量的污染物(特别是有毒、有害物质)的办法,而是采用模型模拟的方法获取相关参数研究水环境系统的变化规律。这种研究方法根据实际监测资料所提供的部分信息,通过逻辑推理、数理分析或实物模型实验建立起能代替真实系统的模型,然后用模型进行水环境系统变化规律的研究。也可以将模拟理解为一种试验,这种试验并不是在真实的水环境系统中而是在通过某种方法建立的模型(数学模型或物理模型)中进行的。

(一) 水环境系统模拟的目的

一个水环境系统涉及诸多因素,是个复杂的大系统,通过对其变化机理、规律的了解有助于合理地采取各种措施,开展水环境的规划管理、污染防控等方面的工作。因此,水环境系统模拟的目的包括以下几个方面:

1. 掌握水环境系统内部因子变化规律。无论是开展物理模拟还是数学模拟,都可以通过一定的方法获得水环境系统变化的机理和规律,这样在实际的水质管理和控制中,就可以根据目前的水质状况,污染物的迁移转化规律以及今后可能的污染源发生情况来预测今后水体质量的变化情况,以便采取必要的措施,防患于未然。

2. 对水环境系统的变化进行定性和定量描述。水环境保护工作是建立在水质保护规划基础上的,建立合理的水质模型,运用其对水中各控制断面的污染物浓度的变化做出定量和定性的分析,可以为环境保护规划提供科学依据。由于水质数学模型能定量地表达水中污染物浓度和总量的增减,因而我们就能按水体的实际用途和相应的水质标准对污染物的时空变化及残留在水体中的污染物做出定量及定性的分析,并据此来衡量污染物的浓度是否达到所要求的水质标准,也可用水质数学模型及率定参数预测水质发展的趋势等。

3. 节约人力、物力、财力,提高规划管理工作的效率。通过对水环境系统的模拟,可以以较小的代价获得较可靠的结果,为决策者提供相应的决策依据。同时科学的模拟可以节约大量的资金和人员,并且可以保证结果的可靠性。

(二) 水环境系统模拟的任务

1. 量化:即通过对水环境系统的模拟,了解其组成资源的量和质的分布及变化规律,从而为决策提供依据。

2. 优化:通过模拟,采用科学的规划手段对水环境系统进行优化配置、污染防控和分配,使其组成资源的量和质处于最佳状态。

3. 决策:对水环境系统各种资源进行调度、分配,使得其社会效益和环境效益均达到较理想的状态。

4. 控制:使水环境系统的各资源在管理者的监控之下,发挥其最大的社会效益。

(三) 水环境系统模拟的主要内容

水环境系统模拟主要包括对水流运动、水质变化、污染物时空变化规律及对系统进行规划管理和污染防控等方面的内容。因此,对水环境系统进行模拟需要针对具体的模拟对象和模拟要求采用适宜的方法。

二、水环境系统模拟研究现状

(一) 确定性模型模拟

确定性模型一般可以较全面地反映水环境系统变化的机理,目前对其研究较深入。美国环保署(USEPA)1996年在EML/IMES(Exposure Models Library and Integrated Model Evaluation System)上发布了近年来美国公开发行的92个计算机水环境模型,其中地表水模型30个,地下水模型33个,非点源模型29个。表0-1、表0-2和表0-3分别列举了这三类模型的主要功能和适用范围^{[1][2]}。

表 0-1 地表水模型的主要技术指标

模型名称	水体类型	水文模型	水质模型	沉积物	污染物类型	有机污染物的物理化学变化
CEQICM	河 / 河口	一维静态	三维	沉降	易 / 难降解有机物	——
CEQRI	湖	一维动态	一维	吸附 / 沉降	有机物、重金属	——
CEQRIVI	河	二维动态	一维	吸附	有机物、重金属	——
CEQW2	河 / 湖 / 河口	三维动态	二维	吸附 / 沉降	有机物、重金属	——
CORMIX	河 / 湖 / 河口 / 海	一维动态	三维	——	难降解有机物	降解
DYNHYD5	河 / 河口	一维静态	均质	——	难降解有机物	——
DYNTOX	河	一维静态	一维	——	难降解有机物	——
EUTRO5	河 / 湖 / 河口	一维静态	三维	吸附	易 / 难降解有机物	——
EXAMS	河 / 湖 / 河口	一维动态	三维	吸附	难降解有机物	降解 / 挥发 / 转化
HEC-5Q	河 / 湖	一维静态	一维	——	易 / 难降解有机物	——
HEC-6	河 / 湖	一维动态	一维	吸附 / 迁移	难降解有机物	——
HSPF	河 / 湖	二维动态	一维	吸附 / 沉降 / 迁移	易 / 难降解有机物	降解 / 挥发 / 转化
HYDRO2DV	河 / 河口	二维动态	均质	——	难降解有机物	——
HYDRO3D	湖 / 河口	三维静态	均质	——	难降解有机物	——
MEXAMS	河 / 湖 / 河口	一维静态	三维	吸附	重金属	挥发 / 转化

(续表)

模型名称	水体类型	水文模型	水质模型	沉积物	污染物类型	有机污染物的物理化学变化
MICHRIV	河	一维静态	一维	吸附 / 沉降	难降解有机物	——
MINTEQA2	河 / 湖 / 河口	一维静态	均质	吸附重金属	转化	
PCPROUTE	河	三维动态	一维	——	难降解有机物	降解 / 转化
PLUMES	河 / 湖 / 河口 / 海	一维静态	三维	——	难降解有机物	——
QUAL2E	河	一维静态	一维	吸附	易 / 难降解有机物	——
REACHSCAN	河	一维动态	一维	吸附	难降解有机物	挥发
RIVMOD	河 / 湖 / 河口	一维静态	一维	迁移	难降解有机物	——
SEDDEP	河口 / 海	一维静态	三维	沉降	难降解有机物	——
SLSA	河 / 湖	一维静态	一维	吸附	难降解有机物	——
SMPTOX	河	三维动态	二维	吸附 / 沉降	重金属	降解 / 挥发
TOXI5	河 / 湖 / 河口	一维静态	三维	吸附 / 沉降 / 迁移	难降解有机物	降解 / 挥发 / 转化
TWQM	河	一维动态	一维	吸附 / 沉降	有机物、重金属	挥发
WASP5	河 / 湖 / 河口	一维静态	三维	吸附 / 沉降 / 迁移	易 / 难降解有机物	降解 / 挥发 / 转化
WQAM	河 / 湖 / 河口	一维静态	一维	吸附	易 / 难降解有机物	——
WQRRS	河 / 湖	一维静态	一维	沉降	易 / 难降解有机物	——

表 0-2 地下水模型的主要技术指标

模型名称	研究区域	水文模型	溶解相	含水层数量	地下水位	水质模型	污染源类型	污染物的物理化学变化
BIOPLUMELI	非饱和带	二维均质	多相	单个	恒定	二维	点源	扩散 / 吸收 / 降解
CATTI	饱和带	二维均质	单一相	多个	恒定	二维	点源 / 线源	扩散 / 降解
CFEST	饱和带	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
CHAINT	饱和带	二维均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 衰变
CHEMFLO	非饱和带	一维均质	单一相	单个	恒定	一维	点源	扩散 / 吸收 / 降解
DPCT	饱和带	二维非均质	单一相	多个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 衰变
FEMWASTE	任意	二维非均质	单一相	多个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
GETOUT	饱和带	一维均质	单一相	单个	恒定	一维	点源	扩散 / 吸收 / 衰变
GLEAMS	非饱和带	一维非均质	单一相	多个	恒定	一维	点源 / 线源 / 面源	吸收 / 降解
HST3D	饱和带	三维非均质	单一相	单个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 衰变
MMT	饱和带	一维均质	单一相	单个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收
MOCDENSE	饱和带	二维非均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
NWFT/DVM	饱和带	一维非均质	单一相	单个	恒定	一维	点源	扩散 / 吸收 / 衰变
PRINCETON	饱和带	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
PRZM	非饱和带	一维均质	单一相	多个	变化	一维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
RITZ	非饱和带	一维均质	多相	单个	恒定	一维	点源	吸收 / 降解

(续表)

模型名称	研究区域	水文模型	溶解相	含水层数量	地下水位	水质模型	污染源类型	污染物的物理化学变化
RUSTIC	任意	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
RWH	饱和带	二维均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
SAFTMOD	饱和带	二维非均质	单一相	多个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
SESOIL	任意	一维均质	单一相	多个	变化	一维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
SHALT	饱和带	二维非均质	单一相	多个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解 / 衰变
SUTRA	任意	二维非均质	单一相	多个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
SWANFLOW	任意	三维非均质	多相	单个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	——
SWENT	饱和带	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解 / 衰变
SWIFT	饱和带	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 衰变
SWIP2	饱和带	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
TETRANS	非饱和带	一维均质	单一相	多个	变化	一维	点源 / 线源 / 面源	吸收
TRAFRAP—WT	饱和带	二维非均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 衰变
TRANS	饱和带	二维均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解 / 衰变
TRUST	任意	三维非均质	单一相	多个	变化	三维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收
USGS2D—MOC	饱和带	二维非均质	单一相	单个	变化	二维	点源 / 线源 / 面源	扩散 / 吸收 / 降解
VADOFT	非饱和带	一维非均质	单一相	多个	变化	一维	点源	扩散 / 吸收 / 降解
WORM	任意	一维非均质	单一相	多个	变化	一维	点源	吸收 / 降解

表 0-3 非点源模型的主要技术指标

模型名称	流域类型	污染源	流域数量	模型的时间分辨率	污染物进入水体方式	污染物类型	污染物的物理化学变化
AGNPS	农业用地 / 未利用地	点 / 面源	多个	min/s	径流	易降解 / 难降解	——
ANSWERS	农业用地 / 未利用地	面源	多个	min/s	径流 / 渗流	易降解	——
BASINS	农业 / 城市 / 未利用地	点 / 面源	多个	d/h	径流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
CREAMS	农业用地 / 未利用地	面源	单个	min/s	径流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
DR3MQUAL	城市用地	点 / 面源	多个	min/s	径流 / 人工管道	难降解	——
EPIC	农业用地	面源	单个	d/h	径流 / 渗流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
FHWA	城市用地	面源	单个	a/月	径流	易降解 / 难降解	——
GLEAMS	农业用地 / 未利用地	面源	单个	d/h	径流 / 渗流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
GWLF	农业 / 城市 / 未利用地	点 / 面源	多个	d/h	径流 / 渗流	易降解	——
HELP	填埋场	面源	单个	d/h	径流 / 渗流	——	——
HSPF	农业 / 城市 / 未利用地	点 / 面源	多个	min/s	径流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
MRI	农业 / 城市 / 填埋场 / 未利用地	面源	单个	a/月	径流 / 渗流	易降解 / 农药	——
NPSMAP	农业 / 城市 / 未利用地	点 / 面源	多个	d/h	径流	易降解	——

(续表)

模型名称	流域类型	污染源	流域数量	模型的时间分辨率	污染物进入水体方式	污染物类型	污染物的物理化学变化
P8—UCM	城市用地	点 / 面源	多个	min/s	径流	易降解	——
PREWET	湿地	点 / 面源	单个	d/h	径流	易降解 / 难降解	降解
PRZM	农业用地	面源	单个	d/h	径流 / 渗流	农药	吸附 / 降解
QILLUDAS	城市用地	面源	单个	d/h	径流	易降解	——
SIMPLE	城市用地	面源	单个	a/ 月	径流	易降解	——
SLAMM	城市用地	点 / 面源	单个	d/h	径流	易降解	——
SLOSSPHOS	农业用地 / 未利用地	面源	多个	a/ 月	径流	易降解	——
STROM	城市用地	点 / 面源	多个	d/h	径流	易降解 / 难降解	——
STREAM	农业用地	面源	单个	d/h	径流	农药	吸附 / 降解
SWAT	农业用地 / 未利用地	点 / 面源	多个	d/h	径流 / 人工管道	易降解 / 农药	吸附 / 降解
SWMM	城市用地	点 / 面源	多个	min/s	径流 / 人工管道	易降解 / 难降解	降解
SWRRBWQ	农业用地 / 未利用地	点 / 面源	多个	d/h	径流 / 渗流	易降解 / 农药	吸附 / 降解
USGSREGR	农业 / 城市 / 未利用地	面源	单个	a/ 月	径流	易降解	——
WATERSHED	农业用地 / 城市用地	点 / 面源	单个	a/ 月	径流	易降解	——
WMM	农业 / 城市 / 未利用地	面源	多个	a/ 月	径流	易降解 / 难降解	吸附
WQAM	农业 / 城市 / 填埋场 / 未利用地	点 / 面源	多个	a/ 月	径流 / 渗流	易降解 / 农药	吸附 / 降解

对于 QUAL 模型,国外的研究较早^{[3][4]},在国内,吴燕华等^[5]在北京市排水河道通惠河中应用了 QUAL2E 模型模拟了河道全程 BOD₅ 和 DO 的变化。该模型可以很好地定量描述水环境质量在空间和时间上的变化,有助于水环境规划目标的制定。郭永彬等^[6]对 QUAL2K 模型进行了部分修改,对汉江中下游的 BOD₅ 进行了预测,QUAL2K 比 QUAL2E 提高了精度。张俊等^[7]根据大沽河的水流特性和水文、水质实测资料,利用 QUAL2E 综合水质模型,分析确定了大沽河干流丰水期和平水期的水环境容量,为大沽河流域水污染控制的管理和决策提供了科学依据。

国外应用 WASP 模型研究水环境质量变化也开展的较早^{[8][9]}。在我国,周东风等^[10]采用 WASP5 模型划分水库水源保护地。贾海峰等^[11]将 GIS 与 WASP5 模型进行集成,强化了模型的功能,为地表水水质空间模拟提供了有力的支持。廖振良^[12]对 WASP 模型进行了二次开发,并将其应用于对苏州河的水环境整治目标分析中。

MIKE 模型体系由丹麦水动力研究所(DHI)开发,包括 MIKE11^[13]、MIKE21^{[14][15]}和 MIKE3^[16]。李军等^[17]采用 MIKE11 模型,分析了南沙河水质,结果表明 MIKE11 模型可以使用在南沙河流域管理规划中。

Bencala, K. E. 等^[18]、Broshears, R. E. 等^[19]、Valett, H. M. 等^[20]也都将 OTIS 模型应用于水质模拟中,并取得了较好的效果。CE—QUAL—W2 模型^[21]、EFDC 模型^{[22][23]}目前也都分别有一定的应用。

（二）随机方法模拟

随机方法模拟并没有考虑水环境系统水质变化的内在机理,但由于其本身数理基础完善,对于特定研究区域的模拟效果通常较好,因此也大量被用于水环境系统模拟中。

马尔可夫法:马占青等^[24]应用数据加载法提出了GM(1,1)的修正模型,通过灰色预测法和马尔可夫链预测法的耦合,建立了城市污水排放量的灰色马尔可夫预测模型。钱家忠等将马尔可夫模型与灰色模型结合^[27],成功预报了矿坑涌水量问题;将马尔可夫模型与时间序列模型结合,对地下水资源评价中降水量预报,尤其是降水峰值的预报精度较高^{[28][29]}。

灰色模型法:孙鸣等^[30]采用了灰色模型对大武水源地的水质变化进行了预测,为水质规划提供了参考依据。张永波等^[33]依据城市人口、经济、水资源和水环境之间的相互影响、相互制约关系,建立了城市水资源水环境系统多阶段灰色动态仿真模型,为解决城市水资源水环境系统规划问题提供了一条有效途径。

人工神经网络法:国内外近年来也将这一新兴方法应用于水质模拟中。Marina Campolo等^[34]、Bin Zhang等^[35]、T. R. Neelakantan等^[36]、Sharad Kumar Jain^[37]及其他学者都将人工神经网络法与水质模拟相结合,取得了较好的模拟结果。在国内,魏文秋等^[38]引入神经网络技术建立水质预测模型,在四川沱江的实际应用中取得了较好的预测精度。郭劲松等人^[39]将人工神经网络方法引入到河流水质模型建模中,采用长江干流重庆段的史册水质样本进行训练和检验,建立了BOD—DO耦合BP人工神经网络水质模型,获得了较好的预测精度。郭宗楼等^[40]提出了因素状态BP网络,并将建立的水质预测因素状态人工神经网络模型应用于丹江口水库,取得了较好的结果。李莹等^[41]根据东江水质监测实际情况提出了两种基于自适应神经网络的惠州段水质预测方案,并给出了算法,结果精度高、适用范围广。

目前还有大量其他非机理性模拟预测方法被用于水质模拟,众多环境工作者将在其他领域应用效果良好的方法比如自组织法^[42]、多元回归模型^[43]、混沌预测^[44]等引入到水质模拟预测中,取得了不错的结果。还有一些研究者将未确知数学思想应用于水质模拟预测中^[45],进一步拓展了水质模拟预测方法。

三、水环境系统模拟及污染控制的发展前景

（一）综合水质模型的完善

自1925年第一个水质模型问世以来,水质模型已经从单一组分的研究转向多组分相互作用的综合模型开发上,随着对污染物污染机理的深入研究,很多科研组织已开发了不少综合水质模型。当然现有的综合水质模型也存在一些亟待解决的问题:①并未完全清楚污染物在介质中的迁移转化过程,近似假设仍可能导致模拟较大地偏离真实情况;②模型比较复杂,导致许多参数难以较准确度和估值,参数的随机性也会引起结果的不确定性。因此,加强污染机理研究、提高参数估值准确度及研究模型的不确定性将成为河流综合水质模型在今后发展中的一个重要方向。

（二）基于人工神经网络的研究

人工神经网络除了可以直接应用于对水质进行模拟预测外,还可以被嵌入到水质模型模拟中,如通过人工神经网络率定水质模型中的各参数,使其对水质的分析和模拟过程更趋于合理化,同时增强处理非线性问题的能力,提高预报精度等,可以想象这将会成为将来水质模拟预测的重要方向之一。

（三）基于地理信息系统的研究

地理信息系统(Geographic Information System, 简称为 GIS)的概念是 1963 年由 Roger F. Tomlinson 提出,在 20 世纪 80 年代开始走向成熟。它以具有地理位置的空间数据为研究对象,以空间数据库为核心,采用空间分析和建模的方法,适时提供多种空间的和动态的资源与环境信息。近年来 GIS 已广泛应用于各领域,特别在水质模拟与管理规划方面发挥了重要作用^{[46][47][48][49]}。由于江河流域水环境信息是具有空间特征的信息,通过应用 GIS 技术可使流域水环境信息从单一的表格、数据形式逐步转变为具有生动形象的图形、图像方式,并且以这些信息为基础,还可完成对相关流域水环境的预测、规划,以及对某些重大水环境问题进行预警和防范。从而将 GIS 技术结合于水环境污染模拟、控制和决策也是今后水质模拟预测的重要研究课题。

（四）模拟预测不确定性的研究

无论是应用机理性水质模型还是采用非机理性方法进行水质模拟预测,由于实际水环境系统中存在很大的随机性和偶然因素,从而导致输出结果的不确定性。为了提高模拟预测的精确度和结果的可靠性,有必要对现有的水质机理性模型进行研究修正,同时也应针对不同的非机理性方法应用条件合理选择,以保证结果的有效性。因此,如何克服不确定性对模拟预测带来的负面影响也将是今后水质模拟预测研究的重要内容之一。

（五）基于可视化技术和 VR 技术的研究

“可视化是将一种抽象符号转换为几何图形的计算方法,以便研究者能够观察其模拟与计算的过程和结果^[50]。”可视化技术是在计算图形学的基础上发展的一门新兴学科,它融合了计算机图形技术、网络技术、视频技术、计算机辅助设计与交互技术等。由于可视化技术的优越性,目前国内外都积极将其引入到水质模拟和环境管理中^{[51][52][53][54]}。

虚拟现实技术(VR)^{[55][56]}是对计算机仿真与视觉技术的延伸,它于 20 世纪 80 年代后期兴起,可利用计算机技术生成逼真的三维视觉、听觉、触觉等感觉形式的虚拟世界。目前 VR 技术也已开始在环境领域中应用^{[57][58]}。随着 VR 技术的进一步发展和其应用的深化,对河流水质进行模拟并最终实现模拟结果的可视化、动态化、虚拟调度水质已经成为一项很有意义和挑战性的课题。因此如何将可视化技术和 VR 技术与水质模型相结合实现结果的动态可视交互性必将成为今后水质模型的又一重要研究方向。

（六）地下水环境污染修复技术

地下水环境修复技术是近 10 年来环境工程和水文地质研究发展最为迅猛的领域之一。以美国为例:1980 年,美国国会首次把地下水净化列为国家最优先问题,通过了综合环境响应、赔偿和责任法案(Comprehensive Environment Response, Compensation, and Liability Act, 简称 CERCLA),1984 年,国会通过了修订资源保护与恢复法案(Resource Conservation and Recovery Act, 简称 RCRA)。CERCLA 和 RCRA 修正案通过后,美国各州都相继通过了要求净化污染地下水的法律。CERCLA 和 RCRA 强烈影响了州的法律。

自 1991 年后,与地下水和土壤污染修复技术有关的专利数量高速增长。欧美国近 10 年来的水文地质研发经费的重点投向了地下水污染与环境修复技术研究。近 10 年来在 Ground Water, Water Resources Research, Environmental Science and Technology, Applied Geochemistry, Water Research, Ground Water Monitoring and Remediation, Journal of Contaminant Hydrology 等西方水文地质、环境科学与工程类主流学术刊物上发

表的与地下水有关的论文多与地下水污染有关。相比之下,我国同类研究十分薄弱,可以预计地下水环境修复技术在我国加快经济建设的进程中将会越来越得到重视和加强。

参 考 文 献

- [1] USEPA. Exposure models library and integrated model evaluation system[R]. EPA/600/C-92/002, 1996
- [2] 李本纲,陶澎,曹军. 水环境模型与水环境模型库管理[J]. 水科学进展,2002,13(1):14-20
- [3] Linfield C. Brown, Thomas O. Barnwell, Jr. The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAD: Documentation and User Manual[R]. Athens, GA: US Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory, 1987
- [4] Park, S. S., Lee, Y. S. A multiconstituent moving segment model for the water quality predictions in steep and shallow streams[J]. Ecological Modelling, 1996, 89: 121-131
- [5] 吴燕华,王金如. 河流综合水质模型 QUAL2E 在通惠河的应用[J]. 水资源保护, 1995, 1: 34-38
- [6] 郭永彬,王焰新. 汉江中下游水质模拟与预测——QUAL2K 模型的应用[J]. 安全与环境工程, 2003, 10(1): 4-7
- [7] 张俊,余宗莲,王成见等. 大沽河干流青岛段水环境容量研究[J]. 青岛海洋大学学报, 2003, 33(5): 665-670
- [8] Thomann, R. V. and J. J. Fitzpatrick. Calibration and Verification of a Mathematical Model of the Eutrophication of the Potomac Estuary[R]. Prepared for Department of Environmental Services, Government of the District of Columbia, Washington, D. C., 1982
- [9] JRB, Inc. Development of Heavy Metal Waste Load Allocations for the Deep River, North Carolina[R]. JRB Associates, McLean, VA, for U.S. EPA Office of Water Enforcement and Permits, Washington, DC, 1984
- [10] 周东风,杨金海. 应用 WASP5 水质模型划分水库水源保护区. 山西水利科技, 1998, 4: 1
- [11] 贾海峰,程声通,杜文涛. GIS 与地表水水质模型 WASP5 的集成[J]. 清华大学学报(自然科学版), 2001, 41(8): 125-128
- [12] 廖振良. 感潮河流域水质模型研究及苏州河水环境整治目标分析[D]. 上海: 同济大学, 2002
- [13] MIKE11: users & reference manual[R]. Danish Hydraulics Institute, Hørsholm, Denmark, 1993
- [14] MIKE21 User Guide and Reference Manual[R]. Danish Hydraulic Institute, 1996
- [15] Irina Chubarenko, Irina Tchepikova. Modelling of man-made contribution to salinity increase into the Vistula Lagoon(Baltic Sea)[J]. Ecological Modelling, 2001, 138: 87-100
- [16] MIKE 3 Eutrophication Module, User guide and reference manual, release 2. 7[R]. Danish Hydraulic Institute, 1996
- [17] 李军,井艳文,潘安君等. MIKE11 模型结构及其在南沙河流域规划中的应用[J]. 北京水利, 1998, 5: 5-10
- [18] Bencala, K. E., Walters, R. A. Simulation of solute transport in a mountain pool-and-riffle stream — A transient storage model[J]. Water Resources Research, 1983, 19(3): 718-724
- [19] Broshears, R. E., Bencala, K. E., Kimball, B. A., et al. Tracer-dilution experiments and solute-transport simulations for a mountain stream, Saint Kevin Gulch, Colorado[R]. U. S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 92-4081(18), 1993
- [20] Valett, H. M., Morrice, J. A., Dahm, C. N., et al. Parent lithology, surface groundwater exchange, and nitrate retention in headwater streams [J]. Limnology and Oceanography, 1996, 41(2): 333-345

- [21] Paul H. Martin, Eugene J. LeBoeuf, Edsel B. Daniel, et al. Development of a GIS — based spill management information system[J]. Journal of hazardous materials, 2004, B112: 239 — 252
- [22] USEPA. Hydrodynamic and water quality model of Christina River Basin, Final report[R]. United States Environmental Protection Agency, Region III, Philadelphia, PA, 2000
- [23] John M. Hamrick, William B. Mills. Analysis of water temperatures in Conowingo Pond as influenced by the Peach Bottom atomic power plant thermal discharge[J]. Environmental science & policy, 2000, 3: S197 — S209
- [24] 马占青, 崔广柏, 杨宏杰等. 城市污水排放的灰色马尔柯夫预测模型[J]. 河海大学学报, 2000, 28(5): 49 — 53
- [25] 钟政林, 曾光明, 卓利等. 马尔科夫过程 in 河流综合水质预报中的应用[J]. 环境工程, 1997, 15(2): 41 — 44
- [26] 王巨宏. 平顶山市湛河水水质预报模型研究[J]. 干旱环境监测, 2001, 15(3): 173 — 175
- [27] 钱家忠, 朱学愚, 吴剑锋等. 矿坑涌水量的灰色马尔可夫预报模型. 煤炭学报, 2000, 25(1): 71 — 75
- [28] 钱家忠, 吴剑锋, 朱学愚等. 地下水资源评价与管理数学模型的研究进展. 科学通报, 2001, 48(2): 99 — 103
- [29] 钱家忠, 朱学愚, 吴剑锋. 地下水资源评价中降水量的时序 —— 马尔可夫模型. 地理科学, 2001, 21(3): 31 — 34
- [30] 孙鸣, 徐品. 灰色模型在地下水水质预测中的应用[J]. 河北地质学院学报, 1994, 17(2): 192 — 197
- [31] 庞熙. 应用灰色预测法预测柳江柳州市区河段氨氮含量的尝试[J]. 广西水利水电, 2001, 3: 20 — 22, 28
- [32] 冯启言, 马长文, 何康林等. 京杭运河徐州段水污染趋势预测[J]. 中国矿业大学学报, 2002, 31(6): 588 — 591
- [33] 张永波, 马祖宜, 张庆保. 城市水资源水环境系统多阶段灰色动态仿真模型[J]. 太原理工大学学报, 1998, 29(3): 260 — 263, 267
- [34] Marina Campolo, et al.. Forecasting river flow rate during low — flow period using neural network [J]. Water resource research, 1999, 35(11): 3547 — 3552
- [35] Bin Zhang, et al. Prediction of water runoff using Bayesian concepts and modular neural network [J]. Water resource research, 2000, 36(3): 753 — 762
- [36] T. R. Neelakantan, N. V. Pundarikanthan. Neural network — based simulation — optimization model for reservoir operation [J]. Journal of water resources planning and management, 2000, 126(2): 57 — 64
- [37] Sharad Kumar Jain. Development of integrated sediment rating curves using ANNs[J]. Journal of hydraulic engineering, 2001, 127(3): 181 — 193
- [38] 魏文秋, 孙春鹏. 神经网络水质模拟预测模型[J]. 中国农村水利水电(农村水利与小水电), 1996, 1 — 2: 26 — 29
- [39] 郭劲松, 霍国友, 龙腾锐. BOD — DO 耦合人工神经网络水质模拟的研究[J]. 环境科学学报, 2001, 21(2): 140 — 143
- [40] 郭宗楼, 申玮. 水质预测的因素状态网络模型研究[J]. 浙江大学学报(农业与生命科学版), 2000, 26(4): 361 — 364
- [41] 李莹, 邹经湘, 张宇羽等. 自适应神经网络在水质预测建模中的应用[J]. 系统工程, 2001, 19(1): 89 — 93
- [42] 易顺民, 赵文谦, 蒲迅赤. 地下水污染的自组织预测模型及其应用[J]. 地球科学 —— 中国地质大学学报, 1999, 24(6): 643 — 647
- [43] 李博之. 鄱阳湖水体污染现状与水质预测[J]. 长江流域资源与环境, 1996, 5(1): 60 — 66

- [44] 徐敏,曾光明,谢更新等. 混沌理论在河流溶解氧预测中的应用初探[J]. 环境科学学报,2003,23(6), 776—780
- [45] 李如忠,王超,汪家权等. 基于未确知信息的河流水质模拟预测研究[J]. 水科学进展,2004,15(1):35—39
- [46] 杨具瑞,方铎. GIS支持下水质模型模拟的实现研究[J]. 甘肃农业大学学报,1999,3:307—309
- [47] 董浩. VR—GIS技术在小流域治理规划中的应用研究[J]. 水利水电技术,2002,33(2):40—42
- [48] Qihao Weng, Modeling Urban Growth Effects on Surface Runoff with the Integration of Remote Sensing and GIS[J]. Environmental management, 2001,28(6): 737—748
- [49] Dale D. Huff, William W. Hargrove, Robin Graham, et al. A GIS/Simulation Framework for Assessing Change in Water Yield over Large Spatial Scales [J]. Environmental Management, 2002, 29(2):164—181
- [50] Mc Cormick BH, Defanti TA, Brown MD. Visualization scientific computing [J]. Computer Graphics, 1987,21(6):1—14
- [51] 任秀丽,王洪君. 计算机可视化技术在水质量评价中的应用[J]. 松辽学刊(自然科学版),1999,3: 34—36
- [52] 胡文海,刘毓,史忠科. 多河段线性水质模型及其可视化仿真[J]. 系统仿真学报,2001,13(5):656—658,673
- [53] Clifford I. Voss. Editor's Message: Scientific visualization in hydrogeology [J]. Hydrogeology Journal, 1999,7:153—154
- [54] Sorrento. Seventh Triennial International Symposium on Fluid Control, Measurement and Visualization [J]. Experiments in Fluids, 2002,32:734
- [55] 曹芬芳. 虚拟现实技术[M]. 上海:上海交通大学出版社,1997
- [56] Nathaniel I D, Mavor S, Virtual reality, scientific and technological challenges [M]. Washington DC: National Academy Press, 1995
- [57] Adrian, B. & Ian, G. Virtual reality — a role in environmental engineering education [J]. Water Science and Technology, 1998,38(11): 303—310
- [58] 柳静献,陈宝智,王金波. 虚拟现实及其在粉尘扩散研究中的应用[J]. 中国安全科学学报,2000, 10(6):9—13

第一章 水环境系统模拟模型

水环境系统模拟通常分为两类：数值模拟和物理模拟。数值模拟是以水环境系统数学方程为基础，以数值方法和计算机技术为手段，通过对水环境系统的数值模拟，研究其发展变化趋势，为污染防治、规划管理提供理论依据。数值模拟具有省时、高效、无比例影响、可重复性强等优点，因而应用相当广泛。物理模拟即比例模拟，是以模型和原型之间的物理或几何相似为基础的一种模拟方法，物理模拟以再现原型中发生的物理过程为追求目标，具有直观性和物理概念明确的优点。

第一节 水环境系统数值模拟模型

对水环境系统进行数值模拟，首先需要建立数学模型。数学模型是指通过抽象和简化，使用数学语言近似刻画实际水环境系统各因素的变化，以便人们更深刻地认识所研究的对象。数学模型不是对现有系统的简单模拟，而是对水环境系统所具有的信息进行提炼、分析后得到的结果，因而能够较准确地表达水环境系统的内在特征，从而为合理进行数值模拟奠定基础。

通常，从不同的角度，可以对数学模型进行各种形式的分类。比如按所取变量是否为确定值分为确定性模型和随机模型；按变量是否连续分为连续模型和离散模型；按变量是否随时间变化分为静态（稳态）模型和动态模型；按变量之间的关系，可分为线性模型和非线性模型；按模型中参数的性质，可分为集中参数模型和分布参数模型；按建模目的可分为模拟模型、预测模型、优化模型、决策模型、控制模型等。

下面将根据建模目的介绍两类模型——模拟模型和最优化模型。

一、模拟模型

水环境系统的模拟模型是通过对水环境系统自身信息进行提取、分析后建立的系统变量变化规律的数学模型。当模型经过校正和检验，能够较逼真地模拟现实水环境系统的变化发展时，即可采用其对该系统进行模拟。通常模拟模型可以根据变量是否具有确定性分为确定性模型和随机模型。

（一）确定性模拟模型

确定性模型中的变量是遵循某种确定的规律变化和运动的，若要对进入水环境系统的污染物质进行模拟，就必须先了解污染物质在水环境系统中的运动特征。

1. 污染物质在水环境系统环境介质中的运动特征^{[1][2]}

环境介质是指在自然环境中能够传递物质和能量的媒介。水是水环境系统的基本环境介质。

污染物进入水环境系统将做复杂的运动、变化。

① 污染物在环境介质中的迁移运动——推流迁移

推流迁移是指污染物的空间位置在环境介质作用下产生的转移。单纯的推流作用只能改变污染物质的空间位置,并不能降低污染物的浓度,也不能降低污染物的质量。

污染物的推流迁移一般采用迁移通量(单位时间通过单位面积的污染量)来表述:

$$\begin{aligned} f_x &= u_x C \\ f_y &= u_y C \\ f_z &= u_z C \end{aligned} \quad (1-1)$$

其中: f_x, f_y, f_z —— x, y, z 方向上的污染物推流迁移通量, $[M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}]$;

u_x, u_y, u_z ——水环境系统的环境介质在 x, y, z 方向上的流速分量, $[L \cdot T^{-1}]$;

C ——污染物在环境介质中的浓度, $[M \cdot L^{-3}]$ 。

② 环境介质对污染物的分散作用

在研究污染物在环境介质中的分散作用时,通常假定污染物质点与水的质点的动力学特征一致。这样,大多数溶解性污染物质、胶体污染物或浮力中性的颗粒物质都可满足这一假设。环境介质对污染物包含三种形式的分散作用:分子扩散、湍流扩散和弥散。

分子扩散是指由分子的随机热运动引起的质点分散现象,这一现象存在于污染物的所有运动过程中。分子扩散过程服从费克第一定律,也即分子扩散的质量通量与扩散物质的浓度梯度成正比:

$$\begin{aligned} I_{m,x} &= -E_m \frac{\partial C}{\partial X} \\ I_{m,y} &= -E_m \frac{\partial C}{\partial Y} \\ I_{m,z} &= -E_m \frac{\partial C}{\partial Z} \end{aligned} \quad (1-2)$$

其中: $I_{m,x}, I_{m,y}, I_{m,z}$ ——污染物在 x, y, z 方向上的分子扩散的质量通量, $[M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}]$;

E_m ——分子扩散系数,指单位浓度梯度下物质在单位时间内通过单位面积的量,其数值量级在河流系统中约为 $10^{-5} - 10^{-4} m^2/s$, $[L^2 \cdot T^{-1}]$;

C ——污染物在环境介质中的浓度, $[M \cdot L^{-3}]$ 。

分子扩散具有各向同性,式(1-2)中的负号表示质点是由浓度高处向浓度低处迁移,即指向负浓度梯度方向。

湍流扩散也称为紊流扩散,是指在湍流流场中物质质点由于湍流脉动,其各种状态(流速、压力、浓度等)的瞬时值相对于其时平均值的随机脉动而产生的分散现象。当流体质点的湍流瞬时脉动速度为稳定的随机变量时,湍流扩散规律可以用费克第一定律来描述:

$$\begin{aligned} I_{t,x} &= -E_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \\ I_{t,y} &= -E_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial Y} \\ I_{t,z} &= -E_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial Z} \end{aligned} \quad (1-3)$$

其中： $I_{t,x}$ 、 $I_{t,y}$ 、 $I_{t,z}$ ——污染物在 x 、 y 、 z 方向上由湍流扩散所导致的质量通量， $[M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}]$ ；

E_x 、 E_y 、 E_z —— x 、 y 、 z 方向上的湍流扩散系数， $[L^2 \cdot T^{-1}]$ ；

$\bar{C}$ ——湍流流场中某一点处时间平均的污染物浓度值， $[M \cdot L^{-3}]$ 。

弥散是指由于流体的横断面上各点的实际流速分布不均匀所产生的剪切而导致的分散现象。河流中的弥散现象主要是内河床的剪切阻力造成的，河口的弥散现象则主要由水流的交汇所引起，而地下水中的弥散现象起因则更复杂。

弥散作用所引起的质量通量也可仿照费克第一定律来描述：

$$\begin{aligned} I_{D,x} &= -D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial X} \\ I_{D,y} &= -D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial Y} \\ I_{D,z} &= -D_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial Z} \end{aligned} \quad (1-4)$$

其中： $I_{D,x}$ 、 $I_{D,y}$ 、 $I_{D,z}$ ——污染物在 x 、 y 、 z 方向上的由于弥散作用所导致的质量通量， $[M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}]$ ；

D_x 、 D_y 、 D_z —— x 、 y 、 z 方向上的弥散系数，弥散系数往往具有更大的各向异性，一般河流中弥散作用的量值为 $10^2 - 10^4 m^2/s$ ， $[L^2 \cdot T^{-1}]$ ；

$\bar{C}$ ——湍流流场中某一点处时间平均的污染物浓度值， $[M \cdot L^{-3}]$ 。

③ 污染物的衰减和转化

污染物进入环境后，在外界因素的作用下会发生引起污染物质结构、组成变化的作用。当经过一系列变化后，污染物质被分解成稳定存在的小分子，如 H_2O 、 CO_2 等，这种过程就被称为衰减或污染物的降解。

根据污染物衰减或转化过程的快慢，可将其分为守恒物质和非守恒物质。守恒物质进入环境后，其空间位置随环境介质的运动而不断变换，其初始浓度随分散作用不断向周围扩散而逐渐降低，但它的总量并不发生改变。例如重金属、很多高分子有机化合物都属于守恒物质。对于那些对生态系统、人体健康有害，或暂时无害但可在环境中累积，从长远看有害的守恒物质要严格控制其排放浓度和总量。

非守恒物质进入环境后，会随着环境介质流动而改变位置、不断扩散而降低浓度，还会因自身衰减而加速浓度的下降。非守恒物质的衰减方式有两种：一种由其自身的运动变化规律所决定；一种是在环境因素作用下，由于化学的或生物的反应而不断降解。

污染物在环境中的衰减过程基本符合一级反应动力学规律，即

$$\frac{dC}{dt} = -KC \quad (1-5)$$

其中： C ——污染物的浓度， $[M \cdot L^{-3}]$ ；

t ——反应时间， $[T]$ ；

K ——反应(衰减)速率常数， $[T^{-1}]$ 。

2. 水环境系统模拟确定性模型^{[1][2]}

确定性模型是根据污染物在环境介质中的基本运动特征,以质量守恒原理为理论基础,通过演绎法建立描述污染物在环境介质中的运动变化规律的微分方程。

便于讨论,假定进入环境的污染物质点与环境介质质点具有相间的流体力学特性,这样,就可以把污染物质点当作流体质点进行分析,使建模过程大大简化。而在实际中污染物质点除随流体质点运动外,还会产生凝聚、沉淀等现象,为提高模拟预测的精度和准确性,则应根据具体情况在基本模型的基础上考虑各种影响因素加以修正。

求解水环境系统的数字模型一般有解析解法和数值解法两种,解析法求解基本模型所要求的条件非常严格,由于真实的环境条件复杂,用解析法求解形式复杂的微分方程就有一定难度。故常采用有限差分法、有限元法和有限分析法等数值方法求模型的数值解。由于基本模型的解析解往往比采用数值计算方法得到的值更直接更能展示水环境系统内在的发展变化规律,因此考察解析解有助于研究污染物在水环境系统中的分布特征以及其对环境的影响状况。

在采用解析法求解模型时,常假定环境介质处于稳定流动状态,即水体流动状态在所研究的时段内不随时间发生变化。这时污染物的排放将取决于污染源的排放特征,一般地,污染物可分为连续稳定排放和非稳定排放两大类。

当环境介质处于稳定流动状态、污染源连续稳定排放的条件下,污染物在某一空间位置的浓度将不会随时间变化即 $\frac{dC}{dt} = 0$, 此时模型的解析解较易求得。若所研究的问题时间尺度很大,而在这样的时间尺度下污染物浓度的平均值保持稳定,就可以通过取时间平均值把问题按稳态处理。这样既可大大降低模型的复杂程度,也可满足管理要求。所以稳态问题的求解是比较重要的。

而非稳定排放多指由于事故泄漏导致的瞬时点源排放问题。在这种情况下,污染物在某一空间位置的浓度是时间的函数,即 $\frac{dC}{dt} \neq 0$, 此时的基本模型是非齐次微分方程,只有在某些特定情况下才能求得解析解。

2. 确定性水环境系统的基本模型

(1) 零维模型

在某些特定条件下,可以将所研究的环境单元看作一个完全混合的反应器,如湖泊、某一河流河段等。在这样的反应器中,所研究的环境单元在任意一个空间方向上都不存在环境质量的变化,进入该反应器的污染物可在瞬时分散到空间各部位,使各处浓度值相等。

根据质量守恒原理建立完全混合反应器的平衡方程,即水环境系统的零维模型:

$$V \frac{dC}{dt} = QC_0 - QC + S + rV \quad (1-6)$$

其中: V ——反应器的容积, $[L^3]$;

Q ——流入流出反应器的物质流量, $[L^3 \cdot T^{-1}]$;

C_0 ——输入环境介质中的污染物浓度, $[M \cdot L^{-3}]$;

C ——输出环境介质中的污染物浓度,即反应器中的污染物浓度, $[M \cdot L^{-3}]$;

r ——污染物的反应(衰减)速度, $[M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}]$;

S ——污染物的源与汇(漏)项,指系统内非主要因素引起的污染物量的添加与衰减,

比如降雨或湖底渗漏等引起的, $[M \cdot T^{-1}]$ 。

当没有源、汇项, 即当 $S = 0$ 时, 上式可以写为:

$$V \frac{dC}{dt} = Q(C_0 - C) + rV \quad (1-7)$$

如果污染物的反应符合一级反应动力学的衰减规律, 即当 $r = -KC$ 时, (1-7) 式可以写为:

$$V \frac{dC}{dt} = Q(C_0 - C) - KCV \quad (1-8)$$

其中: K ——反应(衰减)速率常数, $[T^{-1}]$ 。

① 由式(1-8), 在稳态条件下, $\frac{dC}{dt} = 0$, 得其稳态解析解为:

$$C = \frac{C_0}{1 + t_w K} \quad (1-9)$$

其中: $t_w = V/Q$ 为理论停留时间, 其余符号同前。

② 由式(1-8), 在非稳态排放条件下, $\frac{dC}{dt} \neq 0$, 给定初始条件为 $t = 0$ 、 $C = C_0$ 时, 可得

$$C(t) = \frac{rC_0}{K+r} + \frac{KC_0}{K+r} \exp[-(K+r)t] \quad (1-10)$$

其中: $r = Q/V = 1/t_w$ 为冲刷速度常数; 其他符号同前。

(2) 一维模型

当污染物浓度的空间分布只在某一个方向上存在显著差异时, 就用一维模型对其进行描述。一维模型是通过一个微小的体积元的质量平衡推导的, 在该体积元中只在某一个方向(假设为 x 轴向)上存在浓度梯度。图 1-1 表示的是在 x 方向上存在输入、输出的微小体积元, 其边长分别为 Δx 、 Δy 、 Δz 。

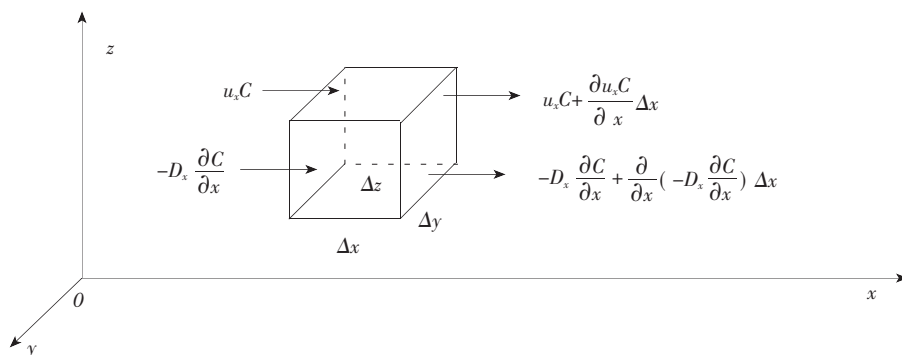


图 1-1 体积元的质量平衡关系

单位时间内输入该体积微元的污染物量为:

$$[u_x C + (-D_x \frac{\partial C}{\partial x})] \Delta y \Delta z$$

单位时间内输出的污染量为：

$$[u_x C + \frac{\partial u_x C}{\partial x} \Delta x + (-D_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (-D_x \frac{\partial C}{\partial x}) \Delta x] \Delta y \Delta z$$

若污染物在体积微元内发生一级衰减反应，则由衰减引起的污染物的变化为 $-KC\Delta x\Delta y\Delta z$ ，那么在单位时间内该体积微元的污染物输入、输出总量为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} \Delta x \Delta y \Delta z &= [u_x C + (-D_x \frac{\partial C}{\partial x})] \Delta y \Delta z \\ &- [u_x C + \frac{\partial u_x C}{\partial x} \Delta x + (-D_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial x} (-D_x \frac{\partial C}{\partial x}) \Delta x] \Delta y \Delta z \\ &- KC \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (1-11)$$

将上式简化，并令 $\Delta x \rightarrow 0$ ，得：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial u_x C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (-D_x \frac{\partial C}{\partial x}) - KC \quad (1-12)$$

在均匀流场中， u_x 和 D_x 都可以作为常数，则上式可以写为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - KC \quad (1-13)$$

其中： C ——污染物的浓度，是时间 t 和空间位置 x 的函数， $[M \cdot L^{-3}]$ ；

D_x ——纵向弥散系数， $[L^2 \cdot T^{-1}]$ ；

u_x ——断面的平均流速， $[L \cdot T^{-1}]$ ；

K ——污染物的衰减速率常数， $[T^{-1}]$ 。

① 当处于稳态条件下，即 $\frac{dC}{dt} = 0$ 时，式(1-13)变为：

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - KC = 0 \quad (1-14)$$

这是一个二阶线性偏微分方程，特征方程为：

$$D_x \lambda^2 - u_x \lambda - K = 0$$

由此可求得特征根为：

$$\lambda_{1,2} = \frac{u_x}{2D_x} (1 \pm m)$$

其中：

$$m = \sqrt{1 + \frac{4KD_x}{u_x^2}}$$

则式(1-14)的通解为：

$$C = Ae^{\lambda_1 x} + Be^{\lambda_2 x}$$

无论是对守恒还是非守恒性污染物, λ 都不应取正值, 若给定初始条件为: $x = 0$ 时 $C = C_0$, 则式(1-14) 的解为

$$C = C_0 \exp \left[\frac{u_x x}{2D_x} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4KD_x}{u_x^2}} \right) \right] \quad (1-15)$$

对于一般条件下的河流, 由推流导致的污染物的迁移作用要比弥散作用大得多, 因此在稳态条件下可忽略弥散作用, 则有:

$$C = C_0 \exp \left(-\frac{Kx}{u_x} \right) \quad (1-16)$$

式(1-15)、(1-16) 中的 C_0 可以按下式计算:

$$C_0 = \frac{QC_1 + qC_2}{Q + q} \quad (1-17)$$

其中: Q ——河流的流量, $[L^3 \cdot T^{-1}]$;

q ——排入河流的污水的流量, $[L^3 \cdot T^{-1}]$;

C_1 ——河流中污染物的本底浓度, $[M \cdot L^{-3}]$;

C_2 ——污水中污染物的浓度, $[M \cdot L^{-3}]$ 。

② 瞬时点源(非稳定源) 排放时, 若考虑弥散系数, 则将式(1-13) 变换为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + KC = 0$$

对上式可以通过拉普拉斯变换及其逆变换求解。若给定初始条件: $x = 0$ 时 $C = C_0$, $t \rightarrow \infty$ 时, $C = 0$, 则可得到:

$$C(x, t) = \frac{u_x C_0}{\sqrt{4\pi D_x t}} \exp \left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} \exp(-Kt) \right] \quad (1-18)$$

在瞬时投放的条件下, $C_0 = \frac{M}{Q}$, 又 $Q = Au_x$, 代入上式, 得到:

$$C(x, t) = \frac{M}{A \sqrt{4\pi D_x t}} \exp \left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} \exp(-Kt) \right] \quad (1-19)$$

其中: M ——瞬时投放的污染物的量, $[M]$;

A ——断面平均面积, $[L^2]$; 其余符号同前。

若忽略弥散作用, 即 $D_x = 0$, 则式(1-13) 可变为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} + KC = 0 \quad (1-20)$$

上式可以用特征线法求解, 将其写为两个微分方程:

$$\frac{dx}{dt} = u_x$$

$$\frac{dC}{dt} = -KC$$

由于忽略了弥散作用,污染物质是瞬时出现在某一位置,上式的解为:

$$C(x, t) = C_0 \exp(-Kt) = C_0 \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-21)$$

在实际中瞬时点源的排放往往不太可能实现真正的“瞬时”,此时假定排放的时段为 Δt ,也即在 $0 \leq t \leq \Delta t$ 时,投入质量为 M 的污染物质,此时下游任意空间和时间的污染物浓度可用下式计算:

$$C(x, t) = \int_0^{\Delta t} \frac{u_x C_0}{\sqrt{4\pi D_x t}} \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t}\right] dt \quad (1-22)$$

其中: $C_0 = \frac{M}{Q \cdot \Delta t}$, 表示在 $0 \leq t \leq \Delta t$ 时投放点处河流中的污染物浓度, $[M \cdot L^{-3}]$ 。

于是有:

$$C(x, t) = \int_0^{\Delta t} \frac{M}{A \Delta t \sqrt{4\pi D_x t}} \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t}\right] dt \quad (1-23)$$

其中: M ——在 Δt 时段内投放的污染物总量, $[M]$;

Q ——河流的流量, $[L^3 \cdot T^{-1}]$;

A ——河流的断面面积, $[L^2]$ 。

式(1-23)的解为:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} [\exp(A_1) \operatorname{erfc}(A_2) + \exp(A_3) \operatorname{erfc}(A_4)] \exp\left(\frac{u_x x}{2D_x}\right) - \frac{C_0}{2} [\exp(A_1) \operatorname{erfc}(A_5) + \exp(A_3) \operatorname{erfc}(A_6)] \exp\left(\frac{u_x x}{2D_x}\right) \theta(t - \Delta t) \quad (1-24)$$

$$\theta(t - \Delta t) = \begin{cases} 0, & \text{当 } t \leq \Delta t \\ 1, & \text{当 } t > \Delta t \end{cases}$$

$$\text{其中: } A_1 = \frac{x}{\sqrt{D_x}} = \sqrt{\frac{u_x^2}{4D_x} + K}$$

$$A_2 = \frac{x}{2\sqrt{D_x t}} + \sqrt{\frac{u_x^2 t}{4D_x} + Kt}$$

$$A_3 = -A_1$$

$$A_4 = \frac{x}{2\sqrt{D_x t}} - \sqrt{\frac{u_x^2 t}{4D_x} + Kt}$$

$$A_5 = \frac{x}{2\sqrt{D_x(t - \Delta t)}} + \sqrt{\frac{u_x^2(t - \Delta t)}{4D_x} + K(t - \Delta t)}$$

$$A_6 = \frac{x}{2\sqrt{D_x(t - \Delta t)}} - \sqrt{\frac{u_x^2(t - \Delta t)}{4D_x} + K(t - \Delta t)}$$

$erfc(x)$ 称为余误差函数,与误差函数 $erf(x)$ 有如下关系:

$$erfc(x) = 1 - erf(x) \quad (1-25)$$

$$erf(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-u^2} du \quad (1-26)$$

也可通过级数计算误差函数:

$$erf(x) = x - \frac{x^3}{1! \cdot 3} + \frac{x^5}{2! \cdot 5} - \frac{x^7}{3! \cdot 7} + \dots \quad (1-27)$$

(3) 二维模型

当污染物的浓度在 x 方向和 y 方向都存在显著的差异时,可以参考一维模型的建立思路,同时考虑体积微元在两个方向上的质量平衡,得到二维模型:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - KC \quad (1-28)$$

其中: D_y —— y 坐标方向的弥散系数, $[L^2 \cdot T^{-1}]$;

u_y —— y 方向的流速分量, $[L \cdot T^{-1}]$;

其余符号同前。

① 在稳态条件,即 $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$ 时,式(1-29)为:

$$D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - KC = 0 \quad (1-29)$$

对于水环境系统水质模拟的二维模型,将会涉及到有边界影响和无边界影响两类情况。

a. 无边界的连续点源排放:在均匀流场中,点源排放到无限宽的水体中(如图 1-2 所示),则式(1-29)的解析解为:

$$C(x, y) = \frac{M}{4\pi h (x/u_x)^2 \sqrt{D_x D_y}} \exp\left[-\frac{(y - u_y x/u_x)^2}{4 D_y x/u_x}\right] \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-30)$$

其中: M ——单位时间内排放的污染物质,即源强, $[M \cdot T^{-1}]$;

h ——平均水深, $[L]$;

其余符号同前。

如果忽略 D_x 和 u_y (比如对于顺直河道,当水深变化不大的情况下,其横向流速很小可近似为零,纵向扩散项远远小于推流的影响,此时的 D_x 和 u_y 项可忽略),则式(1-29)化简为:

$$D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - KC = 0 \quad (1-31)$$

解析解为:

$$C(x, y) = \frac{M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x/u_x}} \exp\left(-\frac{u_x y^2}{4 D_y x}\right) \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-32)$$

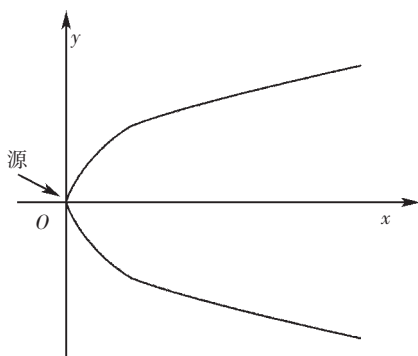


图 1-2 宽度无限的点源排放

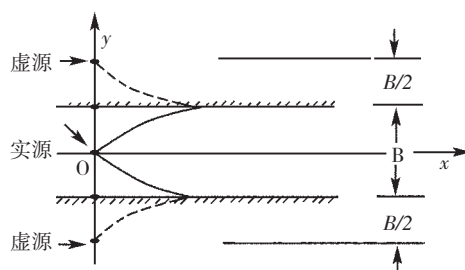


图 1-3 宽度有限的中心点源排放

b. 在有边界的连续点源排放中,污染物的扩散会受到边界的阻碍而产生反射,这种反射可以通过设立虚源来模拟(图 1-3),即设想边界为一面镜子,镜子后面有一个与实际源强度相同、距离相同的虚拟反射源。当有两个边界时,反射会成为连锁式的。如果污染源处于两个边界的中间,则式(1-32)就成为:

$$C(x, y) = \frac{M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x / u_x}} \left[\exp\left(-\frac{u_x y^2}{4D_y x}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{u_x (nB - y)^2}{4D_y x}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{u_x (nB + y)^2}{4D_y x}\right) \right] \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-33)$$

如果污染源处在边界上,对于宽度无限大的环境(图 1-4a),则有:

$$C(x, y) = \frac{2M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x / u_x}} \exp\left(-\frac{u_x y^2}{4D_y x}\right) \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-34)$$

如果水环境的宽度为 B (图 1-4b),同样可以通过假设对应的虚源来模拟边界的反射作用,则有:

$$C(x, y) = \frac{2M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x / u_x}} \left[\exp\left(-\frac{u_x y^2}{4D_y x}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{u_x (2nB - y)^2}{4D_y x}\right) + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(-\frac{u_x (2nB + y)^2}{4D_y x}\right) \right] \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-35)$$

虚源的作用随着 n 的增大衰减得很快,通常计算 4—5 次反射即可满足计算精度的要求。

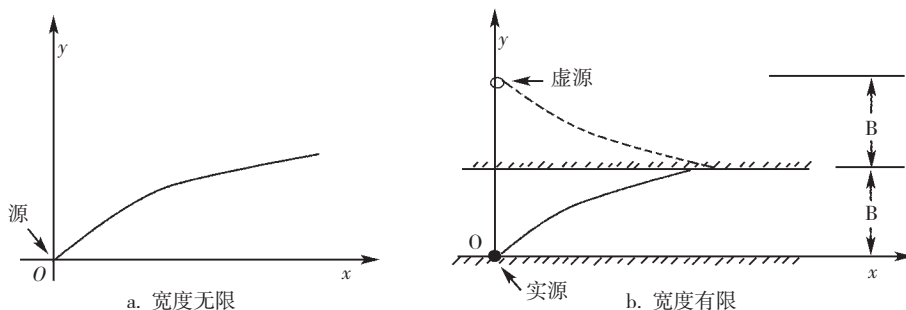


图 1-4 边界上排放污染物的二维扩散

② 瞬时点源排放时,假定所研究的问题处于 x 、 y 平面上,即 $\frac{\partial C}{\partial z} = 0$,当无边界约束时,给定边界条件为:当 $y = \pm \infty$ 时, $\frac{\partial C}{\partial y} = 0$,则有:

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi h \sqrt{D_x D_y t^2}} \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} - \frac{(y - u_y t)^2}{4D_y t}\right] \exp(-Kt) \quad (1-36)$$

在有边界条件时,式(1-36)需要增加边界的反射作用,这种反射作用仍可以用一个虚点源来模拟(图1-5)。将边界看作一个反射镜面,在实源的对称位置设立一个源强与实源相等的虚源。

则式(1-36)的修正形式为:

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi h \sqrt{D_x D_y t^2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} - \frac{(y - u_y t)^2}{4D_y t}\right] + \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} - \frac{(2b + y - u_y t)^2}{4D_y t}\right] \right\} \exp(-Kt) \quad (1-37)$$

式中: b ——点源到边界的距离, [L]。

当点源的位置逐步向边界移动,当 $b = 0$,即在边界上排放时,可以得到:

$$C(x, y, t) = \frac{2M}{4\pi h \sqrt{D_x D_y t^2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x - u_x t)^2}{4D_x t} - \frac{(y - u_y t)^2}{4D_y t}\right] \right\} \cdot \exp(-Kt) \quad (1-38)$$

(4) 三维模型

当污染物在空间各方向上均存在浓度梯度时,就需要采用三维模型。三维模型的建模思路与一维、二维相似,需要注意的是:在三维模型中,因为不采用段面的平均值,所以不出现弥散系数而采用湍流扩散系数。三维模型的基本形式如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - KC \quad (1-39)$$

其中: u_z —— z 坐标方向的流速分量, [L · T⁻¹];

E_x 、 E_y 、 E_z —— x 、 y 、 z 方向的湍流扩散系数, [L² · T⁻¹]。

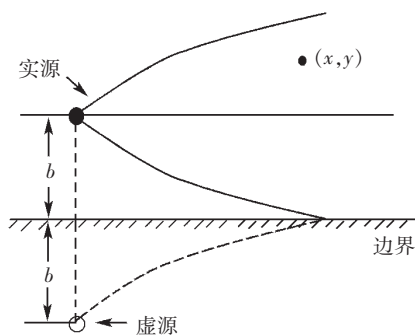


图 1-5 边界上排放污染物的二维扩散

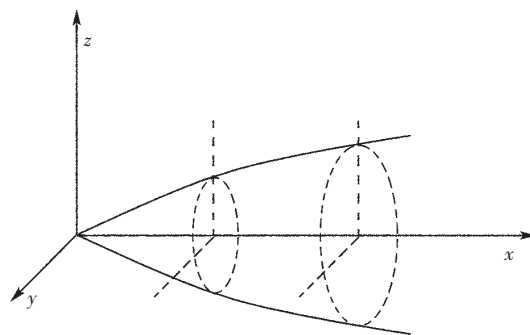


图 1-6 均匀湍流场中的三维扩散

三维模型在理论上是完整和完善的,但在实际应用中,求解较困难。所以,可以针对污染物的混合状况作各种简化。

① 在稳态条件下,即 $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$ 时,式(1-39)将变为:

$$E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - KC = 0 \quad (1-40)$$

对于一个连续稳定排放的点源,当 $u_x \geq 1\text{m/s}$ 时,可以忽略纵向扩散的影响以及在 y 方向和 z 方向上的流动,即 $E_x = 0, u_y = 0, u_z = 0$,则式(1-40)又可简化为:

$$E_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - KC = 0 \quad (1-41)$$

该式的解析解为:

$$C(x, y, z) = \frac{M}{4\pi x \sqrt{E_y E_z}} \exp\left[-\frac{u_x}{4x} \left(\frac{y^2}{E_y} + \frac{z^2}{E_z}\right)\right] \exp\left(-\frac{Kx}{u_x}\right) \quad (1-42)$$

其中: E_x, E_y, E_z —— x, y, z 方向的湍流扩散系数, $[\text{L}^2 \cdot \text{T}^{-1}]$ 。

② 当无边界的瞬时点源排放时,则式(1-39)的解析解为:

$$C(x, y, z) = \frac{M}{8 \sqrt{(\pi t)^3 E_x E_y E_z}} \exp\left\{-\frac{1}{4t} \left[\frac{(x - u_x t)^2}{E_x} + \frac{(y - u_y t)^2}{E_y} + \frac{(z - u_z t)^2}{E_z}\right]\right\} \exp(-Kt) \quad (1-43)$$

其中: E_x, E_y, E_z —— x, y, z 方向的湍流扩散系数, $[\text{L}^2 \cdot \text{T}^{-1}]$ 。

污染物进入水环境系统后的运动、变化十分复杂,以河流为例,当污水排入河流后,从污水排放口到污染物在河流横断面上达到均匀分布,通常需要经历竖向混合和横向混合两个阶段。在竖向混合阶段,所研究的问题涉及到空间的三个方向,所以又常称为三维混合问题。而横向混合过程可以看作二维混合问题。当横向混合完成后,污染物在整个断面达到均匀分布,故可以作为一维问题进行处理。在实际研究和工作中,应该对水环境系统进行分析,采用相应合理的模拟模型。

(二) 随机模拟模型

自然界中各种现象的变化都具有不确定性,水环境系统也不例外。水环境系统因子的变化会引起水环境系统状态的变化,从而引起污染物浓度的波动。因此,某种污染物进入水环境系统之后,其变化是相当复杂的。再加上外界影响因素存在着不确定性。所以,仅仅采用确定性的模拟模型往往不能描述水环境系统所具有的随机特性,因此随机模拟模型越来越受到环境工作者和研究者的重视。

目前,随机模拟模型一般分为两类:随机微分方程模型和离散随机过程模型。

1. 随机微分方程模型

随机微分方程于 1902 年提出,1969 年用于水质规划^[4]。其模型方程的形式和确定性方程的形式相同,但它在描述水质变化动力系统特性时采用系数观测值(或识别值)的现实分布,来研究方程解的统计特性和各种可能出现的结果。同时随机微分方程还可以描述水质变化过程的随机波动和考虑了系统的随机输入、初值、边界值的随机变化等对系统的影响状况。下面对随机微分方程的一维耦合随机模型和二维随机水质模型分别进行说明。

(1) 耦合模型法随机模拟^[5]

耦合模型随机模拟的思路为:首先分别建立确定性水质模型和有关影响因素的随机模拟模型,然后将随机模拟的有关影响因素的变化过程同步地输入确定性模型,从而模拟出一个长序列的水质浓度过程。对此统计分析,绘出浓度概率分布曲线,就可看出超过某一浓度的持续时间长短和机会的大小,以便为水质规划管理提供丰富的决策信息。

依据上述思路,耦合模型法的基本程序为:

① 建立确定性水质模型

对于进入水环境的污染物,随其性质不同,降解转化规律也不同,因此模拟采用的模型也将各异。这就需要针对具体情况,通过理论分析确定模型结构,进行参数率定和系统检验,建立适合的确定性模型。比如当河流系统断面不很宽时,污染物浓度在断面上的分布基本均匀,可简化为一维模型计算;如果计算时段内河川径流和排污量比较稳定,则可以进一步采用一维稳态水质模型模拟一定时间内浓度沿流程的变化情况。

② 随机变量的概率分布

这里所指的是影响河流水质变化的随机变量,主要有流量、水温、上断面的污染物浓度、排污流量和浓度等。其概率分布形式不尽相同,常采用正态分布和皮尔逊 III 型分布进行描述。比如河流月平均流量的变化可以采用对数正态分布或皮尔逊 III 型分布描述。而排污流量及其浓度则可能是围绕平均情况上下波动,如果主要是由控制生产的技术性能不稳定造成,则其变化与测验误差的波动较类似,可以采用正态分布或截头尾的正态分布描述。为叙述其一般性,以 x_{ij} 代表第 i 年 第 j 月的随机变量值,如月平均水温、月平均流量等。

a. 正态分布。正态分布是将实测的某月同类变量 x_{ij} 作经验频率计算,在概率格纸上点绘经验频率点,若其分布近似为直线,则说明属正态分布。

正态分布密度函数为:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1-44)$$

在实际中,通常用样本均值 $\bar{x}$ 估计均值 μ ,用样本方差 S^2 估计方差 σ^2 。则有两个随机变

量:均值 $\bar{x}$, 方差 S^2 , 可有下列公式计算:

$$\bar{x}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} \quad (1-45a)$$

$$S_{xj}^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j) \quad (1-45b)$$

$$C_{xj} = \frac{S_{xj}}{\bar{x}_j} \quad (1-45c)$$

其中: $\bar{x}_j$ 、 S_{xj} 、 C_{xj} ——分别为第 j 月某一随机变量 x 的均值、均方差和离势系数; $i = 1, 2, \dots, n$, n 为实测资料的年数; $j = 1, 2, \dots, 12$ 为月数。

当绘在概率格纸上的经验频率曲线 $x-p$ 明显不为直线时, 则说明其分布为偏态, 可考虑对数正态分布, 皮尔逊 III 型分布进行配线, 以确定其概率分布。分布的偏态程度可由偏态系数反映:

$$C_{sxj} = \frac{1}{n-3} S_{xj}^3 \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j) \quad (1-46)$$

式中的 C_{sxj} 为第 j 月随机变量 x_{ij} 的偏态系数。由于实测资料的年数常只有几十年, 用该式计算的 C_{sxj} 误差很大, 故计算值仅作参考, 实用中则是在分布函数形式选定后用配线法确定。

b. 皮尔逊 III 型分布。皮尔逊 III 型分布是我国水文计算中广泛使用的随机变量概率分布类型, 大量资料显示对于降水、径流的概率分布都可采用这种形式。皮尔逊 III 型分布的密度函数为:

$$\begin{cases} f(x) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} (x-b)^{\alpha-1} e^{-\beta(x-b)} \end{cases} \quad (1-47)$$

$$\begin{cases} \alpha = \frac{4}{C_s^2}, \beta = \frac{2}{x C_{sx} C_s}, b = \bar{x} \left(1 - \frac{2C_{sx}}{C_s}\right) \end{cases} \quad (1-48)$$

式中的均值 $\bar{x}$ 、离势系数 C_{sx} 、偏态系数 C_{sx} 按式(1-45a)、(1-45c)、(1-46) 计算。

③ 有关变量的随机过程模拟

在上述成果基础上, 可以选择适当的随机模拟模型来模拟逐年逐月的河流河段上断面流量、水质浓度、水温 and 排污流量、浓度等。随机模拟模型视具体情况选用。例如当 x_{ij} 服从正态分布并与上一时段变量 $x_{i,j-1}$ 关系比较密切时可以考虑采用季节性一阶自回归模型模拟:

$$x_{ij} = \bar{x}_j + r_{xj} + \frac{S_{xj}}{S_{x,j-1}} (x_{i,j-1} - \bar{x}_{j-1}) + \sqrt{t_{ij} S_{xj} (1 - r_{xj}^2)} \quad (1-49)$$

其中: r_{xj} ——变量 x 上月(即 $j-1$ 月)的值 $x_{i,j-1}$ 与该月(即 j 月)的值 x_{ij} 间的相关系数, 称为一阶自相关系数;

t_{ij} ——标准正态分布 $N(0, 1)$ 下模拟的第 i 年 第 j 月的随机数; 其他符号同前。

当模拟时段为一个月时, 全年每月都有一个模拟方程式(1-49)。采用下式计算 r_{xj} :

$$r_{xj} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i,j-1} - \bar{x}_{j-1})(x_{ij} - \bar{x}_j)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i,j-1} - \bar{x}_{j-1})^2 \sum_{i=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_j)^2}} \quad (1-50)$$

采用变换抽样法,任意多次抽取两个相互独立的 $[0,1]$ 均匀分布的随机数 u_1, u_2 ,按下式计算 t_{ij} :

$$t_{ij} = \begin{cases} (-2\ln u_1)^{1/2} \cos(2\pi u_2) \\ (-2\ln u_1)^{1/2} \sin(2\pi u_2) \end{cases} \quad (1-51)$$

模拟是由逐月资料计算的 $\bar{x}_j, r_{xj}, S_{xj}, S_{x,j-1}$ 带入式(1-49)的逐月的 x_{ij} 模拟方程。给定一个初值 x_{11} ,依次循环使用这些方程,即可模拟出 x 逐年逐月的随机过程。为保证模拟的正确性,还必须对模拟的随机过程进行检查,看其统计参数和频率曲线是否与实测资料一致,如果相符,则可认为模拟的随机过程是正确的,否则需检查原因进行修改。

当 x_{ij} 为皮尔逊 III 型分布时,随机过程的季节性一阶自回归模型为:

$$x_{ij} = \bar{x}_j + r_{xj} \frac{S_{xj}}{S_{x,j-1}} (x_{i,j-1} - \bar{x}_{j-1}) + \phi_{ij} \sqrt{S_{xj}(1-r_{xj}^2)} \quad (1-52a)$$

$$\phi_{ij} = \frac{2}{C_{s\phi j}} \left(1 + \frac{C_{s\phi j} t_{ij}}{6} - \frac{C_{s\phi j}^3}{36}\right) - \frac{2}{C_{s\phi j}} \quad (1-52b)$$

$$C_{s\phi j} = (C_{sxj} - r_{x,j-1}^3 C_{sx,j-1}) / (1 - r_{xj}^2)^{3/2} \quad (1-52c)$$

已知 x_{ij} 逐月的统计参数: $\bar{x}_j, r_{xj}, S_{xj}, C_{sx,j}$,且概率分布服从皮尔逊 III 型,便可按上式建立逐月的 x_{ij} 随机模拟模型,假设初值后,依次循环使用这些模型便可得到这种情况下的逐年逐月变化过程。

④ 水质参数变化的随机模拟

根据水质实验、监测资料可以确定水质参数的概率分布。联系已经模拟的流量、水温等过程,便可以模拟出同步的水质参数变化的随机过程。其模拟的一般形式为:

$$K_{ij} = K(Q_{ij}, T_{ij}, \dots) + t_{ij} S_K \quad (1-53)$$

其中: K ——某种水质参数,如大气复氧系数 K_2 ;

K_{ij} ——第 i 年第 j 月的 K 值;

$K(Q_{ij}, T_{ij}, \dots)$ ——通过 K 与 $Q, T, \dots$ 的关系式计算的 K 值;

t_{ij} ——标准正态分布 $N(0,1)$ 下模拟的第 i 年第 j 月的随机数;

S_K —— $K(Q_{ij}, T_{ij}, \dots)$ 偏离的均方差。

由于该式前一项已经考虑了 Q, T 的影响,因此当 $t_{ij} S_K$ 不大时,可以不计 $t_{ij} S_K$ 的作用,从而减小 K 值随机模拟的工作量。

⑤ 河流水质变化的随机过程模拟

将③、④两步模拟的河流径流量、水温、上断面或起始断面水质浓度、水质参数和排污流量、浓度等的随机过程同步输入到确定性水质模型中,便可以模拟或预测出涉及地点的水质浓度变化过程。

⑥ 设计断面水质浓度分布曲线

对上述模拟设计断面的某一水质浓度随机过程 $C(t)$ 如 $L(t)$,设一浓度值 C ,统计出大

于等于该值的持续时间 t_c , 除以模拟的整个时间 t_s , 得超过该值的概率 $p = t_c/t_s$, 依此求得一系列 C 值的概率 P , 即可绘出设计断面的水质浓度分布曲线, 根据水质标准 C' , 便可以在图上查得超标的概率 P' 。

这种耦合随机模拟模型可以为水环境水质规划管理提供参考依据。

(2) 二维随机水质模拟模型^{[6][7]}

在顺直的或微弯的河道上, 二维稳态模型可用式(1-31)表示:

$$D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} = 0$$

其中: u_x ——河道沿纵向的平均流速, $[L \cdot T^{-1}]$;

C ——污染物垂向的平均浓度值, $[M \cdot L^{-3}]$;

D_y ——河道横向的平均扩散参数, $[L^2 \cdot T^{-1}]$;

K ——污染物的降解(衰减)速率常数, $[T^{-1}]$;

x, y ——河道纵横方向上的距离, $[L]$ 。

扩散系数可以用下式计算:

$$D_y = auh^{5/6} n \sqrt{g} \quad (1-54)$$

式中: a ——经验系数;

h ——河道的平均水深, $[L]$;

n ——糙率;

g ——重力加速度, $[L \cdot T^{-2}]$; 其余符号同前。

如果将式(1-31)中的 K 和式(1-54)中的 a 视为随机变量, 则式(1-31)便转变为一个随机微分方程。给定坐标值 (x, y) 后, 浓度 C 将是一个随机变量。求解式(1-31)的目的就是要根据 K 、 a 及边界值的已知概率分布, 推求污染带内任一点 $C(x, y)$ 的概率分布。对排污口位于河道中心, 且沿河深方向, 单位时间逸出的质量为 M 的线源来讲, 污染带内任一点的污染物浓度 C 与随机变量 M 、 K 、 a 的关系可以通过求解式(1-31)得到:

$$C = C(x, y, a) = \frac{M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x / u_x}} \exp\left(-\frac{u_x y^2}{4 D_y x}\right) \exp\left(-\frac{K x}{u_x}\right) \quad (1-55)$$

式(1-55)的符号同式(1-31)和式(1-54)。

如果排污口位于河道旁侧, 且岸界边壁对污染物能完全反射, 则 C 与 M 、 K 、 a 的关系如下:

$$C = C(x, y, a) = \frac{2M}{u_x h \sqrt{4\pi D_y x / u_x}} \exp\left(-\frac{u_x y^2}{4 D_y x}\right) \exp\left(-\frac{K x}{u_x}\right) \quad (1-56)$$

根据随机变量的函数及其分布的理论, 当排污强度 M 、降解系数 K 、扩散经验系数 a 这三个随机变量相互独立, 且它们的概率密度函数分别为 $f_1(M)$ 、 $f_2(K)$ 、 $f_3(a)$ 时, 随机变量 C 小于某一指定数值 B 的概率可表达为:

$$P(C < B) = P[C(M, K, a) < B] = \iiint_{C(M, K, a)} f_1(M) f_2(K) f_3(a) dM dK da \quad (1-57)$$

联立求解式(1-57)、(1-54)、(1-55)[或(1-56)],便可以把 C 的概率分布计算出来
式(1-57)的数值求解可采用 Monte—Carlo 方法^{[6][7]},该法也称随机模拟法。它的基本思想是将问题概化成概率模型或随机过程,使它的参数等于问题的解;然后通过对模型或过程的观察或抽样试验来计算所求参数的统计特征,最后给出所求解的近似值。用 Monte—Carlo 方法求解式(1-57)的步骤为:

- ① 任意给出 B 的数值(为了提高计算机的有效性, B 的取值区间应大致等于 C 的变化范围);
- ② 采用随机变量的抽样方法,从密度函数 $f_1(M), f_2(K), f_3(a)$ 中各抽取 m 个变量值;
- ③ 检查积分区域,将抽取的随机变量值及相应的已知确定值代入式(1-54)、(1-55)[或(1-56)],可计算得到 m 个 C 值,如 M 个 C 值中有 n 个 C 值小于给定的 B 值,那么用 n/m 作为 $P(C < B)$ 的近似值, $P(C < B) \approx \frac{n}{m}$ 。

如果任意给出一连串的 B 值,并且重复步骤 ② 与 ③,那么就可以将某给定点的污染物浓度 C 的概率分布求出来。有关 Monte—Carlo 方法的详细介绍可以参考相关的专业书籍。

上述计算步骤中的抽样数目 m 可根据柯尔莫哥洛夫定理求出。该定理的内容为:若总体 ϵ 的分布函数 $F(x)$ 连续,经验分布函数为 $F'_m(x)$,统计量为:

$$D_m = \sup |F'_m(x) - F(x)|, (-\infty < x < \infty)$$

(即经验分布于总体分布的误差上界),并记 $Q_m(\mu)$ 为 $\sqrt{m}D_m$ 的分布函数,则:

$$Q_m = P(\sqrt{m}D_m < \mu), \mu > 0$$

分布函数的 $Q_m(\mu)$ 的极度值为:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} Q_m(\mu) = Q(\mu) = 1 - 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k-1} \exp(-2k^2 \mu^2), \mu > 0 \quad (1-58)$$

故对于给定的显著水平 β ,有:

$$P(\sqrt{m}D_m < \mu_\beta) = P(D_m < \mu_\beta / \sqrt{m}) = 1 - \beta \quad (1-59)$$

上式中的 μ_β 可由 $Q(\mu_\beta) = 1 - \beta$ 这个方程解出,常用的 β 及 μ_β 值见表 1-1。上式表示在显著性水平为 β 的情况下,经验分布与总量分布的最大误差 D_m 不会超过 $\mu_\beta / \sqrt{m}$,于是抽样数目 m 的估计式为:

$$m = \mu_\beta^2 / D_m^2 \quad (1-60)$$

由式(1-60)可知,只要给出误差值大小 D_m 与显著水平 β ,便可计算出抽样数目 m , m 值的大小与具体抽得的样本数据无关。

表 1-1 常用的 $\beta - \mu_\beta$ 关系数据表

β	0.20	0.10	0.05	0.01
μ_β	1.07	1.22	1.36	1.63

2. 离散随机过程模型

这类方法通常是将影响水质变化的因素或水质变化过程看作一个离散的随机过程,然后用随机过程的理论或方法来建立概率模型。常用的方法有马尔可夫过程、时间序列过程。

(1) 马尔可夫方法

马尔可夫法实际上是一种随机过程预测法,其状态和时间参数都是离散的,可以用于描述某种复杂系统状态的转移。它已经在股票预测^{[8][9]}、降雨量^{[10][11]}、环境预测与管理^{[12][13]}等许多领域得到应用并取得了不错的效果。水环境系统由于受诸多因素的影响而成为一个复杂的系统,其中有人为因素,也有自然环境自身的因素,而这些因素又都具有许多的不确定性。因此采用马尔可夫法进行模拟预测是比较适合的。马尔可夫法的特点是:无需依据大量的历史统计资料而通过对近期情况的分析可以预测出将来的情况,为制定长远规划和对策提供参考信息。因此,这种方法也已经运用于水环境系统的模拟,并且在水质模拟预测中^{[14][15]}取得了不错的效果。

(2) 时间序列过程方法

时间序列是指按时间顺序排列的一组数据。广义而言即指一组有序的随机数据,这组随机数据既可按时间先后顺序排列,也可按空间的前后顺序排列,还可按其他物理量顺序排列^[16]。时间序列分析方法属于统计学范畴,通过研究、分析和处理时间序列,提取出系统的相关信息,从而揭示时间序列本身的结构与规律,认识系统的固有特性,掌握系统与外界的联系,推断出系统在将来的变化和行为。因此,时间序列分析方法已经不仅仅是一种数据处理的方法,它已演变为一种系统分析研究的方法。水环境系统的变化可被看作是时间序列,例如对某一监测站点的水质指标监测值将随时间的推进发生改变,通过对相关监测值建立时间序列模型,以历史资料进行参数估值后就可以对该监测指标进行预测了。

时间序列分析法的主要思路就是根据预测对象的数据,利用数理统计方法加以处理,以预测事物的发展趋势。这类预测方法的基本原理是:(a)从事物发展的延续性,运用过去的时间序列数据进行统计分析,就能推测事物的发展趋势,做出定量预测;其特点是简便易行,但准确性较差;(b)考虑了事物发展中随机因素的影响和干扰,为了消除事物发展的不规则性的影响,将历史时间序列数据作为随机变量序列。运用统计分析中的加权平均的方法进行趋势预测。下面简单介绍时间序列法中的几种基本方法^[2]。

① 滑动平均法

这种方法通过不断引进新数据来修改平均值,以消除变动的偶然因素影响,得出事物发展的主导趋势,其实质是对时间序列的修均。滑动平均法的预测模型为:

$$F_t = \frac{x_{t-1} + x_{t-2} + \dots + x_{t-n}}{n} \quad (t \geq n) \quad (1-61)$$

其中: t ——资料的时间期限,如年、季、日;

F_t —— t 时间的预测值;

x ——实际值;

n ——预测资料期(滑动平均的时间长)。

滑动平均法预测误差的大小取决于时段长 n 的选择, n 值愈大对实际值的修均作用愈强,灵敏度愈差;反之, n 值愈小,预测值愈接近实际值,灵敏度愈高。

该方法很简单,但需要有足够的历史数据。 n 值主要取决于预测的目的和实际数据的特点。一般地,如果要求预测精度比较高,预测值比较精确, n 取得小一点较好(如 3—5 之间);如果只要得到事物变化的大体趋势, n 值可取得大一点(如可取 10 左右);如果实际数据上下波动较大, n 值也可取得大一点。

② 加权滑动平均法

加权滑动平均法就是利用不同的权数来反映数据的作用。一般距预测值较近的数据对预测值的影响较大,其权值也应大一些;而离预测值较远的数据,其影响相对较小,权值可以小一些。加权滑动平均法的模型如下:

$$F_t = \sum_{i=t-n}^{t-1} \omega_i x_i \quad (1-62)$$

其中: ω_i ——与 x_i 相应的加权值,满足 $\sum \omega_i = 1$,且 $0 \leq \omega_i \leq 1$;

F_t —— t 时间的预测值;

x_i ——实测值。

一般地,采用加权滑动平均法预测能比较好地反映实际值的变化情况,其误差比滑动平均法的小。

(3) 指数平均法

指数平均法是在滑动平均法的基础上发展得到的一种时间序列预测方法。其特点是以以前的交际值和预测值为依据,经修改后得到本次的预测值。该法实际上也是一种加权平均法,只不过它的权与加权滑动平均法的权不同,后者权的选取带有经验性,而前者的权值由实际值与预测值的误差来确定,且它在整个时间序列中是有规律排列的。指数平均法的数学模型如下:

$$F_t = F_{t-1} + \alpha(x_{t-1} - F_{t-1}) \quad (1-63)$$

其中: α ——平滑系数,且 $0 \leq \alpha \leq 1$;其他符号同前。

采用该式计算预测值时,其大小主要取决于前期的实际值和预测值的误差($x_{t-1} - F_{t-1}$)以及权值 α 。一般说来,当前期的预测值与实际值的误差较大时,则 α 要取得大一些;反之,当误差较小时,则 α 可以取得较小些。 α 的作用是修正误差,目的是使预测值更接近于实际值。如 $\alpha = 0.2$,则表示 20% 误差需要修正。

用指数平均法进行预测, α 的取值将直接影响预测的精度。一般地,当时间序列的前期数据对近期发展影响不大,或者时间序列的波动较大时,一般取 α 为 0.3~0.5 或更大些。当时间序列变动缓慢,长期趋势较稳定时, α 取较小的值,一般为 0.05~0.3。在估计 α 的取值时最好通过试算来决定。例如,对同一个预测对象分别用 $\alpha = 0.3, 0.5, 0.7$ (或 0.9) 进行试算,看哪一个 α 值修正前期预测值与实际值的绝对误差小,即可把这个值确定为平滑系数。

(4) 其他方法

人工神经网络(Artificial Neural Networks,简记作 ANNs),是对人类大脑系统的一种描述;它是一个并行、分布处理结构,由处理单元及信号通道互连而成;它也是一个数学模型,可以用电子线路来实现,也可以用计算机程序来模拟。它具有通过学习获取知识解决问题的能力,是人工智能的一种重要研究方法。当前,利用人工神经网络对水质进行模拟已成

为环境工作者的重要课题之一^{[17][18][19]}。随着计算机技术的不断发展,特别是在人工智能领域研究的不断深入,人工神经网络作为一种重要的研究方法将会与水质模拟结合更加紧密。

目前还有大量其他模拟预测方法如自组织法^[20]、多元回归模型^[21]、混沌预测^[22]、未确知理论^[23]等引入到水环境系统模拟预测中,取得了不错的结果。

二、水环境系统最优化模型^{[1][2]}

前面介绍的模拟模型的研究和开发有助于研究者和环境工作者、决策者了解污染物在环境介质中迁移转化规律和变化发展的趋势。但建立模拟数学模型的目的不仅仅在于探索环境质量变化的规律,更重要的是在掌握这些规律的基础上,建立环境质量管理模型,对环境污染控制系统各组成部分进行有的放矢的优化管理。因此如何实现对水环境系统的优化管理和规划将对于保护水环境系统具有十分重要的意义,而最优化模型的建立则是实现这一目标的重要手段。

(一) 水污染控制系统规划

水污染控制系统规划是水环境系统管理的基础工作,对水环境系统的保护有着非常重要的意义,其规划模型是水环境管理的技术核心。水污染控制系统规划的目标就是协调水环境系统内部各组成部分之间的关系,从而以最低的水污染控制系统费用满足水环境管理目标和水环境质量的要求。

1. 水污染控制系统的组成

水污染控制系统属于开放的复合动态系统。一般,它由四大部分组成:污染源子系统(污染物发生子系统)、污染物的收集、输送子系统、污水处理子系统和纳污水体子系统。

(1) 污染源子系统

污染源子系统就是进入水环境系统的污染物的来源。水污染的主要来源有工业污染源和城镇生活污染源。虽然水环境系统的污染物有成千上万种但重点研究的是那些具有共性的污染物的排放与治理问题。一般区域(城市)污水处理厂可以处理的污水应采用集中处理以降低成本。而区域污水处理厂不能处理的污染物应在污染源内部处理或经预处理后再进行集中处理。

(2) 污水收集、输送子系统

污水的收集、输送系统是指将污水由污染源集中并输送到污水厂的污水输送管道和提升泵站组成的污水转输网络系统,也可指把污水从一个区域输送到另一个区域的转输系统。对一个区域(城市)而言,污水的收集、输送系统的投资在水污染控制系统中约占 70% 的比例。

(3) 污水处理子系统

污水处理子系统是对污水进行处理、减轻其对水体污染程度的核心部分。污水处理的方法很多,比如按处理方法可分为物理处理、化学处理、生化处理等,按处理程度可分为一级、二级、三级处理。在水污染控制系统规划中主要是通过调节污水处理程度和处理量来调节污染物的排放量,从而达到水质控制的目标。

(4) 纳污水体子系统

纳污水体子系统是污水的最终归宿,这些水体包括河流、湖泊、海湾等。水体都具有一定的自净功能,在满足环境质量的约束条件下合理利用水体的自净能力可以节省巨额的污水

处理费用。

水污染控制的方法很多。早期是针对每个小区的排水修建污水处理厂,控制污染物的排放量;随着经济发展和技术进步,区域性污水处理厂日益增多。合理选择水污染控制方法可以最大限度的发挥水环境系统的自净能力,节约资金,因此要建立合理的水污染控制系统就必须针对当地条件,选择适合的水污染控制方法。

2. 水污染控制系统规划的分类

水污染控制系统规划可以按规划的层次、规划的方法和解决问题的途径进行分类。

(1) 按规划的层次分类

按照规划的层次,水污染控制系统规划可分为流域规划、区域规划和设施规划。

① 流域规划

流域规划是指在一个流域范围内确定水污染控制的战略目标,包括环境质量目标和经济目标,并在流域范围内协调各个重要污染源(城市或区域)之间的关系,以保证流域范围内的各个水环境系统(湖泊、河段和支流等)满足水质要求。水质要求是根据水环境系统所处的空间、时间条件所确定的功能制订的。

流域规划可以为各个污染源(城市或区域)进行排放总量控制提供依据,是区域规划和设施规划的基础。它是高层次的规划。

② 区域规划

区域规划是指流域范围内具有复杂的污染源的城市或工业区的水污染控制规划。区域规划以流域规划为指导,将排放总量分配给各个污染源,并制定具体的方案提供给环境管理部门。

区域规划既要满足流域规划对该区域提出的限制,又要为设施规划提供依据。

③ 设施规划

设施规划是按照区域规划的结果,提出合理的污水处理设施,并且所选的污水处理设施既要满足污水处理效率的要求,又要使污水处理的费用最低。

(2) 按规划的方法分类

按规划的方法,可以将水污染控制系统规划分为:排放口处理最优规划、均匀处理最优规划和区域处理最优规划。

① 排放口处理最优规划

排放口处理最优规划是在水体水质条件约束下,以各个小区污水处理厂的规模为基础,寻求满足水体水质要求的各排放口的污水处理效率的最佳组合,从而使各排放口的污水处理费用之和最低。这类问题研究得最早,又称为水质规划问题,目前对其研究较深入,求解的数学方法较多也较成熟。在做排放口最优规划时,各个污水处理厂的处理规模不变,等于各个小区收集的污水量。

② 均匀处理最优规划

均匀处理最优规划也称为污水处理的厂群规划问题。其目的是在污水处理效率同一的条件下,在区域范围内寻求最佳的污水处理厂的位置与规模的组合,使污水处理和管道输送费用的总和最低。均匀处理最优规划中各个污水处理厂都取相同的处理效率,从而使许多水体未能充分发挥其自净作用。

③ 区域处理最优规划

区域处理最优规划是排放口最优规划和均匀处理最优规划的总和,要求综合考虑水体自净、污水处理、管道输水三种因素。在区域处理最优规划中,既要考虑寻求污水处理厂的最佳位置和容量,又要考虑每座污水处理厂的最佳处理效率的组合。所以,区域处理最优规划方法不但充分发挥了污水处理系统的经济效能,还合理利用了水体的自净能力。

(3) 按解决问题的途径分类

根据解决污染问题的途径,可以将水污染控制系统规划分为最优规划和方案选优两大类。

① 最优规划

最优规划就是应用数学规划方法,科学地组织污染物的排放或科学地协调各个治理环节,以尽量小的人为代价达到规定的水质目标。以上介绍的各种规划实际上都属于最优规划的范畴。最优规划的特点是根据污染源、水体、污水处理厂和输水管线提供的信息,一次求出水污染控制的最佳方案。只有在资料详尽、技术具备的地方才能顺利地应用最优规划方法。由最优规划得出的方案是理想化的方案。

② 方案选优法

当最优规划的条件不完全具备,或者由于采用了某种特殊的污水处理方法,致使问题的目标函数和约束条件不能反映这种特殊情况,此时就选用方案选优的规划方法。

方案选优法应首先进行污水收集与处理系统的设计,做出各种规划方案,然后对各种方案的污水排放与水体水质之间的关系进行水质模拟,检验规划方案的可行性;最后通过损益分析或其他决策分析方法选择最合理的解。

由方案选优法得到的解一般不是最优解,结果的“好”与“坏”在很大程度上取决于规划人员的经验和能力。在采用方案选优法时,要尽可能多地提出一些初步的规划方案,以供规划人员进一步筛选。

3. 规划的依据

(1) 水污染控制系统的费用构成及性质

在水污染控制系统规划中,规划的目标是在满足水质约束条件下使水污染控制的费用最低。一般地,水污染控制系统的总费用 C 可以表示为:

$$C = C_1 + C_2 \quad (1-64)$$

其中: C —— 污水处理的总费用;

C_1 —— 整个系统的污水处理费用;

C_2 —— 污水输送费用。

水体的自然净化(同化)能力、污水处理与输送的规模经济效应和污水处理效率的经济效应对水污染控制系统的费用有决定性影响。

① 水体的自净能力

水体的自净能力指水体能够同化污染物质而保证水质满足某种功能要求的能力,它与水体自身的特性、对水质的要求、污水的排放方式(如排放点的位置、分散排放或集中排放)等因素有关。水体自净能力是一种有限的自然环境资源。因此,在规划水污染控制系统时要合理开发和利用水体的自净能力,协调平衡节省水污染控制费用与防止水体污染之间的关系。

在决定水体自净能力的诸因素中,水体自身的特性是不可控制的,合理的水质标准、合理进行污水排放点的位置布设是合理利用水体自净能力的保证。

② 污水处理与输送的规模经济效应

污水处理的费用函数反映了污水处理规模、效率的经济特征。目前所使用的费用函数还只能作为一种经验模型来处理,污水处理费用 C_1 与污水处理量 Q 和污水处理效率 η 有关,常用的函数形式为:

$$C_1 = K_1 Q^{K_2} + K_3 Q^{K_2} \eta^{K_4} \quad (1-65)$$

其中: C_1 ——系统的污水处理费用;

Q ——污水处理的规模;

η ——污水处理的效率;

K_1, K_2, K_3, K_4 ——费用函数的参数。

当污水处理效率不变,即 η 为常数时,式(1-65)可写为:

$$C_1 = \alpha Q^{K_2} \quad (1-66)$$

其中: $\alpha = K_1 + K_3 \eta^{K_4}$ 为常数。

研究表明,参数 K_2 的值在 $0.7 \sim 0.8$ 范围内。由于 $0 < K_2 \leq 1$,说明随着污水处规模的增大,处理单位污水的成本降低(如图1-7所示)。费用与规模的这种关系称为污水输送规模的经济效应, K_2 称为污水处理规模的经济效应指数。

污水输送费用 C_2 与污水输送量 Q_{ij} 和输送距离(或管线长度) L_{ij} 有关,关系式为:

$$C_2 = K_5 Q_{ij}^{K_6} L_{ij} \quad (1-67)$$

其中: K_5, K_6 ——费用函数的参数。

由于 $0 < K_6 \leq 1$,说明对于输水管道也存在类似的经济效应,随着输水量的增加,输送单位污水的成本也将降低,这称为污水输送规模的经济效应, K_6 称为污水处理规模的经济效应指数。

由于存在污水处理规模的经济效应,大型污水处理厂在经济上有优势地位,一般倾向于建立大型的污水处理厂以集中处理污水来降低单位污水的处理费用。如果以一个地区建设污水处理厂的数量为变量,随着污水处理厂数量由大变小,即由分散处理逐步过渡到集中处理,系统的污水处理费用将有明显的下降,但污水输送的费用将会迅速上升,如图1-8所示。

③ 污水处理效率的经济效应

如果污水处理的规模不变,即 Q 为常数,则式(1-65)可以写为:

$$C_1 = a + b \eta^{K_4} \quad (1-68)$$

式中: $a = K_1 Q^{K_2}$, $b = K_3 Q^{K_2}$ 均为常数,其函数曲线如图1-9所示。研究表明: $K_4 > 1$ 。所以处理单位污染物所需要的费用将随着污水处理效率的增加而增加。而它们之间的这种关系称为污水处理效率的经济效应。 K_4 称为污水处理效率的经济效应指数。

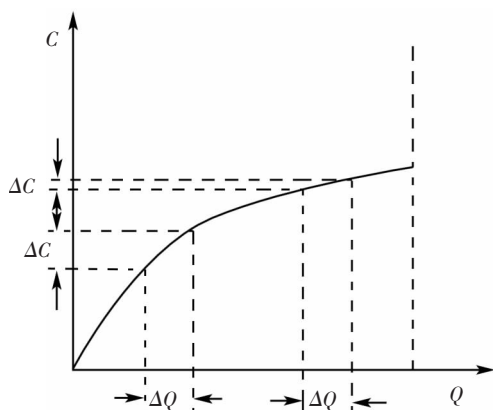


图 1-7 污水处理量的费用函数关系曲线

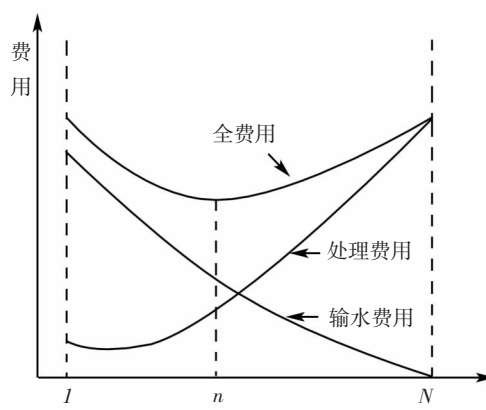


图 1-8 水污染控制系统的组成

由于污水处理效率的经济效应的存在,在规划水污染控制系统时,首先应致力于解决那些尚未处理的污水的治理,或者首先提高那些低水平处理的污水处理程度,然后再进行污水的更高级的处理。

水体的自净能力、污水处理规模的经济效应和污水处理效率的经济效应,在水污染控制系统中是相互影响、相互制约的。例如,为了充分利用污水处理规模的经济效应,需要建设集中污水处理厂;但由于污水的集中排放,反而不利于合理利用水体的自净能力。而当提高集中污水处理厂的处理效率以满足水体水质要求时,又会受到污水处理效率经济效益的制约。因此,对于一个具体的系统来说,水污染控制系统规划的出发点与归宿就是在适当的位置建设适当规模和具有适当处理效率的污水处理厂,在满足水体的水质要求的同时,又使系统的费用最低。

(二) 排放口处理最优规划模型

排放口处理最优规划是在各小区污水处理厂的规模固定的条件下(Q 为常数),寻求满足水体水质要求的各污水处理厂最佳处理效率的组合。

1. 排放口处理最优规划模型

排放口最优化处理模型的表达式为:

$$\min Z = \sum_{i=1}^n C_i(\eta_i)$$

$$s. t \begin{cases} \vec{UL} + \vec{m} \leq \vec{L}^0 \\ \vec{VL} + \vec{n} \geq \vec{O}^0 \\ \vec{L} \geq 0 \\ \eta_i^1 \leq \eta_i \leq \eta_i^2 \end{cases} \quad (1-69)$$

其中: $C_i(\eta_i)$ ——第 i 个小区的污水处理费用;

η_i ——第 i 个小区的污水处理效率;

U, V ——水环境系统 BOD 和 DO 的响应矩阵;

$\vec{L}^0$ ——水环境系统(如河流各断面)的 BOD 约束组成的 n 维向量;

$\vec{O}^0$ ——水环境系统(如河流各断面)的 DO 约束组成的 n 维向量;

$\vec{L}$ ——由输入水环境系统(如河流各断面)的 BOD 组成的 BOD 约束向量;

$\vec{m}, \vec{m}$ ——水环境系统模型中的常数向量;

η_i^1, η_i^2 ——对各污水处理厂效率的技术约束。

式(1-69)目标函数中的变量是污水处理效率 η_i , 而约束条件中的变量是污染物的排放浓度 L_i , η_i 和 L_i 之间的关系可以表示为:

$$\eta_i = 1 - \frac{L_i}{L_i^0} \quad (1-70)$$

$$L_i = (1 - \eta_i) L_i^0$$

其中: L_i^0 ——第 i 小区的污水初始 BOD 浓度。

2. 目标函数线性化模型

由于目标函数是非线性形式,在实际应用中为了能用线性规划模型求解排放口处理最优规划问题,常将费用函数线性化。为使线性函数更好地代表原函数,通常采用分段线性化方法,即将污水处理效率分成几个区间,每一区间用一线性函数代表原函数。

假定在 $0 \leq \eta < 1$ 的区间里,用 n 段线性函数来近似原函数。效率 η 的分段为 $\eta_0, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n$; 每一段直线的斜率分别为 $s_1, s_2, \dots, s_n$ (图 1-10)。

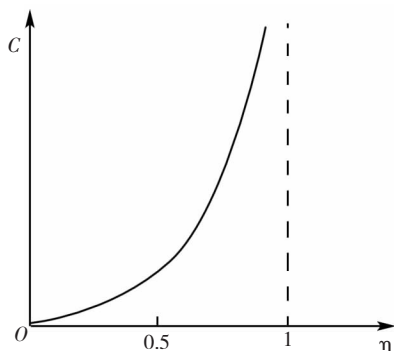


图 1-9 污水处理效率费用函数关系曲线

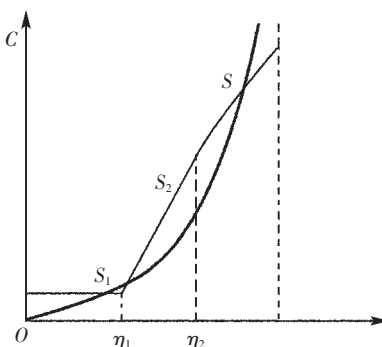


图 1-10 费用函数的分段线性化

对于每一段线性费用函数的近似表达式为:

$$\text{第一段 } C_1 = a + s_1(\eta - \eta_0), \eta_0 \leq \eta < \eta_1$$

$$\text{第二段 } C_2 = a + s_1(\eta_1 - \eta_0) + s_2(\eta - \eta_1), \eta_1 \leq \eta < \eta_2$$

...

第 i 段

$$C_i = a + \sum_{j=1}^{i-1} S_j(\eta_j - \eta_{j-1}) + S_i(\eta - \eta_{i-1}), \eta_{i-1} \leq \eta < \eta_i$$

为了使每一段直线与原函数的误差最小,要求直线与原曲线之间所夹的面积最小,应满足如下的目标函数:

$$\min \int_{\eta_{i-1}}^{\eta_i} dZ = \int_{\eta_{i-1}}^{\eta_i} \left[a + \sum_{j=1}^{i-1} S_j (\eta_j - \eta_{j-1}) + S_i (\eta - \eta_{i-1}) - (a + b\eta^{K_4}) \right]^2 d\eta$$

$$\text{令 } \frac{d \int_{\eta_{i-1}}^{\eta_i} dZ}{ds_i} = 0, \text{ 可以求得各段直线的斜率:}$$

$$s_i = \frac{A_1 + A_2 + A_3}{\frac{1}{3}(\eta_i - \eta_{i-1})^3} \quad (1-71)$$

$$\text{其中: } A_1 = \frac{b}{K_4 + 2} (\eta_i^{K_4+2} - \eta_{i-1}^{K_4+2})$$

$$A_2 = -\frac{b\eta_{i-1}}{K_4 + 1} (\eta_i^{K_4+1} - \eta_{i-1}^{K_4+1}) \quad (1-72)$$

$$A_3 = -\frac{(\eta_i - \eta_{i-1})^2}{2} \sum_{j=1}^{i-1} s_j (\eta_i - \eta_{j-1})$$

3. 线性规划模型

对目标函数作线性化处理,可以将式(1-69)转变为一个线性规划模型:

$$\min Z = \sum_{i=1}^n \left[a_{i0} + \sum_{j=1}^m s_{ij} \eta_{ij} \right]$$

$$s. t. \begin{cases} \vec{UL} \leq \vec{L}^0 - \vec{m} \\ \vec{VL} \geq \vec{O}^0 - \vec{n} \\ \vec{L} \geq 0 \\ \eta_{ij}^1 \leq \eta_{ij} \leq \eta_{ij}^2 \end{cases} \quad (1-73)$$

其中: $i = 1, \dots, n$ 是污水处理厂的编号;

$j = 1, \dots, m$ 是费用函数线性化的段数;

a_{i0}, s_{ij} —— 第 i 个污水处理厂的费用函数的常数项;

η_{ij} —— 第 i 个污水处理厂第 j 段线性函数的处理效率。

将式(1-70)代入式(1-73)得到:

$$\min Z = \sum_{i=1}^n \left[a'_{i0} + \sum_{j=1}^m s'_{ij} (-L_{ij}) \right]$$

$$s, t \left\{ \begin{array}{l} \vec{UL} \leq \vec{L}^0 - \vec{m} \\ \vec{VL} \geq \vec{O}^0 - \vec{n} \\ \vec{L} \geq 0 \\ \eta_{ij}^1 \leq \eta_{ij} \leq \eta_{ij}^2 \end{array} \right. \quad (1-74)$$

一个实际问题形成线性规划后可用单纯形方法编程求解。

非线性规划问题还可以用动态规划、约束梯度法(微分算法)等方法求解,也可以使用一些专门的工具软件或某些软件的优化工具箱求解,如 *Matlab*。

(三) 均匀处理最优规划模型

均匀处理最优规划是在污水处理效率已知的条件下,通过寻求污水处理厂的最佳位置和规模的组合来使区域的污水处理和管道输水的总费用最低。在均匀处理最优规划问题中,由于污水处理效率已知,费用函数只是污水处理规模的函数,在约束条件中不出现水质约束。描述最优均匀处理的模型可以用下述一组数学式来表示:

$$\begin{aligned} \min Z &= \sum_{i=1}^n C_i(Q_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{ij}(Q_{ij}) \\ s, t \left\{ \begin{array}{l} q_i + \sum_{j=1}^n Q_{ji} - \sum_{j=1}^n Q_{ij} - Q_i = 0 \\ Q_i, q_i \geq 0 \\ Q_{ji}, Q_{ij} \geq 0 \\ \forall i, j \end{array} \right. \end{aligned} \quad (1-75)$$

其中: $C_i(Q_i)$ ——第 i 个污水处理厂的污水处理费用,它是污水处理规模的单值函数;

$C_{ij}(Q_{ij})$ ——由 i 地输往 j 地的污水输送的费用,它是输水量的 Q_{ij} 函数;

Q_{ij} ——由 i 地输往 j 地的污水量, $Q_{ji} = -Q_{ij}$;

q_i ——在 i 地收集的污水量;

Q_i ——在 i 地处理的污水量。

由于费用函数是非线性函数,所以均匀处理最优规划模型是非线性模型。

对于第 i 个小区的污水处理费用可由式(1-65)改写为

$$C_{i1} = K_1 Q_i^{K_2} + K_3 Q_i^{K_2} \eta_i^{K_4} = \alpha_i Q_i^{K_2} \quad (1-76)$$

其中: C_{i1} ——第 i 个小区的污水处理费用;

Q_i ——第 i 个小区的污水处理量;

η_i ——第 i 个小区的污水处理效率。

对于一条线路确定的管线,由第 i 小区不处理情况下转输到第 $i+1$ 小区的输水费用可写为:

$$C_{i2} = K_5 Q_{i,i+1}^{K_6} L_{i,i+1} \quad (1-77)$$

其中: C_{i2} ——第 i 个小区的污水转输费用;

$Q_{i,i+1}$ ——由 i 小区转输至 $i+1$ 的污水处理量;

$l_{i,i+1}$ ——输水管线的长度。

对于一个包含 n 个小区的水污染控制系统,总费用可表示为:

$$Z = \sum_{i=1}^n (C_{i1} + C_{i2}) = \sum_{i=1}^n \alpha_i Q_i^{K_2} + K_5 Q_{i,i+1}^{K_6} l_{i,i+1} \quad (1-78)$$

约束条件为:

$$\begin{aligned} Q_{i,i+1} &= Q_{i-1,i} + q_i - Q_i \\ Q_{n,n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (1-79)$$

其中: q_i ——第 i 个小区的当地产生的污水量。

定义拉格朗日(Lagrange)函数:

$$L = \sum_{i=1}^n (C_{i1} + C_{i2}) + \sum_{i=1}^{n-1} \phi_i (Q_{i-1,i} + q_i - Q_{i,i+1}) + \phi_n (Q_{n-1,n} + q_n - Q_n) \quad (1-80)$$

为验证 Q_i 和 $Q_{i,i+1}$ 的变化对目标函数的影响,计算拉格朗日的海森(Hessian)矩阵:

$$\frac{\partial^2 L}{\partial Q^2} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 L}{\partial Q_1^2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2 L}{\partial Q_2^2} & \dots & & & & & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & & & & \dots \\ \dots & & \dots & \frac{\partial^2 L}{\partial Q_n^2} & \dots & & & \dots \\ \dots & & & \dots & \frac{\partial^2 L}{\partial Q_{1,2}^2} & \dots & & \dots \\ \dots & & & & \dots & \frac{\partial^2 L}{\partial Q_{2,3}^2} & \dots & \dots \\ \dots & & & & & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{\partial^2 L}{\partial Q_{n-1,n}^2} \end{bmatrix} \quad (1-81)$$

在海森矩阵中,除对角线元素外其余全为 0。由于污水处理和输送的规模效应存在, K_2 和 K_6 都是大于 0 小于 1 的数,所以有:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 L}{\partial Q_{i,i+1}^2} &= \frac{\partial^2 C_{i2}}{\partial Q_{i,i+1}^2} < 0 \\ \frac{\partial^2 L}{\partial Q_i^2} &= \frac{\partial^2 C_{i1}}{\partial Q_i^2} < 0 \end{aligned} \quad (1-82)$$

由于海森矩阵主对角线上的元素全部小于 0, 其余全为 0, 因此海森矩阵的奇数阶主子式全小于 0, 而偶数阶主子式全大于 0。根据多元函数的极值定理, 原函数也即区域水污染控制系统的总费用在区间 $0 < Q_i < (Q_{i-1,i} + q_i)$ 内可取最大值。均匀处理最优规划的目标函数实际上是由两个凸函数的加和构成。因此目标函数的费用关系曲线也是由两条凸曲线叠加而成的一条凸曲线。这意味着对于 i 小区而言, 将全部污水(包括当地收集的污水和其他小区转输来的污水)分为两部分, 一部分处理, 另一部分转输到其他小区去处理的策略是不经济的。只有在 $Q_i = 0$ (全不处理), 或 $Q_i = Q_{i-1,i} + q_i$ (全部处理) 时, 水污染控制系统的总费用才取得极小值。根据这种性质确定的就是“全不处理或全部处理”的策略。这个结论对水污染控制系统的规划有着重要的意义。运用这个结论来研究水污染控制系统内部结构的分解组合, 可以大大缩小问题的解空间, 可以把一个具有无穷多组流量组合的问题变成一个有限多组解的问题。一个小区的污水可以被作为一个整体或者全部就地处理, 或者全部转输到另一个小区去进行联合处理。

一个包含 n 个小区(或节点)的系统, 可能的最大污水量组合数目是 $2^n - 1$ 。当 n 较小时可以采用枚举法列举出所有可能的污水量组合方案。但当 n 增大时方案数会迅速增加, 采用枚举法进行求解就很困难。此时可采用混合整数规划法求解。

目前, 整数规划和混合整数规划模型尚只能运用于线性模型, 因此, 必须首先对污水处理系数的费用函数(包括污水处理和污水输送的费用函数)进行线性化。我们将式(1-78)中的 Q_i 和 Q_{ij} 都分成三个区间, 进行分段线性化, 如图 1-11a、b 所示。设污水处理费用函数分段线性化的斜率分别为 a_1, a_2, a_3 , 各线段在纵坐标上的截距分别为 a_1^0, a_2^0 和 a_3^0 ; 污水的输送费用函数分段线性化的斜率分别为 b_1, b_2, b_3 , 各线段在纵坐标上的截距分别为 b_1^0, b_2^0 和 b_3^0 。

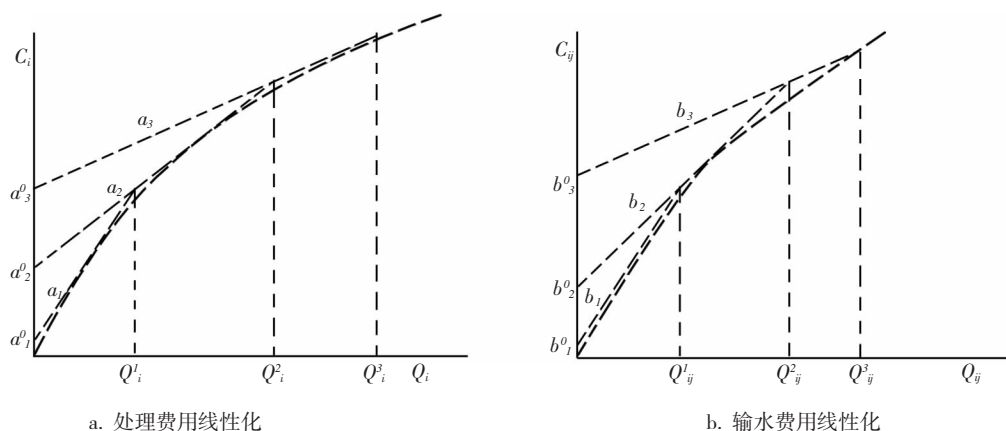


图 1-11 目标函数的线性化

线性化后的污水处理费用为:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^3 \alpha_{ik} Q_{ik} + \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^3 \alpha_{ik}^0 \gamma_{ik} \quad (1-83)$$

污水输送的费用是:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^3 b_{ijk} Q_{ijk} + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^3 b_{ijk}^0 \delta_{ijk} \quad (1-84)$$

其中: γ_{ik} 和 δ_{ijk} 为逻辑变量,特性如下:

$$\gamma_{ik} = \begin{cases} 0, & \text{当 } Q_{ik} = 0 \\ 1, & \text{当 } Q_{ik} \neq 0 \end{cases} \quad (1-85)$$

$$\delta_{ijk} = \begin{cases} 0, & \text{当 } Q_{ijk} = 0 \\ 1, & \text{当 } Q_{ijk} \neq 0 \end{cases}$$

脚标 k 表示费用函数线性化的分段区间。则均匀处理的水污染控制系统最优规划的目标函数就是污水处理费用和输送费用之和,即:

$$\min Z = \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^3 (\alpha_{ik} Q_{ik} + \alpha_{ik}^0 \gamma_{ik}) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^3 (b_{ijk} Q_{ijk} + b_{ijk}^0 \delta_{ijk}) \quad (1-86)$$

上述目标函数的最优化必须满足下列约束条件:

$$\begin{aligned} s.t1: & q_i + \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^3 Q_{jik} - \sum_{i=1}^n \sum_{k=1}^3 Q_{ijk} - \sum_{k=1}^3 Q_{ik} = 0, \forall i \\ s.t2: & \sum_{k=1}^3 Q_{ik} \leq \mu_{ik} \gamma_{ik}, \forall i \\ s.t3: & \sum_{k=1}^3 Q_{ijk} \leq V_{ijk} \delta_{ijk}, \forall i, j \\ s.t4: & \sum_{k=1}^3 \gamma_{ik} \leq 1, \forall i \\ s.t5: & \sum_{k=1}^3 \delta_{ijk} + \sum_{k=1}^3 \delta_{jik} \leq 1, \forall i, j \\ s.t6: & Q_{ijk} \geq 0, \forall i, j, k \\ s.t7: & Q_{ik} \geq 0, \forall i, k \\ s.t8: & \gamma_{ik}, \delta_{ijk} = 0 \text{ 或 } 1, \forall i, j, k \end{aligned} \quad (1-87)$$

其中:s.t1 代表节点的流量平衡约束。s.t2 表示在某小区建设的污水处理厂的规模不应大于允许在该地区排入水体的流量, μ_{ik} 代表允许排入水体的污水量。s.t3 表示管线的输水能力约束, V_{ijk} 代表给定管线的最大输水能力。s.t4 是为每一小区至多只建造一座污水处理厂的约束。s.t5 代表流向约束,即污水管线上只允许污水单方向流动。s.t6、7 为变量的非负约束;s.t8 为逻辑变量约束。

上述目标函数与约束条件一起构成了一个混合整数规划问题,求解这个模型可以得到系统的总费用(包括污水的处理费用和输送费用)、最佳的污水处理厂的位置、规模、输水管线的走向和输水量等。

(四) 区域处理最优规划模型

区域处理最优规划是排放口处理最优规划和均匀处理最优规划的综合,要求综合考虑水体自净能力、污水处理、输水线路三种因素的作用。也就是说既要考虑污水处理厂的最佳位置和规模,又要考虑每座污水处理厂的最佳处理效率。其一般形式为:

$$\begin{aligned} \min Z = & \sum_{i=1}^n C_i(Q_i, \eta_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n C_{ij}(Q_{ij}) \\ s.t. & \begin{cases} \vec{UL} + \vec{m} \leq \vec{L}^0 \\ \vec{VL} + \vec{n} \geq \vec{O}^0 \\ q_i + \sum_{j=1}^n Q_{ji} - \sum_{j=1}^n Q_{ij} - Q_i = 0, \forall i \\ Q_i, q_i \geq 0, \forall i \\ Q_{ij}, Q_{ji} \geq 0, \forall i, j \\ \vec{L} \geq 0 \\ \eta_i^1 \leq \eta_i \leq \eta_i^2, \forall i \end{cases} \end{aligned} \quad (1-88)$$

其中: $C_i(Q_i, \eta_i)$ 为第 i 个小区的污水处理费用,它既是污水处理规模(Q_i)的函数,又是污水处理效率(η_i)的函数。目前还没有比较成熟的技术求解这类问题,试探分解法是较为常用的处理方法。

试探分解法的基础是“全不处理或全部处理”的策略。根据这个策略,可以把任一个小区的污水作为一个决策变量,或者就地处理,或者试探着把它送到其他相邻节点去进行共同处理。通过对产生的结果(系统总费用)进行直接比较,选出使系统总费用最低的解作为当前最优解,并作为下一次试探的初始目标,这种试探按一定的规则反复进行,直至预定的程序结束。

在进行每一次试探之后,原问题就分解成了两个新的子问题——排放口最优化处理问题与输水管线的最优计算问题,这两个问题可以独立计算。它们的费用之和就是一次试探后的系统总费用,把这个总费用返回原问题,与上一次保留的最优解进行比较,舍劣存优。然后按一定步骤重复进行分解和协调,不断使目标获得改进,直至取得满意的解。

试探法是一种直接最优化方法,它没有固定的运算程序,其目标就是在试探过程中包含尽可能多的组合方案,从中选出目标值最优的解。试探法可以从任意一个初始可行解开始,较常用的方法是由开放节点试探、封闭节点试探与最优输水路线试探求解。

1. 开放节点试探

开放节点是指那些建有污水处理厂的小区,负责处理本小区的污水和由其他小区转输来的污水。所谓开放节点试探就是将被试节点的污水送到相邻的开放节点去处理,而将原来的污水处理厂关闭,以考察封闭污水处理系统中每一个开放节点的可能性(能否使费用降低)。若所试探的节点是 i ,与其相邻的另一个开放节点是 j (j 可以在 i 的上游,也可以在 i 的下游)。试探的结果用下式判定:

$$\left[C_i(Q_i, \eta_i) + C_j(Q_j, \eta_j) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n C_k(Q_k, \eta_k) \right] -$$

$$\left[C'_j(Q_i + Q_j, \eta'_j) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n C'_k(Q_k, \eta'_k) + C_{ij}(Q_{ij}) \right] > 0? \quad (1-89)$$

其中: i ——试探开放节点的编号;

j ——相邻开放节点的编号;

k ——其余节点的编号;

C_{ij} ——污水转输的费用;

C_i, C_j, C_k ——污水处理的费用;

Q_i, Q_j, Q_k ——污水处理的规模;

η_i, η_j, η_k ——污水处理的效率;

Q_{ij} ——污水转输的流量。

上述判断式左边第一个方括号内表示的是试探前的污水处理总费用,第二个方括号内表示的是试探后的污水处理费用和转输费用总和。试探过程不仅改变了流量的组合,也使污水处理效率的组合发生变化。 C'_j 和 C'_k 可由排放口最优规划计算, C_{ij} 由转输管线的费用函数计算。

若上述不等式成立,说明节点 i 应该封闭,因为节点 i 封闭后,系统总费用将下降;否则节点 i 将继续开放。开放节点试探根据节点编号依次进行,对系统中所有开放节点进行一次试探称为开放节点的一次试探循环。若一个循环产生了费用改进,就返回第一个开放节点继续探讨;否则进入下一子程序——封闭节点试探。

2. 封闭节点试探

封闭节点又称为转输节点,是指那些不建设污水处理厂,而将污水送到邻近小区去处理的小区(节点)。封闭节点试探是开放节点试探的反过程,它的任务是试探开放原先封闭节点的可能性。一个封闭节点一旦重新开放,则该节点处收集的本小区的污水及经由该节点转输的污水全部在该节点处进行处理。一个封闭节点是否应该开放,由下式判断:

$$\left[C_j(Q_i + Q_j, \eta'_j) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n C_k(Q_k, \eta'_k) + C_{ij}(Q_{ij}) \right] -$$

$$\left[C_i(Q_i, \eta_i) + C_j(Q_j, \eta_j) + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^n C_k(Q_k, \eta_k) \right] > 0? \quad (1-90)$$

若上述不等式成立,则 i 节点应该开放;否则应继续封闭。

与开放节点试探一样,封闭节点试探也根据节点编号依次进行。若在一个封闭节点试探循环中产生任何的目标改进,就返回第一个子程序——开放节点试探;否则进入下一个子程序——输水路线试探。

3. 输水路线试探

输水路线试探是要探索一种输水捷径。开放节点试探和封闭节点试探都是按节点的编号依次进行的。实际上一个节点的污水输送到另一个节点,有可能并不必经过中间节点转输,在两个节点之间有可能存在捷径(图1-12)。图中假设 i 和 k 是两个封闭节点, j 是开放节

点。根据开放节点试探和封闭节点试探的结果, i 节点的污水经由 k 节点, 与 k 节点的本地污水汇合以后共同输往 j 节点。现在的问题是: 如果由 i 节点到 j 节点存在捷径, 则 i 节点的污水是直接输往 j 节点好还是原先的路径好? 这个问题可以由以下判别原则解决:

$$[C_{ik}(Q_i) + C_{kj}(Q_i + Q_k)] - [C_{ij}(Q_i) + C_{kj}(Q_k)] > 0? \quad (1-91)$$

若不等式成立, 则表明 i 节点的污水应直接输送到 j 节点; 否则仍需转至节点 k 再输至 j 。

输水路线试探对每一个封闭节点依次进行, 计算结束输出系统的一个满意解及其相应的费用。

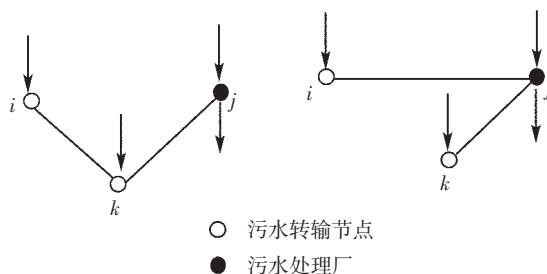


图 1-12 输水路线试探

试探法是一种直接最优化方法, 它原理简单, 方法易行。试探法本身对目标函数的形式没有特别要求, 在处理水污染控制系统的规划问题时, 试探法的应用十分灵活, 尤其是对于大型、复杂的水污染控制规划问题, 在其他优化技术不能或很难施展时, 试探法不失为一种有力而实用的工具。

(五) 水资源—水质系统规划模型

水体的自净能力体现在对污染物的稀释和生化降解两方面。如果进入水环境系统的污染物浓度过高, 会很快消耗完水环境中的溶解氧, 使水体中的生化反应从好氧转化为缺氧直至厌氧, 水质变坏。一般来说, 污水及污染物的排放在时间上的分布比河流水文条件的变化要均匀很多。由于河流的径流量直接影响到河流的稀释净化能力, 因此, 比较严重的污染一般都发生在河流的低流量时如枯水期。为了解决低流时污染严重的问题, 可以强化污染物的处理, 以最不利的水文条件来确定污水处理构筑物的容量和运行效率。但这样会使污水处理厂的建设费用和运行费用很高; 同时在除了低流量以外的大多数时间里, 污水处理构筑物的容量将变得多余, 造成经济上的不合理。另外, 还可以对河流的径流量进行适当的调节, 放大低流时的流量, 提高河流的稀释自净能力, 以减轻污染、降低污水处理费用。

显然, 这就需要在河流上游修建可进行流量调节的构筑物, 这项工作除可以发挥污染控制效益外, 还可以在诸如洪水控制、水力发电、农田灌溉等方面提供效益。对于这样一个多功能的问题, 要确定流量调节的费用函数是比较困难的。1976 年 J. R. McNamara 以 10 年连续 7 天的最低平均流量的倍数作为变量, 建立了流量调节的费用函数:

$$C = c_r a^{b_r} \quad (1-92)$$

且有

$$a = \frac{Q_{11}' - Q_{11}}{Q_{11}} \quad (1-93)$$

其中: c_r, b_r ——常数, 且 $c_r > 0, b_r > 1$, 它们可根据水库调节的费用进行估算;

a ——低流放大倍数;

Q_{11} ——河流低流时的流量;

Q'_{11} ——经水库调节后的河流低流流量。

在水库调节条件下, 并在一定低流放大倍数下, 对于排放口处理最优规划, 其目标函数的构成为:

$$\min Z = \sum_{i=1}^n C_i(\eta_i) + c_r a^{b_r}$$

$$s.t \begin{cases} \vec{UL} + \vec{m} \leq \vec{L}_2^0 \\ \vec{VL} + \vec{n} \geq \vec{O}_2^0 \\ \vec{L} \geq 0 \\ \eta_i^1 \leq \eta_i \leq \eta_i^2 \end{cases} \quad (1-94)$$

这个模型最简单的求解方法是假定一系列的 a 值, 如令 $a = 0.1, 0.2, \dots, 1, 2, \dots, 10$, 然后计算原问题得到相应总费用 Z 与 a 的关系曲线。在曲线上可找到总费用最低时的低流放大倍数 a^* , 以及相应的污水处理效率 $\eta_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 。

对于区域处理最优规划问题也可用相似的方法处理。

第二节 水环境系统物理模拟模型

物理模拟是以模型和原型之间的物理或几何相似为基础的一种模拟方法。它以再现原型中发生的物理过程为追求目标。物理模拟的最重要问题在于如何建立物理模型以及如何根据其研究(包括实验研究)结果判断在所谓的“自然条件”下所发生(或可能发生)的现象。物理模拟的优点是可以将原型中发生的综合过程在模型中全面反映出来, 这些复杂的过程往往不是简单的数学方程式所能表示的^[24]。

目前水环境系统的物理模拟分为地表水的物理模拟和地下水的物理模拟。地表水的物理模拟, 主要有室内实验模拟和河工模拟试验^{[25][26]}。室内模拟是在实验室内利用水槽或者转动的圆筒来模拟河流中水的流动, 利用自动检测装置, 定期检测水中的 BOD_5 、 DO 的变化。根据 BOD_5 、 DO 随时间变化的曲线, 计算水流中有机污染物的生化降解系数 K_1 和大气复氧系数 K_2 。水槽或者圆筒中的水样采自所研究的水体, 水体的深度、流速以及温度可以自动控制, 因此实验得到的 K_1 、 K_2 的数值具有代表性。河工模型试验是根据相似原理, 模拟天然河流、河口等水体的现象和过程, 在实验室条件下进行观测和研究, 然后将观测研究得到的结果用同样的比尺加以放大, 得到天然原型的过程。模型的设计和制作必须根据原型实测资料, 按照一定的缩尺比例来重现原型。利用河工模型, 可以在室内条件下模拟研究污染物在天然河道中的迁移扩散规律, 同时还可以模拟自然界中一些很少出现的现象如特大洪水、严重干旱发生时的水污染等。

一、物理模拟的理论基础

(一) 相似现象

自然界的相似现象是指在几何相似的系统中,各相应点上发生着物理本质相同的过程,并可用相同的物理方程来描述。在相应点上,同名的物理量(如流速,流量,作用力等)之间具有相同的比例关系。对相似,可以将一个现象的每一个物理量的大小,以一定的倍数转换成另一个现象对应点上的同名物理量的数值。

当表示现象特性各量互成比例,而且一定种类的量,在系统的所有点上,其比例系数具有恒定的数值时,则可以决定现象为相似。对不同种类的量,其比例系数不同。这就是说,如果两种力学系统具有相似的现象,则具有共同的物理规律性,这两个现象必可用共同的数学物理方程描述。

(二) 相似理论

自然界现象的相似要具备一定的条件,只有当这些现象的形成因素相同时才可能产生相同的演变。这就是相似理论的根据。相似理论是物理实验的科学依据也是模型试验的理论基础。

为了讨论相似定理。先介绍一些基本的概念:表征两个相似现象的同名物理量应该有一个常数的比例关系,这个比例值叫做相似常数,常称比尺,如两个系统相应点之间的流速比以 λ_u 表示,相应点的距离比以 λ_l 表示,密度比以 λ_ρ 表示,作用力比以 λ_F 表示等,则相似常数就是这些比例值:

$$\lambda_u = \frac{u'}{u''}, \lambda_l = \frac{l'}{l''}, \lambda_\rho = \frac{\rho'}{\rho''}, \lambda_F = \frac{F'}{F''}$$

式中的撇号表示该量属于第一个现象或第二个现象。所谓相似准数,是指在相似现象中,由某些不同物理量表示的单值条件组成的无量纲的综合数,例如雷诺数 $Re = \frac{vd}{\nu}$ 等。

描述某一现象的物理方程可以有一般的解,也可以有特定的解,在特定的条件下有一对应的特定解。两个流动现象如果相似,就意味着它们具有相似的单值解,造成单值解的条件即是单值条件。流动现象的单值条件包括以下几个方面:

1. 现象的几何条件,如河床的几何形状、河床与河岸的粗糙程度等;
2. 边界条件,如河底是否固定,表面是否与大气相接触,是否具有清混水交接面等;
3. 起始条件,指现象起始的时刻及相应的流动状态,如流动的速度场、浓度场、压力场及流动形态等。流动的起始状态会影响以后的流动,而恒定过程则不会。
4. 介质的物理特性及主要的特性常数,如密度、粘性、加速度、混掺物(泥沙、气体等)的容重、阻力系数、粗糙系数等。

(1) 相似第一定理

由牛顿(N. Newton)于1686年提出,别尔特兰(J. Bertrand)1848年给出证明。假设有两个呈相似运动的力学系统,根据牛顿第二定理,设第一系统为原型,以 p 表示有 $F_p = m_p \frac{du_p}{dt_p}$; 设第二系统为模型,以 m 表示可有: $F_m = m_m \frac{du_m}{dt_m}$ 。因为两个系统运动相似,故有相似比尺关系,即

$$\lambda_F = \frac{F_p}{F_m}, \lambda_m = \frac{m_p}{m_m}, \lambda_u = \frac{u_p}{u_m}, \lambda_t = \frac{t_p}{t_m}$$

亦即:

$$\frac{F_p t_p}{m_p u_p} = \frac{F_m t_m}{m_m u_m} = idem (\text{同一数值})$$

这一由单位条件所组成的无量纲数 $\frac{Ft}{mu} = Ne$ 称为牛顿数, 为一相似准数, 是判别现象相似的一种标志, 也即两个相似系统中牛顿数必相同。这样相似第一定理可以表述为: “相似现象中的牛顿数必相等” 或者 “具有相同物理过程的相似现象, 其相似准数的数值相等”。

(2) 相似第二定理

对两个相似的现象, 描述其物理过程的方程式必然是一样的, 只是各物理量的数值大小不同而已, 这种方程可以改写成为各无量纲准数, 如管道流动的阻力问题, 其物理量之间关系式为:

$$f(\Delta p, v, \mu, l, d, k) = 0$$

表示为无量纲的相似准数的关系式为

$$F\left(\frac{\Delta p}{\rho v^2}, \frac{ud}{\gamma}, \frac{l}{d}, \frac{k}{d}\right) = 0$$

即常见的阻力公式

$$\Delta h = f(Re, \frac{k}{d}) \frac{l}{d} \frac{v^2}{2g} = \lambda \frac{l}{d} \frac{v^2}{2g}$$

这样相似第二定理就可以表述为: “描述自然界现象的各物理量间的方程式, 常可表示为各相似准数(无量纲的特征数) 间的函数关系。”

(3) 相似第三定理

相似第一定理和第二定理说明了相似现象的共同性质。但是怎样的现象才能成为相似呢? 应当找到现象相似的必要和充分条件。若在几何相似的系统中有两个现象, 且由同一个物理方程式描述, 这就构成了两者相似的第一个必要条件。若使两个现象相似, 它们的单值量的相似是必要的, 因为单值条件决定着现象的系统某部分的性能, 这一部分不相似则现象就不能互相相似, 因此, 单值条件的相似, 是两者相似的另一个必要条件。在两种现象间, 由单值量所组成的相似准数, 也应是相等的, 这就构成了现象相似的充分条件。

综上所述, 相似第三定理可表述为: “发生在几何相似系统中的现象, 服从于同一个物理方程, 其单值量是常数的比例现象, 且由之组成的相似准数相等时, 则现象为相似。”

上述三个定理是相似理论的基础。它说明了在进行实验研究时应该量测包括在相似准数中的哪一些量。并且以相似准数间的关系来整理实验所得的数据。而在将实验结果应用到其他同一性质的现象上去时, 只要知道单值条件相似以及相似准数相等这两个条件, 就可以确定该现象与研究过的现象相似, 将实验所得结果应用上去。总之, 相似理论不但能指导实验以及处理实验结果, 而且还能指出实验结果推广应用的区域。所以相似理论是模型试验的理论基础。

但是, 在自然界的现象中, 要保持第三定理中所有单值条件的相似以及相似准数数值的

相等,常常是困难的,所以就运用了近似相似的方法。近似相似的方法,是根据实验的要求,以及各个因素对现象影响的大小,抓住起主导作用的因素,忽略次要的因素,来进行实验及处理实验结果。

(三) 流动的相似条件

当两种流动相似时,两种流动相应点上所有表征流动状况的相应物理量都各具有一定的比例关系。所以流动的力学相似的三个条件:几何和边界相似,运动相似和动力相似。

1. 几何和边界相似

几何和边界相似是指原型和模型两个流动的几何形状相似和两个流动的边界条件相同。几何形状相似要求原型和模型两个流动中对应部位的长度保持一定的比例关系,即模型水流各对应几何尺寸都是按同一比例尺由原型水流塑制而成。设 L_p 为原型某一部位的长度, L_m 为模型对应部位的长度,则几何相似要求长度比例尺 λ_L 为:

$$\lambda_L = \frac{L_p}{L_m} \quad (1-95)$$

长度比例尺 λ_L 在原型和模型任何对应的部位都是相同的,它既可以代表长度比例尺,也可以代表宽度比例尺和高度比例尺。因此,有了长度比例尺,就可以引出面积比例尺和体积比例尺:

$$\lambda_\omega = \frac{\omega_p}{\omega_m} = \lambda_L^2$$

$$\lambda_V = \frac{V_p}{V_m} = \lambda_L^3$$

可以看山,几何相似是通过长度比尺来表达的。边界条件相同,就是要求边界上的流动条件相同,如模型的进流条件和出流条件应和原型水流是相同的等等。

2. 运动相似

运动相似是指原型和模型两个流动中各对应质点的运动情况是相似的,即要求原型和模型对应质点的速度方向相同、大小保持同一比例,也就是要求两者的速度和加速度相似。设 u_p 为原型流动某一点的流速, u_m 为模型流动对应点的流速,则流速比尺为:

$$\lambda_u = \frac{u_p}{u_m} = \frac{\lambda_L}{\lambda_t} \quad (1-96)$$

式中 λ_t 为时间比尺。若流速采用断面平均流速 v ,则流速比尺为:

$$\lambda_v = \frac{v_p}{v_m} = \frac{\lambda_L}{\lambda_t} \quad (1-97)$$

有了流速比尺 λ_v ,就可以引入加速度比尺:

$$\lambda_a = \frac{a_p}{a_m} = \frac{\lambda_v}{\lambda_t} = \frac{\lambda_L}{\lambda_t^2} \quad (1-98)$$

可以看出,运动相似是通过长度比尺和时间比尺来表达的。

3. 动力相似

动力相似是指作用于原型和模型两个流动相应点的各种不同性质的作用力都各自成同

一的比例关系。作用于流体的力有重力、粘滞力、惯性力、表面张力、弹性力等。如以 F_p 代表原型流动某点的作用力,以 F_m 代表模型流动中相应点上的同样性质的作用力,则动力相似要求

$$\lambda_F = \alpha \frac{F_p}{F_m} \quad (1-99)$$

流体运动的变化发展就是各种物理力与惯性力相互作用的结果。因此各物理力之间的比例关系应以之为一方,分别以它对其他物理力的比例来表示,要想达到两种流动相似,则这种比例应该保持固定不变。

已知惯性力等于质量乘以加速度,即 $F = ma = \rho Va$
其中: ρ ——密度, $[M \cdot L^{-3}]$; V ——体积, $[L^3]$; a ——加速度, $[L \cdot T^{-2}]$ 。因此惯性力可用下式衡量:

$$\rho L^3 \frac{L}{t^2} = \rho L^2 v^2 \quad (1-100)$$

式中 $\rho L^2 v$ 代表单位时间流过某一断面的质量,而 $\rho L^2 v \cdot v$ 代表单位时间内流过某一断面的流体质量所具有的动量。也即流体的惯性力。这个量的大小能反映出流动的惯性抵抗改变运动状况的能力。如果企图改变运动状态的其他物理力用 F 表示,则各物理力之间的比例关系为 $\frac{F}{\rho L^2 v^2}$,通常把这个无量纲数 $\frac{F}{\rho L^2 v^2}$ 叫做牛顿数,用 Ne 表示。若原型和模型两种流动成为动力相似,则两者的牛顿数必然相等,即

$$Ne = \frac{F}{\rho L^2 v^2} = \text{常数} \quad (1-101)$$

或可写为 $Ne_p = Ne_m$

$$\text{即} \frac{F_p}{\rho_p L^2 v_p^2} = \frac{F_m}{\rho_m L^2 v_m^2}$$

对上式做变化可得:

$$\lambda_F = \frac{F_p}{F_m} \frac{\rho_p L^2 v_p^2}{\rho_m L^2 v_m^2} = \lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_v^2$$

或写为

$$\frac{\lambda_F}{\lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_v^2} = 1 \quad (1-102)$$

上式对作用于流体的任意物理力都是适用的。若将作用于二相流动的某种物理力代入上式的 λ_F 中,即可得物理力相似时的比例关系。

(四) 水动力现象相似的相似准数

要获得水动力现象的相似所要求的相似准数,必须先要有描述该种流动现象的方程式,然后才能导出确定该种流动相似所需要的相似准数。

下面讨论不可压缩粘性流体运动的相似准数。不可压缩粘性流体的运动方程是连续方程式和纳维埃斯托克斯运动方程式:

$$\text{连续方程} \quad \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0 \quad (1-103)$$

$$\text{运动方程} \quad \begin{cases} \frac{\partial v_x}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = g_x - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x} + \nu \nabla^2 v_x \\ \frac{\partial v_y}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = g_y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial y} + \nu \nabla^2 v_y \\ \frac{\partial v_z}{\partial t} + v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_y}{\partial y} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} = g_z - \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \nabla^2 v_z \end{cases} \quad (1-104)$$

其中： v_x, v_y, v_z ——流速 v 在 x, y, z 各轴方向上的分量；

g_x, g_y, g_z ——单位体积力在各轴方向的分量；

p ——压力； ν ——运动粘滞系数；

$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ ——拉普拉斯算子。

假定两种流动(原型和模型变量分别以脚标 p 和 m 表示)的任何相应点处流体质点的运动都遵从不可压缩粘性流体运动方程,若两种流动现象相似,则可写出其单值条件间相似的比例关系(相似常数)如下(设 λ 表示原型值与模型值的比例即比例尺):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{x_p}{x_m} = \frac{y_p}{y_m} = \frac{z_p}{z_m} = \lambda_l \\ \frac{v_{xp}}{v_{xm}} = \frac{v_{yp}}{v_{ym}} = \frac{v_{zp}}{v_{zm}} = \lambda_v \\ \frac{g_{xp}}{g_{xm}} = \frac{g_p}{g_m} = \lambda_g \\ \frac{t_p}{t_m} = \lambda_t, \frac{\rho_p}{\rho_m} = \lambda_\rho, \frac{\lambda_\rho}{\lambda_m} = \lambda_\lambda \end{array} \right. \quad (1-105)$$

若两种流体运动相似,则 $\lambda_t, \lambda_\lambda$ 可以是任何数,不受任何限制。通过对原型流动和模型流动分别改写,并加以比较,可得:

$$\frac{\lambda_l}{\lambda_t \lambda_v} = \frac{\lambda_g \lambda_l}{\lambda_v^2} = \frac{\lambda_p}{\lambda_\rho \lambda_v^2} = \frac{\lambda_\lambda}{\lambda_v \lambda_l} = 1 \quad (1-106)$$

于是 4 个方程式联系着水动力学方程式中的 7 个物理量的相似常数,显然只允许其中 3 个相似常数可以任意选择。将式(1-105)代入式(1-106),可得相似准数:

$$\begin{aligned} \frac{v_p t_p}{l_p} &= \frac{v_m t_m}{l_m}, \text{ or } \frac{v t}{l} = idem \\ \frac{v_p^2}{g_p l_p} &= \frac{v_m^2}{g_m l_m}, \text{ or } \frac{v^2}{g l} = idem \\ \frac{p_p}{\rho_p v_p^2} &= \frac{p_m}{\rho_m v_m^2}, \text{ or } \frac{p}{\rho v^2} = idem \\ \frac{v_p l_p}{\nu_p} &= \frac{v_m l_m}{\nu_m}, \text{ or } \frac{v l}{\nu} = idem \end{aligned} \quad (1-107)$$

由此可见,水动力现象的相似应保持式(1-107)中的4个等式成立,也即有4个无量纲的相似准数。相似准数 $\frac{vt}{l}$ 称为斯特鲁哈数,常以 St 表示,它表示两种非恒定流动在流速对时间关系上是否相似,反映流动的非恒定程度。准数 $\frac{v^2}{gl}$ 称为弗劳德数,常以 Fr 表示,它表示惯性力与重力之比,说明重力影响的大小。准数 $\frac{p}{\rho v^2}$ 称为欧拉数,以 Eu 表示,有时可用 Δp 代替压力 p ,因此准数就具有 $\frac{\Delta p}{\rho v^2}$ 的形式,它反映压力或压差与惯性力之比,表示压力的影响。准数 $\frac{vl}{\nu}$ 称为雷诺数,以 Re 表示,反映惯性力与粘滞力之比,表示粘滞力的影响, Re 数很大就说明惯性力大大超过粘滞力。从而式(1-107)可写为:

$$\begin{aligned} St_p &= St_m \quad \text{或} \quad St = idem \\ Fr_p &= Fr_m \quad \text{或} \quad Fr = idem \\ Eu_p &= Eu_m \quad \text{或} \quad Eu = idem \\ Re_p &= Re_m \quad \text{或} \quad Re = idem \end{aligned} \quad (1-108)$$

根据式(1-108)所述,两种粘性流动现象达到相似需要4个相似准数相等,对于非恒定流,可以用4个相似准数相等所确定的函数式表示:

$$f(St, Fr, Re, Eu) = 0 \quad (1-109)$$

而对于恒定流则可去掉表示非恒定程度的 St 准数,故可写为:

$$f(St, Re, Eu) = 0 \quad (1-110)$$

式(1-109)和式(1-110)称为准数方程式,当运动现象的各种类型的力被确定后,相似现象的各相似准数存在着确定关系时,这种关系可用描述这个现象的微分方程式描述。

(五) 几种常用的模型相似准则

流体的各种物理性质引起不同的作用力。当原型与模型两个水流维持动力相似时,要求两个水流中各种物理力保持固定的比例关系,但要求所有作用力同时保持相似的比例关系是很困难的。此时就根据某一具体水流中起主导作用的力,确定其相似条件。表示水流运动中某种起主导作用的物理力的相似条件,叫做相似准则,也叫模型相似律。

1. 重力相似准则

若原型与模型中对水流运动起主导作用的力为重力,而将运动中次要的作用力略去不计,则两种水流动力相似就按重力相似处理。作用于水流的重力 $G = mg = \rho Vg$,分别用 G_p 和 G_m 代表原型和模型中作用的重力,则两种水流保持动力相似应具有下列关系:

$$\lambda_G = \frac{G_p}{G_m} = \frac{\rho_p g_p V_p}{\rho_m g_m V_m} = \lambda_\rho \lambda_g \lambda_L^3 \quad (1-111)$$

根据液流相似条件,欲达到动力相似,可将牛顿数中的 F 值代以 G ,即在式(1-102)中用 λ_G 代替 λ_F ,可得:

$$\frac{\lambda_G}{\lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_v^2} = 1$$

$$\lambda_\rho \lambda_g \lambda_L^3 = \lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_v^2$$

$$\text{也即 } \frac{\lambda_v^2}{\lambda_g \lambda_L} = 1 \quad \text{或} \quad \frac{\lambda_v}{\sqrt{\lambda_g \lambda_L}} = 1 \quad (1-112)$$

这说明重力起主导作用的两种水流保持动力相似时,要求原型和模型中的弗劳德数 Fr 相等,即所谓弗劳德相似准则。在这种情况下,相似准数为弗劳德数。弗劳德数相等意味着原型与模型的流速水头沿程变化相等。

在重力相似准则下,流速比尺、流量比尺和时间比尺分别为:

$$\begin{aligned} \lambda_v &= \lambda_L^{1/2} \\ \lambda_Q &= \lambda_\omega \lambda_v = \lambda_L^{5/2} \\ \lambda_t &= \frac{\lambda_L}{\lambda_v} = \frac{\lambda_L}{\lambda_L^{1/2}} = \lambda_L^{1/2} \end{aligned} \quad (1-113)$$

2. 阻力相似准数

当研究压力隧洞、有压管道及潜体绕流等问题时,水流主要受阻力作用,原型与模型的动力相似按阻力相似准则考虑。水流阻力包括因粘滞性而产生的粘滞阻力和因质点混掺动量交换而产生的紊流混掺阻力两部分。设水流阻力为 T ,粘滞阻力可以 $\mu\omega \frac{du}{dn}$ 表示。紊流混掺阻力以 $\tau\chi l = (\lambda RJ)\chi l$ 表示,故有:

$$T = \mu\omega \frac{du}{dn} + (\gamma RJ)\chi l \quad (1-114)$$

其中: μ ——动力粘滞系数;

ω ——过流断面;

$\frac{du}{dn}$ ——流速梯度;

R ——水力半径;

τ ——沿紊流边界的紊流切应力, $\tau = \gamma RJ$;

χ ——过流边界的湿周;

l ——过流边界的长度;

J ——水力坡度。

当水流处于层流状态时,上式右边第二项为 0;水流处于阻力平方区时,等号右边第一项为 0。

(1) 水流为层流状态,粘滞阻力为主要作用力时

$$T = \mu\omega \frac{du}{dn}$$

通过原型与模型比例相似可得:

$$\lambda_\mu \lambda_L \lambda_\nu = \lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_\nu^2$$

$$\frac{\lambda_L \lambda_\nu}{\lambda_\mu} = \frac{\lambda_L \lambda_\nu}{\lambda_\nu} = 1$$

或写为

$$\frac{\nu_p L_p}{v_p} = \frac{\nu_m L_m}{v_m} \quad (1-115)$$

$$Re_p = Re_m$$

上式说明流动的粘滞力作用若相似,则其雷诺数必相等,此即粘滞力相似准则,相似准数为雷诺数。在该准则下,流速比尺、流量比尺和时间比尺分别为:

$$\lambda_\nu = \frac{1}{\lambda_L}, \lambda_Q = \lambda_w \lambda_\nu = \lambda_L, \lambda_t = \frac{\lambda_L}{\lambda_\nu} = \lambda_L^2 \quad (1-116)$$

(2) 当水流处于紊流的阻力平方区,紊流为主要作用力时,即 $T = \lambda R J \chi l$, 将 $\lambda = \rho g$, $J = \frac{\lambda_\nu^2}{c^2 R}$ 代入得 $T = \rho g R \chi l \frac{\lambda_\nu^2}{c^2 R} = \rho \chi l \nu^2 \frac{g}{c^2}$, 由水力学的达西和谢才公式,可得 $c = \sqrt{\frac{8g}{\lambda}}$, 即 $\frac{g}{c^2} = \frac{\lambda}{8}$, 代入 c , $T = \rho \chi l \nu^2 \frac{\lambda}{8}$, 因而可得:

$$\lambda_T = \lambda_\rho \lambda_L^2 \lambda_\nu^2 \lambda_\lambda^2 \quad (1-117)$$

在牛顿数中,令 $\lambda_F = \lambda_T$, 则可得

$$\lambda_\lambda = 1 \text{ 或 } \lambda_p = \lambda_m \quad (1-118)$$

上式说明:与保持原型与模型的紊流阻力相似,除两者流动均处于阻力平方区外,还需要 $\lambda_p = \lambda_m$, 即要求两种水流的阻力系数相等。

(3) 重力和阻力同时相似

当研究河道水流运动和溢洪道过水能力等问题时,需同时考虑重力和阻力的作用。所以在模型试验时,原型和模型同时满足重力和阻力的相似。在这种情况下,水流多处于紊流状态,因此,原型和模型两种水流中所有相应点上的重力比尺 λ_G 应等于紊流阻力比尺 λ_T , 并均应等于牛顿数的比尺 λ_F , 即

$$\lambda_G = \lambda_T = \lambda_F$$

将式(1-111)和式(1-117)分别代入式(1-102)得:

$$\frac{\lambda_\nu^2}{\lambda_g \lambda_L} = 1 \text{ 和 } \lambda_\lambda = 1 \quad (1-119)$$

这就是重力和阻力相似所要满足的条件。上式第一项为弗劳德准则,是满足重力相似必须遵守的相似准则;第二项 $\lambda_\lambda = 1$, 即得 $\lambda_p = \lambda_m$ 是满足紊流阻力的相似准则。由上二式可知,在按重力相似准则设计模型时,同时满足 $\lambda_p = \lambda_m$ 的要求,就可以同时满足重力和紊流阻力相似的要求。

二、河流水体中污染物混掺和输移的模型试验^[26]

(一) 概述

我们在制订水污染控制规划和水质管理措施时,需要了解研究水体的水污染程度并对未来水质变化作一定的预测,在进行模拟预测时就必须掌握污染物质在水体中的混掺和输移规律。水质问题的研究涉及到水动力学、化学、生物学、气象学以及土壤学等方面的知识,而水环境中污染物质的处理则涉及到河流、水库、河口、海洋等许多领域。为说明问题,这里重点介绍河流中污染物质的混合和输移的试验研究问题。

研究水质的水动力学问题,可以利用原型观测、数学模拟和物理模拟等方法。河流中比重较大的杂质和金属的输移,原则上可以按照河流泥沙的研究方法处理。

污水排入河流形成污染带,与河水逐渐混掺,会显示出污染浓度或温度的垂向、横向以及纵向上的分布情况。首先是水出流后由初始动量和浮力在受纳水体中进行稀释,动量和浮力作用即行减弱;继而污水主要由于受纳水体的紊动作用在河道中进行横向混掺,一般将污水的回流区和过渡区称为近区。最后当河流横向充分混掺后,则纵向剪切流动的离散过程将使浓度趋向均匀,这个河段被称为远区。

城市污水和电厂废热水排放所要研究的问题可分为:

1. 在平面上污染带的沿程变化以及在深度上和横向上的浓度变化或温度变化;
2. 排水建筑物附近的水流情况,包括排出水流的方向、流量和流速及其对污染带和浓度分布的影响;
3. 排出水流形成的流速,一般规定不大于 $0.3m/s$,以免影响航行;
4. 电厂常在上游布置取水口以引取冷水。排水口输出的温水一般与河水存在温度差,并易于产生温差异重流。取水口与排水建筑物的间距不能过小,以免中间的回流将温水带进取水口。

目前,在工程和环境上受到重视的是工业冷却水的废热水排放。工业冷却水的废热水排放与一般城市大型排污口废水排放还有所异同。两者在温度水体的混合、扩散、输送、异重上浮下潜等物理现象上,都遵循相同的基本方程。但市政污水排放的特点是污水排放不总是集中排放,排放数量也较少,受纳水体很少引起水温升高,不对表面气象条件产生影响。在实际工程中,大型排污口一般采用多孔长管潜没出流。而电厂废热水排放的影响因素较为复杂,排水量很大,且基本上是连续排放。

根据混掺过程的不同,在各种流区里不同的参数起着支配作用。在紧靠着出口建筑物附近的近区,速度场和浓度场是由出流的参数决定的,因此这个区域的情况受出口建筑物设计的影响。远区就没有动力学的影响,这里的流场是由河道的参数决定的,混掺是比较缓慢的。

(二) 模型的相似条件和模型设计的一些说明

1. 为了准确地模拟近区污染物的混掺现象和重力影响应采用正态模型并遵循弗劳德相似准则:

$$\lambda_{Fr} = \frac{\lambda_v}{(\lambda_g \lambda_h)^{1/2}} = 1 \quad (1-120)$$

这确定了速度比尺,并保证了平均流速分布的相似。

2. 因为混掺现象不仅受对流输移的影响,而且受紊动扩散的影响。而紊动是由粘性及惯性的相比作用引起的,所以要用雷诺数 $Re = \frac{vd}{\nu}$ 来表征。在具有和原型相同的雷诺数的模型中,紊流脉动能自动地得以正确重现。因此,只要模型流动的雷诺数超过临界雷诺数(对于明渠流, $Re \approx 3000$) 就不致影响紊流的结构。也即在弗劳德模型中只要主流保证是紊流,就能模拟紊动的输移过程。

3. 研究扩散过程,假如必须考虑浮力,则模型和原型的密度弗劳德数必须相等,即

$$\lambda_{Frd} = \frac{\lambda_v}{(\lambda_{\Delta p gh / \rho})^{1/2}} = 1 \quad (1-121)$$

4. 在密度分层的流动中,交界面的阻力必须准确地模拟。假如能准确地模拟了河床阻力,即阻力系数 $\lambda_f = 1$,则在较大的 Re 数情况下,交界面的阻力就可做到足够精度的相似。

5. 对于物理、化学或生物交换过程的模拟,需要流动和交换过程的时间比尺一致。

6. 一般认为正态的近区物理模型和远区的数学模型相结合,对于研究河流中的混掺过程是有利的。实践还表明,河道断面形状正态而对混掺现象还能保持一定的相似精度时,对近区模型采用正态也是可以接受的。在目前仍然没有能够代替试验的普遍适用的近区数学模型。

7. 应该指出,由于因素复杂、污染物混掺和输移的模型相似律还远不够完善,只能抓住污水系统的现象本质和现象的主要影响因素,正确处理边界条件,进行深入研究及模拟。对于已经试验获得的成果,还应通过大量原型测验资料,对模型试验结果予以验证。

三、地下水污染系统的物理模拟

地下水系统是一个复杂的大系统,物理模拟在地下水系统的各种问题研究中非常普遍,对于地下水运动的模拟目前已有砂槽模拟、窄缝槽模拟、连续型电模拟和离散型电模拟等多种方法,对这些方法的具体操作和原理可以参考文献[27]。

下面重点介绍地下水污染系统的物理模拟方法。通过物理模拟不仅可以为数学模型提供各种准确的参数值,为求解复杂的数学模型、定量阐述各单元污染物的迁移、转化过程创造条件,还可深入揭示污染物在地下水系统中的迁移、转化机理。因此物理模拟已经成为研究地下水系统中污染物迁移、转化的主要内容。按照模拟范围物理模拟可以分为单元模拟和整体模拟两种^[28]。

(一) 单元物理模拟

虽然地下水污染系统本身是一个完整的体系,但由于各单元的影响因素有明显的不同,加之系统的空间范围较大,整体试验的安装操作不便,因此首先按单元分别进行模拟试验,然后建立各自相应的模式,最后将各单元模式联结起来进行整体系统的计算。

1. 表土层的模拟试验

模拟表土层的试验通常采用盆栽的方法,装置参见图 1-13。盆体一般用陶瓷盆(筒)或塑料盆(筒),尽量不采用泥制盆(筒)。土样高 20 ~ 30cm,直径 20cm 左右,盆底最好成漏斗形,土质依研究区域而定,盆底装粘性较耕作层稍大的土壤,厚约 6 ~ 8cm,用于模拟犁底层,其下设尼龙滤网和砂垫层。试验可分静态和动态两种:

静态试验:定期加入浓度为 C_0 的污水,底部不取样,待植物成熟、收割后再分别测定污

染物在土壤的不同深度和植物的不同部位(根、茎、叶、实)的累积量。该试验成果用于研究不同浓度的污水对植物和土壤的影响、各种不同污染物对植物和土壤影响的差别及不同污染物在不同植物和不同土壤中的积累转化特性等。

动态试验:定期加入浓度为 C_0 的污水,从底部出水管定期取样分析,以作出污染物在土样中运转的 $C-t$ 穿透曲线。动态试验除可达到静态试验的研究目的外,还可建立表土层(耕作层)污染物的运移模型。但考虑到污染物质在该层的迁移复杂性,在实际工作中常根据质量守恒原理和达西定律采用黑箱模拟。

盆栽试验的水利条件可以是饱水条件(是模拟地表被水体淹没如水稻田、地面水池等的情况),也可以是非饱水情况(模拟旱田灌溉、大气降水等间歇入渗后的非饱水状态)。对于某些挥发性污染物要注意挥发作用的影响。挥发性的强弱常用传质系数 K_L 来表征:

$$K_L = - \left(d \times \ln \frac{C_{t+\Delta t}}{C_t} \right) / \Delta t \quad (1-122)$$

其中: K_L ——液相总传质系数, $[L \cdot T^{-1}]$;

d ——平均水深, $[L]$;

C_t —— t 时刻污染物的浓度, (ppm);

$C_{t+\Delta t}$ —— $t + \Delta t$ 时刻污染物的浓度, (ppm)。

2. 犁底层的模拟试验

犁底层通常是由于耕种农机具的压力和入渗水流的淀积以及粘粒的淋失综合作用的结果,厚约 6 ~ 8cm,常呈片状结构,甚至有明显的水平层理,致密坚硬、孔隙度小,通水透气性差,其导水率(渗透系数)远小于表土层,一般也小于下部的下包气带土层。

犁底层对污染物起阻隔作用,表征的综合指标是导水率 k 值,测定方法如下:

为比较犁底层和表土层及下包气带土层的导水性能,可在同一地点分别对上述三层土取至少三组以上的原状土样,取样器直径和高度均宜在 10cm 左右,表层土取样深度 5 ~ 15cm,犁底层取样深度 20 ~ 3cm,下包气带取样深度 30 ~ 40cm。取样后在室内用“导水率测定仪”分别测定各自导水率 k 。

3. 下包气带的模拟试验

在室内进行下包气带土层的模拟试验时,通常采用土柱试验。土柱的管材一般采用塑料管和陶瓷管,不能用瓦管和有机玻璃管,柱直径可由几厘米到二、三十厘米,土样高应保持在土样直径的 2 倍以上,以保证试验时水流均匀流动。试验装置如图 1-14 所示。

土样的装填有原状土和扰动土两种:原状土法是将天然土层拨去表土层及犁底层之后,在不破坏土层的天然结构条件下将土样压入管内;扰动土法是在取土样同时测定其容重,取土样后晾干粉碎,按天然状态下土壤容重装入管内,即用相同容重使扰动土的结构接近天然土的结构。土柱试验的水动力条件可以是饱水条件或非饱水条件。

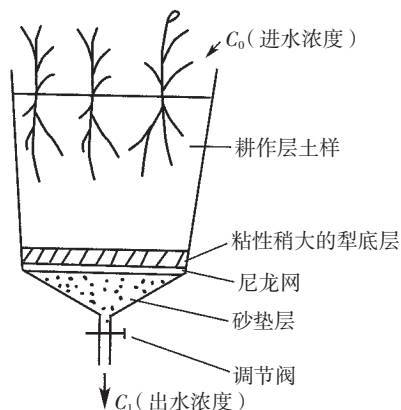


图 1-13 盆栽试验示意图

通过土柱试验可以模拟污染物在下包气带迁移、转化的条件,如测定土壤解吸的渗透系数、水分特性曲线、有效孔隙度、弥散系数以及吸附、降解常数等。在此基础上可建立污染物在下包气带的运移模型。研究污染物在土壤介质中的转化机理时也可采用土柱试验,具体方法可参见文献[28]。

4. 含水层的模拟试验

含水层依据所依托介质的不同有孔隙含水层和裂隙含水层。孔隙含水层由松散颗粒组成,与非饱和带介质相比,颗粒较大,颗粒的比表面积较小,因此对污染物的吸附容量不大。裂隙含水层中污染物运移受控于裂隙水运动,在模拟裂隙介质水污染运移时,传统的理论框架如 Darcy 定律和 Fick 定律遇到困难,因此裂隙含水系统中水流和物质迁移机理研究是目前国际上研究的热点^[29-33]。此外,含水层中有机物的降解也较微弱,在研究中常为简化而忽略不计。但污染物在含水层中的运移受水动力条件影响大,而水动力条件又受含水层厚度、天然流场、人工开采等因素制约。如含水层厚度较大时应考虑垂向弥散,厚度较薄时则可看作是水平二维问题等。因此,模拟污染物在含水层中的运移,实质上是模拟污染物在多孔介质中的对流和弥散问题。具体测定方法有室内渗槽法和野外现场测定法。

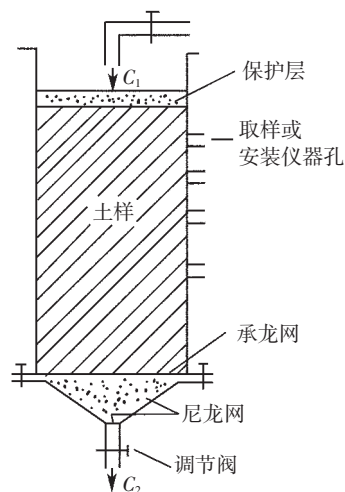


图 1-14 土柱模拟试验装置

(二) 整体物理模拟

地下水污染系统在自然界是一个系统,但由于条件限制有时将其分开模拟。如有可能进行整体模拟更加合理,特别是对可降解的有机物在地下水污染系统中的运移模拟,采用分段模拟可能会得出不合理的结论。

当然,并不是说对任何情况下都得进行整体模拟试验。事实上,只有那些只在土壤的表层进行输移、转化的污染物质才应当进行整体的模拟试验,如可生化降解的有机物、重金属如铅、镉等。而对那些难降解而又可在土壤介质中被均匀吸附的有机物和铬、砷等重金属则完全可分段进行单元模拟。

参 考 文 献

- [1] 程声通,陈毓玲. 环境系统分析. 北京:高等教育出版社,1990
- [2] 郑彤,陈春云. 环境系统数学模型. 北京:化学工业出版社,2003
- [3] W·金士博. 水环境数学模型. 北京:中国建筑工业出版社,1987
- [4] 泽夫·司曲斯. 随机微分方程理论及其应用. 上海:上海科学技术出版社,1986
- [5] 雒文生,宋星原. 用耦合模型法进行水质随机模拟的研究. 水利学报,1995,3: 12—20,27
- [6] 黄平,陈锐成. 河流污染带的随机模拟方法. 水文,1995,3:8—12
- [7] 史荣生,黄平. 河流污染带的随机模拟方法. 人民珠江,2002,2:46—49
- [8] 胡锡健,韩东,朱维宝. 股票价格的回归——马氏链分析与预测. 预测,1997,5:66—68,72
- [9] 李东,苏小红,马双玉. 基于新维灰色马尔科夫模型的股价预测算法. 哈尔滨工业大学学报,2003,35(2):244—248
- [10] 钱家忠,朱学愚,吴剑锋. 地下水资源评价中降水量的时间序列——马尔可夫模型. 地理科学,2001,21(4):350—353

- [11] 孙才志,林学钰. 降水预测的模糊权马尔可夫模型及应用. 系统工程学报,2003,18(4):294—299
- [12] 李颖. 马尔柯夫预测模型在环境预测中的应用. 云南环境科学,1998,17(1):8—9
- [13] 焦锋,秦伯强,黄文钰. 小流域水环境管理——以宜兴湖滢镇为例. 中国环境科学,2003,23(2):220—224
- [14] 钟政林,曾光明,卓利等. 马尔科夫过程在河流综合水质预报中的应用[J]. 环境工程,1997,15(2):41—44
- [15] 王巨宏. 平顶山市湛河水水质预报模型研究[J]. 干旱环境监测,2001,15(3):173—175.
- [16] 杨叔子,吴雅. 时间序列分析的工程应用(上册)[M]. 华中理工大学出版社,1996
- [17] Marina Campolo, et al.. Forecasting river flow rate during low — flow period using neural network [J]. Water resource research,1999,35(11):3547—3552.
- [18] T. R. Neelakantan, N. V. Pundarikanthan. Neural network — based simulation — optimization model for reservoir operation [J]. Journal of water resources planning and management, 2000,126(2): 57—64.
- [19] 崔宝侠,段勇,高鸿雁等. 神经网络在水质模型中的应用[J]. 沈阳工业大学学报,2003,25(3):220—222
- [20] 易顺民,赵文谦,蒲迅赤. 地下水污染的自组织预测模型及其应用[J]. 地球科学——中国地质大学学报,1999,24(6):643—647
- [21] 李博之. 鄱阳湖水体污染现状与水质预测[J]. 长江流域资源与环境,1996,5(1):60—66
- [22] 徐敏,曾光明,谢更新等. 混沌理论在河流溶解氧预测中的应用初探. 环境科学学报,2003,23(6),776—780
- [23] 李如忠,王超,汪家权等. 基于未确知信息的河流水质模拟预测研究[J]. 水科学进展,2004,15(1):35—39
- [24] 戴文跃,田万录,于骏一. 模拟方法的新进展——从传统模拟到功能模拟. 自然辩证法研究,2000,16(3):20—24
- [25] 林芳荣. 模拟技术及GIS在珠江水资源保护中的应用. 人民珠江,1999,6:12—13,22
- [26] 惠遇甲,王桂仙. 河工模型试验. 北京:中国水利水电出版社,1999
- [27] 薛禹群. 地下水动力学原理. 北京:地质出版社,1986
- [28] 刘兆昌,张兰生,聂永丰等. 地下水系统的污染与控制. 北京:中国环境科学出版社,1991
- [29] 钱家忠,刘咏,葛晓光,汪家权. 基岩裂隙流水位与流程关系的统计研究. 煤田地质与勘探,2002,30(2):44—45
- [30] 钱家忠,赵卫东,刘咏等. 小隙单一流经基岩水平平均流速与水力坡度关系的实验研究. 煤田地质与勘探,1999(2):35—38.
- [31] Qian Jia — zhong, Wang Jia — quan, Li Ruzhong, Liu Yong. Formulae for average velocity of groundwater flow and experimental evidence of non — Darcy's flow through a single fracture. Journal of Hydrodynamics, 2003,Ser. B (6): 56—62
- [32] Qian Jiazhong, Zhan Hongbin, Zhao Weidong, et al. Experimental Study of Turbulent Groundwater Flow in a Single Fracture. Journal of Hydrology, 2004,
- [33] 钱家忠,汪家权,葛晓光,张寿全,李如忠. 我国北方型裂隙岩溶水流及污染物运移模型研究进展. 水科学进展,2003,14(4):509—512

第二章 水环境系统最优化方法的理论基础

第一节 概 述

系统分析是从系统观点出发,应用各种技术方法,对系统进行定性和定量分析,它是从运筹学派生出来的一门实用学科。和运筹学相比,系统分析更适用于对情况比较复杂、不确定因素较多的系统进行分析。随着应用数学的发展和大容量、高速度电子计算机的出现,系统分析发展到了一个新的水平,已经成为系统工程的基本处理方法。

一、系统及其特征^{[1][2]}

(一)系统的概念

自然界和人类社会中的一切事物都不是孤立存在的,而是相互制约和相互联系的,它们形成各式各样的系统。系统这一概念来源于人类的长期社会实践,最早出现于古希腊语中,是部分组成整体的意思。

“系统”,指的是一个复杂的(研究)对象。这个对象处于一定的环境中,由两个或两个以上相互独立又相互制约的组成部分(或元素)结合而成的执行特定功能的有机整体,如工业系统、农业系统、环境系统、排水系统、供水系统等。系统的组成部分又称子系统,而每个子系统又包含若干更小的子系统;同样,每一个系统又是它所从属的一个更大系统的子系统。

(二)系统的分类

系统广泛地存在于自然界,为便于研究需对系统进行分类。系统的分类方法很多,这里仅介绍以下几种:

1. 按系统的成因可以分为:自然系统、人工系统和复合系统。自然系统指存在于自然界,不受人类活动干预的系统,如由矿物、植物、动物等自然物质构成的海洋系统、生态系统、矿藏系统等。人工系统指由人工建造、执行某一特定功能的系统,如排水系统、给水系统、管道系统等。复合系统介于自然系统和人工系统之间,是人们借助于认识和利用自然规律为人类服务而建造的系统,如气象预报系统等。

2. 按系统所处的状态,可分为静态(稳态)系统和动态系统。系统的状态不随时间而变化的系统,称为静态(稳态)系统;否则称为动态系统,动态系统的状态变量是时间的函数。

3. 按与周围环境的关系,系统可分为开放系统和封闭(闭环)系统。开放系统与外界环境有能量、物质、信息的交流,而封闭系统则没有。

4. 其他分类还有:按系统内变量之间的关系,可分为线性系统和非线性系统;按参数的分布特征,可分为集中参数系统和分布参数系统;按规模可分为小型系统、中型系统、大型系统和超大型系统等。

以上各种系统形态的分类并不是绝对的,同一个系统按不同的分类方法可分为不同的类型,所以系统之间是相互交叉,相互渗透的。对于不同类型的系统要采用不同的处理方

法。

(三)系统的特征

一个系统一般具有如下几个特征:

1. 整体性 也即集合性。系统不是各个要素的简单拼凑,而是具有统一性的一个系统整体。因此即使每个要素并不很完善,但它们也可以综合、统一成具有良好功能的系统。反之,即使每个要素是良好的,但它们构成的整体却不具有某种良好的功能,那么这个系统就不是一个完善的系统。

2. 相关性 系统内的各要素是相互依赖、相互制约的。只有具有这种相关关系的要素才能构成系统。同时,系统中任何一个要素的变化都会对其他要素产生影响。

3. 目的性 系统通常是多目的性的,一个目的可以用一个或多个具体的目标来表示,而为达到规定的目的,系统就具有一定的功能。没有明确目的的系统,不是系统工程研究的对象。这样,就把那些目前人类还不能改造和控制的自然系统从系统工程中排除了。

4. 环境适应性 环境是指存在于系统以外的事物(消息、物质、气象等)的总称,任何一个系统都存在于一定的物质环境中,它必须适应外部环境的变化。在研究系统的时候,环境往往起着重要的作用,它会对系统及对组成系统的诸要素产生约束。

5. 阶层性 系统是相互作用的要素的集合,内部存在着一定的层次结构。一个系统可以包含若干个一级子系统,每个一级子系统又可以包含若干个二级子系统等等。在系统和子系统以及各子系统之间存在着物质、能量和信息交换。系统的层次结构是实现系统递阶控制和目标管理的基础。

根据系统的定义和特征,可得出如下三条结论:(1)整体中每一个组成部分的性质或行为将影响整体的性质和行为;(2)每一组成部分的性质或行为及其影响整体的途径依赖于其他一个或几个组成部分的性质或行为;(3)每一组成部分对整体都不具备独立的影响,所以系统不能分出独立的子系统。

二、系统分析^{[1][2][3]}

(一)系统分析的基本概念

“系统分析(System Analysis)”一词最早是在 20 世纪 30 年代提出的,当时是以管理问题为主要应用对象。到了 20 世纪 40 年代,由于它的应用获得成功,得到了进一步的发展。随着系统分析在各个领域和各种类型问题中的应用不断扩展,不同专业领域的工作者和专家结合本身经验应用系统的思想,摸索出了多种多样的分析和解决问题的方法。

系统分析的目的在于通过分析比较各种替代方案的费用、效益、功能和可靠性等各项技术经济指标,得出可供决策者决策所必须的信息和资料,以获得最优方案(图 2-1)。

系统分析的任务与传统的工程学科方法的任务不同,它除了要研究系统中各要素的具体性质,解决系统要素的具体问题外,还着重研究和揭示各个要素之间的有机联系,使系统中各个要素的关系协调融洽,达到系统总目标最优。

系统分析的过程是对系统的分解和综合。所谓分解,就是研究和描述组成系统的各个要素的特征,掌握各要素的变化规律;而综合就是研究各要素之间的联系和有机组合,达到系统的总目标最优。系统分解和综合的过程都要建立和运用数学模型。各种数学方法是系统分析必备的手段。

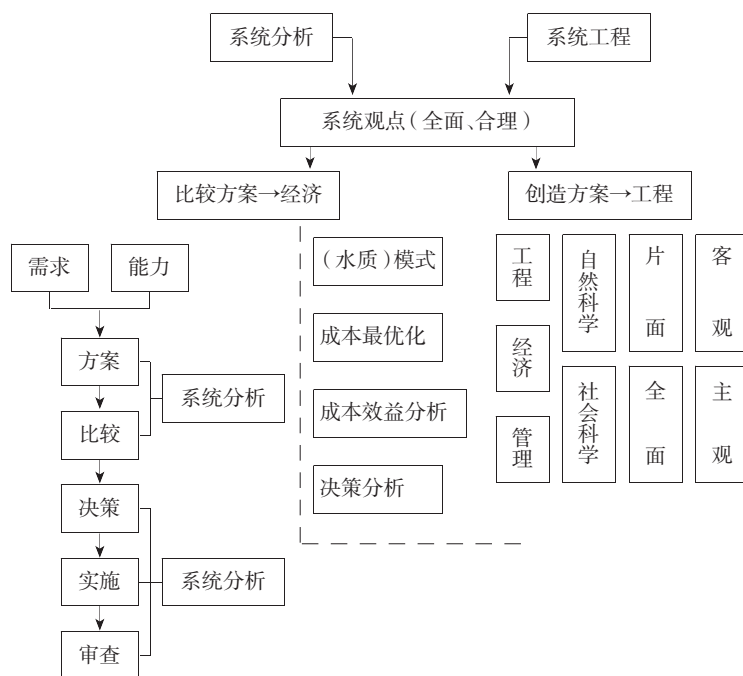


图 2-1 系统分析的目的示意图

系统分析研究的对象是复杂的大系统。这种大系统在系统中存在着许多矛盾因素和不确定因素。大系统的物质流、能量流和信息流的量很大,而且随着研究的深入,系统分析必将面临日趋复杂的问题。

所以,系统分析是对研究对象进行有目的、有步骤地探索和研究过程,它运用科学的方法和工具,确定一个系统所具备的功能和相应的环境条件,以实现系统目标的最佳方案,同时帮助决策者提高对所研究的问题认识的清晰程度,以便决策者选择行动方案。

(二)系统分析的步骤

系统分析包括的内容有:确定系统的功能和目标,调查系统的环境约束和资源条件,研究系统的要素并对其模型化,实现系统的综合(最优化)并为系统设计和系统实施提供最优方案。系统分析不同于一般的技术经济分析,作为一种解决问题的方法,它可以帮助决策者对大量可行性方案进行鉴别从而选择一个最合适的方案,以在满足所有约束的条件下,最优地达到系统设计者和决策者的总目标,一般说来,系统分析可以按照如下步骤进行:

1. 明确问题的范围和性质

根据问题的范围和性质确定问题的各要素间的相互关系,以及它们和环境间的关系。根据具体条件,实事求是地反映系统内部结构及其与外界的联系。

2. 明确目的,设立目标

对某一系统进行分析,要明确所分析问题的目的和当前目标。所谓目的,多偏重于原则性、理想的期待;而目标则是在特定目的下,具有实际可行的具体的期待,是决策者希望实现的理想。目的一般要由多个目标来完成。明确目的和确定目标非常重要,如果目的和目标不明确,那无论怎样进行分析也不会得到正确的结果。确定目标通常要考虑将来的效果、全局的可行性、经济性等。

3. 收集分析资料

数据的监测和收集是系统分析的基础工作,在进行此项工作时,需要调查影响目的的各种因素的现状及其历史,收集国内外有关问题的各种资料,确定影响目的各个因素并进行资料收集。

4. 系统的模型化和系统的最优化

系统的模型化是掌握系统各个功能以及功能间的相互关系,通过说明系统的构成和行为,用适当的数学方程、图像甚至是物理的形式来表达系统实体的一种科学方法。环境系统的模型化尤为重要,在建立模型时要识别主要元素,简明扼要,避免繁琐复杂。

系统的最优化一般通过模型进行的,它的作用在于运用最优化的理论和方法,对若干替换模型进行最优化,求出几个替换解。

5. 制定系统的评价标准

根据最优化所得到的替换解,考虑前提条件、假定条件和约束条件,在经验和知识的基础上决定最优解,从而为选择最优系统设计方案提供足够的信息。对于水环境系统管理决策系统的评价,通常包括如下标准:

- (1)若所能支付的费用已定,则应选择在此费用下效益最大的方案;
- (2)若效益标准已定,则应选择为实现既定效益所需费用最低的方案;
- (3)若所能支付的费用和应达效益都无法确定时,则应选择效益、费用比最大的方案;
- (4)在多目标条件下,一般没有唯一标准,问题决策与决策者的偏好关系很大。

6. 综合分析

运用数学模型和电子计算机,综合协调各子系统之间的关系,分析研究系统的各种可能的方案,并提出系统分析的最终结果。

(三)系统分析的准则

一个系统由很多元素组成,它既受系统内各元素的影响,又受外部环境的制约,形成错综复杂、影响广泛的关系。所以,在进行系统分析时,要处理好这种复杂关系应遵循下列原则:

1. 外部条件与内部条件相结合

在进行系统分析时,必须将系统内、外部各种有关因素结合起来进行综合分析,才能实现方案的最优化。

2. 当前利益与长远利益相结合

选择一个最优方案,不仅要当前利益出发,而且还要考虑到将来的利益。所采用的方案如当前利益和长远利益都有利,这无疑是最理想的方案。但在实际工作中,当前利益和长远利益常常会发生矛盾,通常在处理这些矛盾时,应以长远利益为主,兼顾当前利益,力争把长远利益和当前利益结合起来,在服从长远利益的前提下,将当前利益的损失减少到最低限度。

3. 局部利益与整体利益相结合

系统与子系统的关系就是整体与局部的关系。如果每个局部效益都好,则整体效益自然得到保证。但实际情况并非都是这样,有时会出现局部利益好而整体效益却不好,或者某些局部利益不好而整体效益好的情况。在系统分析中,强调局部服从整体,在确保系统整体效益最优的前提下,将局部利益和整体利益结合起来。

4. 定量分析与定性分析相结合

所谓定量分析,指对那些可以用数量表示的指标的分析。定性分析是指对那些不容易用数量表示的指标如环境污染对人类健康、经济、环境等的影响的分析,通常需要根据经验统计分析和主观判断来解决。

系统分析不仅要进行定量分析,而且要进行定性分析,在探索各种系统对象时,通常遵循的是“定性—定量—定性”这一循环过程。定性分析是定量分析的基础,而定量分析则是对定性分析的量化。不了解系统各个方面的性质,也就不能建立起探讨定量关系的数学模型。但定量分析是否成功,还要经过验证和评价。这一循环往复过程只有将定性、定量两者结合起来进行分析,才能达到优化目的。

(四)系统评价的指标

系统的优劣通常是相对的,对一个系统的评价是看其对预定目标的满意程度。评价一个系统的主要因素包括:

1. 系统的功能

功能目标评价是系统评价的重要内容。所谓功能,指系统所起的作用与所应完成的任务。人们总希望建立一个高功能系统,而一个系统的功能可能是多方面的。

2. 系统的可靠性

可靠性是指系统的各个层次和组成部分,在预定期限和正常条件下运行成功的概率。可靠性的要求往往与实现系统功能的费用密切相关。

3. 系统实现的时间

建立一个系统所需的时间也是一个主要的评价指标,在较短时间内可发挥投资效益,是每一个决策者的共同愿望,也是一个系统所追求的目标之一。

4. 系统的费用

费用包括建立一个系统所需的物化劳动、活劳动、流动费用以及各种内部和外部的损失费用等。在满足一定功能的条件下,低费用的系统比高费用的系统更受欢迎。

5. 系统的可维护性

一个好的系统在长期运行过程中,应便于维护管理。

6. 系统的外部影响

一项工程的外部影响常常很大,因此对于诸如生态平衡影响、资源和能源消耗等,都应该建立相应的评价指标和评价标准。

三、系统的最优化概述

系统最优化是进行系统分析的重要方法和手段,它通常是通过最优化数学模型实现的。系统的最优化,就是对所有可行方案,进行分析、判断比较,再从中找出一种最理想的,即最佳方案来。

最优化问题普遍地存在于人类活动的各个领域、各行各业。随着水环境系统的管理规划日益得到重视,最优化技术也越来越多地被用于水环境系统的各种工作中,比如在区域水质管理问题中,选取什么样的系统设计方案,使上水系统净水厂和下水系统污水处理厂,有最优处理能力,既使水质满足标准,又使处理费用最小;再如水处理领域中水处理设备的设计、制造、安装及运行方式的最优选取,水处理工艺的优化工艺选择和确定、药剂投加量最优

值的确定等都涉及到最优化问题。

人们探索解决最优化问题的途径,已有几个世纪之久,但是在电子数字计算机问世之前,人们解决最优化问题的方法,只限于古典的微分法和变分法,而这种方法解决的问题是十分有限的。直到 1946 年,大型电子数字计算机在美国宾州大学变成现实,求解非常大型的现实生活中的优化问题,才有了实用工具。从而促进了优化理论和算法的迅速发展,形成了一门新学科。近三十年来,优化理论和方法在各个领域得到了广泛的应用。实践证明,应用优化理论和方法可节省材料 10%~40%。美国 500 家有财力的公司中,85% 的公司都曾应用了优化方法。所以,优化方法不论对于盈利性公司、企业还是对于水环境系统的管理规划,都将具有重要的意义。

优化方法是以优化理论为基础,借助电子计算机,自动完成对参数的调优,得到在一定条件下的最优方案。这种方法,可大大缩短选优方案的周期,提高设计质量,把人们从繁琐计算中和大量的重复劳动中解放出来,去从事更有价值的创造性的工作。

第二节 系统分析的理论基础

上节介绍了系统分析的一般步骤,若对其进行某些改进,则可使系统分析方法具有更好的性质。

一种改进是强调定量分析。虽然有时采用定性的、描述性的形式来强调定量分析,但是如果采用数学模型往往可以得出更具说服力的定量分析的结果。如果系统各组成部分、目标和决策等以数学式描述,就便于系统分析者交换相互的分析结果,还便于决策者理解问题的解。定量分析虽然并不能完全取消主观判断,但至少能防止出现模糊不清的结果。对系统分析的另一个改进是由定量决策引出的。除较简单的系统之外,系统中各组成部分之间通常存在着多种组合,形成不同的决策方案。这些组成部分之间的相互作用可以用数学模型来描述。分析者可以通过改变模型的参数,利用模型的输出,预测实际系统的变化。最后一个改进是引入一些提高分析效果所必需的条件,使模型得出所需形式的解。大多数数学模型能够评价多个方案,然而分析需要的是能满足目标和约束条件的最佳可行方案,这种方案可以通过最优化技术和层次分析法等方法获得。

一、系统最优化

系统分析是解决环境问题的十分有用的技术之一,如果系统分析问题具备以下一些特性:

1. 目标清楚且可量化;
2. 能用一个合理的、易解的数学模型描述;
3. 有充分的数据说明不同解的影响;
4. 不存在明显的最优解;

则可以使最优化技术与系统的数学模型相结合,形成最优化模型。

最优化模型一般形式为:

$$\begin{aligned}
 \max(\min) z &= f(x_1, x_2, \dots, x_n) \\
 s. t. \quad g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) &\geq (=, \leq) b_i \\
 i &= 1, 2, \dots, m
 \end{aligned}
 \tag{2-1}$$

最优化模型由决策变量 $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 、目标函数 $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 和约束条件 $g_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$, $(i = 1, 2, \dots, m)$ 构成。其中可使目标函数 z 最大化或最小化, 约束条件方程组决定了决策变量的可行值, 它可以是等式或不等式, 其中 b_i ($i = 1, 2, \dots, m$) 为常数。满足式(2-1)约束条件的 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的任何组合均为最优化模型的可行解, 使 z 最大或最小的可行解就是整个模型的最优解。

二、层次分析法^{[2][5]}

层次分析法 (Analytical Hierarchy Process, 简称 AHP) 由美国运筹学家、匹兹堡大学萨蒂 (T. L. Saaty) 教授于 20 世纪 70 年代提出。AHP 将分析人员的经验判断进行量化, 是目前系统工程处理定性与定量相结合问题的比较简便易行且又行之有效的一种系统分析方法。

AHP 法将问题分解为不同的要素, 并将这些要素归并为不同的层次, 以构成多层次结构, 在每一层次可按某一规定准则, 对该层元素进行逐对比较, 建立判断矩阵。通过计算判断矩阵的最大特征值及对应的正交化特征向量, 得出该层要素对于该准则的权重。在此基础上进而计算出各层次要素对于总体目标的组合权重, 从而得出不同设想方案的权值, 为选择最优方案提供依据。运用层次分析法解决问题一般分五个步骤:

(一) 明确问题

首先要明确问题的范围、提出具体要求、问题包含的因素、各因素之间的关系, 以确定所需资料是否已满足要求。

(二) 建立系统的层次分析模型

把所研究的问题层次化、条理化, 构造出一个层次模型。在模型中, 复杂问题被分解为人们称之为元素的组成部分, 这些元素又按属性分为若干组, 形成不同层次。同一层次下的元素作为准则对下一层的某些元素起支配作用, 同时它又受上层次的元素支配。

层次可以分为三类:

1. 最高层: 这一层次中只有一个元素, 它是问题的预定目标或理想结果, 因此也称为目标层。
2. 中间层: 这一层次包括了为实现目标所设计的中间环节、所需要考虑的准则。该层可由若干层次组成, 因此有准则和子准则之分。这一层也称为准则层。
3. 最底层: 这一层次包括为实现目标可供选择的各种措施、决策方案等, 因此也称为措施层或方案层。

上层元素对下层元素的支配关系所形成的层次结构就称为递阶层次结构。当然上一层的元素可以支配下一层的所有元素, 但也可能只支配其中部分元素。层次结构图如图 2-2 所示。

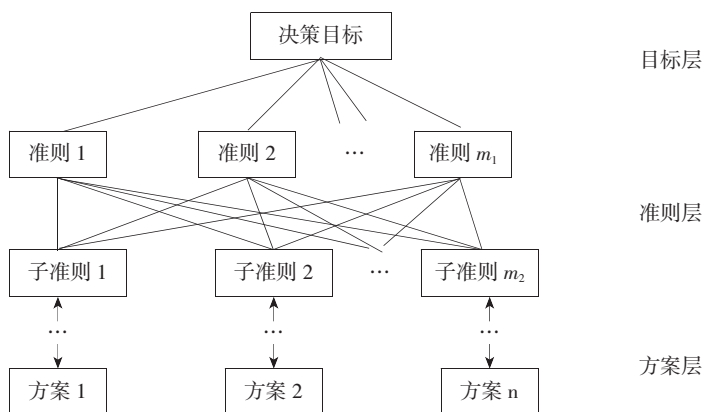


图 2-2 递阶层次结构示意图

(三) 建立判断矩阵和最大特征根及对应特征向量的计算

1. 判断矩阵的构造

当建立了分析层次后,即可逐层逐项进行两两比较,通常利用评分办法来比较它们的优劣。在进行比较时可以先从最低层(方案层)开始。例如对图 2-2 中的决策目标以 A 表示,准则层各准则以 $C_j (j = 1, 2, \dots, m)$ 表示,方案层各方案以 $P_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 表示。方案 $P_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 以准则 $C_j (j = 1, 2, \dots, m)$ 进行两两比较,得

C_j	P_1	P_2	$\dots$	P_n
P_1	b_{11}	b_{12}	$\dots$	b_{1n}
P_2	b_{21}	b_{22}	$\dots$	b_{2n}
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$
P_n	b_{n1}	b_{n2}	$\dots$	b_{nn}

得判断矩阵

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix}$$

判断矩阵中 b_{ij} 系数值确定如下:对于准则 C_j ,

如 P_i 与 P_j 优劣相等,则 $b_{ij} = 1$;

如 P_i 稍优于 P_j ,则 $b_{ij} = 3$;

如 P_i 优于 P_j ,则 $b_{ij} = 5$;

如 P_i 甚优于 P_j ,则 $b_{ij} = 7$;

如 P_i 极优于 P_j ,则 $b_{ij} = 9$ 。

同样,如 P_i 劣于 P_j ,则有:

如 P_i 稍劣于 P_j ,则 $b_{ij} = \frac{1}{3}$;

如 P_i 劣于 P_j ,则 $b_{ij} = \frac{1}{5}$;

如 P_i 甚劣于 P_j , 则 $b_{ij} = \frac{1}{7}$;

如 P_i 极劣于 P_j , 则 $b_{ij} = \frac{1}{9}$ 。

这里引用了 1—9 标度的方法, 如两方案相比较, 为上述数学判断折中值时, 可采用 2、4、6、8 等数字。

对判断矩阵 B , 显然有:

$b_{ij} = 1$, 当 $i = j$ 时;

$$b_{ij} = \frac{1}{b_{ji}} \begin{cases} i = 1, 2, \dots, n \\ j = 1, 2, \dots, n \end{cases}$$

故 n 阶判断矩阵, 只要求出 $\frac{n(n-1)}{2}$ 个元素就可以了。 b_{ij} 是根据资料、专家意见和分析人员的经验反复研究而确定的。

以上对每一准则 $C_j (j = 1, 2, \dots, m)$ 列出了 $P_1, P_2, \dots, P_n$ 的判断矩阵。同样对目标 (A) 来说, 在 m 个准则中其重要程度如何, 也要通过两两比较, 以求得判断矩阵。

2. 计算判断矩阵的最大特征根及其对应的特征向量

计算判断矩阵的最大特征根及其对应的特征向量, 其方法通常有三种:

(1) 方根法

① 计算判断矩阵每一行元素的乘积 M_i :

$$M_i = \prod_{j=1}^n b_{ij} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2-2)$$

② 计算 $\bar{W}_i$ 的 n 次方根

$$\bar{W}_i = \sqrt[n]{M_i} \quad (2-3)$$

③ 将向量 $W = (\bar{W}_1, \bar{W}_2, \dots, \bar{W}_n)^T$ 正规化

$$W_i = \frac{\bar{W}_i}{\sum_{j=1}^n \bar{W}_j} \quad (2-4)$$

则 $W = (W_1, W_2, \dots, W_n)^T$ 即为所求的特征向量。

④ 计算判断矩阵最大特征根 $\lambda_{\max}$

$$\lambda_{\max} = \sum_{i=1}^n \frac{(BW)_i}{nW_i} \quad (2-5)$$

其中 BW_i 表示向量 BW 的第 i 个分量。

(2) 正规化求和法

① 将判断矩阵每一列正规化

$$\bar{b}_{ij} = \frac{b_{ij}}{\sum_{k=1}^n b_{kj}} \quad (i, j = 1, 2, \dots, n) \quad (2-6)$$

正规化后,每列各元素之和为 1。

② 各列正规化后的判断矩阵按行相加

$$\bar{W}_i = \sum_{j=1}^n \bar{b}_{ij} (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2-7)$$

③ 对向量 $\bar{W} = (\bar{W}_1, \bar{W}_2, \dots, \bar{W}_n)^T$ 按式(2-4)正规化

则得新向量 $W = (W_1, W_2, \dots, W_n)^T$ 即为所求的特征向量。

④ 计算判断矩阵最大特征根 $\lambda_{\max}$ 同式(2-5)

(3) 求和法

① 将判断矩阵的每一列相加

$$\sum_{j=1}^n b_{ij} = V_i (i = 1, 2, \dots, n)$$

② 对向量 $V = (V_1, V_2, \dots, V_n)^T$ 正规化

$$W_i = \frac{V_i}{\sum_{j=1}^n V_j} (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2-8)$$

③ 按式(2-5)计算矩阵最大特征根 $\lambda_{\max}$ 。

(四) 层次单排序和判断矩阵一致性检验

由计算得到的 W 向量即为同一层次相应因素对与上一层次某一因素相对重要性的权值,这一过程称为层次单排序。

应用层次分析法应保证判断矩阵有完全一致性,所谓一致性,即判断矩阵 B 应满足:

$$b_{ij} \cdot b_{jk} = b_{ik} (i, j, k = 1, 2, \dots, n) \quad (2-9)$$

由矩阵论知识,可知在满足上述完全一致的条件下,矩阵具有唯一非零的最大特征根 $\lambda_{\max} = n$,除 $\lambda_{\max}$ 外,其余特征根皆为零。

当判断矩阵具有完全一致性时,它的最大特征根稍大于矩阵阶数 n ,且其余特征根接近于零。因此,引入判断矩阵的最大特征根以外的其余特征根的负平均数,作为度量判断矩阵偏离一致性指标,即

$$CI = \frac{\lambda_{\max} - n}{n - 1} \quad (2-10)$$

为了度量不同阶判断矩阵是否具有完全一致性,这里引入判断矩阵的平均随机一致性指标 RI 值,对 1—9 阶判断矩阵, RI 值见表 2-1。

表 2-1 1—9 阶判断矩阵的 RI 值

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9
RI	0.00	0.00	0.58	0.90	1.12	1.24	1.32	1.41	1.45

判断矩阵的一致性指标 CI 与同阶平均随机一致性指标 RI 之比称为随机一致性比率,记为:

$$CR = \frac{CI}{RI} \quad (2-11)$$

当 $CR < 0.10$ 时,即认为判断矩阵具有完全的一致性,否则就需要调整判断矩阵,使其满足条件 $CR < 0.10$ 。

(五) 层次总排序和一致性检验

1. 层次总排序

层次总排序利用层次单排序的计算结果,综合出对更上一层次的优劣顺序。仍以图 2-3 为例说明,若已分别得到 $P_1, P_2, \dots, P_n$ 对 $C_1, C_2, \dots, C_m$ 的顺序和 $C_1, C_2, \dots, C_m$ 对 A 的顺序,则 $P_1, P_2, \dots, P_n$ 对 A 的顺序可用表 2-2 说明。

表 2-2 $P_1, P_2, \dots, P_n$ 对 A 的顺序

层次 C 层次 P	C_1	C_2	$\dots$	C_m	总排序权值
	a_1	a_2	$\dots$	a_m	
P_1	W_{11}	W_{12}	$\dots$	W_{1m}	$\sum_{j=1}^m a_j W_{1j}$
P_2	W_{21}	W_{22}	$\dots$	W_{2m}	$\sum_{j=1}^m a_j W_{2j}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
P_n	W_{n1}	W_{n2}	$\dots$	W_{nm}	$\sum_{j=1}^m a_j W_{nj}$

表 2-2 中,层次 C 对层次 A 已完成单排序,其单排序权值分别为 $a_1, a_2, \dots, a_m$; 层次 P 对层次 C 各元素 $C_1, C_2, \dots, C_m$ 的单排序权值分别为 $W_{11}, W_{21}, \dots, W_{n1}; W_{12}, W_{22}, \dots, W_{n2}; \dots; W_{1m}, W_{2m}, \dots, W_{nm}$ 。总排序的权值为表 2-2 右列公式列出。

2. 层次总排序的一致性检验

这一过程也是从高到低逐层进行的。如 P 层次某些因素对于 C_j 单排序的一致性指标为 C_{ij} , 相应的平均随机一致性指标为 R_{ij} , 则 P 层总排序随即一致性比率为:

$$CR = \frac{\sum_{j=1}^m a_j C_{ij}}{\sum_{j=1}^m a_j R_{ij}} \quad (2-12)$$

如果 $CR < 0.10$, 则认为层次总排序结果具有满意的一致性, 否则需要重新调整判断矩阵的元素使取值达到 $CR < 0.10$ 。

三、环境问题的费用 — 效益分析^[2]

(一) 基本原理

费用 — 效益分析(Cost-Benefit Analysis) 是环境经济学应用的一种基本方法。

1958 年费用 — 效益分析首先应用于污染控制方面。近十几年来, 在环境问题上得到广泛应用, 但由于环境问题复杂多变, 总的来说对环境影响的经济评价至今还不十分完善。

目前费用 — 效益分析在环境经济领域中尚不能做到完全的最优化分析。它在进行经济评价和方案选定时能向决策者提供许多有参考价值的信息。另外费用 — 效益分析在环境经济管理与规划中也起着重要作用, 但它对环境污染造成的经济损失、社会危害分析还较少。环境的污染究竟能引起多大的经济损失要量化表示出来, 并纳入经济指标中, 才能把环境

效益和经济效益真正统一起来,为制定国民经济发展目标和环境目标提供科学依据。

在环境经济学的范畴内,污染被看作一种单纯的外部影响。从理论上讲,最好的解决方法是按市场价格把它内部化,从而使环境质量成为一种商品,以恢复价格机制的作用。费用—效益分析法的基本原则是效益必须大于费用。现以图 2-3 说明其应用原理。

图 2-3 中, y 轴表示每降低一个单位污染的社会边际费用和社会边际效益; x 轴代表污染治理的程度,越往右代表污染治理程度越高。图中的边际效益线从左往右向下倾斜,这说明当环境处于严重污染时,人们愿意为消除一个单位的污染而付出较高的费用。也即此时社会边际效益很高。但当污染有所减轻,对健康基本无影响时,人们就不再愿意继续为减少污染而支付费用。也即此时的社会边际效益下降了。与此相反,边际费用曲线从左往右向上倾斜,它说明当污染严重开始治理时,社会为减少一个单位的污染所支付的费用较小,而随着污染的逐步治理,每减少一个单位的污染,所支付的社会边际费用会日益增大。因此从经济学的观点看,最佳环境政策并不是不惜一切代价地彻底消除污染。图 2-3 中的边际费用曲线和边际效益曲线的交叉点,正好是社会边际费用等于社会边际效益,此时对社会最有利,进一步消除污染的做法只会给社会带来不利。从经济可行性的观点出发,某种程度的污染可能需要忍受。但究竟什么样的污染水平可以忍受,即所谓达到最佳污染水平,则取决于污染的危害程度,以及所需费用的可行性范围及其优选区间,这正是费用—效益分析方法所要解决的问题。

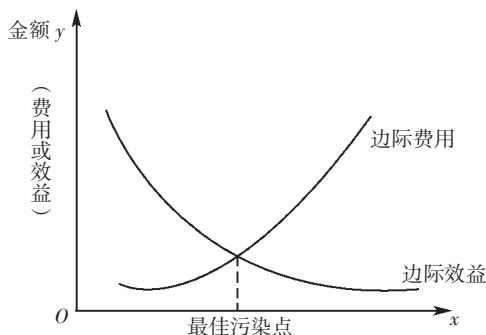


图 2-3 费用—效益分析原理图

费用—效益分析法与最优化问题有联系,但又不同于最优化,一般它仅比较两种或有限几种的经济方案,得出何者为“最优”的结论,而其“结论”本身并不一定是最优的,所以我们将它称之为“准优法”。这一特点决定了该法并不能代替决策。另外,费用—效益分析与投入—产出、最优化分析不同,一般不需要建立模型,而是着重于费用和效益两方面的计算和多方案比较。在进行分析时,通常也不需要考虑谁承担费用,谁获得效益,即社会福利的再分配问题。

费用—效益分析法与最优化问题有联系,但又不同于最优化,一般它仅比较两种或有限几种的经济方案,得出何者为“最优”的结论,而其“结论”本身并不一定是最优的,所以我们将它称之为“准优法”。这一特点决定了该法并不能代替决策。另外,费用—效益分析与投入—产出、最优化分析不同,一般不需要建立模型,而是着重于费用和效益两方面的计算和多方案比较。在进行分析时,通常也不需要考虑谁承担费用,谁获得效益,即社会福利的再分配问题。

(二) 费用—效益分析在环保中的应用

费用—效益分析在实际应用中,一般包括下列七个步骤:

1. 确定分析系统所要达到的目标

经济分析的基本目标应该是对系统所选定的方案能取得最大的净效益,由于环境影响的经济评价涉及生态和社会的环境目标、环境质量标准、技术和经济可行性等诸多因素,在确定分析目标时应结合当地社会、经济、技术等方面的因素进行综合研究。

2. 确定为达到上述目标,在发展规划或建设项目中可能实施的各种备选方案,特别地,这些方案在当时当地一般条件下应该是可行的。

3. 尽可能定量地将各方案对环境影响包括社会环境等的全部影响进行分析。在分析时除了考虑直接影响外,还应考虑间接的、二次的影响。

4. 估计各备选方案的环保费用与效益,尽量用货币形式来表示,对于一时难以货币值估计的,也要作出定性描述,并对效益与损失出现的概率进行恰当的分析,提出预防措施及其

概略费用。

5. 计算出各备选方案的净效益

在分配投资额已确定的条件下,应使方案的总费用控制在预算投资范围内,并争取净效益最大。

6. 对于不能用币值表示的影响因素,则可以采取半定量的排序或定性及权重排列等方法,进行综合比较并指明其先后序列。

7. 将以上估算与分析评价的结果及建议意见提供给领导部门参考,作为决策时的科学依据。

(三) 环境问题的费用与效益估算

环境问题中,费用—效益分析的费用就是指环保费用。环保费用一般都能获得以货币表示的估值,对具体的环保建设工程或规划项目来讲,其费用或投资包括基建费用和运转费用。

一般说来环境效益是指社会采取环保措施后,环保费用以外的其他环境损失的减少,因此其币值的估计事实上就是对其环境损失的币值估计。下面介绍四种估算环境效益的方法。

1. 生产率法

这种方法把环境质量看成一个生产要素。环境质量的变化导致生产率和生产成本的变化,从而又导致价格和生产水平的变化并由此估定其币值。

2. 机会成本法

很多不同的估算环保效益的方法都可以归属于机会成本法。特别在不能直接估算出环境效益时,此法更为有用,比较简便易行。

3. 调查评定法

在缺乏市场价格数据时,可利用调查的方法,求得环境效益的币值。在国外,已用此法来估算环境资源的经济价值。此法大致可分为两种,即群众调查和专家咨询。

4. 赔偿法

环境损害的赔偿有时可由法院判决来确定。这种判决的结果影响因素很多,看来不易获得环境损失的实质性社会经济价值,即使接近于理想也往往说不清其取得的道理,或者它所代表的是什么。此外在应用生产数字和产品市价计算时,采用的市价是否合理也是一个问题。因此,虽然此法有时可能反映了人们遭受的环境经济损失,但是依据的客观性和科学性较差,因而估定的效果不好。

第三节 最优化方法的理论基础^{[1][2][6]}

优化技术是从所有可能的方案中选择最佳方案,以达到最优目标的科学。这种技术是近二三十年来随着电子计算机的普通应用而发展起来的,推广运用这门技术将会取得显著的经济效果。

本节仅扼要介绍线性规划、非线性规划、动态规划等有关内容。

一、线性规划

(一) 线性规划概述

线性规划(Linear Programming)是运筹学的一个重要分支。它所研究的问题主要有两

个方面：一是确定一项任务，如何统筹安排，以尽量做到用最少的资源来完成它；二是如何利用一定量的人力、物力和资金等资源来完成最多的任务。线性规划的模型可以叙述为：在满足一组线性约束和变量为非负的限制条件下，求多变量线性函数的最优值（求最大值和最小值）。

例如，某工厂单位时间内生产 x 个产品，每个产品的售价 10 元，生产成本是每个 2.7 元。在生产每个产品同时，产生三个单位的污水。废水必须排走，废水的一部分 y 可以直接排入一条河里，其余的可以经过附近一个处理效率为 85% 的处理厂处理后再排入河里（图 2-4）。若该处理厂的最大处理能力为每个时间单位处理 9 个污水单位；处理成本是每单位污水 0.50 元，而环保部门对排入河流的废水单位收费 1.76 元，同时根据环境标准还进一步要求该厂单位时间内最多排入河流 2.25 个单位污水。为了得到最大的净收益，工厂应如何选择生产与排污方式呢？

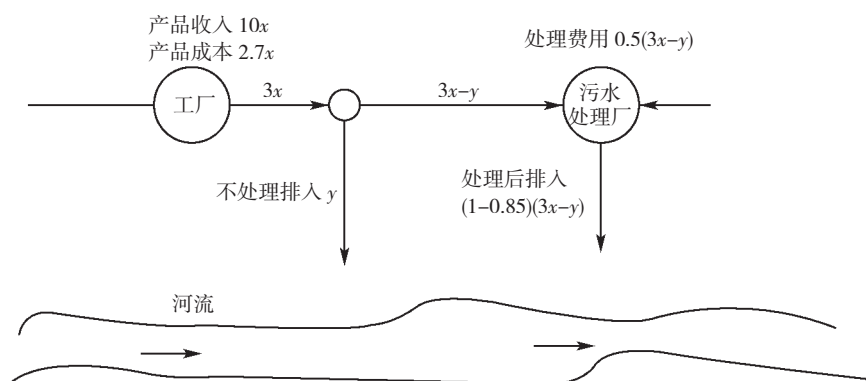


图 2-4 污水排放示意图

按题意，设工厂单位时间内净收入费用为 f ，建立目标函数如下：

$f = 10x - 2.7x - 0.5(3x - y) - 1.76[y + (1 - 0.85)(3x - y)] = 5x - y$ (为方便起见，小数点后四舍五入)

必须使这个函数在下述条件下取最大值：

处理厂能力限制：

$$3x - y \leq 9$$

排入河流的污水量限制：

$$y + (1 - 0.85)(3x - y) \leq 2.25$$

$$\text{即} \quad 9x + 17y \leq 45$$

进入处理厂的流量不应为负，因此有：

$$3x - y \geq 0 \text{ 或写为 } y - 3x \leq 0$$

$$x \geq 0, y \geq 0$$

综上所述，这个环保问题可归结为：

满足约束条件

$$3x - y \leq 9$$

$$9x + 17y \leq 45$$

$$y - 3x \leq 0$$

$$x, y \geq 0$$

使得

$$f = 5x - y \text{ 最大。}$$

从上例可以看出：它属于线性规划问题。本质上，它是一类特殊的条件极值问题，具有以下特征：

1. 每一个问题都由一组未知数 $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ 表示某一方案，这组未知数的一组定值就代表一个具体方案，通常要求这些未知数取值为非负；

2. 存在一定的限制条件（即约束条件），这些限制条件都可以用一组线性等式或线性不等式来表达；

3. 都有一个目标要求，并且这个目标可表示为上述这组未知数的线性函数。按所研究的问题不同，要求目标函数实现最大化或者最小化。

由此可知，线性规划数学模型的一般形式是：

目标函数：

$$\max(\min) f = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n \quad (2-13)$$

约束条件：

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &\leq (=, \geq) b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &\leq (=, \geq) b_2 \\ &\dots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &\leq (=, \geq) b_m \\ x_1, x_2, \dots, x_n &\geq 0 \end{aligned} \quad (2-14)$$

上述数学模型也可写为：

在约束为：

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j &\leq (=, \geq b_i) i = 1, 2, \dots, m \\ x_j &\geq 0, (j = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (2-15)$$

在这些条件下，求目标函数

$$\max(\min) f = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (2-16)$$

上述给出的线性规划问题数学模型，常有各种具体不同的表达形式，为了以后讨论问题的方便，我们规定以下形式的数学模型为线性规划问题的标准型：

$$\max f = c_1 x_1 + c_2 x_2 + \dots + c_n x_n$$

$$s. t. \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \\ x_1, x_2, \cdots, x_n \geq 0 \end{cases} \quad (2-17)$$

这里要求 $b_i \geq 0 (i = 1, 2, \cdots, m)$, 并且一般 $m < n$ 。

也可写为:

$$\max f = \sum_{j=1}^n c_j x_j \quad (2-18)$$

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j = b_i, i = 1, 2, \cdots, m \quad (2-19)$$

$$x_j \geq 0, j = 1, 2, \cdots, n$$

经常地, 为了书写表达和说明问题的需要, 线性规划的数学模型还采用如下的矩阵表达形式:

$$\begin{aligned} \max f &= CX \\ \begin{cases} AX &= B \\ X &\geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2-20)$$

其中:

$$X = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^T$$

$$C = (c_1, c_2, \cdots, c_n)$$

$$B = (b_1, b_2, \cdots, b_m)^T$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

对任意给出的非标准形式的线性规划问题, 总可以经过如下步骤化为标准线性规划问题。

1. 若为极小化问题 $\min f$, 只需将目标函数乘以 -1 , 则转化为 $\max(f' = -f)$, 即可求得原问题的最优解, 再对所求得的目标函数值反号, $\min f = -\max f'$, 这样即为原问题的最小目标函数值;

2. 当某些 b_i 不满足 $b_i \geq 0$ 的要求时, 可对相应的约束条件两端同乘以 -1 来得到;

3. 约束条件若是不等式, 这可有两种情况: 当为“ $\leq$ ”形式的不等式时, 可在“ $\leq$ ”号左端加入新的非负变量(称为松弛变量); 当为“ $\geq$ ”形式的不等式时, 则可在“ $\geq$ ”号左端减去非负变量(称为剩余变量), 经此处理, 即可将不等式约束变为等式约束。需要指出的是: 要使新

添加的变量不影响原目标函数,只要在目标函数中对新增加的变量系数取零就可以了。

4. 若线性规划问题存在着无非负要求的变量 x_k , 为适应标准线性规划模型对变量的非负要求, 可令 $x_k = x_k' - x_k''$, 其中 $x_k', x_k'' \geq 0$, 将此代入原问题即可。

在讨论线性规划问题的求解前, 以式(2-18)和(2-19)为例了解一下线性规划解的概念。

可行解 满足约束条件(2-19)的解 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, 称为线性规划问题的可行解, 而使目标函数达到最大值的可行解叫最优解。

基 设 A 是约束方程组的 $m \times n$ 维系数矩阵, 其秩为 m 。 B 是矩阵 A 中 $m \times m$ 阶非奇异子矩阵($|B| \neq 0$), 则称 B 是线性规划问题的一个基。也就是说, 矩阵 B 是由 m 个线性独立的列向量组成。

基可行解 满足非负条件 $x_j \geq 0, (j = 1, 2, \dots, n)$ 的基解, 称为基可行解, 其非零分量的数目不大于 m , 并且都是非负的。

对应于基可行解的基, 称为可行解。基解中的非零分量的个数小于 m 个时, 这基解是退化解, 以下讨论中假设不出现退化情况。

(二) 线性规划问题的图解法

下面介绍上例线性规划问题的图解法, 并以此考察线性规划问题求解中的特点。

在以 x, y 为坐标轴的直角坐标系中, 非负条件 $x \geq 0$ 就代表 y 轴和它的右侧的半平面; 而非负条件 $y \geq 0$ 就代表 x 轴和它以上的半平面。这两个条件同时存在就指第一象限。同样道理, 例中的每一个约束条件都代表一个半平面。如约束条件 $3x - y \geq 9$ 是代表以直线 $3x - y = 9$ 边界的左边的半平面。例中的所有约束条件为半平面的交汇区域是 $OABC$, 见图 2-5 的阴影部分。

区域 $OABC$ (阴影部分) 中的每一点(包括边界点)都是这个线性规划问题的一个解(可行解), 因此区域 $OABC$ 是该线性规划问题的解的集合(可行域)。

现在我们来分析目标函数 $f = 5x - y$ 。在坐标平面 $x - y$ 上, 它表示以 f 为参数的一族平行线, 位于同一直线上的点, 具有相同的目标函数值, 因而也称它为“等值线”。当 x 值由小变大时, 直线 $f = 5x - y$ 沿其法线方向向右移动, 当移动到右下角 B 点时, f 的取值最大, 这就得到最优解, B 的坐标为 $(3.3, 0.9)$, 于是由计算得 $f = 15.6$ 。即该工厂在单位时间内生产 3.3 件产品, 而未经处理直接排入河流的污水是 0.9 个单位, 输送到污水厂的污水为 9 个单位时可获得最大净收益 15.6 元。

通常线性规划问题的最优解会出现以下几种情况:

1. 不可能有解;
2. 可有一个有限最优解;
3. 可有一个无限最优解(无界解);
4. 可有无穷多个最优解。

但是, 若线性规划问题存在有限最优解的话, 它一定会在可行域的顶点上取得。虽然图解法具有直观、简便等优点, 但很明显, 当变量超过两个后, 即在高维情况下它就无能为力了。因此, 在实际中普遍采用的方法是单纯形法。

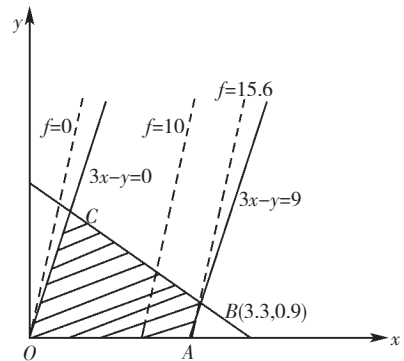


图 2-5 线性规划问题图解法

(三) 单纯形法

单纯形法的基本思路是:根据问题的标准,从可行域中某个基可行解(一个顶点)开始,转换到另一个基可行解(顶点),并且使目标函数达到最大值,问题得到解决。

下面讨论单纯形法的一般实现步骤,为便于理解计算关系,常采用单纯形表。为说明其具体的计算步骤,以如下特殊约束条件形式的最优化模型进行考察。

$$\begin{aligned}
 \max f &= c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n \\
 x_1 + \cdots + a_{1,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{1n} x_n &= b_1 \\
 x_2 + \cdots + a_{2,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{2n} x_n &= b_2 \\
 &\dots\dots\dots \\
 x_m + a_{m,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{mn} x_n &= b_m \\
 x_j &\geq 0, j = 1, 2, \dots, n
 \end{aligned} \tag{2-21}$$

将式(2-21)与目标函数组成 $n+1$ 个变量, $m+1$ 个方程的方程组:

$$\begin{aligned}
 x_1 + \cdots + a_{1,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{1n} x_n &= b_1 \\
 x_2 + \cdots + a_{2,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{2n} x_n &= b_2 \\
 &\dots\dots\dots \\
 x_m + a_{m,m+1} x_{m+1} + \cdots + a_{mn} x_n &= b_m \\
 -f + c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_m x_m + c_{m+1} x_{m+1} + \cdots + c_n x_n &= 0
 \end{aligned}$$

为了便于迭代计算,可将上述方程组写成增广矩阵

$$\begin{array}{cccccccccc}
 -f & x_1 & x_2 & \cdots & x_m & x_{m+1} & \cdots & x_n & b \\
 \left[\begin{array}{cccccccccc}
 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & a_{1,m+1} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & a_{2,m+1} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\
 \vdots & & & & & & & & \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & a_{m,m+1} & \cdots & a_{mn} & b_m \\
 1 & c_1 & c_2 & \cdots & c_m & c_{m+1} & \cdots & c_n & 0
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

若将 f 看作不参与基变换的基变量,它与 $x_1, x_2, \dots, x_m$ 的系数构成一个基,这时可采用行初等变换将 $c_1, c_2, \dots, c_m$ 变换为零,使其对应的系数矩阵为单位矩阵。得到:

$$\begin{array}{cccccccccc}
 -f & x_1 & x_2 & \cdots & x_m & x_{m+1} & \cdots & x_n & b \\
 \left[\begin{array}{cccccccccc}
 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & a_{1,m+1} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\
 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 & a_{2,m+1} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\
 \vdots & & & & & & & & \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & a_{m,m+1} & \cdots & a_{mn} & b_m \\
 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & c_{m+1} - \sum_{i=1}^m c_i a_{i,m+1} & \cdots & c_n - \sum_{i=1}^m c_i a_{in} & - \sum_{i=1}^m c_i b_i
 \end{array} \right]
 \end{array}$$

在增广矩阵设计计算表(见表 2-3) 中填入以下内容:

X_B 列中填入基变量, 这里是 $x_1, x_2, \dots, x_m$;

C_B 列中填入基变量的价值系数, 这里是 $c_1, c_2, \dots, c_m$; 它们是与基变量相对应的。

b 列中填入约束方程组右端的常数;

c_j 行中填入基变量的价值系数 $c_1, c_2, \dots, c_n$;

θ_i 列中的数字是在确定换入变量后, 按 θ 规则计算后填入;

最后一行称为检验数行, 对应各非基变量 x_j 的检验数是

$$c_j - \sum_{i=1}^m c_i a_{ij}, j = 1, 2, \dots, n$$

表 2-3 称为初始单纯形表, 每迭代一步构造一个新单纯形表。

表 2-3 增广矩阵设计计算表

$c_j \rightarrow$			c_1	$\dots$	c_m	c_{m+1}	$\dots$	c_n	θ_i
C_B	X_B	b	x_1	$\dots$	x_m	x_{m+1}	$\dots$	x_n	
c_1	x_1	b_1	1	$\dots$	0	$a_{1,m+1}$	$\dots$	a_{1n}	θ_1
c_2	x_2	b_2	0	$\dots$	0	$a_{2,m+1}$	$\dots$	a_{2n}	θ_2
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	$\vdots$	$\vdots$
c_m	x_m	b_m	0	$\dots$	1	$a_{m,m+1}$	$\dots$	a_{mn}	θ_m
	$-f$	$-\sum_{i=1}^m c_i b_i$	0	$\dots$	0	$c_{m+1} - \sum_{i=1}^m c_i a_{i,m+1}$	$\dots$	$c_n - \sum_{i=1}^m c_i a_{in}$	

计算步骤为:

1. 找出初始可行基, 确定初始基可行解, 建立初始单纯形表。

2. 检验各非基变量 x_j 的检验数 $\sigma_j = c_j - \sum_{i=1}^m c_i a_{ij}$, 若 $\sigma_j \leq 0, j = m+1, \dots, n$; 则已得到最优解, 可停止计算, 否则转入下一步。

3. 在 $\sigma_j > 0, j = m+1, \dots, n$ 中, 若有某个 σ_k 对应 x_k 的系数列向量 $P_k \leq 0$, 则此问题无解, 可停止计算, 否则, 转入下一步。

4. 根据 $\max(\sigma_j > 0) = \sigma_k$, 确定 x_k 为换入变量, 按 θ 规则计算

$$\theta = \min \left(\frac{b_i}{a_{ik}} \mid a_{ik} > 0 \right) = \frac{b_l}{a_{lk}}$$

可确定 x_l 为换出变量, 转入下一步。

5. 以 a_{lk} 为主元素进行迭代(即用高斯消去法或称为旋转变量), 把 x_k 所对应的列向量

$$P_k = \begin{pmatrix} a_{1k} \\ a_{2k} \\ \vdots \\ a_{lk} \\ \vdots \\ a_{mk} \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{变换为}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

将 X_B 列中的 x_l 换为 x_k , 得到新的单纯形表。重复 ②—⑤, 直到终止。

对于单纯形法的详细讲解可以参考文献[6]。

(四) 线性规划的对偶问题

所谓“对偶”就是等价的意思。对于任一线性规划问题都有一个与之密切相关的另一个线性规划问题,称为它的对偶问题(Duality Problem)。如果称最初给出的问题为原问题,则与其对应的线性规划问题就称为原问题的对偶问题。若给定原问题:

$$\begin{aligned} \max f &= c_1 x_1 + c_2 x_2 + \cdots + c_n x_n \\ \begin{cases} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} &\leq \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \\ x_1, x_2, \cdots, x_n &\geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2-22)$$

则其对偶问题的表达形式是

$$\begin{aligned} \min w &= y_1 b_1 + y_2 b_2 + \cdots + y_m b_m \\ \begin{cases} (y_1, y_2, \cdots, y_m) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} &\geq (c_1, c_2, \cdots, c_n) \\ y_1, y_2, \cdots, y_m &\geq 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (2-23)$$

这里 $y_1, y_2, \cdots, y_m$ 为对偶线性规划的变量,称为对偶变量。

以上就是线性规划原问题与对偶问题的标准形式,它们之间的转换关系可用表 2-4 表示。

表 2-4

x_j	x_1	x_2	$\cdots$	x_n	原关系	$\min w$
y_i	a_{11}	a_{12}	$\cdots$	a_{1n}	$\leq$	b_1
y_2	a_{21}	a_{22}	$\cdots$	a_{2n}	$\leq$	b_2
$\vdots$	$\cdots$				$\vdots$	$\vdots$
y_m	a_{m1}	a_{m2}	$\cdots$	a_{mn}	$\leq$	b_m
对偶关系	$\geq$	$\geq$	$\cdots$	$\geq$	$\max f = \min w$	
$\max f$	c_1	c_2	$\cdots$	c_n		

一般线性规划问题中,常会遇到非标准形式的情况。如原问题的约束条件中包含有等式约束条件,则可将每一个等式约束条件分解为两个不等式约束条件,然后按标准形式求其对偶问题的表达形式。

假设如下约束条件是等式线性规划问题:

$$\begin{aligned}\max f &= \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j &= b_i, i = 1, 2, \dots, m \\ x_j &\geq 0, j = 1, 2, \dots, n\end{aligned}$$

(1) 先将等式约束条件分解为两个不等式的约束条件, 这时上述规划问题可表示为:

$$\begin{aligned}\max f &= \sum_{j=1}^n c_j x_j \\ \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j &\leq b_i, i = 1, 2, \dots, m,\end{aligned}\tag{a}$$

$$\begin{aligned}-\left(\sum_{j=1}^n a_{ij} x_j\right) &\leq -b_i, i = 1, 2, \dots, m, \\ x_j &\geq 0, j = 1, 2, \dots, n\end{aligned}\tag{b}$$

令 y_i' 为对应不等式组(a)的对偶变量($i = 1, 2, \dots, m$)

y_i'' 为对应不等式组(b)的对偶变量($i = 1, 2, \dots, m$)

(2) 由标准形式的变换关系即可写出原问题的对偶问题:

$$\begin{aligned}\max w &= \sum_{i=1}^m b_i y_i' + \sum_{i=1}^m (-b_i) y_i'' \\ \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i' + \sum_{i=1}^m (-a_{ij}) y_i'' &\geq c_j, j = 1, 2, \dots, n \\ y_i', y_i'' &\geq 0, i = 1, 2, \dots, m\end{aligned}$$

整理上述各式有:

$$\begin{aligned}\max w &= \sum_{i=1}^m b_i (y_i' - y_i'') \\ \sum_{i=1}^m a_{ij} (y_i' - y_i'') &\geq c_j, j = 1, 2, \dots, n \\ y_i', y_i'' &\geq 0, i = 1, 2, \dots, m\end{aligned}\tag{2-24}$$

再令 $y_i = y_i' - y_i''$, 将 y_i 代入各式中, 则对偶规划问题可进一步简化为:

$$\begin{aligned}\max w &= \sum_{i=1}^m b_i y_i \\ \sum_{i=1}^m a_{ij} y_i &\geq c_j, j = 1, 2, \dots, n\end{aligned}\tag{2-25}$$

在上面的简化过程中, 因为 $y_i', y_i'' \geq 0$, 可知 y_i 不受正、负约束。因此, 带等式约束条件

的原问题,其对偶问题中相应等式约束条件的对偶变量无正、负要求。反之,如在线性规划的原问题中,若变量取值范围不受正、负约束限制的话,则其在对偶问题中对应于该变量的约束条件应取等式。

对于线性规划的原、对偶问题,下面给出它们的一些基本性质。

1. 对偶问题的对偶是原问题;
2. 若 X 是原问题的可行解, Y 是对偶问题的可行解, 则有 $cX \leq Yb$;
3. 设 X^* 是原问题的可行解, Y^* 是对偶问题的可行解, 当 $cX^* = Y^*b$ 时, 则 X^* 、 Y^* 分别为线性规划原、对偶问题的最优解;
4. 若原问题有最优解, 则对偶问题也存在最优解, 且二者目标函数值相等;
5. 若 X^* 、 Y^* 分别是原问题和对偶问题的可行解, 则 $X_s Y_s^* = 0$, $X^* Y_s = 0$ 的充分条件是 X^* 、 Y^* 分别为原、对偶问题的最优解, 其中 X_s 、 Y_s 为原、对偶问题的松弛、剩余变量。

二、整数规划

在前面讨论的线性规划模型中,一般地,其最优解可能是分数或小数,也可能是整数。但在实际问题中,常要求解必须是整数,例如所求解是机器的台数、完成工作的人数或装货的车数等,这时如采用非整数解就不合理了。为满足决策变量取整数解,初看起来,似乎只要对非整数解采取“舍入取整”的办法就能解决问题,但这样往往是不恰当的,因为化整后不一定是可行解;或者即使是可行解,也不一定是最优解。因此,对所求最优化整数解的问题,有必要另行研究,我们称这种求取最优整数解的规划问题为整数规划(Integer Programming),简称 IP。

整数规划中如果所有的变数都限制为(非负)整数,就称为纯整数规划(Pure Integer Programming)或全整数规划(All Integer Programming);如果仅一部分变数限制为整数,则称为混合整数规划(Mixed Integer Programming)。当变数取值仅限于 0 或 1 时,就称为 0—1 规划。

对于整数规划的解法有很多种,这里进行简要介绍。

(一) 分枝定界解法

在求解整数规划时,采取穷举变量所有可能整数组合的方式是不可取的。现有解决问题的思路一般都是通过检查可行整数组合中的一部分以确定出最优的整数解,分枝定界法(Branch and Bound Method)就是这种方法中一种。

分枝定界法是 20 世纪 60 年代由 Land Doig 和 Dakin 等人提出的,它十分灵活且便于计算机求解,已成为整数规划的重要方法。设有最大化的整数规划问题 A ,与它相应的线性规划问题 B ,从解问题 B 开始,若其最优解不符合 A 的整数条件,则 B 的最优目标函数必是 A 的最优目标函数 f^* 的上界,记为 $\bar{f}$;而 A 的任意可行解的目标函数值将是 f^* 的一个下界 $\underline{f}$ 。分枝定界法就是将 B 的可行域分成子区域(称为分枝)的方法,逐步减小 $\bar{f}$ 和增大 $\underline{f}$,最终达到 f^* 。现以下例进行说明。

$$\max f = 40x_1 + 90x_2$$

$$\begin{cases} 9x_1 + 7x_2 \leq 56, & (a) \end{cases}$$

$$\begin{cases} 7x_1 + 20x_2 \geq 70, & (b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1, x_2 \geq 0, & (c) \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1, x_2 \text{ 为整数}, & (d) \end{cases}$$

先不考虑条件(d),得到最优解

$x_1 = 4.81, x_2 = 1.82, f_0 = 356$,即为图 2-6 中的 B 点,可见它不符合整数条件(d)。这时是问题 A 的最优目标函数 f^* 的上界,记作 $\bar{f}$,而 $x_1 = 0, x_2 = 0$ 时,显然是问题 A 的一个整数可行解,这时 $f = 0$,是一个下界,记作 $\underline{f} = 0$,即 $0 \leq f^* \leq 356$ 。

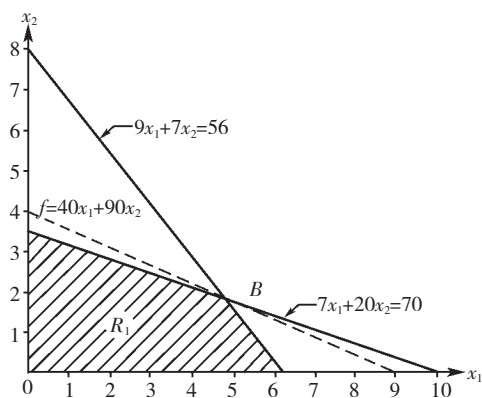


图 2-6 图解示意图

分枝定界法的解法,首先注意其中一个非整数变量的解,如 x_1 ,在问题 B 的解中 $x_1 = 4.81$,于是对原问题的最优整数解应满足:

$$x_1 \leq 4, \text{ 或 } x_1 \geq 5$$

可将原问题分解为两个子问题 B_1 和 B_2 (即两枝),给每枝增加一个约束条件,如图 2-7 所示。这并不影响问题 A 的可行域,不考虑整数条件解问题 B_1 和 B_2 ,称此为第一次迭代,得到最优解为:

问题 B_1	问题 B_2
$f_1 = 349$	$f_2 = 341$
$x_1 = 4.00$	$x_1 = 5.00$
$x_2 = 2.10$	$x_2 = 1.57$

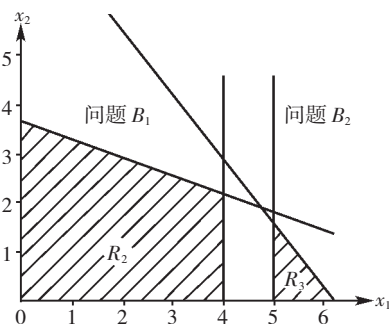


图 2-7 分解示意图

显然没有得到全部变量是整数的解。因为 $f_1 > f_2$,故将 $\bar{f}$ 改为 349,则必存在最优整数解,得到 f^* ,并且

$$0 \leq f^* \leq 349$$

继续对问题 B_1 和 B_2 进行分解,因 $f_1 > f_2$,故先分解 B_1 为两枝。增加条件 $x_2 \leq 2$ 者,称为问题 B_3 ;增加条件 $x_2 \geq 3$ 者,称为问题 B_4 。故在图 2-7 中再舍去 $2 < x_2 < 3$ 之间的可行域,再进行第二次迭代,解题过程的结果列在图 2-8 中。可见问题 B_3 的解已都是整数,它

的目标函数值 $f_3 = 340$, 可取为 $\underline{f}$, 而它大于 $f_4 = 327$ 。所以再分解 B_4 已无必要。而问题 B_2 的解 $f_2 = 341$, 所以 f^* 可能在 $340 \leq f^* \leq 341$ 之间有整数解, 于是对 B_2 分解, 得问题 B_5 , 即非整数解, 且 $f_5 = 308 < f_3$, 问题 B_5 无可行解。于是可以断定

$$f_3 = \underline{f} = f^* = 340$$

问题 B_3 的解 $x_1 = 4.00, x_2 = 2.00$ 为整数规划的最优整数解。

从以上解题过程可得用分枝定界法求解整数规划(最大化)问题的步骤为:

开始将要求解的整数规划问题称为问题 A , 将与它相应的线性规划问题称为问题 B 。

1. 解问题 B , 可能得到以下情况之一:

- (1) B 没有可行解, 这时 A 也没有可行解, 则停止。
- (2) B 有最优解, 并符合问题 A 的整数条件, B 的最优解即为 A 的最优解, 则停止。
- (3) B 有最优解, 但不符合 A 的整数条件, 记它的目标函数值为 $\bar{f}$ 。

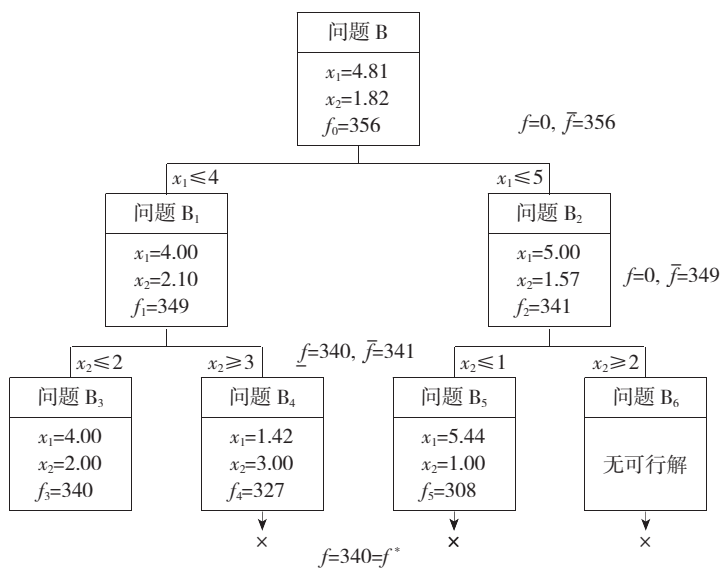


图 2-8 分枝定界法分解图

2. 用观察法找问题 A 的一个整数可行解, 一般可取 $x_j = 0, j = 1, \dots, n$ 试探, 求得其目标函数值, 并记作 $\underline{f}$, 以 f^* 表示问题 A 的最优目标函数值, 此时有

$$\underline{f} \leq f^* \leq \bar{f}$$

进行迭代。

第一步: 分枝, 在 B 的最优解中任选一个不符合整数条件的变量 x_j , 其值为 b_j , 以 $[b_j]$ 表示小于 b_j 的最大整数, 构造两个约束条件

$$x_j \leq [b_j] \quad (a) \text{ 和 } x_j \geq [b_j] + 1 \quad (b)$$

将这两个约束条件分别加入问题 B , 求两个后继规划问题 B_1 和 B_2 , 不考虑整数条件求解这两个后继规划问题。

定界, 以每个后继问题为一分枝表明求解的结果, 从其他问题的解的结果中, 找出最优目标函数值最大者作为新的上界 $\bar{f}$ 。从已符合整数条件的各分枝中, 找出目标函数值最大者作为新的下界 $\underline{f}$, 若无作用则 $\underline{f} = f^*$

第二步:比较与剪枝,各分枝的最优目标函数中若有小于 $\underline{f}$ 者,则剪掉这枝(用打 $\times$ 表示),即以后不再考虑了。若大于 $\underline{f}$,且不符合整数条件则重复第一步骤,一直到最后得到 $f^* = \underline{f}$ 为止,得到最优整数解 $x_j^*, j = 1, \dots, n$ 。

用分枝定界法可解纯整数规划问题和混合整数规划问题,比穷举法优越且计算量小。但变量数很大时,计算工作量也是相当可观的。

(二) 割平面法

整数规划的割平面法(Cutting Plane Method)是从1958年开始形成的,它可以用来求解完全整数规划和混合整数规划的问题。

割平面法(又称切约束平面法)的基本思路是,把整数线性规划的变量中为整数的约束先略去,得到一个一般的线性规划问题,称之为“关连的线性规划”,然后对此关连线性规划的可行解所在的约束凸集,通过逐次增加一个约束条件(割平面)以实现逐次割去其非整数可行解中的某一部分,以最后得到一个所求的全部整数可行解;换言之,对关连线性规划的最优解,当不符合全整数的要求时,引入一个约束条件(对某一非整数的那一变量),这相当于将关连线性规划的非整数的那一块角锥体切去。

割平面法基本运算步骤如下:

1. 解整数规划时,先忽略整数的约束要求,用单纯形法解线性规划问题;
2. 如果最优解是整数值,则该整数规划问题已解完,否则,转向3;
3. 引入一个附加约束,即割掉一部分可行域,从而压缩原来的可行解集合,并返回1。

对于混合整数规划问题,只需对那些受整数约束的变量进行整值调整就行了,其他方面与完全整数规划问题的解法是一样的。

求解整数规划问题的方法常见的还有隐枚举法等,对于这些方法的深入讲解可参看文献[6]。应该指出:在实际求解整数规划问题时,应根据问题的特点,选择适当的求解方法或将某些方法结合使用,可能会取得更好的效果。

三、非线性规划

在水环境系统规划、管理中,不少实际问题可以归结或简化为线性规划问题的优化模型,其目标函数和约束条件都是决策变量的一次函数。而当规划模型的目标函数或约束条件中,若存在至少有一个决策变量的非线性函数,就称这种规划模型为非线性规划模型。例如在进行环境的成本—效益分析时,若考虑问题的经济性,比如污水处理中规模与效率的经济效应:即随着污水处理厂的规模增大,处理单位污水所需要的基建费用与运行费用都会相对下降;而去除单位污染物所需要的费用,却随着污水处理效率的提高而增加。包含这种非线性关系的优化问题,涉及到非线性规划的方法。

(一) 非线性规划及其基本概念

一般,我们可以将非线性规划的数学模型表示为如下形式:

$$\begin{aligned} \min f(X) \\ g_i(X) \geq 0, i = 1, 2, \dots, m \end{aligned} \quad (2-26)$$

其中: $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 是 n 维欧氏空间 E^n 中的向量(点); $f(X)$ 称为目标函数, $g_i(X) \geq 0$ 为约束条件,一般它们均为决策变量 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的多元函数。

在非线性规划中,由于函数的性质复杂,往往很难得到问题的全局最优解,因此了解非线性规划解的特性就显得十分重要。

设 $f(X)$ 为定义在 n 维欧氏空间 E^n 中某一区域 R 上的 n 元实函数,其中 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ 对于 $X^* \in R$, 如果存在 $\epsilon > 0$, 使得 R 中一切 $X \neq X^*$ 当 $|X - X^*| < \epsilon$ 时有 $f(X) \geq f(X^*)$ 成立, 则称 X^* 为函数 $f(X)$ 在 R 上的局部极小点, $f(X^*)$ 为局部极小值。

若当上述定义仅要求严格不等号“ $>$ ”成立, 则称 X^* 为函数 $f(X)$ 在 R 上的严格局部极小点, $f(X^*)$ 为严格局部极小值。

如果对 R 中一切 $X \neq X^*$, 有 $f(X) \geq f(X^*)$ 成立, 则称 X^* 为函数 $f(X)$ 在 R 上的全局最小点, $f(X^*)$ 为全局最小值。类似地, 仅当 $f(X) > f(X^*)$ 成立, 则称 X^* 为函数 $f(X)$ 在 R 上的严格全局最小点, $f(X^*)$ 为严格全局最小值。

将上述诸定义中不等式反号, 即可有相应极大(最大)点和极大(最大)值定义。下面仅就极小点和极小值加以说明。

以下说明极值点存在的必要条件和充分条件。

必要条件: 设 R 是 n 维欧氏空间 E^n 上的某一开集, $f(X)$ 在 R 上有一阶连续偏导数, 且在点 $X^* \in R$ 取得局部极值, 则必有:

$$\frac{\partial f(X^*)}{\partial x_1} = \frac{\partial f(X^*)}{\partial x_2} = \dots = \frac{\partial f(X^*)}{\partial x_n} = 0 \quad (2-27)$$

或

$$\nabla f(X^*) = 0 \quad (2-28)$$

其中:

$$\nabla f(X^*) = \left(\frac{\partial f(X^*)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(X^*)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial f(X^*)}{\partial x_n} \right)^T$$

为函数 $f(X)$ 在点 X^* 处的梯度。

充分条件: 设 R 是 n 维欧氏空间 E^n 上的某一开集, $f(X)$ 在 R 上有二阶连续偏导数, $X^* \in R$, 若 $\nabla f(X^*) = 0$, 且对任何非零向量 $Z \in E^n$ 有:

$$Z^T H(X^*) Z > 0 \quad (2-29)$$

则称 X^* 为函数 $f(X)$ 在 R 上的严格局部极小点。此处 $H(X^*)$ 为 $f(X)$ 在点 X^* 处的海森(Hession) 矩阵。

$$H(X^*) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_1 \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_2 \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_2^2} & \dots & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_n \partial x_1} & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_n \partial x_2} & \dots & \frac{\partial^2 f(X^*)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} \quad (2-30)$$

函数的最优值与极值是有区别的, 前者是就全区域而言, 而后者为局部的性质。一般地, 在区域内部, 最优点必是极值点, 反之结论却并不一定成立。但是, 在特定条件下, 最优点与

极值点是相同的,这涉及到凸集、凸函数和凸函数的极值性质的一些基本概念。

凸集:设集合 $C \in E^n$, 如果 C 中任意两点 u_1, u_2 的任意凸组合 $u = \alpha_1 u_1 + \alpha_2 u_2$ ($\alpha_1 + \alpha_2 = 1$, 且 $0 \leq \alpha_i \leq 1, i = 1, 2$) 仍在 C 中, 则称集合 C 为凸集。

凸函数的定义:设 $f(X)$ 是定义在 n 维欧氏空间 E^n 某凸集 R 上的函数。若对任何实数 α ($0 < \alpha < 1$) 及 R 中任意两点 X_1 和 X_2 , 恒有:

$$f(\alpha X_1 + (1 - \alpha) X_2) \leq \alpha f(X_1) + (1 - \alpha) f(X_2)$$

则称 $f(X)$ 为定义在 R 上的凸函数。

若对任何 α ($0 < \alpha < 1$), 当集合 R 中任意两点 $X_1 \neq X_2$, 恒有

$$f(\alpha X_1 + (1 - \alpha) X_2) < \alpha f(X_1) + (1 - \alpha) f(X_2)$$

则称 $f(X)$ 为定义在 R 上的严格凸函数。

对于凸函数有:

若 $f(X)$ 为定义在凸集 R 上的凸函数, 则其任一极小值就是它在 R 上的最小值。进一步, 如 $f(X)$ 为定义在凸集 R 上的严格凸函数, 则 $f(X)$ 具有唯一的最小值。

(二) 非线性规划优化方法

非线性规划优化方法大体可以分为两类。

1. 解析法

解析法要求用数学方程的形式来描述一个非线性规划问题。它首先按照函数极值的必要条件 $\nabla f(X) = 0$, 用数学方法求出其解析解。然后, 按照极值存在的充分条件或问题的实际意义确定其最优解。这类间接的寻优方法适用于求解目标函数和约束条件具有简单而明确数学表达形式的非线性规划问题。而对于目标函数较复杂且具有各种形式约束条件的情况, 则难以解析处理, 往往需借助于数值法。

2. 数值法

又称为直接法或搜寻法, 基本上是根据函数在某一局部区域的性质(一阶或二阶导数条件等)或一些已知的函数值, 来确定一有规律的迭代步骤, 改善目标函数, 逐步搜索、逼近, 最后达到最优点。由于许多问题的实际复杂性, 大量的非线性规划的寻优求解还是通过数值法进行的。

考虑到非线性规划的各种情况: 从决策变量个数看, 有单变量、多变量之分; 从约束条件个数看有无约束、有约束之分; 从约束条件性质看, 有等式约束、不等式约束、线性约束、非线性约束等等。这里仅介绍几种最基本的非线性规划求解办法。

为了确定起见, 以后总假定所研究对象为非线性规划模型式(2-26)形式, 且所讨论的问题一般为严格凸规划, 即在它的解的可行域内, 规划问题具有唯一最小点。

(1) 单变量函数的优化方法 —— 0.618 法

单变量优化又称为一维搜索, 它是沿某一已知直线方向寻求目标函数极值的方法。对于不少多变量优化计算, 往往可归结为反复地一维搜索过程。因此, 单变量函数的寻优方法就成为解非线性规划问题的基础, 这里重点介绍基于缩小搜索区间思想的 0.618 法。

我们知道一条线段的黄金分割点应取在其 0.618 处。对于区间 $[0, L]$ 上的单变量函数 $y = f(x)$, 假如它在此区间上具有唯一极小点 x^* , 显然, 它可出现在 $[0, L]$ 上的任意位置, 寻

找该点的一个很自然的想法就是设法将区间 $[0, L]$ 不断缩小,同时却使 x^* 始终留在未被消去的保留区间中,通常这并不难做到。现在此区间中任取两点 $x_1, x_2, x_1 < x_2$,并计算其函数值 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$,可能会出现两种情况:

① $f(x_1) < f(x_2)$,这时极小点 x^* 必在区间 $[0, x_2]$ 内,如图2-9a。

② $f(x_1) \geq f(x_2)$,这时极小点 x^* 必在区间 $[x_1, L]$ 内,如图2-9b。

这说明:只要在区间 $[0, L]$ 内任取两个不同点,计算出其函数值并予以比较,就可以将极小点 x^* 的存在范围缩小。则如果要继续缩小极小点 x^* 存在的范围,只需在其现存区间 $[0, x_2]$ 或 $[x_1, L]$ 内再取一新点并计算出该点相应的函数值加以比较,进行区间去留即可。只要被缩小的保留区间包含该极小点 x^* ,仿上述做法,则会使得含 x^* 的区间越缩越短,也就越接近函数 $f(x)$ 在区间 $[0, L]$ 内的极小点 x^* 。

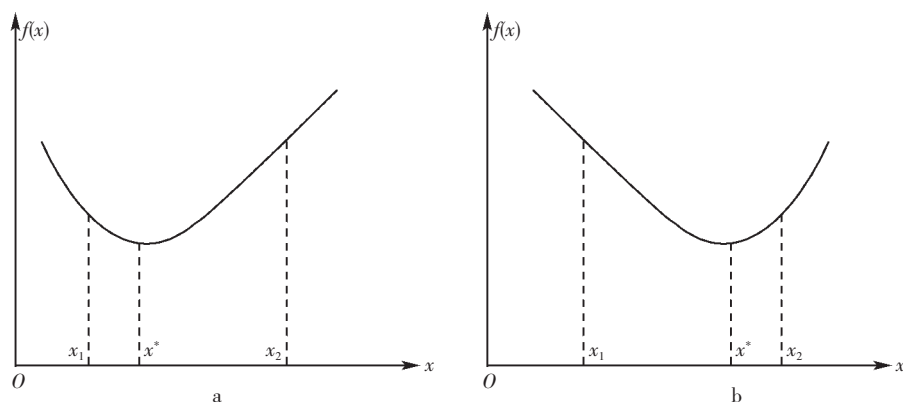


图2-9 极小点示意图

若要尽快求得极小点 x^* ,则每次区间的消除部分较大为好,但由于要保留的区间即极小点 x^* 的存在区间 $[0, x_2]$ (或 $[x_1, L]$)是哪一部分事先并不能确定,因此取消 $[0, x_2]$ 或 $[x_1, L]$ (保留 $[0, x_2]$ 或 $[x_1, L]$)的可能性应是一样的。所以最有利的方式是要求被消去区间部分是等长度的,即

$$L - x_2 = x_1 \quad (2-31)$$

另一方面,在逐步缩小保留区间的过程中,为能利用已有点及其计算信息,且使每次点的取舍有规律,希望其保留点在现存区间的位置,应具有区间被缩小前消去点所处的位置性质。也即:如果丢掉的是区间 $[x_2, L]$,保留 $[0, x_2]$,则其中保留点 x_1 在 $[0, x_2]$ 中位置应与原来 x_2 在 $[0, L]$ 的位置相仿,即比例关系不变

$$\frac{x_2}{L} = \frac{x_1}{x_2}$$

结合式(2-31)有:

$$\frac{x_2}{L} = \frac{L - x_2}{x_2} \quad (2-32)$$

由上式可看出满足上述要求的两个点之一 x_2 正是给定一直线段的黄金分割点。而这种

求取单变量函数最小值的寻优方法就是 0.618 法, 又称黄金分割法。它的实质是根据斐波那契序列, 使用对称搜索方法, 逐步缩短所考察区间, 以尽量少的次数, 达到某一预定的缩短率的近似方法。

对某区间 $[a, b]$ 上的具有唯一极小点的函数 $f(x)$, 给定收敛精度 ε , 使用 0.618 法的具体计算方法及步骤如下:

① 在初始区间 $[a, b]$, 计算

$$x_1 = a + 0.382(b - a) \quad y_1 = f(x_1)$$

$$x_2 = a + 0.618(b - a) \quad y_2 = f(x_2)$$

② 对 $f(x_1)$ 和 $f(x_2)$ 比较大小,

若 $f(x_1) > f(x_2)$, 则 $a = x_1, x_1 = x_2, y_1 = y_2$

$$x_2 = a + 0.618(b - a)$$

$$y_2 = f(x_2), \text{转 } ③$$

若 $f(x_1) \leq f(x_2)$, 则 $b = x_2, x_2 = x_1, y_2 = y_1$

$$x_1 = a + 0.382(b - a)$$

$$y_1 = f(x_1), \text{转 } ③$$

③ 根据给定精度和收敛条件, 判断, 例如: $b - a \leq \varepsilon$

④③ 中条件满足, 则可得极小值点 x^* 和极小值 y^* 。

$$x^* = \frac{1}{2}(b + a)$$

$$y^* = f(x^*)$$

否则转步骤 ②。

(2) 无约束极值问题 —— 梯度法

以下的无约束机制问题是指多变量函数的优化问题, 这种问题可表述为:

$$\min Z = f(X), X \in E^n \quad (2-33)$$

原则上, 求解多变量无约束极值问题, 可借助极值存在的必要与充分条件, 通过求解方程组 $\nabla f(X) = 0$ 进行。但该方程组通常是非线性的, 求解相当困难, 甚至无法实施。而采用数值法迭代求解时, 由于决策变量个数不止一个, 会存在无数路径通向最优点, 若仍继续考虑类似单变量的消去区域的方式寻优, 已不易进行。因此, 大量解决这类问题的基本思路则主要是依据函数的某些特征(导数、函数值等), 从某一已知点 X_0 出发, 按照某种方式确定一使函数值有所下降的搜索方向, 循此方向, 前进到一新位置 X_1 , 如此形成一系列新点 $X_1, X_2, \dots, X_k \dots$, 以逐步逼近最小点 X^* 。围绕这种为形成点列 $\{x_k\}$ 而构造搜索方向问题, 就产生了各种优化方法的研究。其中利用一阶梯度作为搜索方向的方法是最古老但又十分基本的一种数值方法, 它迭代过程简单, 使用方便, 又是理解其他许多无约束解法的基础。

假定无约束极值问题式(2-33)中的目标函数 $f(X)$ 有一阶连续偏导数, 具有极小点 X^* 。以 $X^{(k)}$ 表示极小点的第 k 次近似, 为了求其第 $k+1$ 次近似点 $X^{(k+1)}$, 在 $X^{(k)}$ 点沿方向 $P^{(k)}$ 作射线

$$X = X^{(k)} + \lambda P^{(k)} \quad (\lambda \geq 0)$$

现将 $f(X)$ 在 $X^{(k)}$ 点处展成泰勒级数

$$f(X) = f(X^{(k)} + \lambda P^{(k)}) = f(X^{(k)}) + \lambda \nabla f(X^{(k)})^T P^{(k)} + o(\lambda)$$

对于充分小的 λ , 只要

$$\nabla f(X^{(k)})^T P^{(k)} < 0 \quad (2-34)$$

即可保证 $f(X^{(k)} + \lambda P^{(k)}) < f(X^{(k)})$ 。这时若取

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \lambda P^{(k)}$$

就能使目标函数得到改善。

考察不同的方向 $P^{(k)}$ 。假定 $P^{(k)}$ 的模一定(且不为零), 并设 $\nabla f(X) \neq 0$ (否则 $X^{(k)}$ 是平稳点), 使式(2-34)成立的 $P^{(k)}$ 有无限多个。为使目标函数值能得到尽量大的改善, 必须寻求使 $\nabla f(X^{(k)})^T P^{(k)}$ 取最小值的 $P^{(k)}$ 。由线性代数知识可知当

$$P^{(k)} = -\nabla f(X^{(k)})$$

时也即 $P^{(k)}$ 取负梯度方向, 它是使函数值下降最快的方向(在 $X^{(k)}$ 的某一小范围内)。

为了得到下一个近似极小点, 在选定了搜索方向之后, 还要确定步长 λ 。当采用可接收点算法时, 就是取某一 λ 进行试算, 看是否满足不等式

$$f(X^{(k)} - \lambda \nabla f(X^{(k)})) < f(X^{(k)}) \quad (2-35)$$

若上述不等式成立, 就可以迭代下去。否则, 缩小 λ 值使满足不等式(2-35)。由于采用负梯度方向, 满足不等式(2-35)的 λ 总是存在的。

现简要总结一下梯度法解无约束极值问题的步骤:

- ① 给定初始近似点 $X^{(0)}$ 及精度 $\epsilon > 0$, 若 $\|\nabla f(X^{(0)})\|^2 \leq \epsilon$, 则 $X^{(0)}$ 即为近似极小点。
- ② 若 $\|\nabla f(X^{(0)})\|^2 > \epsilon$, 求步长 λ_0 , 并计算

$$X^{(1)} = X^{(0)} - \lambda_0 \nabla f(X^{(0)})$$

求步长可用一维搜索法、微分法或试算法。若求最佳步长, 则应使用前两种方法。

- ③ 一般地, 若 $\|\nabla f(X^{(0)})\|^2 \leq \epsilon$, 则即为所求近似解; 若 $\|\nabla f(X^{(0)})\|^2 > \epsilon$, 则求步长 λ_k , 并确定下一个近似点

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - \lambda_k \nabla f(X^{(k)})$$

如此继续, 直至达到要求的精度为止。

若 $f(X)$ 具有二阶连续偏导数, 在 $X^{(k)}$ 作 $f(X^{(k)} - \lambda \nabla f(X^{(k)}))$ 的泰勒展开:

$$\begin{aligned} f(X^{(k)} - \lambda \nabla f(X^{(k)})) &\approx f(X^{(k)}) - \nabla f(X^{(k)})^T \lambda \nabla f(X^{(k)}) \\ &+ \frac{1}{2} \lambda \nabla f(X^{(k)})^T H(X^{(k)}) \lambda \nabla f(X^{(k)}) \end{aligned}$$

对 λ 求导并令其为零, 得到近似最佳步长:

$$\lambda_k = \frac{\nabla f(X^{(k)})^T \nabla f(X^{(k)})}{\nabla f(X^{(k)})^T H(X^{(k)}) \nabla f(X^{(k)})} \quad (2-36)$$

(3) 有约束极值问题 —— 拉格朗日乘子法

实际工作中遇到的大多数优化问题,其变量的取值多少有一定限制,这种限制由约束条件体现。对于含有约束条件(特别是不等式约束条件)的非线性规划问题,由于函数特性复杂,约束条件形式多样,寻优更加困难,方法也不成熟。这类问题的求解大致可分为三类:a. 在解的可行域内仅通过函数值相比较而进行极值搜索的直接方法;b. 将有约束问题化为无约束极值问题;c. 对非线性规划线性化。拉格朗日乘子法是一种常见的消去约束条件的求解方法。

对仅含有等式约束条件的非线性规划问题

$$\begin{cases} \min f(X) \\ g_i(X) = 0, i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (2-37)$$

设非线性规划问题(2-37)中函数 $f(x)$ 及 $g_i(x) (i = 1, 2, \dots, m)$ 均具有连续的偏导数,且设矩阵:

$$\left(\frac{\partial g_i(X)}{\partial x_j} \right), i = 1, 2, \dots, m, j = 1, 2, \dots, n (m < n)$$

中有某个 m 阶子行列式 $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ 处不为零,则函数 $f(X)$ 在条件 $g_i(X) = 0 (i = 1, 2, \dots, m)$ 下于 X^* 处有极值的必要条件是:存在一组常数 $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_m$, 使当 $X = X^*$ 时下式成立:

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial x_j} + \lambda_1 \frac{\partial g_1}{\partial x_j} + \lambda_2 \frac{\partial g_2}{\partial x_j} + \dots + \lambda_m \frac{\partial g_m}{\partial x_j} = 0, j = 1, 2, \dots, n \\ g_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (2-38)$$

式(2-38)中的常数 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, m)$ 称为拉格朗日乘子。

求解由式(2-38)构成的联立方程组,可得出 x^*, λ^* , 即可求出规划问题(2-37)的极值点,方程组(2-38)的求解等价于求解一个新的无约束函数:

$$L(X, \lambda) = f(X) + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i(X) = f(X) + \lambda^T g(X)$$

的极值点。此函数极值存在的必要条件是:

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x_j} = \frac{\partial f(X)}{\partial x_j} + \sum_{i=1}^m \lambda_i \frac{\partial g_i(X)}{\partial x_j} = 0, j = 1, 2, \dots, n \\ \frac{\partial L}{\partial \lambda_i} = g_i(X) = 0, i = 1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (2-39)$$

这正是式(2-38)表达的结果。这个新定义的函数 $L(X, \lambda)$ 称为拉格朗日函数。

通过应用拉格朗日乘子,可使求等式约束条件下函数 $f(X)$ 的极小点问题,转化为寻求拉格朗日函数 $L(X, \lambda)$ 的稳定点问题,这种引进待定乘子 λ , 构成拉格朗日函数求解等式约束条件下函数极值的优化方法称为拉格朗日乘子法。

方程组(2-38)或(2-39)共有 $m+n$ 个方程,其中待求变量 $x_j, (j = 1, 2, \dots, n), \lambda_i (i =$

$1, 2, \dots, m)$ 也有 $m+n$ 个, 故方程组一定能够求解。但是经常地, 式(2-39) 表现为非线性方程组的形式, 为求解带来了相当的困难, 为便于在计算机上利用前面介绍的无约束极值优化迭代算法, 可再引入一新的函数

$$Z = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial L}{\partial x_j} \right)^2 + \sum_{i=1}^m [g_i(X)]^2$$

直接对函数 Z 求极小值, 同样可得原问题的最优解。

四、动态规划

在一般最优决策问题中, 包含有目标函数和约束条件, 并在静态条件下求得某些最优结果。但在实际工作中, 有时会碰到最优决策是由一系列部分决策构成的, 即一个系统的最优决策包含有多阶段的决策。求解这类问题通常采用本节介绍的动态规划方法。

在最优化问题的研究中, 有一类问题是一种随着时间而变化的活动过程。它可以按照时间过程划分成若干个相互联系的阶段, 每个阶段都需要作一定的决策。但是每个阶段最优决策的选择不能只是孤立地考虑本阶段所取得的效果如何, 而必须把整个过程中的各阶段联系起来考虑, 要求所选择的各个阶段决策的集合——策略(Policy) 能使整个过程的总效果达到最优。这类问题叫做多阶段决策问题, 20 世纪 50 年代由美国数学家贝尔曼等人根据这类多阶段决策优化问题的特性, 提出了解决这类问题的优化方法。由于它是在时间过程中, 依次分阶段选取一些决策, 来解决整个动态过程的最优化问题, 所以称之为“动态规划”。

实际工作中有一些问题, 虽然不直接随时间变化而是空间位置上的变化, 但是我们也可以把这种位置上的变化过程比拟为随时间而变的“动态过程”, 而采用动态规划的方法求最优策略。

还有一些问题例如水质规划、投资分配、某些结构物的优化设计问题等, 本是一些与时间因素无关的静态多变量优化决策问题, 但我们也可以人为地把这种静态多维决策问题引入“时间因素”化为多阶段决策过程问题, 而用动态规划的方法来研究。

因此, 动态规划的方法就是把一个“动态过程”的优化决策问题分成段以后, 把每一个阶段作为一个静态的问题来分析。

(一) 动态规划的几个基本概念

1. 阶段

对我们所研究问题的过程, 根据其特性往往可以将其恰当地划分为若干个相互联系的阶段, 以便于求解。表示阶段的量称为阶段变量。假设有活动划分为 A—B, B—C, C—D, D—E, E—F, F—G 六阶段, 若记阶段变量为 k , 则 $k=6$ 即代表 F—G 阶段。

2. 状态和状态变量

状态表示某段的出发位置。它既是该段某支路的始点, 同时也是前一段的终点。通常一个阶段包含着若干状态。

描述过程状态的变量称为状态变量, 它可用一个数、一组数或一个向量来描述, 常用 x_k 表示在 k 阶段的某一状态。一般某阶段的起点不止一个, 或说存在有若干个状态。这样第 k 阶段所有状态就形成一个状态集合 X_k

$$X_k = \{x_k^{(i)}\}$$

3. 决策和决策变量

决策就是在某阶段状态给定以后,从该状态演变到下一阶段某状态的选择。

描述决策的变量称为决策变量。它也可用一个数、一组数或一个向量来描述。常用 $U_k(x_k)$ 表示第 k 段当状态处于 x_k 时的决策变量。在实际问题中,决策变量的取值往往被限制在某一范围内,此范围称为允许决策集合。通常以 $D_k(x_k)$ 表示第 k 段的允许决策集合,则有

$$U_k(x_k) \in D_k(x_k)$$

4. 策略

由过程的第一阶段开始到终点的过程,称为问题的全过程。由每段的决策

$$U_i(x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

组成的决策函数序列 $P_{in}(x_i) = \{U_i(x_i)\} (i = 1, 2, \dots, n)$ 就称为全过程策略,简称策略。

由第 k 段开始到终点的过程称为原过程的后部子过程,其决策函数序列称为 k 子过程策略,简称子策略。实际问题中,可供选择的策略范围称为允许策略集合,动态规划的任务就是从允许策略集合中找到最优效果的最优策略。

5. 指标函数和最优指标函数

在多阶段决策过程中衡量所实现过程优劣的数量指标称为指标函数。它是一个定义在全过程和所有后部子过程上的确定数量函数,常用 $V_{k,n}$ 表示。它可表示为距离、利润、费用、产品、产量或资源的消耗等。以 $d_k(x_k, u_k)$ 表示阶段指标。

指标函数 $V_{k,n}$ 的最优值,称为相应的最优指标函数,记为 $f_k(x_k)$ 。

(二) 最短路线问题及求解方法

如图 2-10 所示,如何选择一条从 A 点到 E 点的污水管线,使得管道铺设总距离为最短(两点连线为可允许铺设线路,连线上数字表示两点间的距离)。

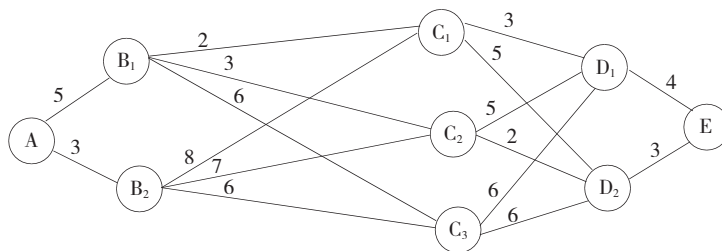


图 2-10 最短路线问题

对此污水管网网络,可视为一多阶段决策问题。从 A 点到 E 点可分为四个阶段:A—B, B—C, C—D, D—E。从 A 出发到 B 为第一阶段,这时可有两种选择:一是将污水管线铺设到 B_1 ,另一是铺设到 B_2 。若选择 A 到 B_2 这条路线,则 B_2 点就是第一阶段决策选择下的结果。它既是这一阶段管线铺设的终点,同时也是下一阶段(B—C 阶段)的起点。在第二阶段,应从 B_2 出发。对应于 B_2 点,则存在一个可供选择的终点集合 $\{C_1, C_2, C_3\}$,如果选择由 B_2 到 C_2 为第二阶段的决策,则 C_2 就是第二阶段的终点,同时它又是第三阶段的起点。类似地递推下去,不难看出,各个阶段的决策不同,所形成的污水管线就会不同。很明显,当某阶段的起始点给定时,它直接影响着后面各阶段污水管线的铺设和整个管线距离的长短,而其后各阶段

路线的发展则不受这点以前各阶段线路的影响。这里所要解决的问题正是上述四阶段中的每一阶段选取一个恰当的决策,使由这些决策组成的策略所确定的污水管线总距离最短。

当然,可以采用穷举的方法找出所有 12 条线路,比较最短者得出问题的解。显然,这样的计算方式是繁琐的,特别是当活动阶段数目很多、各阶段的决策选择也很多时,计算工作量将变得非常庞大,甚至电子计算机都实现不了。与此相反,动态规划的方法则会使计算量大大减少,求解简便。

根据实践经验,启发人们寻求铺设最短污水管线问题的解决思路:先从最后一阶段开始,用由后向前逐步递推的方式,求出 k 阶段, $k-1$ 阶段, … 最后第一阶段到终点的最短污水线路,这也正是动态规划求解多阶段过程问题的基本方法。

下面按照上述思路,对污水管线进行寻优计算。

首先从最后一阶段开始,当 $k=4$ 时,可有两点 D_1 、 D_2 到终点 E ,即存在着两种到达 E 的初始状态。分别考察它们到 E 的最短距离 $f_4(x_4)$,显见如果 $x_4 = D_1$,则从 D_1 到 E 的最短距离是 $f_4(D_1) = 4$,同理, $f_4(D_2) = 3$ 。

向上递推, $k=3$ 即 $C-D$ 阶段,该阶段共有三种状态,允许状态集 $X_3 = \{C_1, C_2, C_3\}$,再计算这阶段从不同三点到终点 E 的最短距离 $f_3(x_3)$ 。

若从 C_1 出发,共有两种允许的选择,即 $D_3(C_1) = \{D_1, D_2\}$ 。因此决策 $U_3(C_1)$ 也只能有两个,分别应是 $U_3(C_1) = D_1$ 和 $U_3(C_1) = D_2$,这时从 C_1 出发的决策选择或说状态转移的阶段效益 $d_3(C_1, D_1) = 3$, $d_3(C_1, D_2) = 5$ 。由于从第 4 阶段各起点状态到终点的最短距离(最优效益 $f_4(x_4)$)已经计算出,所以在第 3 阶段从状态 C_1 到终点 E 的最短距离(最优效益 $f_3(C_1)$)计算,只需将本阶段的阶段效益与其后对应的最优效益相加,比较即可得出,故:

$$f_3(C_1) = \min \left\{ \begin{array}{l} d_3(C_1, D_1) + f_4(D_1) \\ d_3(C_1, D_2) + f_4(D_2) \end{array} \right\} = \min \left\{ \begin{array}{l} 3 + 4 \\ 5 + 3 \end{array} \right\} = 7$$

这就是说,如果从 C_1 铺设污水管到 E 点的话,应选择经 D_1 点,其最优策略 $P_{3,4}(C_1) = \{D_1, E\}$,这时距离最短,长度为 7。

类似地,若从 C_2 出发, $D_3(C_2) = \{D_1, D_2\}$ 。

$$f_3(C_2) = \min \left\{ \begin{array}{l} d_3(C_2, D_1) + f_4(D_1) \\ d_3(C_2, D_2) + f_4(D_2) \end{array} \right\} = \min \left\{ \begin{array}{l} 5 + 4 \\ 2 + 3 \end{array} \right\} = 5$$

所以 $U_3(C_2) = D_2$ 时, $P_{3,4}(C_2) = \{D_2, E\}$,这时最短污水管线是 $C_2 - D_2 - E$,距离为 5。

若从 C_3 出发, $D_3(C_3) = \{D_1, D_2\}$ 。

$$f_3(C_3) = \min \left\{ \begin{array}{l} d_3(C_3, D_1) + f_4(D_1) \\ d_3(C_3, D_2) + f_4(D_2) \end{array} \right\} = \min \left\{ \begin{array}{l} 6 + 4 \\ 6 + 3 \end{array} \right\} = 9$$

所以 $U_3(C_3) = D_2$ 时, $P_{3,4}(C_3) = \{D_2, E\}$,这时最短距离为 9。

这样就计算出了第 3 阶段在不同状态下的最优效益及其相应的策略。

同理, $k=2$ 时, $X_2 = \{B_1, B_2\}$

若从 B_1 出发, $D_2(B_1) = \{C_1, C_2, C_3\}$

$$f_2(B_1) = \min \begin{cases} d_2(B_1, C_1) + f_3(C_1) \\ d_2(B_1, C_2) + f_3(C_2) \\ d_2(B_1, C_3) + f_3(C_3) \end{cases} = \min \begin{cases} 2 + 7 \\ 3 + 5 \\ 6 + 9 \end{cases} = 8$$

所以 $U_2(B_1) = C_2$ 时, $P_{2,3}(B_1) = \{C_2, D_2, E\}$, $f_2(B_1) = 8$

若从 B_2 出发, $f_2(B_2) = 12$, $U_2(B_2) = C_2$, 而 $P_{2,3}(B_2) = \{C_2, D_2, E\}$

$k = 1$ 时, 出发点只有一个 A 点, 它的决策集合为 $\{B_1, B_2\}$, 则对于不同状态的选择:

$$f_1(A) = \min \begin{cases} d_1(A, B_1) + f_2(B_1) \\ d_1(A, B_2) + f_2(B_2) \end{cases} = \min \begin{cases} 5 + 8 \\ 3 + 12 \end{cases} = 13$$

即这一阶段的决策应为 $U_1(A) = B_1$, 对应的策略是 $P_{1,4}(A) = \{B_1, C_2, D_2, E\}$ 。至此, 已将污水管线铺设的最短路线问题计算完毕。由定义符号可知, 当按照 $A - B_1 - C_2 - D_2 - E$ 线路布设污水管线, 其总距离最短, 长度为 13。

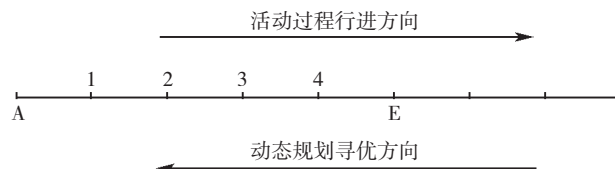


图 2-11 动态规划寻优

总结上述计算过程, 可看出: 在解决污水管线铺设问题时, 使按照图 2-11 所示顺序, 利用了 k 阶段与 $k+1$ 阶段的下述关系:

$$\begin{cases} f_k(x_k) = \min\{d_k(x_k, U_k) + f_{k+1}(U_k)\}, k = 1, 2, \dots, 6 \\ f_0(G) = 0, (\text{或 } f_1(x_1) = d_1(x_1, G)) \end{cases} \quad (2-40)$$

这一递推关系也称为动态规划的函数基本方程。

以上对最优化技术和系统分析的基本内容进行了简要介绍, 这两部分的内容都在不断发展中, 因此为了了解更新的内容, 可以查阅相关的书刊文献。

参 考 文 献

- [1] 程声通, 陈毓玲. 环境系统分析. 北京: 高等教育出版社, 1990
- [2] 韦鹤平. 环境系统工程. 上海: 同济大学出版社, 1993
- [3] 顾培亮. 系统分析与协调. 天津: 天津大学出版社, 1998
- [4] 郑大素, 江允正. 最优化方法及实用程序. 哈尔滨: 哈尔滨工程大学出版社, 1997
- [5] 任善强, 雷鸣. 数学模型. 重庆: 重庆大学出版社, 1996
- [6] 甘应爱, 田丰, 李维铮等. 运筹学. 北京: 清华大学出版社, 1990

第三章 水质模拟

对水环境系统开展规划管理、进行污染综合防治等方面的工作,不可缺少的一项基础性工作就是对水环境质量的变化趋势进行模拟、预测,从而为决策者提供进行规划管理、制定综合防治措施的基础资料。另一方面,无论是对连续的或突发性的排污进行水质影响的描述和评价,还是对开发建设的工程项目进行水环境质量的预测评价,也无论在制订区域水污染控制系统规划或进行污染控制的系统分析,还是在制订地区水污染物排放标准或确定水体各排污口的容许排污量和削减率,以减轻水环境系统的污染程度等过程中,都涉及到水环境质量在空间和时间上的变化问题,也即需要解决水质的定量预测问题。因此,对水质进行定量模拟和预测已经越来越受到环境工作者和决策制定者的关注。

前已述及,对水环境系统进行模拟一般有物理模拟和数值模拟两大类方法。虽然物理模拟较为直接、形象,但往往要消耗较多的人力、物力和财力,而且在模拟水质方面还难以达到相当的真实性和准确性。而数值模拟与其他形式的模拟相比,它不需要过多的专门设备和工具,因此可以节省大量的试验费用。现代计算机技术的高速发展,又使数值模拟的运算速度和精度有了很大提高,同时数值模拟可以在一个受控的环境中进行各种状态及其影响因素的考察,从而使研究者在深度和广度上取得更有意义的模拟和预测数据。数学模拟本身所具有的灵活性也远胜于物理模拟方法,它可以根据各种各样的需要和可能性作出多方案的模拟和比较,为决策者提供大量的信息和多种选择的可能。

第一节 概 述

水环境系统从大的方面分为两大组成部分:地表水环境系统和地下水环境系统。本节将分别介绍地表水的水质过程和污染物在地下水环境系统的各种作用。

一、地表水环境系统水质过程的分析^{[1][2][3][4]}

根据污染物在水环境中输移、衰减(降解)的特点以及它们的预测模式,一般可以将污染物分为四大类。

1. 持久性污染物 指所有在水环境中难降解、毒性较大,以及长期积累的有毒物质,例如重金属、芳香烃类有机物等。

2. 非持久性污染物 指在水环境中能通过自身衰变能力衰减的放射性物质和在微生物作用下可较迅速被生化降解的有机物类物质。

3. 酸碱类物质 该类物质可能会改变水环境系统的 pH 值。

4. 可引起热污染类物质 比如某些较高温度的废水、冷却水等,可改变水环境系统的温度。

在建模的准备阶段,进行水质调查时常选择的水质参数一般包括两类:一类是常规的水质参数,这类参数可反映水环境系统水质的一般状况;另一类是特征水质参数,它能代表建

设项目未来排放的水质特征。

常规水质参数以 GB3838 中所提出的水温、pH 值、悬浮物(SS)、溶解氧(DO)、生化需氧量(BOD)、化学需氧量(COD)、总氮或氨氮($\text{NH}_3\text{-N}$)、挥发酚、石油类、氰化物、总磷、总镉(Cd)、总砷(As)、总汞(Hg)、六价铬(Cr^{6+}) 等为基础,根据水环境系统类别、评价等级、污染源状况进行适当的删减。

地表水与地球上的其他圈层的交互作用最为直接和显著,具有明显的地带性和节律性。因此地表水的水质也受着多方面因素的影响,虽然不同的水体各具特性,但也存在着很多共性,所以在建立具体的水质模型时可以根据当地水体的特性对共性模型进行修正。

对地表水水质产生影响的过程可分为物理过程、生化过程和水体的耗氧与复氧。

(一) 物理过程

物理过程主要是指污染物在水体中的混合、扩散稀释、输移、沉淀、悬浮、吸附、解吸、挥发等对污染物的分布形式有影响但对污染物的总量不产生影响的过程。

在水质基本模型的建立过程中,为使模型简化易解,通常认为污染物与水可以互溶并具有与水相同的水力学特性,这样的假设就暂不考虑沉降、悬浮、吸附、解吸、挥发等作用对水体中污染物的影响。在水质基本模型中,物理过程中的输移与扩散项是影响污染物时空状态的主要因素,而其他的则作为源汇项在实际应用时对水质基本模型进行修正。

在第一章中已经介绍了污染物的输移、扩散等的数学模型,而沉淀、悬浮(或再悬浮)、吸附等的影响则在基本的模型基础上相应引入沉降系数、悬浮系数(或再悬浮系数)、吸附系数等项进行修正即可。

(二) 生化作用

污染物进入水体后,在水体中各种微生物作用下会产生一系列生物化学反应,这样就可以使一些有机污染物得到氧化分解而逐步降解或转化为较简单的分子;但同时也会使水环境系统中的溶解氧不断消耗。如果排入过量的污染物,水体中的溶解氧将会很快消耗,当溶解氧消耗殆尽时将会导致鱼类甚至原生动物死亡、细菌大量繁殖,从而使水质恶化、生态环境遭到破坏。

一般有机物在好氧细菌的作用下,在水体中发生的生物化学降解过程可用图 3-1 表示。

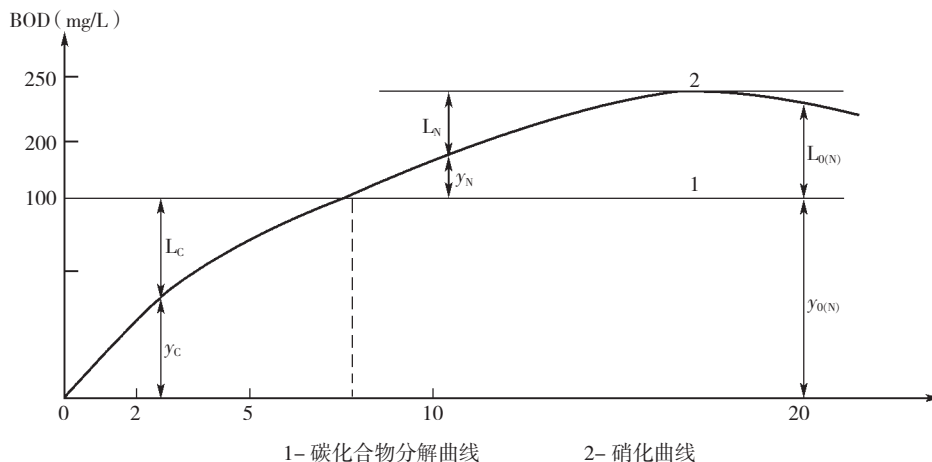


图 3-1 有机物(BOD) 的氧化分解曲线

在水体中,首先是含碳的有机化合物发生氧化分解(以 CBOD 表示),如曲线 1,然后是含氮的有机化合物发生氧化分解(以 NBOD 表示),如曲线 2。前者是好氧性细菌对碳化合物的氧化,后者(一般又称为硝化阶段)是兼氧和厌氧菌对氮的氧化。以主要考虑碳质 BOD 去除的活性污泥处理厂出水为例,硝化菌的作用开始是被抑制的,几乎一直到含碳氧化过程末期硝化细菌才开始占优势。因此一般在 10 天左右才进入第二阶段的氧化分解——硝化反应。而对于 BOD 浓度较低的河流,有机污染物一进入河中,硝化作用则会马上发生。

生化反应常常包括一系列复杂的中间反应,而 BOD 又是以混合的和种类不确定的有机物进行测定的,因此通常将有机物由于生物降解所产生的浓度变化用一级反应式来表示,即假定 BOD 的降解近似于下式:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (3-1)$$

得到其解析式为:

$$L = L_0 \exp(-K_1 t) \quad (3-2)$$

其中: L —— t 时刻的含碳有机物的剩余生物化学需氧量(BOD), $[M \cdot L^{-3}]$;

L_0 ——初始时刻的含碳有机物的总生物化学需氧量(BOD), $[M \cdot L^{-3}]$;

K_1 ——含碳有机物的降解速度常数,也称为耗氧系数, $[T^{-1}]$ 。

K_1 的数值是温度的函数。它和温度之间的关系可以表示为:

$$\frac{K_{1,T}}{K_{1,T_1}} = \theta^{T-T_1} \quad (3-3)$$

若取 $T_1 = 20^\circ\text{C}$,以 $K_{1,20}$ 为基准,则任意温度 T 的 K_1 值为:

$$K_{1,T} = K_{1,20} \theta^{T-20} \quad (3-4)$$

式中 θ 称为 K_1 的温度系数, $\theta = 1.02 \sim 1.06$,一般取 1.047 左右($T = 10^\circ\text{C} \sim 35^\circ\text{C}$)。在实验中测定 BOD 和时间的关系,可以估计 K_1 的值。

对 K_1 的测定经常使用实验室测定法,但在实验室里的耗氧过程在很大程度上依赖于水样中偶然捕获的微生物群落种类,因此确定的 K_1 值常与实际水体如河流等的 K_1 值不同。Bosko 得出了在实验室里测定的 $K_{1,L}$ 与河流里的实际耗氧速度 $K_{1,R}$ 之间的一个关系:

$$K_{1,R} = K_{1,L} + n_a \frac{u}{H} \quad (3-5)$$

其中: u ——河流流速, $[m/s]$; H ——平均水深, $[m]$;

$K_{1,L}, K_{1,R}$ ——分别为实验室测定的耗氧系数和河流中的耗氧系数, $[d^{-1}]$;

n_a ——河床的活度系数(Coefficient of river bed activity),见表 3-1。

一般 BOD 实验的相对误差较大,重现性也不好。COD 是一种较容易测定的指标,然而 COD 和氧的饱和浓度之间没有像 BOD 与氧之间那样的直接关系,故在关

表 3-1 河床活度系数

河流坡度 (m/km)	河床活度系数 n_a
0.47	0.10
0.95	0.15
1.89	0.25
4.73	0.40
9.47	0.60

于氧的模型中仍使用 BOD 指标。一般在以后所讲的 K_1 都是指实际水体如河流的耗氧系数。

(三) 水体中的耗氧与复氧过程

当污染物进入水环境系统后,随着污染物在水体中的迁移转化过程,水体中的溶解氧主要通过以下一些过程被不断消耗掉。

- (1) 水体中含碳化合物的氧化分解引起耗氧。
- (2) 水体中含氮化合物的氧化分解引起耗氧。
- (3) 进入水体中的其他还原性污染物或还原性物质引起水体的耗氧。
- (4) 底栖动物和沉淀物质的耗氧。

河床底泥耗氧是由返回到水中的底泥耗氧物质和底泥顶层耗氧物质的氧化分解引起的。一般底泥很容易造成缺氧环境,底泥中的有机物在缺氧条件下发生厌氧分解,产生有机酸和甲烷、二氧化碳、氨等气体,当这些物质释放到水体中时,将消耗水体中的溶解氧而造成环境缺氧。

目前,对于底泥耗氧的机理尚未完全阐明,费尔(Fair)用阻尼反应来表达底泥的耗氧速度:

$$\left(\frac{dC}{dt}\right)_d = -\frac{dL_d}{dt} = -(1+r_c)^{-1} K_b L_d \quad (3-6)$$

其中: L_d ——河床的 BOD 面积负荷; K_b ——河床的 BOD 耗氧速度常数;

C ——水体中的溶解氧;

r_c ——底泥耗氧的阻尼系数。底泥耗氧速度常数是温度的函数,温度修正系数的常用值为 $1.072(5-30^\circ\text{C})$ 。

- (5) 水生植物(藻类)的呼吸作用。

晚间光合作用停止时,水生植物(如藻类)因呼吸作用而消耗水体中的溶解氧。通常把藻类呼吸耗氧速度看作常数,即

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_r = -R \quad (3-7)$$

在一般情况下, R 的值在 $0 \sim 5\text{mg}/(\text{l} \cdot \text{d})$ 之间。光合作用的产氧速度和呼吸作用的耗氧速度可以用黑白瓶试验求得。

试验在白天进行,将水体水样分散在两个密封的碘量瓶中,其中一个用黑幕罩住,同时置入河水中。黑瓶用以模拟黑夜的呼吸作用,白瓶模拟白天的呼吸作用和光合作用。根据两个瓶中的溶解氧在试验周期中的变化,可以写出黑瓶和白瓶的氧平衡方程。

$$\text{对于白瓶:} \quad \frac{24(C_1 - C_0)}{\Delta t} = P - R - K_c L_0 \quad (3-8)$$

$$\text{对于黑瓶:} \quad \frac{24(C_2 - C_0)}{\Delta t} = -R - K_c L_0 \quad (3-9)$$

其中: C_0 ——试验开始时水样的溶解氧浓度(mg/l);

C_1, C_2 ——试验终了时白瓶中的水样和黑瓶中的水样的溶解氧浓度(mg/l);

K_c ——在试验温度下得 BOD 降解速度常数(d^{-1});

Δt ——试验延续的时间(h); L_0 ——试验开始时水体 BOD 值(mg/l)。

求解式(3-8)、(3-9),可以得到水体中的光合作用产氧速度 P ($\text{mg/l} \cdot \text{d}$) 和呼吸耗氧速度 R ($\text{mg/l} \cdot \text{d}$)。

水体中的溶解氧主要来自如下几方面。

- (1) 上游水体或潮汐河段海水带来的溶解氧。
- (2) 排入水体的废水所带来的溶解氧。
- (3) 大气复氧。

大气中的氧向水体中扩散溶解,这是目前水体中溶解氧的主要来源。氧气从大气进入水中的质量传递速度可以表示为:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{K_L A}{V} (C_s - C) \quad (3-10)$$

其中: C —— 水体中的溶解氧浓度, $[\text{M} \cdot \text{L}^{-3}]$;

C_s —— 水体中饱和溶解氧的浓度, $[\text{M} \cdot \text{L}^{-3}]$;

K_L —— 质量传递系数, $[\text{L} \cdot \text{T}^{-1}]$;

A —— 气体扩散的表面积, $[\text{L}^2]$;

V —— 水的体积, $[\text{L}^3]$ 。

对于河流, $A/V = 1/H$, H 是平均水深, $(C_s - C)$ 表示河水中的溶解氧不足量,称为氧亏,一般用 D 表示,则(3-10) 可以写为:

$$\frac{dD}{dt} = -\frac{K_L}{H} D = -K_2 D \quad (3-11)$$

其中: K_2 —— 大气复氧速度常数,也称复氧系数, $1/\text{d}$ 。

K_2 是水体流态和温度等的函数。如果以 20°C 为基准,则任意温度时的大气复氧速度常数可写为:

$$K_{2,T} = K_{2,20} \theta'^{T-20} \quad (3-12)$$

其中: θ' 称为 K_2 的温度系数, $\theta' = 1.015 \sim 1.047$,一般取 1.024 左右。

欧康那(D. O'Conner) 和多宾斯(W. Dobbins) 在 1958 年提出了根据河流的流速、水深计算大气复氧速度常数的方法,其一般形式为:

$$K_2 = c \frac{u^n}{H^m} \quad (3-13)$$

其中: u —— 河流的平均流速(m/s);

H —— 河流的平均水深(m)。

式(3-13) 中的 K_2 的单位是 d^{-1} (20°C)。很多研究者对其中的参数 c 、 n 、 m 进行了研究。

(4) 光合作用

水体中繁殖的光合自养型水生植物(如藻类) 白天通过光合作用释放出氧气溶解于水中,这是水体溶解氧的另一个重要来源。欧康那假定光合作用的速度随着光照强弱的变化而变化,中午光照最强时,产氧速度最快;夜晚没有光照时,产氧速度为零。

欧康那假定光合作用产氧满足下列的速度规律:

$$p_t = p_m \sin\left(\frac{t}{T}\pi\right), \text{对 } 0 \leq t \leq T \quad (3-14)$$

$$p_t = 0, \text{对其余时间}$$

其中: T ——白天发生光合作用的持续时间, 如 12h;

t ——光合作用开始以后的时间;

p_m ——一天中最大的光合作用产氧速度, 其值随水体条件变化很大, 对河流而言, 其范围在 $0 \sim 30\text{mg/l} \cdot \text{d}$ 之间。

对于一个时间平均模型, 可以将产氧速度取为一天中的平均值, 即产氧速度值为一常数:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_p = P \quad (3-15)$$

其中: P ——一天中产氧速度的平均值。

图 3-2 表示的是水体中的耗氧与得氧的途径。

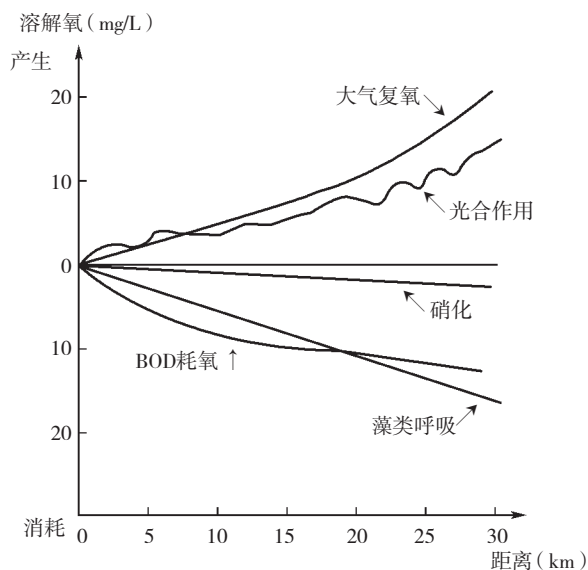


图 3-2 水体的耗氧与得氧

二、污染物在地下水系统中的物理、化学及生物作用^{[2][5]}

随着工农业的发展, 环境的污染日趋严重, 地下水也受到不同程度的污染。为了寻找优质地下水及防止地下水的污染, 需要对地下水的形成和污染的成因、过程等相关因素进行研究。

污染物在地下水系统中的迁移、转化过程是复杂的, 是物理、化学及生物综合作用的结果。地表的污染物进入含水层时, 一般都要经过表土层及下包气带, 而表土层和下包气带对污染物不仅有输送和储存功能, 而且还有延续或衰减污染的效应。实际上由于污染物经过表土层及下包气带时, 产生了一系列的物理、化学和生物作用, 使一些污染物降解为无毒无害的组分; 一些污染物由于过滤吸附和沉淀而截留在土壤里; 还有一些污染物被植物吸收或合

成到微生物体内,结果使污染物浓度降低,这称为自净作用。但是,污染物在上述过程中,还可能发生与自净作用相反的现象,即有些作用会增加污染物的迁移性能,使浓度增加;或从一种污染物转化成另一种污染物,如污水中的 $\text{NH}_3\text{-N}$,经过表土层及下包气带中的硝化作用会变成 $\text{NO}_3\text{-N}$,使得 $\text{NO}_3\text{-N}$ 浓度增高。

(一) 物理、化学作用

1. 机械过滤和稀释

机械过滤作用主要取决于土壤介质的性质和污染物颗粒的大小。一般土壤粒径愈小,过滤效果愈好。过滤效果主要是去除悬浮物,其次是细菌。此外,一些主要组分的沉淀物如 CaCO_3 、 CaSO_4 等,一些次要及微量组分的沉淀物如 $\text{Fe}(\text{OH})_3$ 、 $\text{Al}(\text{OH})_3$ 以及有机物如粘土絮凝剂也可被去除。在松散的地层中,悬浮物一般在 1m 内即能被去除,而在某些裂隙地层中,悬浮物有时可迁移几公里。在砂土中,过滤对细菌的去除无效,而在粘土或粉土地层中,或含粘土或粉土地层中,过滤对细菌的去除是有效的,而对病毒无效或效果很差。但当细菌和病毒附着在悬浮物中,这样过滤可有效地去除细菌和病毒。

影响过滤的因素很多,如水动力学作用、分子扩散、沉积作用等运移过程以及范德华力、电作用力等截留因素和有关化学过程。因此,要精确地表示过滤过程是很困难的,目前一般都是利用质量守恒和考虑运动学定律来描述固体物质的总过滤过程。对于单位体积孔隙介质质量所截留的物质以下式表示:

$$-\frac{dC}{dZ} = \frac{1}{v_f} \cdot \frac{dm_v}{dt} \quad (3-16)$$

其中: m_v ——单位孔隙介质体积所截留的物质质量, $[\text{M} \cdot \text{L}^{-3}]$;

Z ——过滤长度, $[\text{L}]$; t ——时间, $[\text{T}]$;

C ——固体浓度, $[\text{M} \cdot \text{L}^{-3}]$; v_f ——渗透速度, $[\text{L} \cdot \text{T}^{-1}]$ 。

对于最初无积累或沿渗滤长度均匀积累的过滤介质,固体物质浓度的沿程变化可表示为:

$$-\frac{dC}{dZ} = \lambda \cdot C \text{ 或 } C = C_0 \exp(-\lambda Z) \quad (3-17)$$

其中: C_0 ——进入过滤介质的固体物质浓度, $[\text{M} \cdot \text{L}^{-3}]$;

λ ——过滤介质参数。

孔隙介质所截留的固体物质,最初起着有利于过滤的作用,但随着时间的延长,则可能堵塞孔隙通道使渗透能力减弱,而且还可能由于化学过程和生物过程加剧堵塞现象。当污水与地下水相混合时,或当雨水下渗通过包气带补给地下水时,或污染物在含水层中产生弥散作用时,均会产生稀释作用,它可使地下水中污染物浓度降低,但这并不意味着污染物已被去除。

2. 物理吸附

土壤介质特别是土壤中的胶体颗粒具有巨大的表面能,它能够借助于分子引力把地下水中的某些分子态的物质吸附在自己的表面上,这种吸附称为物理吸附。物理吸附具有下列特征:

(1) 吸附时土壤胶体颗粒的表面能降低,是放热反应。

(2) 吸附基本上不具选择性,即对于各种不同的物质,只不过是分子间力的大小有所不同,分子引力随分子量的增加而加大;对于同一系列化合物,吸附随分子量的增加而增加。

(3) 不产生化学反应,因此不需要高温。

(4) 由于热运动,被吸附的物质可以在胶体表面做某些移动,亦即解吸。

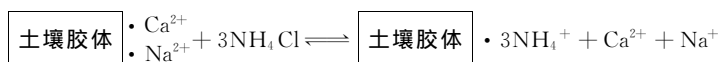
基于上述特征,凡是能降低表面能的物质,如有机酸、无机盐等,都可以被土壤胶粒表面所吸附,称为正吸附;能够增加表面能的物质,如无机酸及其盐类——氯化物、硫酸盐、硝酸盐等,则受土壤胶粒的排斥,称为负吸附。此外,土壤胶粒还可吸附 H_2 、 NH_3 和 CO_2 等气态分子。

3. 物理化学吸附(离子代换)

土壤胶体带有双电层,其扩散层的补偿离子可以和地下水中同电荷的离子进行等当量代换,这是一种物理化学现象,故称物理化学吸附,亦称离子代换吸附。它是土壤中吸附污染物的主要方式。土壤中的离子代换吸附作用分为如下两种。

(1) 土壤中的阳离子代换吸附作用

土壤胶体一般带负电,所以能够吸附保持阳离子,其扩散层的阳离子可被地下水中的阳离子代换出来,故称为代换吸附,其反应式如下:



当离子交换达到平衡状态时,可用下列数学表达式:

$$C_0 - C = K \left(\frac{C}{C_0 - C} \right)^{\frac{1}{p}} \quad (3-18)$$

其中: C_0 ——初始阳离子浓度(mg/L); C ——平衡时阳离子浓度(mg/L); K 、 $1/p$ 均为常数。

土壤阳离子吸附作用具有以下特征:① 是一种能迅速达到动态平衡的可逆反应,离子代换速度虽因胶体种类而异,但在数分钟内即达到平衡;② 阳离子的代换是等当量代换。

所谓离子代换能力,是指一种阳离子将另一种阳离子从胶体上取代出来的能力,其强弱取决于:

① 电荷价:根据库仑定律,离子的电价愈高,受胶体电性的吸引力愈大,因而离子代换能力亦愈强。

② 离子半径及水化程度:同价离子中,离子半径愈大,代换能力愈强。因为在电荷价相同的情况下,离子半径较大,单位面积上电荷量较小,电场强度较弱,对水分子的吸引力即水化力弱,离子外围的水膜薄,受到胶体的吸力就较大,因而具有较强的代换能力。

③ 离子浓度:代换作用受质量作用定律支配。代换力弱的离子,在浓度较大的情况下,也可代换出低浓度的代换力强的离子。

土壤阳离子的代换量(CEC)是指单位质量土壤吸附保持阳离子的最大数量,通常用 meq/kg 土表示。应当注意,阳离子吸附容量与重金属的土壤容量不是同一概念,后者是指在发生污染危害之前土壤重金属含量的最高值,它主要取决于各种重金属元素的毒性大小及其在土壤中有有效浓度的高低。而土壤阳离子代换量的大小取决于土壤负电荷数量的多少。单位质量土壤负电荷愈多,对阳离子的吸附量亦愈大。土壤胶体的数量、种类和土壤 pH 值三

者共同决定土壤负电荷的数量。因此,土壤质地越粘、有机质含量越高、土壤的 pH 值愈大,土壤的负电荷数量就愈大,阳离子的代换量也就愈大。

(2) 土壤中阴离子的代换吸附作用

对于阴离子吸附起作用的是带正电的胶体,它比阳离子代换吸附作用要弱得多。阴离子代换吸附作用也是可逆的反应,能很快达到平衡,平衡的转移也受质量作用定律支配。但是,土壤中阴离子代换吸附常常与化学吸附作用同时发生,两者不易区别清楚,所以相互代替的离子之间没有明显的当量关系。各种不同的阴离子,其代换能力亦有差别。

土壤阴离子代换量与粘土矿物成分和土层反应有关。含水氧化铁、铝的阴离子代换量在土壤溶液 pH 值为 5 时,可达 100meq/100g 土,高岭石含量高的土壤,阴离子代换量亦较大。阴离子代换量随着土壤 pH 值的升高而降低,并在某一 pH 值时会出现负吸附。

4. 化学吸附

化学吸附是土壤颗粒表面的物质与污染物质之间,由于化学键力发生了化学作用,使得化学性质有所改变。原来在土壤溶液中的可溶性物质,经化学反应后可转变为难溶性化合物的沉淀物。因为在地下水中常含有大量的氯离子、硫酸根离子、重碳酸根离子等阴离子和硫化氢等还原性物质,所以,一旦有重金属污染物进入,在一定的氧化—还原电位和 pH 值条件下,则可产生相应的氢氧化物、硫酸盐或碳酸盐而发生沉淀现象。此外,还可能有石灰吸附空气中的 CO_2 ,形成 CaCO_3 沉淀及锌粒吸附污水中的汞形成锌汞齐合金等。

沉淀析出的盐类,在 pH 值和氧化还原电位改变时,还可能再溶解。这将会影响水动力学过程,从而间接影响水动力过程制约的其他形式的去除作用。同时,沉淀会形成新的吸附面积,溶解则会减少吸附面积,所以沉淀过程会影响吸附性能。

化学吸附的特点是:吸附热大;吸附有明显的选择性;化学键大时,吸附是不可能的。

5. 沉淀和溶解

污染物在包气带及含水层中迁移时,其浓度常常受某些难溶化合物溶解度的控制。如果其离子活度积大于溶度积,便产生沉淀,从而降低污染物浓度。越容易生成难溶盐沉淀的污染成分,其迁移能力也越小。在研究溶解度对污染物浓度的控制时,一般只考虑难溶盐(即溶解度小于 1g/L 的盐类)。难溶盐的沉淀除受溶度积控制外,还与 pH 值、氧化还原条件等密切相关,除了与无机络合离子(如离子对)有关外,还与有机络合离子(螯合物)有关。

在总溶解固体浓度大的地下水中,即在离子强度大于 0.1,或者比 0.1 小得多的地下水中,常常出现络合组分。这些络合组分可被看作是热力学上的统一体,而且它们与自由离子处于动平衡状态。络合是中心原子的阳离子与阴离子或分子的结合,如 CaCO_3^0 、 CaHCO_3^+ 等。无论是无机络合还是有机络合,都可能改变某些化合物的溶解度。例如,在土壤水中,与富里酸、柠檬酸等形成的络合物是易溶的,它们可增加某些化合物的溶解度;而与腐殖酸形成的螯合物是难溶的,它们可降低某些化合物的溶解度。腐殖酸的总键合能力是比较大的,每 100g 的腐殖酸约键合 200—600meq 金属,所键合的阳离子是不可逆的并与腐殖酸固定在一起,具有这种键合性质的阳离子约占其键合能力的 2/3。因此,富里酸的存在,可增加某些组分的迁移能力;而腐殖酸则降低某些组分的迁移能力。

6. 氧化—还原反应

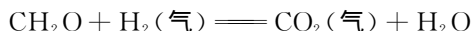
地下水系统中有不少元素具有多种氧化态,氧化还原反应直接影响其迁移性能。具有多种氧化态的元素主要有 N、S、Fe、Mn、Cr、Hg、As 等。即使有些只有一种氧化态的元素(如

Cu、Pb、Cd、Zn),其迁移性能也明显地受氧化还原条件的影响,只是影响程度较小。

在饮用水水质标准所规定的组分中,根据浅层的地下水所具有的 pH—Eh,可知最易迁移的组分是 Cr、As、Se。在氧化条件下,在具有正常的 pH 值的浅层水中,Cr 和 As 以一价或二价阴离子形式存在,Se 的情况也如此,Eh 很低时才产生难溶的硫化物沉淀,而在氧化条件下,其迁移不受溶解度的控制。在化学上常用 pH—Eh 图判断氧化还原条件,虽然 pH—Eh 图对各种元素在不同的 pH—Eh 条件下的迁移能力提供一个总的情况,但并不能直接利用它们来预测地下水中污染物的迁移能力。因为要把 pH—Eh 图直接应用于鉴别各种污染物的迁移性能,就必须准确地测定 pH 和 Eh 值;此外,地下水中的细菌也得查清,因为细菌对氧化还原往往影响很大。但是,由于很难准确地测定地下水系统中的 Eh 值,同时缺乏细菌的定量数据,所以很难应用 pH—Eh 图定量地确定地下水污染系统中某组分的存在形式及其迁移性能。

在固体废物堆放地点下受污染的地下水中,往往具有很低的氧化还原电位,属还原条件,而其周围未被污染的地下水,则具有较高的氧化还原电位。

O₂ 在水中的溶解度低(25℃ 为 9mg/L,5℃ 为 11mg/L),又因为地下环境中的 O₂ 补给受限制,所以只要有少量有机质存在就能耗尽地下水中的溶解氧。有机质的氧化反应如下(以最简单的碳水化合物 CH₂O 代表有机物):



据质量守恒关系算得,只要 8.4Mg/L CH₂O 被氧化,就能消耗 9mg/L 的 O₂,这样水中的溶解氧就被耗尽了。但是,即使地下水中的氧全部被耗尽,仍然可产生有机质的氧化,这时的氧化剂是地下水中的 SO₄²⁻、NO₃⁻、Fe(OH)₃ 等。

7. pH 值的影响(酸碱反应)

地下水污染系统的 pH 值对污染物的迁移有明显的影响,由于 pH 值的变化,可能引起某些污染物的沉淀,同时也可能引起某些污染组分的吸附,从而降低这些组分的迁移能力。

由于一般地下水均含有定量的溶解 CO₂ 和 HCO₃⁻ 而组成了一个缓冲系统,使得天然地下水的 pH 值一般多在 6~9 之间。pH 值很高的地下水,通常是碳酸钠含量高的地下水;pH 值很低的地下水通常是酸性矿山排水,这是硫化物氧化成硫酸盐,而硫酸盐进一步溶解的结果。当有酸性污染水或酸雨渗入含水层时,地层中碳酸盐及硅酸盐的溶解可起到明显的缓冲作用,使 pH 值升高。据地下水系统的碳酸平衡原理,随着碳酸盐的溶解,水中的 HCO₃⁻ 和 pH 值增加。同样,硅铝酸盐溶解消耗水中的 H⁺,结果使水中增加 Ca²⁺、Mg²⁺、Na⁺ 和 K⁺,同时 pH 值和 HCO₃⁻ 也上升。

因此,酸性废水或酸雨的入渗不一定会引起地下水的 pH 值降低,它可能溶解地层中某些矿物,增加其迁移能力;同时,如产生碳酸盐及硅铝酸盐的溶解,也可能使 pH 值升高,有利于某些金属离子形成氢氧化物或碱式盐沉淀。

8. 化学降解

化学降解是一些污染物在没有微生物参加情况下的分解。一般来说,化学降解是针对有机物而言的。有机物通过化学降解可以转变为另一种形式,如毒性小或无毒的形式。例如,某些农药(包括马拉硫磷、丁烯磷、莠去津、敌草隆等)通过化学降解强烈地被消耗。当然,在酸性土壤里,所产生的化学脱氮作用(无微生物参加的化学还原)去除 NO₃⁻ 的过程也属于化

学降解。

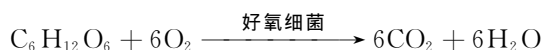
除上述化学作用外,光分解也是一种减少污染物迁移的化学作用。光辐射到地面上,可使一些有机污染物变为无毒形式。目前资料证明能进行光分解的有机物有三氯化物、五氯酚、异狄氏剂、杀扑磷等。

(二) 生物作用

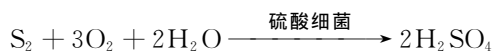
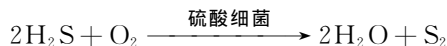
1. 微生物作用产生的降解和转化过程

实践早已表明,无论是在包气带土壤中还是埋藏不深的潜水中,甚至 100m 或更大深度的地下水中,都有微生物在活动,而且在零下几十度和零上 85 ~ 100℃ 的不同温度的地下水中,微生物都能繁殖。微生物的种类包括细菌、放线菌、真菌和寄生虫。在污水灌溉或使用其他固体废物(如污泥等)和有机农药、化肥的土壤里,以及受污染的地下水中,其有机污染物可作为微生物的碳源和能源,微生物在消耗有机物的同时,其群体密度亦在增大。因此,地下水污染系统中,在微生物参与下可使有机物降解或向无机物转化。

所谓微生物降解,是指复杂的有机物(大分子有机物)通过微生物活动使其变成简单的产物(CO_2 、 H_2O 等),如糖类在好氧条件下的降解:



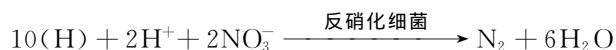
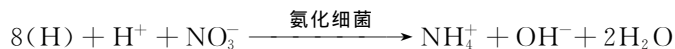
无机物的转化是指一种形式的无机物通过微生物的活动,使其转化为另一种形式的无机物。在好氧的地下水系统中,能使 H_2S 氧化成硫酸:



如果地下水系统中同时有碳酸盐存在,则可生成硫酸盐沉淀析出:



无论是有机物的降解还是无机物的转化,都可在较深的地下水系统中的厌氧条件下通过厌氧细菌进行,只是降解速率要比好氧条件下较小而已。在厌氧环境里,微生物可通过还原含氧的化合物(特别是 NO_3^- 、 SO_4^{2-}) 获得所必需的氧。所以,不含氧、水解常数小的有机物(如卤代烃类)在地下水系统中的厌氧条件下难降解,而含氧的有机化合物(如乙醇、乙醚及脂类等)相对较易降解,如在厌氧条件下氨化和反硝化细菌的转化过程为:



2. 生物积累和植物摄取

(1) 生物积累

生物积累是指地下水中的污染物被有机体吸收。这是一种消除地下水有害物质的的重要因素,但如果生物中积累的微量元素超过一定浓度时,则可能产生毒害作用而使生物从繁殖生长状态转化为死亡状态,于是,原先积累在生物体中的物质则可能重新释放。

在水生生物中,通常用一个富集系数 f_A 来表示生物积累程度,即

$$f_A = \frac{C_{org}}{C_W} \left(\frac{\text{mg/kg}}{\text{mg/L}} \right) \quad (3-19)$$

其中: C_{org} 和 C_W 分别表示所讨论的物质在有机体和周围水体中的浓度。

(2) 植物摄取

某些污染物可作为植物的养分被植物根系吸收,由于植物生长过程的不断摄取,使一部分污染物被去除。植物易摄取的有 N、P、K、Ca、Mg、S、Fe、B、Cu、Zn、Mo、Ni、Mn 以及某些农药。

第二节 地表水水质模拟

地表水环境系统包括的水体很广泛,大到海洋、小到小河,既包括自然水体也包括人工修建的水库等。目前对地表水各水体的研究深度不同,研究得最早也最完善的水体是与人们生活密切相关的河流水环境系统。本节将重点介绍河流水质模型,同时还将介绍其他地表水体,包括河口、湖泊与水库、近海水域等的水质模型。

一、河流水质模型

河流作为地球上分布最广泛的一种水体,其显著的特点就是在三维空间尺度上存在着巨大的差异,并且沿程的水文条件一般变化较大。确定性基本模型都是建立在均匀流场假设基础上的,而从河流全程这一宏观角度看,几乎找不到一条可称得上是均匀流场的河流。因此,就要把河流进行分段,使每一河段尽量满足流态稳定这一基本条件,分别建立单一河段的水质模型,再将各河段模型通过质量平衡原则联系起来,这样就可以组建整条河流的水质联立模型。

用于水质评价的常规水质参数很多,从水质组分看,有机污染物是一种典型的水体污染物,而综合反应耗氧有机物的 BOD—DO 模型具有普遍的重要意义,也是较成熟的模型。

(一) 单一河段水质模型^{[2][3][4][6]}

在所研究的河段内只有一个排放口时,称该河段为单一河段。在研究单一河段时,一般把排放口置于河段的起点,即定义排放口处的纵向坐标 $x = 0$;上游河段的水质视为河流水质的本底值。单一河段的模型一般都比较简单,是研究各种复杂模型的基础。

1. Streeter—Phelps 模型

1925 年,斯特里斯(H. Streeter) 和菲尔普斯(E. Phelps) 建立了第一个描述河流水质的模型,S—P 模型,它是第一个真正意义上的水质模型,被广泛地应用于河流水质的模拟预测中。

S—P 模型是在以下几个基本假设基础上建立的:

(1) DO 浓度仅取决于 BOD 反应与复氧过程,并认为有厌氧微生物参与的 BOD 衰变反应符合一级反应动力学;

(2) 水中溶解氧的减少是由于含碳有机物在 BOD 反应中的细菌分解引起,与 BOD 降解有相同速率;

(3) 由于氧亏和湍流而引起复氧,复氧速率与水中氧亏成正比。

由以上假设得出的模型方程是:

$$\frac{\partial L}{\partial t} + u \frac{\partial L}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - K_1 L \quad (3-20)$$

其中: L, C ——河水中的 BOD、DO 浓度, $[M/L^3]$;

u ——河水流速, $[L/T]$;

C_s ——河水中饱和溶解氧浓度, 与温度有关, $[M/L^3]$;

D_x ——弥散系数, $[L^2/T]$;

K_1, K_2 ——河水中 BOD 降解速度常数, 复氧速度常数, $[T^{-1}]$ 。

在考虑弥散时的稳态解(温度 T 是常数):

此时 BOD 方程变为:

$$D_x \frac{d^2 L}{dx^2} - u \frac{dL}{dx} - K_1 L = 0 \quad (3-21)$$

假设有一条无限长的河流, 它在 $x = 0$ 处有一个排放 BOD 的污染源, 边界条件为 $L(0) = L_0, L(\infty) = 0$, 则在 $x = 0$ 和 $x = \infty$ 之间的方程(3-21) 的解是:

$$L = L_0 e^{\frac{ux}{2D_x}(1 - \sqrt{1 + 4D_x K_1/u^2})} = L_0 e^{\beta_1 x} \quad (3-22)$$

其中

$$\beta_1 = \frac{u}{2D_x} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4D_x K_1}{u^2}} \right) \quad (3-22a)$$

DO 方程变为:

$$D_x \frac{d^2 C}{dx^2} - u \frac{dC}{dx} - K_2 C = K_1 L_0 e^{\beta_1 x} - K_2 C_s \quad (3-23)$$

对于边界条件为 $C(0) = C_0, C(\infty) = C_s$, 得到式(3-23) 的解是:

$$C = C_s - (C_s - C_0) e^{\beta_2 x} + \frac{K_1 L_0}{K_1 - K_2} (e^{\beta_1 x} - e^{\beta_2 x}) \quad (3-24)$$

其中:

$$\beta_2 = \frac{u}{2D_x} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4D_x K_2}{u^2}} \right) \quad (3-24a)$$

在不考虑弥散求稳态解时, 由于 $u \frac{\partial L}{\partial x} = \frac{\partial L}{\partial t}, u \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}$, 式(3-20) 变为:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (3-25)$$

$$\frac{dC}{dt} = -K_1 L + K_2 (C_s - C)$$

若以 $D = C_s - C$ 表示氧亏, 则式(3-25) 可表示为:

$$\frac{dL}{dt} = -K_1 L \quad (3-26)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L + K_2 D$$

根据单一河段的基本含义,有初始条件 $x = 0$ 时, $L = L_0$ 、 $D = D_0$,则式(3-26)的解析式为:

对 BOD:

$$L = L_0 e^{-K_1 t} \quad (3-27)$$

$$D = D_0 e^{-K_2 t} + \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} [e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}] \quad (3-28)$$

其中: $t = x/u$, 表示河水的流行时间。

若以溶解氧浓度表示,则式(3-28)变为:

$$C = C_s - (C_s - C_0) e^{-K_2 t} + \frac{K_1 L_0}{K_1 - K_2} [e^{-K_1 t} - e^{-K_2 t}] \quad (3-29)$$

以上各式中的符号同前。

式(3-29)称为 S-P 氧垂公式,根据该式绘制的溶解氧沿程变化曲线就称为氧垂曲线。

在很多情况下,人们希望能找到溶解氧浓度的最低点——临界点。在临界点,河水的氧亏值最大,且变化速度为零,则

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L - K_2 D_c = 0$$

得到:

$$D_c = \frac{K_1}{K_2} L_0 e^{-K_1 t_c} \quad (3-30)$$

其中: D_c ——临界点的氧亏值, $[M/L^3]$; t_c ——由起始点到达临界点的流行时间, $[T]$ 。

将 $t = x/u$ 带入式(3-28)后,将该式中的 D 对 x 求导,并令 $\frac{dD}{dt} = 0$,可求得临界氧亏的位置:

$$x_c = \frac{u}{K_2 - K_1} \ln \left\{ \frac{K_2}{K_1} \left[1 - \frac{D_0 (K_2 - K_1)}{K_1 L_0} \right] \right\} \quad (3-31)$$

令 $F = \frac{K_2}{K_1}$,一般称 F 为水体的自净速率,将 F 代入式(3-31),则得:

$$x_c = \frac{u}{K_1 (F - 1)} \cdot \ln \left[F (1 - (F - 1) \frac{D_0}{L_0}) \right] \quad (3-32)$$

由此容易计算出临界氧亏发生的时间 t_c

$$t_c = \frac{1}{K_2 - K_1} \ln \left\{ \frac{K_2}{K_1} \left[1 - \frac{D_0 (K_2 - K_1)}{K_1 L_0} \right] \right\} \quad (3-33)$$

若用式(3-32)代入式(3-29),得到:

$$C_c = C_s \frac{L_0}{F} \left[F (1 - (F - 1) \frac{D_0}{L_0}) \right]^{\frac{1}{1-F}} \quad (3-34)$$

假设 L_0 相当大,则用上式得出的 C_c 就可能变为负值,这是 S-P 模型不能令人满意的特性。它主要是由于“氧的消耗速度与氧的浓度无关”的假设造成的。在低溶解氧浓度时,这个

假设是有疑问的。为弥补这个缺陷,Shastry 等人提出了一个非线性模型,如下所示:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial t} + u \frac{\partial L}{\partial x} &= -\tilde{K}_1 LC \\ \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} &= -\tilde{K}_1 L + K_2(C_s - C)\end{aligned}\quad (3-35)$$

式中的 $\tilde{K}_1$ 是常数,采用这个模型不会产生负的溶解氧的浓度值。

S-P 模型是关于河流 BOD 和 DO 耦合的基本水质模型,它忽略了源汇项对河流水质的影响,因此在实际应用中,可根据河流的具体情况,利用下述考虑了源汇项等因素的 S-P 模型的修正式。

2. Thomas(托马斯)模型

对于沉降作用明显的河流,托马斯在 S-P 模型的基础上引进了沉淀系数 K_3 以将沉降作用对 BOD 去除的影响考虑进去,其推导过程就是用 $K_1 + K_3$ 代替 S-P 模型 BOD 部分中的 K_1 ,如下式所示:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial t} + u \frac{\partial L}{\partial x} &= D_x \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - (K_1 + K_3)L \\ \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} &= D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - K_1 L + K_2(C_s - C)\end{aligned}\quad (3-36)$$

处于稳态并忽略弥散影响时,上式变为:

$$\begin{aligned}\frac{dL}{dt} &= -(K_1 + K_3)L \\ \frac{\partial C}{\partial t} &= -K_1 L + K_2(C_s - C) \text{ 或 } \frac{\partial D}{\partial t} = K_1 L - K_2 D\end{aligned}\quad (3-37)$$

在初始条件 $L(0) = L_0, D(0) = D_0$ 下,得托马斯修正式的解析解为:

$$\begin{aligned}L &= L_0 e^{-(K_1 + K_3)t} \\ D &= D_0 e^{-K_2 t} + \frac{K_1 L_0}{K_2 - (K_1 + K_3)} [e^{-(K_1 + K_3)t} - e^{-K_2 t}]\end{aligned}\quad (3-38)$$

若用溶解氧表示

$$\begin{aligned}L &= L_0 e^{-(K_1 + K_3)t} \\ C &= C_s - (C_s - C_0) e^{-K_2 t} + \frac{K_1 L_0}{K_1 + K_3 - K_2} [e^{-(K_1 + K_3)t} - e^{-K_2 t}]\end{aligned}\quad (3-39)$$

3. Dobbins-Camp(多宾斯-康布)修正式

此模型考虑了因底泥释放 BOD 和地表径流所引起的 BOD 变化,以 S_L 表示;同时还考虑了藻类光合作用和呼吸作用引起的溶解氧变化,以 $P-R$ 表示。模型如下:

$$\begin{aligned}\frac{\partial L}{\partial t} + u \frac{\partial L}{\partial x} &= D_x \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - (K_1 + K_3)L + \frac{S_L}{A} \\ \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} &= D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - K_1 L + K_2(C_s - C) + (P - R)\end{aligned}\quad (3-40)$$

处于稳态并忽略弥散影响时,上式变为:

$$\frac{dL}{dt} = -(K_1 + K_3)L + \frac{S_L}{A} \quad (3-41)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -K_1L + K_2(C_s - C) + (P - R) \text{ 或 } \frac{\partial D}{\partial t} = K_1L - K_2D - (P - R)$$

在初始条件 $L(0) = L_0, D(0) = D_0$ 下,得多宾斯-康布修正式的解析解为:

$$L = \left(L_0 - \frac{S_L}{A(K_1 + K_3)} \right) e^{-(K_1 + K_3)t} + \frac{S_L}{A(K_1 + K_3)}$$

$$D = D_0 e^{-K_2 t} + \frac{K_1}{K_2 - (K_1 + K_3)} \left(L_0 - \frac{S_L}{A(K_1 + K_3)} \right) [e^{-(K_1 + K_3)t} - e^{-K_2 t}] \quad (3-42)$$

$$+ \frac{K_1}{K_2} \left(\frac{S_L}{A(K_1 + K_3)} - \frac{P - R}{K_1} \right) (1 - e^{-K_2 t})$$

显然,Dobbins-Camp 模型中若忽略 $S_L/A, P-R$ 即是 Thomas 模型;若再忽略 K_3 ,则简化为 S-P 模型。

4. O'Connor 修正式

此模型假定总的 BOD 是由含碳 BOD 和含氮 BOD 两项组成,增加的 L_N 代表含氮 BOD 降解速度常数。模型如下:

$$\frac{\partial L_C}{\partial t} + u \frac{\partial L_C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 L_C}{\partial x^2} - (K_1 + K_3)L_C + \frac{S_L}{A}$$

$$\frac{\partial L_N}{\partial t} + u \frac{\partial L_N}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 L_N}{\partial x^2} - K_N L_N \quad (3-43)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - K_1 L_C - K_N L_N + K_2(C_s - C) + (P - R)$$

处于稳态并忽略弥散影响时,上式变为:

$$\frac{dL_C}{dt} = -(K_1 + K_3)L_C + \frac{S_L}{A}$$

$$\frac{dL_N}{dt} = -K_N L_N \quad (3-44)$$

$$\frac{dC}{dt} = -K_1 L_C - K_N L_N + K_2(C_s - C) + (P - R)$$

用氧亏表示,且当 $P = 0, R = 0, S_L = 0$ 时,式(3-44) 则为:

$$\frac{dL_C}{dt} = -(K_1 + K_3)L_C$$

$$\frac{dL_N}{dt} = -K_N L_N \quad (3-45)$$

$$\frac{dD}{dt} = K_1 L_C + K_N L_N - K_2 D$$

当初始条件为 $t = 0$ (或 $x = 0$)、 $L_C = L_{C0}$ 、 $L_N = L_{N0}$ 、 $D = D_0$ 时,该模型的解析式为:

$$\begin{aligned} L_C &= L_{C0} e^{-(K_1+K_3)t} \\ L_N &= L_{N0} e^{-K_N t} \end{aligned} \quad (3-46)$$

$$D = D_0 e^{-K_2 t} + \frac{K_1 L_0}{K_2 - (K_1 + K_3)} [e^{-(K_1+K_3)t} - e^{-K_2 t}] + \frac{K_N L_{N0}}{K_2 - K_N} [e^{-K_N t} - e^{-K_2 t}]$$

一般情况下,含氮有机物的 BOD 值 L_N 可以用氨氮的需氧量来表示。由氨的氧化反应方程式 $\text{NH}_3 + 2\text{O}_2 = \text{HNO}_3 + \text{H}_2\text{O}$ 可知,若 $\text{NH}_3 - \text{N}$ 被完全氧化,则氧化 1g 氨氮需要 4.57g 氧,即 1g 氨氮的需氧量为 4.57g。

(二) 一维多河段水质模型^{[2][3]}

环境质量基本模型和单一河段水质基本模型都是建立在流场是均匀、稳定的这一基本假设基础上的。然而,几乎没有任何一条实际河流能在整个流程满足这一基本假设。因此,在建立一条实际河流的水质模型时,一般要把河流分成若干河段,使得每一河段的水文条件基本上保持均匀稳定,满足基本模拟模型和单一河段水质基本模型的基本假设。

一般,可按以下原则划分河段、设置断面。

① 在河流断面形状发生剧烈变化处,这种变化导致河流的流态(流速、流量及水深分布等)发生相应的变化;

② 支流或污水的输入处;

③ 河流取水口处;

④ 其他需要设立断面的地方,如桥涵附近便于采样的地方、现有的水文站附近等。

河流断面确定之后,就可以根据水流与污染物的输入、输出条件,做出河流水质计算的概化图,如图 3-3 所示。

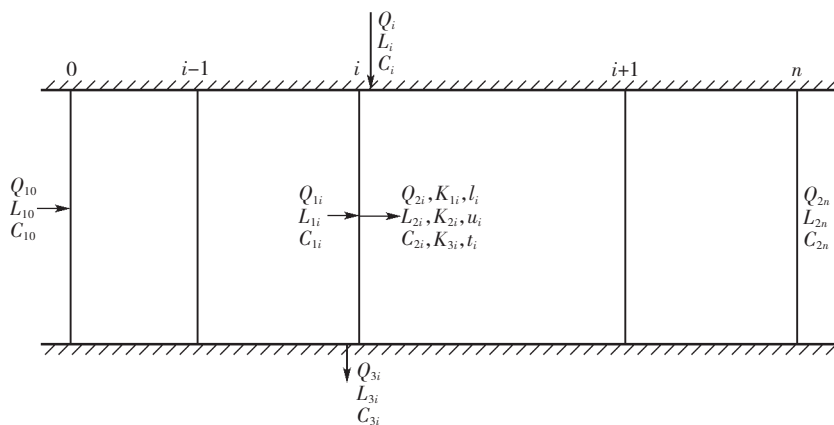


图 3-3 多段河流的概念化

Q_i ——第 i 断面进入河流的污水(或支流)的流量; Q_{1i} ——由上游进入断面 i 的流量;

Q_{2i} ——由断面 i 输出到下游的流量; Q_{3i} ——在断面 i 处的取水量;

L_i 、 C_i ——在断面 i 处进入河流的污水或支流的 BOD 和 DO 的浓度;

L_{1i} 、 C_{1i} ——由上游进入断面 i 的 BOD 和 DO 的浓度;

L_{2i} 、 C_{2i} ——由断面 i 向下游输出的 BOD 和 DO 的浓度;

K_{1i} 、 K_{2i} 、 K_{3i} ——断面 i 下游河段的水质模型参数,其中 K_{1i} 为 BOD 的衰减速度常数;
 K_{2i} 为大气复氧速度常数; K_{3i} 为悬浮物的沉淀与再悬浮速度常数;

l_i ——断面 i 下游河段的长度; u_i ——断面 i 下游河段的平均流速;

t_i ——断面 i 下游河段内的流行时间。

在根据一维多河段水质模型概化图建立多河段水质模型时,要明确河流水质的特点:其中一点是上游每一个排放口排放的污染物对下游每一断面的水质都会产生一个增量,而下游的水质对上游不会产生影响,因此,河流每一个断面的水质状态都可以视为上游每一个断面排放的污染物和本断面排放的污染物的影响的总和。这里所建立的 BOD 多河段模型也可以应用于性质与 BOD 类似的其他污染物的模拟。

由 S-P 模型可以写出河流 BOD 的变化规律:

$$L = L_0 e^{-K_1 t}$$

根据图 3-3 中的符号定义及水流连续性原理和质量守恒原理,可以写出每个断面流量、BOD 的平衡关系式:

$$Q_{2i} = Q_{1i} - Q_{3i} + Q_i \quad (3-47)$$

$$Q_{1i} = Q_{2,i-1} \quad (3-48)$$

$$L_{2i}Q_{2i} = L_{1i}(Q_{1i} - Q_{3i}) + L_iQ_i \quad (3-49)$$

另外,由 S-P 模型可以写出由 $i-1$ 断面至 i 断面间的 BOD 衰减关系:

$$L_{1i} = L_{2,i-1} e^{-K_{1,i-1}t_{i-1}} \quad (3-50)$$

$$\text{令} \quad \alpha_i = e^{-K_{1i}t_i} \quad (3-51)$$

代入式(3-50),得:

$$L_{1i} = \alpha_{i-1}L_{2,i-1} \quad (3-52)$$

同时,由式(3-49)和式(3-52)可以写出:

$$L_{2i} = \frac{L_{2,i-1}\alpha_{i-1}(Q_{1i} - Q_{3i})}{Q_{2i}} + \frac{Q_i}{Q_{2i}}L_i \quad (3-53)$$

$$\text{令} \quad \alpha_{i-1} = \frac{\alpha_{i-1}(Q_{1i} - Q_{3i})}{Q_{2i}} \quad (3-54)$$

$$b_i = \frac{Q_i}{Q_{2i}} \quad (3-55)$$

由式(3-53)、式(3-54)、式(3-55)可以写出任一断面的 BOD 表达式:

$$\begin{aligned} L_{21} &= a_0 L_{20} + b_1 L_1 \\ L_{22} &= a_1 L_{21} + b_2 L_2 \\ &\vdots \\ L_{2i} &= a_{i-1} L_{2,i-1} + b_i L_i \\ &\vdots \\ L_{2n} &= a_{n-1} L_{2,n-1} + b_n L_n \end{aligned}$$

这一组递推式可以用一个矩阵方程来表达:

$$A\vec{L}_2 = B\vec{L} + \vec{g} \quad (3-56)$$

其中: A, B 是 n 阶矩阵:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -a_1 & 1 & 0 & & & \vdots \\ 0 & \ddots & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & -a_{i-1} & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -a_{n-1} & 1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} b_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & b_2 & 0 & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & 0 & b_i & 0 & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & b_n \end{bmatrix}$$

$$\vec{L}_2 = (L_{21}, L_{22}, \cdots, L_{2n})^T, \vec{L} = (L_1, L_2, \cdots, L_n)^T$$

$$\vec{g} = (g_1, g_2, \cdots, g_n)^T, \text{且 } g_i = \begin{cases} a_0 L_{20}, i = 1 \\ 0, i = 2, 3, \cdots, n \end{cases}$$

由式(3-56)可得:

$$\vec{L}_2 = A^{-1}B\vec{L} + A^{-1}\vec{L} \quad (3-57)$$

若令

$$U = A^{-1}B \quad (3-58)$$

$$\vec{m} = A^{-1}\vec{g} \quad (3-59)$$

则式(3-57)可表示为:

$$\vec{L}_2 = U\vec{L} + \vec{m} \quad (3-60)$$

矩阵(3-60)表示每一个断面向下游输出的 BOD($\vec{L}_2$ 向量)与各个节点输入河流的 BOD($\vec{L}$ 向量)之间的关系。在水质模拟和预测时, $\vec{L}$ 是一组已知量, $\vec{L}_2$ 是需要模拟的量; 在水污染控制规划中, 作为河流 BOD 约束 $\vec{L}_2$ 是一组已知量, 而 $\vec{L}$ 则是需要确定的量。

同理, 也可以推导出表示每一个断面向下游输出的溶解氧($\vec{C}_2$ 向量)与各个节点输入河流的 BOD($\vec{L}$ 向量)及溶解氧($\vec{C}$ 向量)之间关系的矩阵方程。

令

$$\gamma_i = e^{-K_{2i}t_i}$$

$$\beta_i = \frac{K_{1i}(\alpha_i - \gamma_i)}{K_{2i} - K_{1i}}\delta_i = C_s(1 - \gamma_i) \quad (3-61)$$

再令

$$c'_{i-1} = \frac{Q_{1i} - Q_{3i}}{Q_{2i}}\gamma_{i-1}$$

$$d_{i-1} = \frac{Q_{1i} - Q_{3i}}{Q_{2i}}\beta_{i-1}$$

$$f_{i-1} = \frac{Q_{1i} - Q_{3i}}{Q_{2i}} \delta_{i-1} \quad (3-62)$$

$$h_i = \begin{cases} c'_0 C_{20} - d_0 L_{20}, i = 1 \\ 0, i = 2, 3, \dots, n \end{cases}$$

则溶解氧关系式可写为:

$$C' \vec{\bar{C}}_2 = -D \vec{\bar{L}}_2 + B \vec{\bar{C}} + \vec{\bar{f}} + \vec{\bar{h}} \quad (3-63)$$

其中:

$$C' = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ -c'_1 & 1 & 0 & & & \vdots \\ 0 & \ddots & 1 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & -c'_{i-1} & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & -c'_{n-1} & 1 \end{bmatrix} \quad D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ d_1 & 0 & 0 & & & \vdots \\ 0 & d_2 & 0 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & d_{n-1} & 0 \end{bmatrix}$$

$$\vec{\bar{f}} = (f_0, f_1, \dots, f_{n-1})^T \quad \vec{\bar{h}} = (h_1, h_2, \dots, h_n)^T$$

则式(3-63)可解得:

$$\begin{aligned} \vec{\bar{C}}_2 &= C'^{-1} B \vec{\bar{C}} - C'^{-1} D \vec{\bar{L}}_2 + C'^{-1} (\vec{\bar{f}} + \vec{\bar{h}}) \\ &= C'^{-1} B \vec{\bar{C}} - C'^{-1} D A^{-1} B \vec{\bar{L}} + C'^{-1} (\vec{\bar{f}} + \vec{\bar{h}}) - C'^{-1} D A^{-1} \vec{\bar{g}} \end{aligned} \quad (3-64)$$

令

$$V = -C'^{-1} D A^{-1} B \quad (3-65)$$

$$\vec{\bar{n}} = C'^{-1} B \vec{\bar{C}} + C'^{-1} (\vec{\bar{f}} + \vec{\bar{h}}) - C'^{-1} D A^{-1} \vec{\bar{g}} \quad (3-66)$$

则(3-64)可写为:

$$\vec{\bar{C}}_2 = V \vec{\bar{L}} + \vec{\bar{n}} \quad (3-67)$$

将式(3-60)与式(3-67)联立,得

$$\begin{aligned} \vec{\bar{L}}_2 &= U \vec{\bar{L}} + \vec{\bar{m}} \\ \vec{\bar{C}}_2 &= U \vec{\bar{L}} + \vec{\bar{n}} \end{aligned} \quad (3-68)$$

式(3-68)就是描述多段河流的 BOD-DO 耦合关系的矩阵模型,其中, U 和 V 是由给定数据计算的 n 阶下三角矩阵, $\vec{\bar{m}}$ 和 $\vec{\bar{n}}$ 是两个由给定数据计算的 n 维向量。每输入一组污水的 BOD($\vec{\bar{L}}$) 值,就可以获得一组对应的河流 BOD 值和 DO 值($\vec{\bar{L}}_2$ 和 $\vec{\bar{C}}_2$)。由于 U 和 V 反

映了这种因果关系,因此称 U 为河流 BOD 稳态响应矩阵, V 为河流 DO 稳态响应矩阵。

对于含支流的河流,当支流和干流要作为一个整体考虑时,可以对支流写出与式 (3-68) 相似的矩阵方程,然后插入主流的矩阵方程,形成新的矩阵方程。

如图 3-4 所示,设干流含有 n 个断面,各断面编号为 $1, 2, \dots, i, \dots, n$; 支流含有 m 个断面 (不含支流汇入主流处的断面), 各断面的编号为 $1(i), 2(i), \dots, j(i), \dots, m(i)$; 汇合断面 $m(i)$ 在干流上的编号为 i 。

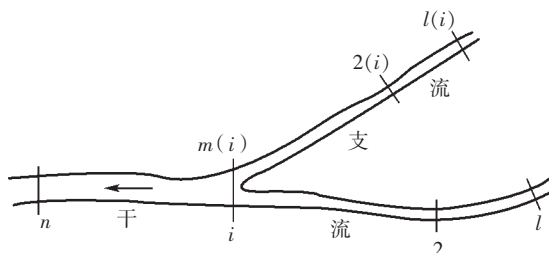


图 3-4 含支流的河流系统

首先分别写出干流和支流的 BOD—DO 耦合关系方程:

$$\begin{aligned} \text{对干流: } & \begin{cases} \vec{L}_2 = U\vec{L} + \vec{m} \\ \vec{C}_2 = V\vec{L} + \vec{n} \end{cases} \\ \text{对支流: } & \begin{cases} \vec{L}_2' = U'\vec{L}' + \vec{m}' \\ \vec{C}_2' = V'\vec{L}' + \vec{n}' \end{cases} \end{aligned}$$

上式干流中, $\vec{L} = (L_1, L_2, \dots, L_i, \dots, L_n)^T$ 。其中 L_i 为支流的 $\vec{L}_2'$ 中的最后一个元素 L_{2m}' , 即 $L_i = L_{2m}'$ 。可由下式计算 L_{2m}'

$$L_{2m}' = \lambda^T (U'\vec{L}' + \vec{n}') \quad (3-69)$$

式中: $\lambda = (0 \ 0 \ \dots \ 0 \ 1)^T$ 为 m 维算子向量。

(三) 二维多河段河流水质模型^{[2][3]}

对于排放到河流中的污染物在完成横向混合前这段过程, 污染物在纵向和横向都存在浓度梯度, 这时就需要采用二维模型对其进行描述。

当河床形状较为规则、水量稳定, 可利用第一章介绍的二维模型及其解析解进行模拟, 这样既可满足计算精度的要求, 又可大大简化计算过程。然而, 在一般情况下, 由于河床非常不规则, 解析解的应用受到限制, 常常采用数值解。目前常用的数值解法很多, 如有限差分法、有限单元法、有限分析法等, 本书将在下一章对这些数值方法进行介绍。这里简要介绍有限单元法在建立并求解二维水质模型中的应用。

有限单元法在二维水质模型中应用的基本思路是把一个连续的环境空间根据一定的原则划分为若干单元, 每个单元都可以视为一个完全混合的子系统; 然后通过对每一个单元建立质量平衡方程, 从而建立起整个体系的联立方程数学模型。

1. 正交曲线坐标系统的建立

在一个给定的河段中, 沿水流方向将河宽分成 m 个流带; 同时, 在垂直水流方向, 将河

段分为 n 个子河段, 构成一个含有 $m \times n$ 个有限单元的平面网格系统, 如图 3-5 所示。

对每一个有限单元来说, 水质变化的原因包括: 由纵向或横向水流的携带作用造成的输入与输出; 由纵向及横向弥散作用形成的输入与输出; 污染物的转化与衰减; 系统外部的输入。根据这些关系, 可以针对每一个有限单元体写出质量平衡方程, 然后联立求解 $m \times n$ 个方程, 就可以获得二维系统中的污染物分布。

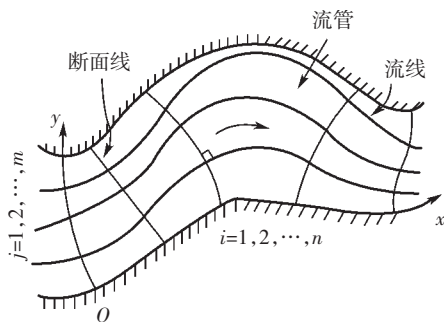


图 3-5 正交曲线坐标系

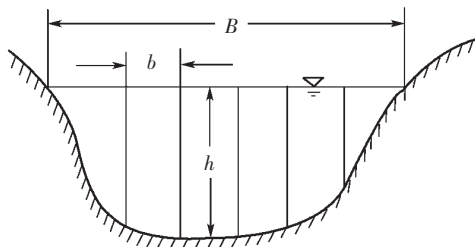


图 3-6 河流断面

二维系统中的横向水流分量的确定是非常困难的。如果在划分流带时使得每条流带的流量保持恒定, 就可以忽略横向的水流交换。为保持流带内的流量恒定, 流带的宽度就必然要随河流的形状不断变化。假定河流的计算流量为 Q , 河宽为 B , 横断面的面积为 A , 断面形状如图 3-6 所示, 则河流断面上任一单位宽度上的流量可表示为:

$$q = a \left(\frac{h}{H} \right)^b \frac{Q}{B} \quad (3-70)$$

其中: q ——河流断面上某一单位宽度上的流量, $[L^3 \cdot L^{-1}]$;

h ——河流断面上某一单位宽度上的局部水深, $[L]$;

H ——河流断面的平均水深, $[L]$;

Q ——河流流量, $[L^3]$;

B ——河流断面的水面宽度, $[L]$;

a, b ——根据断面流量分布估计的参数。

休姆(Sium) 根据河流中观测的数据给出了 a, b 的取值范围。

(1) 在平直河道中, 若 $50 \leq B/H < 70, a = 1.0, b = 5/3$; 若 $70 \leq B/H, a = 0.92, b = 7/4$ 。

(2) 在弯曲河道中, 当 $50 \leq B/H < 100$ 时, $0.80 \leq a \leq 0.95, 1.78 \leq b \leq 2.48$ 。

确定河流断面的单宽流量后, 就可求出断面上的横向累积流量, 作出横向累积流量曲线 (如图 3-7)。根据累积流量曲线, 可确定相对于某一确定流量的流带的宽度。

流带宽度确定之后, 就可给出流带的形状, 然后垂直各流带的分界线 (流线) 作出断面线。由流线和断面线构成一个正交曲线坐标系 (图 3-5)。这个系统共含有 $m \times n$ 个单元, 单元的长度为 x_i , 宽度为 y_i , 深度为 h_i 。如果假定在一个单元内部的浓度是均匀的, 就可对每个单元写出质量平衡方程, 从而建立起系统的水质模型。

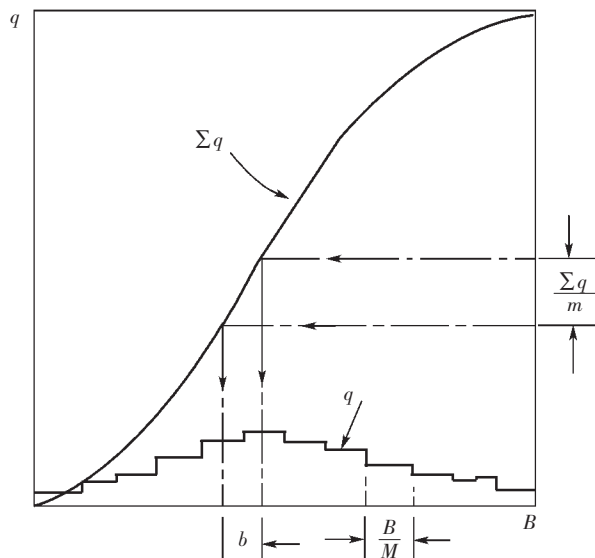


图 3-7 断面累积流量曲线

2. BOD 二维模型

从图 3-5 中取出任意一个有限单元(设为 i, j 单元), 通过该单元的质量平衡关系, 可写出一个差微分方程。

由水流输入、输出该单元的 BOD 总量为

$$q_j (L_{i-1,j} - L_{ij})$$

由纵向弥散作用输入、输出该单元的 BOD 总量为

$$D'_{(i-1,j),ij} (L_{i-1,j} - L_{ij}) - D'_{ij,(i+1,j)} (L_{ij} - L_{i+1,j})$$

由横向弥散作用输入、输出该单元的 BOD 总量为

$$D'_{(i,j-1),ij} (L_{i,j-1} - L_{ij}) - D'_{ij,(i,j+1)} (L_{ij} - L_{i,j+1})$$

在 i, j 单元内的 BOD 衰减量为 $V_{ij} K_{1ij} L_{ij}$

由系统外输入的 BOD 总量为 W_{ij}^L

其中:

$$D'_{(i-1,j),ij} = D_{(i-1,j),ij} \frac{A_{(i-1,j),ij}}{x_{(i-1,j),ij}}$$

$$D'_{ij,(i+1,j)} = D_{ij,(i+1,j)} \frac{A_{ij,(i+1,j)}}{x_{ij,(i+1,j)}}$$

$$D'_{(i,j-1),ij} = D_{(i,j-1),ij} \frac{A_{(i,j-1),ij}}{y_{(i,j-1),ij}}$$

$$D'_{ij,(i,j+1)} = D_{ij,(i,j+1)} \frac{A_{ij,(i,j+1)}}{y_{ij,(i,j+1)}}$$

式中: q_j ——第 j 个流带中的流量; L_{ij} ——第 ij 个单元中的 BOD 浓度;

V_{ij} ——第 ij 个单元的容积; K_{1ij} ——第 ij 个单元中 BOD 的衰减速度常数;
 $D_{ij,kl}$ ——单元 ij 和 kl 间的弥散系数; $A_{ij,kl}$ ——单元 ij 和 kl 间界面面积;
 $\bar{x}_{ij,kl}$ ——上下游相邻单元间的平均距离; $\bar{y}_{ij,kl}$ ——横向相邻单元间的平均距离。

对 ij 单元写出质量平衡关系:

$$V_{ij} \frac{dL_{ij}}{dt} = q_j (L_{i-1,j} - L_{ij}) + D'_{(i-1,j),ij} (L_{i-1,j} - L_{ij}) - D'_{ij,(i+1,j)} (L_{ij} - L_{i+1,j}) \\ + D_{(i,j-1),ij} (L_{i,j-1} - L_{ij}) - D'_{ij,(i,j+1)} (L_{ij} - L_{i,j+1}) - V_{ij} K_{1ij} L_{ij} + W_{ij}^L \quad (3-71)$$

研究稳态问题时, $\frac{dL}{dt} = 0$, 则

$$-q_j (L_{i-1,j} - L_{ij}) - D'_{(i-1,j),ij} (L_{i-1,j} - L_{ij}) + D'_{ij,(i+1,j)} (L_{ij} - L_{i+1,j}) \\ - D'_{(i,j-1),ij} (L_{i,j-1} - L_{ij}) + D'_{ij,(i,j+1)} (L_{ij} - L_{i,j+1}) + V_{ij} K_{1ij} L_{ij} = W_{ij}^L \quad (3-72)$$

如果将所有有限单元中的 BOD 值写为一个 $m \cdot n$ 维向量:

$$\vec{L} = (L_{11} L_{12} \cdots L_{1m} L_{21} L_{22} \cdots L_{2m} \cdots L_{ij} \cdots L_{nm})^T$$

将所有的系统外输入也写为一个 $m \cdot n$ 维向量:

$$\vec{W}^L = (W_{11}^L W_{12}^L \cdots W_{1m}^L W_{21}^L W_{22}^L \cdots W_{2m}^L \cdots W_{ij}^L \cdots W_{nm}^L)^T$$

则对整个河段可写为矩阵方程:

$$G\vec{L} = \vec{W}^L \quad (3-73)$$

G 是一个 $m \cdot n$ 阶矩阵, 称为二维河流的 BOD 变换矩阵。根据式 (3-62), 可计算出矩阵 G 的各个元素 $g_{kl} (k = 1, \cdots, m, l = 1, \cdots, n)$ 的一般形式为:

$$\text{对 } l = k, \quad g_{kl} = q_j + D'_{(i,j-1),ij} + D'_{ij,(i,j+1)} + D'_{(i-1,j),ij} + D'_{ij,(i+1,j)} + V_{ij} K_{1ij}$$

$$\text{对 } l = k + 1, \quad g_{kl} = D'_{ij,(i,j+1)}$$

$$\text{对 } l = k - 1, \quad g_{kl} = D'_{(i,j-1),ij}$$

$$\text{对 } l = k + m, \quad g_{kl} = -D'_{ij,(i+1,j)}$$

$$\text{对 } l = k - m, \quad g_{kl} = -q_j - D'_{(i-1,j),ij}$$

$$\text{对 其余元素, } g_{kl} = 0$$

由上面各式可看出, 矩阵 G 的元素是河流流带的流量、弥散系数、各单元的几何尺寸、BOD 衰减速度常数的函数, 它们可通过各种测量和计算方法得到。因此, 当系统外部的 BOD 输入已知时, 就可用下式求解河流的 BOD 分布:

$$\vec{L} = G^{-1} \vec{W}^L \quad (3-74)$$

式中的 G^{-1} 称为二维河流的 BOD 响应矩阵。

类似的, 也可以求出二维河流的 DO 分布求解矩阵和 DO 的响应矩阵, 具体可参看文献 [3] 的相关章节。

(四)QUAL 综合水质模型^{[3][4][7]}

美国环保局(USEPA)于1970年推出QUAL—I水质综合模型,1973年开发出QUAL—II模型,其后又经多次修订和增强,推出了QUAL2E、QUAL2E—UNCAS、QUAL2K版本。QUAL模型可按用户所希望的任意组合方式模拟15种水质成分,这些组分包括:溶解氧;生化需氧量;温度;叶绿素a藻;有机氮;氨氮;亚硝酸氮;硝酸氮;有机磷;溶解磷;大肠杆菌;任意一种非保守性物质;三种保守性物质。

以QUAL—II模型为例,该模型将河流系统表达为一系列河段构成的网络,用节点将这些河段联系在一起,同时假定在同一河段里水力学参数保持不变。每一个河段又被分为许多小节(小段),这些节的长度即为选定的空间坐标计算步长。这样就把河流系统概化为一系列完全混合反应器组成的系统。每一个小节都是一个反应器,用平移和弥散将这些反应器联系在一起。对每一个小节和每一种水质参数,利用物料平衡都能得到一个方程,这些方程构成一个模型方程组,解这个方程组就可以得到水质参数的浓度分布。在QUAL—II模型中,为了便于建立物料平衡关系,把所有节点分为七种类型:①源头节(主流和支流的第一节);②正常节;③支流入口的上游节;④支流入口节;⑤河系的末节;⑥含有点源的节;⑦有出流的节。

模型假设物质在河流中的主要迁移方式是平移和弥散,且认为这种迁移只发生在河道或水道的纵轴方向上,因此是一维水质综合模型。其基本方程是一个平移—弥散质量迁移方程,同时考虑了水质组分间的相互作用以及组分外部源和汇对组分浓度的影响。对任意的水质变量 C ,方程均可写为如下形式(方程右边的4项分别代表扩散、平流、组分反应和组分外部源汇项):

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \frac{\partial(A_x D_L \frac{\partial C}{\partial x})}{\partial x} dx - \frac{\partial(A_x \bar{u} C)}{\partial x} dx + (A_x dx) \frac{dC}{dt} + s \quad (3-75)$$

式中: M ——所考察的物质质量, $[M]$; C ——组分浓度, $[M/L^3]$;

x ——所考察的距离, $[L]$; t ——时间, $[T]$;

A_x ——距离 x 处的河流断面面积, $[L^2]$; D_L ——纵向弥散系数, $[L^2/T]$;

$\bar{u}$ ——平均流速, $[L/T]$; s ——组分的外部源和汇, $[M/T]$ 。

从式(3-75)这一基本形式出发,可以写出各种水质组分的表达式。

1. 叶绿素—a(浮游藻类)

描述藻类(叶绿素—a)生长与产量的微分方程

$$\frac{dC_A}{dt} = (\mu - \rho_A - \frac{\sigma_1}{H}) C_A \quad (3-76)$$

其中: μ ——局部的藻类比生长率,随温度而变化; ρ_A ——藻类呼吸速率常数,随温度变化;

σ_1 ——藻类沉淀速率常数; H ——平均水深。

2. 氮的循环

在QUAL—II模型中考虑了三种形态的氮:氨氮(C_{N1})、亚硝酸氮(C_{N2})和硝酸氮(C_{N3})。关于它们的反应式如下:

$$\begin{aligned}\frac{dC_{N1}}{dt} &= a_1 \rho_A C_A - K_{N1} C_{N1} + \frac{\sigma_3}{A} \\ \frac{dC_{N2}}{dt} &= K_{N1} C_{N1} - K_{N2} C_{N2} \\ \frac{dC_{N3}}{dt} &= K_{N2} C_{N2} - a_1 \mu C_A\end{aligned}\quad (3-77)$$

其中: a_1 ——藻类生物量中氮氮的分数; σ_3 ——水底生物的氮氮释放速率;

A ——平均横截面积; K_{N1} ——氮氮氧化速率常数;

K_{N2} ——亚硝酸氮氧化的速率常数; 其他符号同前。

3. 磷循环

在 QUAL-Ⅱ 模型中关于磷循环的模型不像氮循环模型那么复杂, 该模型只考虑了溶解性磷和藻类的相互关系, 以及底泥释放磷的项, 模型如下:

$$\frac{dC_{ph}}{dt} = a_2 \rho_A C_A - a_2 \mu C_A + \frac{\sigma_2}{A} \quad (3-78)$$

其中: a_2 ——藻类生物量中磷所占的分数;

σ_2 ——底泥释放磷的释放速率;

C_{ph} ——磷酸盐(换算成磷)的浓度; 其他符号同前。

4. 碳化合物的生物氧化:

$$\frac{dL}{dt} = -(K_1 + K_3)L \quad (3-79)$$

其中: K_1 ——含碳化合物降解的速度常数, 与温度有关;

K_3 ——由于沉淀作用引起的含碳化合物的消耗速度常数;

5. 溶解氧

在 QUAL-Ⅱ 模型中描述溶解氧变化速度的微分方程如下:

$$\begin{aligned}\frac{dC}{dt} &= K_2(C_s - C) + (a_3 \mu - a_4 \rho_A) C_A - K_1 L \\ &\quad - \frac{K_4}{A} - a_5 K_{N1} C_{N1} - a_6 K_{N2} C_{N2}\end{aligned}\quad (3-80)$$

其中: a_3 ——单位藻类的光合作用产氧率;

a_4 ——单位藻类的呼吸作用的耗氧率;

a_5 ——单位氮氮氧化时的耗氧率;

a_6 ——单位亚硝酸氮氧化时的耗氧率;

K_2 ——大气复氧系数; K_4 ——水底耗氧常数。

6. 大肠杆菌

大肠杆菌在河水里的死亡可用以下方程:

$$\frac{dC_s}{dt} = -K_5 C_s \quad (3-81)$$

其中: C_s ——大肠杆菌浓度; K_s ——大肠杆菌死亡率。

7. 任意可降解物质

$$\frac{dC_R}{dt} = -K_6 C_R \quad (3-82)$$

其中: C_R ——任意可降解物质的浓度; K_6 ——降解速度常数。

对于 QUAL 模型的详细介绍可参看文献[7]。

(五) 其他河流水质模型

1. WASP 模型体系

WASP(Water Quality Analysis Simulation Program) 是美国环境保护局提出的水质模型系统,可用于对河流、湖泊、河口、水库、海岸的水质进行模拟。WASP 最原始的版本是于 1983 年发布的^[8],之后又经过几次修订,如 WASP4^[9]、WASP5^[10] 及 WASP6^[11]。WASP 包括两个独立的计算程序:水动力学程序 DYNHYD 和水质程序 WASP,它们可以联合运行,也可以独立运行。DYNHYD 是一个简单的网络水力动态模型,可以处理变化潮汐周期、风力和不稳定流动的水力动态学,产生一个输出文件,为 WASP 提供流量和体积参数。WASP 是水质程序,是一个动态模型模拟体系,基于质量守恒原理,待研究的水质组分在水体中以某种形态存在,在时空上追踪某种水质组分的变化。它由 EUTRO(用来分析传统的水质指标项)和 TOXI(可以模拟固体类物质和有毒物质的污染)两个子模型组成,它们可以装入水质程序中。WASP 在其基本程序中反映了对流、弥散、点杂质负荷与扩散杂质负荷以及边界的交换等随时间变化的过程。WASP 模型可以模拟 1) 保守性物质如示踪剂,用 TOXI 模拟; 2) 底质传输,用 TOXI 模拟; 3) 溶解氧,用 EUTRO 分四个层次模拟, S-P 模型;改进的 SP 模型,将 BOD 分为 CBOD, NBOD;完全线性 DO 方程,将 NBOD 分为无机化和硝化两部分,并增加了浮游植物的光合呼吸作用;非线性 DO 方程,增加了 DO 反馈项; 4) 富营养化,用 EUTRO 模拟,包括四个相互作用的系统:浮游植物动力反应, P、N 循环, DO 平衡; 5) 简单有毒物质和复杂化学物质,采用 TOXI 模块,简单反应使用一级衰减常量和平衡系数,复杂反应应用二级衰减方程和非线性吸收等温线或一级吸收和释放率常量。

经简化, WASP 常用如下模型:

$$\frac{\partial}{\partial t}(AC) = \frac{\partial}{\partial x}(-U_x AC + E_x A \frac{\partial C}{\partial x}) + A(S_L + S_B) + AS_K$$

其中: C ——组分浓度, $[M/L^3]$; t ——时间, $[T]$; A ——横截面积, $[L^2]$;

U_x ——纵向速度, $[L/T]$; E_x ——纵向弥散系数, $[L^2/T]$;

S_L 、 S_B 、 S_K ——弥散负荷率、边界负荷率、总动力输移率, $[M/(L^3 \cdot T)]$ 。

目前, WASP 水质模型已广泛被用于对水质进行模拟^{[21]~[23]}。

2. BASINS 模型体系^[12]

BASINS (Better Assessment Science in Integrating point and Nonpoint Sources) 是由美国环保局发布的多目标环境分析系统,基于 GIS 环境,可对水系和水质进行模拟。它最初用 HSPF^{[10][25]} (Hydrological Simulation Program—Fortran 即水文模拟 FORTRAN 程序作为水动力和水质模型),后来集成了河流水质模型 QUAL2E 和其他模型,同时使用了土壤水质评价工具 WEAT 和 ARCVIEW 界面,可使用 GIS 从数据库抽取数据。该系统由 6 个相互

关联的能对水系和河流进行水质分析、评价的组件组成,它们分别是国家环境数据库、评价模块、工具、水系特性报表、河流水质模型、非点源模型和后处理模块。

3. OTIS 模型体系

OTIS^[13] 是由 USGS 开发的可用于对河流中溶解物质的输移进行模拟的一维水质模型,带有内部调蓄节点,状态变量是痕迹金属。这个模型能模拟河流的调蓄作用,还可用于模拟示踪剂试验。它只研究用户自定义水质组分,还提供了参数优化器。OTIS 模型如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} (AD \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{q_{LIN}}{A} (C_L - C) + \alpha (C_S - C)$$

$$\frac{\partial C_S}{\partial t} = \alpha \frac{A}{A_S} (C - C_S)$$

式中: A 、 A_S ——主要渠道横截面积、储蓄区横截面积, $[L^2]$; x ——距离, $[L]$;

C 、 C_L 、 C_S ——主要渠道溶解物浓度、侧向入流溶解物浓度、储蓄区溶解物浓度, $[M/L^3]$;

D ——弥散系数, $[L^2/T]$; Q ——流量率, $[L^3/T]$;

q_{LIN} ——侧向流量率, $[L^3/(T \cdot L)]$; t ——时间, $[T]$; α ——储蓄区交换系数。

4. MIKE 模型体系

这一模型体系由丹麦水动力研究所(DHI)开发,包括 MIKE11^[14]、MIKE21^{[15][16]} 和 MIKE3^[17]。MIKE11 是一维动态模型,能用于模拟河网、河口、滩涂等多种地区的情况,MIKE21 是二维动态模型,用来模拟在水质预测中垂向变化常被忽略的湖泊、河口、海岸地区。MIKE3 与 MIKE21 类似,但它能处理三维空间。MIKE 模型体系在中国也已有应用实例。以一维 MIKE 模型为例:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = E_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} - K_1 L + K_2 (C_S - C) - S_R$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = E_x \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - \bar{u} \frac{\partial L}{\partial x} - (K_1 + K_3) L + L_A$$

式中: C 、 L 、 C_S ——分别为横断面 DO 和 BOD 浓度及当时水温下饱和溶解氧, $[M/L^3]$;

E_x ——沿流向扩散系数, $[L^2/T]$; x ——横断面沿程距离, $[L]$;

$\bar{u}$ ——平均流速, $[L/T]$; t ——时间, $[T]$;

K_1 、 K_2 ——分别为生化耗氧系数和河水曝气复氧系数, $[T^{-1}]$;

S_R ——由水生生物光合作用、呼吸作用和河床底泥耗氧等引起的 DO 增减率, $[M/(L^3 \cdot T)]$;

L_A ——当地径流或吸着有机物的底泥重新悬浮引起的 BOD 增减率, $[M/L^3 \cdot T]$ 。

5. CE-QUAL-W2 模型体系^[18]

CE-QUAL-W2 模型是二维水质和水动力学模型,由 USACE(美国陆军工程兵团)水道试验站开发。这一模型由直接耦合的水动力学模型和水质输移模型组成。CE-QUAL-W2 模型可模拟包括 DO、TOC、BOD、大肠杆菌、藻类等在内的 17 种水质变量浓度变化。CE-QUAL-W2 水质模型如下:

$$\frac{\partial BC}{\partial t} + \frac{\partial UBC}{\partial x} + \frac{\partial WBC}{\partial z} - \frac{\partial(BD_x(\frac{\partial C}{\partial x}))}{\partial x} - \frac{\partial(BD_z(\frac{\partial C}{\partial z}))}{\partial z} = CqB + SB$$

其中: B —— 时间空间变化的层宽, $[L]$; C —— 横向平均的组分浓度, $[M/L^3]$;

U, W —— 分别为 x 方向(水平)、 z 方向(竖直)的横向平均流速, $[L/T]$;

D_x, D_z —— 分别为 x, z 方向上温度和组分的扩散系数, $[L^2/T]$;

Cq —— 入流或出流的组分的物质流量率, $[M/(L^3 \cdot T)]$;

S —— 相对组分浓度的源汇项, $[M/(L^3 \cdot T)]$ 。

6. EFDC 模型体系^{[19][20]}

EFDC(Environmental Fluid Dynamics Code)即环境流体动态代码,它由 John Hamrick 开发,目前已由 USEPA 支持,可用于模拟来自点源非点源的污染物、有机物迁移、归趋等。EFDC 模型可以用于模拟包括 COD、氨氮、总磷、藻类在内的 22 种水质变量的浓度变化。EFDC 模型如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} + \frac{\partial(wC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(K_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K_y \frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K_z \frac{\partial C}{\partial z}) + S_C$$

其中: C —— 水质变量浓度, $[M/L^3]$; u, v, w —— 分别为 x, y, z 方向的速度分量, $[L/T]$;

K_x, K_y, K_z —— x, y, z 方向上的湍流扩散系数, $[L^2/T]$;

S_C —— 每单位体积上的内部外部源汇项, $[M/(L^3 \cdot T)]$ 。

另外,其他国家如德国、荷兰等也分别开发了比较有效的水质模型,在水质模拟和环境管理中发挥了重要作用。关于其他河流水质模型和相关软件的介绍可参考文献^{[2][21][22]}。

二、河口水质模型^{[2][3]}

河口,是指入海河流受到潮汐作用的一段水体,它与一般河流的最大差别是其受到潮汐的影响,水质显示出明显的时变特征。

潮汐对于河口水质的影响具有两重性:一方面,随着海潮的涌入,大量的 Cl^- 及携带的泥沙进入河口段, Cl^- 及泥沙吸附污染物,使其相对密度增大而沉降;同时海水也带来了大量的溶解氧,增强了河口段的同化能力。另一方面,由于潮流的顶托作用,使污水上溯,从而扩大了污染的范围,延长了污染物在河口的停留时间,有机物的降解会进一步降低水中的溶解氧,使水质下降。此外,潮汐也使河口的含盐量增加。

在通航的河口,其宽度一般都较大,也较深。在无组织排放的条件下,可能有很多排放口伸入河口,因而污染物要经过很长距离才能完成横向混合,并且其混合输移的过程也要比河流更复杂。因此,对河口水文特征进行分析是建立与应用河口水质模型的必要前提。

(一) 河口的水文特征

河口是一个受潮汐影响、上有淡水输入、下与外海自由相连的半封闭水体。如同河流中的混合一样,潮流混合是由于小尺度的紊动扩散和大尺度平均流速场共同作用的结果。但由于河口潮流区引起水流情况变化的因素比河道要多,除一般的重力作用外,还有潮汐和浮力的作用,另外,河口潮流区受风的影响更大,地形也更不规则,这就使得潮流中的混合比河道要复杂很多。

与河流相比,一般潮流混合有以下几个特点。

1. 混合的非恒定性

对河道来说,一般情况下(除洪水外)在较长时期内可按恒定流考虑。但在潮流区,由于每天2次(或1次)的潮汐变化使水流来回流动,时涨时退;加上河口地区一般都比较开阔,风对流动有较明显的影响,在任意周期的风力变化作用下,水流在半天(或1d)内周期性变化的同时,还有低周期的随机变化。流动的非恒定性使水体的混合情况也随时间而明显地变化。

2. 潮汐的抽吸和阻滞作用

潮流除引起紊动混合外还产生较大尺度的流动。较大尺度的流动除引起类似于河流中的剪切离散外还引起其他一些环流,这类环流对河口中的混合产生抽吸作用和阻滞作用。

所谓抽吸作用,是指潮汐作用产生的环流,就好像在水域中放置水泵使水体循环的现象。而 H. B. Fischer 则将在潮汐作用下因岸边低速水流引起的物质分散现象称为潮汐的阻滞作用。在一些河口,它可能是引起纵向离散的主要原因。

3. 密区分层与斜压环流作用

河口中有来自河流的淡水和来自海洋的咸水,在浮力作用下密度小的淡水和密度大的海水将分别趋向水面和河底,促使发生分层流动。而潮汐的作用则促使水体混合,对分层起破坏作用,这就是密区分层。对一个局部分层的河口来说,密度等值线的顶部倾向海洋而底部倾向陆地。这意味着潮周平均流速在表层朝向海洋,而在底层朝向陆地,从而在水流内部产生一个因密度变化引起的环流。为与等密度流动中所发生的“正压环流”相区别,把它叫做“斜压环流”。斜压环流是河口混合中需要分析确定的一个问题,是分层河口混合的一个重要机理。

(二) 河口水质模型基本方程

污染物在河口潮流区的混合输移过程是在三维空间上进行的,其水质模型的基本方程形式如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = E_{t,x} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + E_{t,y} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + E_{t,z} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - KC + \sum S_i \quad (3-83)$$

由于该式求解困难,加上在河口水质的预测方面人们更关心潮周平均、高潮平均和低潮平均的水质,因此有必要、也可以忽略掉一些次要因素;假设污染物在竖向或横向的浓度分布是均匀的,从而可以用一维或二维模型来描述河口水质的变化规律。

1. 一维动态混合衰减模型

尽管在整个周期里净水流是向下游流动的,但潮汐作用使水流在涨潮时向上游运动。在充分混合段的一维河口,纵向弥散是主要影响因素。

如果取污染物浓度的潮周平均值,可写出充分混合段的一维河口水质模型:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(AM_l \frac{\partial C}{\partial x} \right) - K_1 C + S_p \quad (3-84)$$

对于连续稳定排放, $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$, 有

$$M_l \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - K_1 C + S_p = 0 \quad (3-85)$$

其中: S_p ——污染源强, (mg/L);

M_l ——断面的纵向混合系数, (m^2/s), 它是河口潮流区各种弥散作用的综合反映。

欧康奈尔对于定常的断面积和淡水流量的均匀河口, 给出了上式的解析解:

均匀河口, 上游 ($x < 0$, 自 $x = 0$ 处排入):

$$C = C_h + \frac{C_p Q_p}{(Q_h + Q_p) M} e^{\frac{u_x}{2M_l}(1+M)} \quad (3-86)$$

下游 ($x > 0$):

$$C = C_h + \frac{C_p Q_p}{(Q_h + Q_p) M} e^{\frac{u_x}{2M_l}(1-M)} \quad (3-87)$$

$$M = \sqrt{1 + \frac{4K_1 M_l}{u_x^2}} \quad (3-88)$$

其中: C_h ——河流上游污染物浓度, (mg/L); C_p ——污染物排放浓度, (mg/L);

Q_h ——河流流量, (m^3/s); Q_p ——废水排放量, (m^3/s); 其余符号同前。

对于断面面积与距离成正比 ($A = \frac{A_0}{X_0} x$) 的河口

$$x < x_0 \text{ 时 } C = C_h + \frac{C_p Q_p x_0}{A_0 M_l} N_E \left[x_0 \left(\frac{K_1}{M_l} \right)^{1/2} \right] J_E \left[x \left(\frac{K_1}{M_l} \right)^{1/2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^E \right] \quad (3-89)$$

$$x > x_0 \text{ 时 } C = C_h + \frac{C_p Q_p x_0}{A_0 M_l} J_E \left[x_0 \left(\frac{K_1}{M_l} \right)^{1/2} \right] N_E \left[x \left(\frac{K_1}{M_l} \right)^{1/2} \left(\frac{x}{x_0} \right)^E \right] \quad (3-90)$$

$$E = \frac{Q_h X_0}{2A_0 M_l}$$

其中: A_0 —— $x = x_0$ 处河流的断面面积, (m^2); J_E ——第一类 E 阶贝塞尔函数;

N_E ——第二类 E 阶贝塞尔函数; E ——贝塞尔函数的阶数。

2. BOD-DO 耦合模型

对于一维稳态问题, 描述河口氧亏的基本模型为:

$$M_l \frac{\partial^2 D}{\partial x^2} - u_x \frac{\partial D}{\partial x} - K_2 D + K_1 L = 0 \quad (3-91)$$

若给定边界条件, 当 $x = \pm \infty$ 时 $D = 0$, 上式的解为:

对于排放口上游 ($x < 0$)

$$D = \frac{K_1 C_p Q_p}{(K_2 - K_1) Q_h} [A_1 - B_1] \quad (3-92)$$

对于排放口下游 ($x > 0$)

$$D = \frac{K_1 C_p Q_p}{(K_2 - K_1) Q_h} [A_2 - B_2] \quad (3-93)$$

其中：

$$A_1 = \frac{\exp\left[\frac{u_x}{2M_l}(1+j_1)x\right]}{j_1} \quad A_2 = \frac{\exp\left[\frac{u_x}{2M_l}(1+j_2)x\right]}{j_2}$$

$$B_1 = \frac{\exp\left[\frac{u_x}{2M_l}(1-j_1)x\right]}{j_1} \quad B_2 = \frac{\exp\left[\frac{u_x}{2M_l}(1-j_2)x\right]}{j_2}$$

$$j_1 = \sqrt{1 + \frac{4K_1M_l}{u_x^2}} \quad j_2 = \sqrt{1 + \frac{4K_2M_l}{u_x^2}}$$

式中符号同前。

由式(3-92)和式(3-93)就可以绘出河口区排放口上、下游的氧亏分布图(图3-8)。由图中的氧亏分布曲线可见,涨潮时(虚线)由于潮水的顶托,河水的流动趋于静止($u_x = 0.01\text{m/s}$),最大氧亏值出现在排放口附近;同时由于潮水带来大量的溶解氧,临界氧亏值要比河流中的小很多。

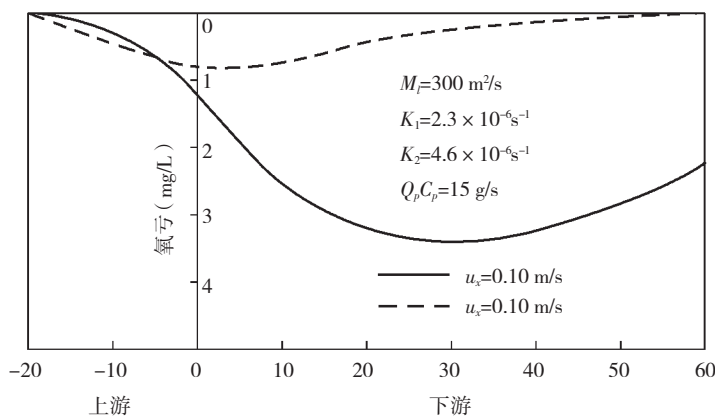


图 3-8 一维潮汐河口的氧亏

3. 二维动态混合衰减数值模型

对于污染物在河口区的混合过程段,可以采用二维动态混合衰减模型预测水质变化,二维模型的基本形式如下:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = M_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + M_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - KC + \sum S_i \quad (3-94)$$

由于河口水文条件的复杂性,难以求得上式的解析解,在实际研究过程中多采用有限差分等数值解法。关于河口水质模型的其他形式可以参考相关的书籍,有限差分等数值解法在本书第四章将有介绍。

三、湖泊与水库水质模型^{[2][3][4]}

天然湖泊与人工水库均系占有陆地较封闭洼地的蓄水体,水面积一般较大、水流缓慢、换水周期长,水体的自净能力是地表水中最弱的一类,随地表径流进入到湖库中的污染物累

积效应明显,与河流相比存在诸多不同的环境问题。

(一) 湖泊和水库的水质特征

水在水库和湖泊中的停留时间较长,一般可达数月甚至数年。湖库一般属于静水环境,湖泊和水库中的化学和生物学过程保持一个比较稳定的状态。由湖泊和水库的边缘至中心,由于水深的不同产生明显的水生植物分层。在浅水区生长有挺水植物。往深处,生长着扎根湖底,但茎叶不露出水面的沉水植物。此外,浮游动植物、自游动植物在各处都可以看到。

由于湖泊和水库属于静水环境,所以一般水流速度很低、停留时间很长,水体的大气复氧能力极为有限,进入湖泊和水库中的营养物质在其中不断积累。因而在湖泊与水库中,最突出的水质问题就是下层厌氧状态的发生和水体富营养化。

所谓富营养化是指这样一种过程:低浮游生物生产率(低营养物输入)的湖泊与水库变成高浮游生物生产率(高营养物输入)的湖泊与水库。在这一过程中,先是出现少量的硅藻和绿藻,接着大量的蓝绿藻开始繁殖,致使水体发臭水质变坏,使本来是天蓝色的水体变成绿色的水体。

从湖泊的发展过程看,由贫营养向富营养的过渡是一个正常的过程,所有的天然湖泊都会经历这一典型的“老化”过程。只是在自然状态下,这个过程进展非常缓慢,通常需要用地质年代的时间尺度来衡量。进入湖泊的河水,输入了沉淀物和溶解物质,沉淀物质沉积在湖泊底部,而溶解物质中的营养物使水中的藻类大量繁殖,藻类的繁殖又造成营养物在湖泊中的积累,使得湖泊的生物产率越来越高,营养越来越丰富。富营养化的结果使有机物生长繁茂,湖底堆积物越来越多,水深越来越浅,最后变成沼泽。

人类的干预活动(如大规模的生产活动)可以急剧地缩短湖泊的“老化”过程,加速湖泊的富营养化。使湖泊的发生、发展和消亡的周期大大缩短。

根据湖泊和水库中营养物含量的高低,可以把它们分为富营养型和贫营养型。一般,高山地区和水温较低的深水湖泊和水库大多是贫营养型的,而水深较浅、生产率高的湖泊和水库,通常属于富营养型。

对于所有的深度较大的湖泊和水库,几乎都发生热分层现象。如果在较深的湖泊和水库中,贮蓄水量比年流量大得多,那么在一年的大部分时间里,这些湖泊中的等温线是水平的,而且在夏末和秋初形成稳定的分层。在秋末冬初和春末夏初湖库表层水温受气温影响急剧下降,使表层水密度大于底层水密度,发生“翻池”现象。一般地,早春时节,湖库中的水温接近等温状态;在春季和夏季热分层明显,在冬季又恢复到初始状态。

湖库的水温结构,大致可分为分层型和混合型两种。分层型湖库的水温结构与湖库温度、气温、水体流动特性有密切关系,并受进水口位置、高程、水库调度、水文状况等复杂关系的影响。分层型湖库内水的滞留时间长,水质现象比较显著。混合型湖库出现在湖库内水流急、掺混强的中小型湖库,一年中湖库的水温分布大致相同。混合型湖库,湖库内滞留时间短,一般水质问题并不严重。

(二) 湖泊与水库的营养源与营养负荷

湖泊、水库的基本水质问题是富营养化,富营养化的一个重要标志是某些营养物质的刺激,使浮游生物,特别是某些蓝藻、绿藻和硅藻大量繁殖,在水面形成稠密的藻被层;同时,大量死亡的藻类沉积在底部进行耗氧分解,使水中溶解氧下降,引起鱼类和其他水生生物的死亡。

由雷比格(Liebig)的最小值定理可知:任何一种有机物的产率都由该种有机物所必需的、在环境中的丰度最低的物质所决定。所谓丰度指环境中的各种营养物质满足藻类生长的程度。描述微生物的营养闲置的莫诺得(Monod)模型,反映了这一关系:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S}{KS + S} \quad (3-95)$$

其中: μ ——微生物的生长速率; $\mu_{\max}$ ——微生物的最大生长速率;

S ——营养物质的实际浓度; KS ——营养物质的半饱和浓度。

在自然界所提供的养分中,磷的丰度一般偏低,往往是富营养化问题的制约因素。但在工业化和城市化程度不断提高的今天,人类活动对于湖库的影响越来越大,使得磷作为控制因素的情况正在发生改变。同时经实际观察证明,藻类的生长可能受到一种以上因素的制约。在一种营养物消耗殆尽之前,藻类并不是以最大速度增长,直至一种营养物枯竭时停止增长;而是以一个较低的速度消耗着各种营养物质。假定碳、氮和磷都是藻类生长的主要成分,则藻类的增长速率可用下式表示:

$$\mu = \mu_{\max} \frac{PS}{KP + PS} \cdot \frac{NS}{KN + NS} \cdot \frac{CS}{KC + CS} \quad (3-96)$$

其中: PS 、 NS 、 CS ——分别是可以用于光合作用的溶解态的磷、氮和碳的含量;

KP 、 KN 、 KC ——分别是相应的半饱和浓度。

在多种营养成分条件下,藻类的增长速率要比单一成分时低得多。

对于湖泊和水库的营养源(营养物的来源),目前一般考虑三个方面:由地面径流输入的营养源;由降水、降尘输入的营养源;以及由城市或工业污水输入的营养源。

而对于湖泊和水库的总营养负荷(湖泊、水库在单位时间内接受的营养物质的量,一般单位时间可取一年),可由下式表示:

$$I_j = I_{jl} + I_{jp} + I_{js} + I_{jk} \quad (3-97)$$

其中: I_j ——湖泊、水库的第 j 种营养物的总负荷, (g/a);

I_{jl} ——地面径流引起的第 j 种营养物的负荷, (g/a);

I_{jp} ——由降水输入的第 j 种营养物的负荷, (g/a);

I_{js} ——流入湖泊或水库的生活污水中的第 j 种营养物的负荷, (g/a);

I_{jk} ——由第 k 种工业废水输入的第 j 种营养物的负荷, (g/a);

且有:

$$I_{jl} = \sum_{i=1}^m A_i E_{ij}$$

式中: A_i ——第 i 种土地利用类型的面积, (m²); m ——土地利用类型的总数;

E_{ij} ——第 i 种土地利用类型的单位面积上第 j 种营养物的流失量, (g/m²)。

$$I_{jp} = C_j P A_s$$

式中: A_s ——湖库的水面面积, (m²); P ——年降水量, (m/a);

C_j ——第 j 种营养物在降水中的含量, (g/m³)。

$$I_{js} = sE_{js}$$

式中: s ——产生污水的人数, 人; E_{js} ——每人产生的第 j 种营养物的量, (g/人·a)。

$$I_{jk} = \sum_{k=1}^n Q_k E_{jk}$$

式中: Q_k ——第 k 种废水的排放量, (m³/a); n ——含第 j 种营养物的污水的污染源数;

E_{jk} ——第 k 种废水中第 j 种营养物的含量, (g/m³)。

(三) 湖泊与水库的箱式水质模型

湖泊、水库的箱式水质模型最早是由沃伦威得尔(R. A. Vollenweider)在20世纪70年代研究北美大湖时提出的。箱式模型把输入湖泊的某一水质组分的总量、湖泊中该水质组分的浓度与湖泊的自然特征, 如平均水深、水利停留时间等建立关系。箱式模型并不描述发生在湖泊内的物理、化学和生物过程, 同时也不考虑湖泊和水库的热分层。它是从宏观上研究湖泊、水库中营养平衡的输入—产出关系的模型。

1. 完全混合箱式模型

由于目前湖库所面临的主要水质问题是富营养化问题, 而在富营养化发生的过程中, 很长的水力停留时间使排入的污染物有足够的时间扩散到水体的各个位置。因而对湖库水质的研究更多的是关注湖库中的污染物的平衡浓度, 这样对于中小型湖库, 就可以通过较长的时间尺度来忽略掉污染物在各个方向上的浓度梯度, 而将湖库视为一个完全混合的反应器, 用零维模型来描述。

(1) 沃伦威得尔(Vollenweider)模型

Vollenweider假定, 对于停留时间较长、水质基本处于稳定状态的湖库, 可以被作为一个均匀混合的水体进行研究。其中污染物浓度随时间的变化率是输入、输出和在湖库内沉积衰减的该种污染物的量的函数。其基本方程形式如下:

$$V \frac{dC}{dt} = I_c - sCV - QC \quad (3-98)$$

其中: C ——某种营养物质的浓度, (g/m³); V ——湖泊或水库的容积, (m³);

I_c ——某种营养物质的总负荷, (g/a); Q ——湖库水流出量, (m³/a);

s ——营养物在湖泊或水库中沉积速度常数, (1/a)。

如果引入冲刷速度常数 $r = \frac{Q}{V}$, 同时改写式(3-98), 可得

$$\frac{dC}{dt} = \frac{I_c}{V} - sC - rC \quad (3-99)$$

在给定的初始条件, 当 $t = 0, C = C_0$ 时, 式(3-99)的解析解为:

$$C = \frac{I_c}{V(s+r)} + \frac{V(s+r)C_0 - I_c}{V(s+r)} \exp[-(s+r)t] \quad (3-100)$$

在湖泊、水库的出流、入流流量及营养物质输入稳定的情况下, 当 $t \rightarrow \infty$ 时, 可达到营养物质的平衡浓度 C_p :

$$C_p = \frac{I_c}{V(s+r)} \quad (3-100a)$$

如果进一步令

$$t_w = \frac{1}{r} = \frac{V}{Q} \text{ 和 } V = A_s h$$

将以上两式代入式(3-100a) 得到:

$$C_p = \frac{L_c}{sh + h/t_w} \quad (3-101)$$

式中: t_w ——湖泊或水库的水力停留时间, (a); A_s ——湖泊或水库的水面面积, (m²);

h ——湖泊或水库的平均水深, (m);

L_c ——湖泊或水库的单位面积营养负荷, $L_c = I_c/A_s$, (g/m² · a)。

(2) 吉柯奈尔—迪龙(Kirchner—Dillon) 模型

式(3-101) 是 Vollenweider 提出的湖泊营养物浓度预测模型。该模型应用的困难在于确定营养物在水库中的沉积速度常数 s 。为此, Kirchner 和 Dillon 在 1975 年引入了滞留系数 R_c , 成功解决了这一困难。所谓滞留系数是指营养物在湖泊或水库中的滞留分数, 根据滞留系数的定义, Kirchner—Dillon 模型可写为:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{I_c(1-R_c)}{V} - rC \quad (3-102)$$

在给定的初始条件, 当 $t = 0, C = C_0$ 时, 式(3-102) 的解析解为:

$$C = \frac{I_c(1-R_c)}{rV} + \left[C_0 - \frac{I_c(1-R_c)}{rV} \right] e^{-rt} \quad (3-103)$$

若湖泊、水库的入流、出流与污染物的输入处在稳定状态, 当 $t \rightarrow \infty$ 时, 可得式(3-103) 的平衡浓度 C_p :

$$C = \frac{I_c(1-R_c)}{rV} = \frac{L_c(1-R_c)}{rh} \quad (3-104)$$

滞留系数 R_c 可根据流入和流出的支流的流量和营养物浓度近似计算:

$$R_c = 1 - \frac{\sum_{j=1}^m q_{oj} O_{oj}}{\sum_{k=1}^n q_{ik} O_{ik}} \quad (3-105)$$

其中: q_{oj} ——第 j 条支流的出流量; C_{oj} ——第 j 条支流的营养物浓度;

q_{ik} ——由第 k 条支流输入湖库的流量; C_{ik} ——第 k 条支流的营养物浓度;

m ——流入湖库的支流数; n ——流出湖库的支流数。

2. 分层箱式模型

湖库的一个显著的水文特征就是夏季的温度分层, 由于上高下低的温度所造成的密度差导致了夏季湖库水质强烈的分层。对于这种情况, 需要用分层箱式模型来描述水质的变化

趋势。

分层箱式模型把上层和下层各视为完全混合模型,在上下层之间存在着紊流扩散的传递作用。分层箱式模型分为夏季模型和冬季模型:夏季模型考虑上、下层的分层现象;冬季模型则考虑上下层的循环作用。分层箱式模型所包含的水质组分为正磷酸盐(P_o)和偏磷酸盐(P_p)。

(1) 分层期模型(夏季模型)

表层正磷酸盐 P_{oe}

$$V_e \frac{dP_{oe}}{dt} = \sum Q_j P_{oj} - Q P_{oe} - P_e V_e P_{oe} + \frac{K_{th}}{Z_{th}} A_{th} (P_{oh} - P_{oe}) \quad (3-106)$$

表层偏磷酸盐 P_{pe}

$$V_e \frac{dP_{pe}}{dt} = \sum Q_j P_{pj} - Q P_{pe} - S_e A_{th} P_{pe} + P_e V_e P_{oe} - \frac{K_{th}}{Z_{th}} A_{th} (P_{ph} - P_{pe}) \quad (3-107)$$

下层正磷酸盐 P_{oh}

$$V_h \frac{dP_{oh}}{dt} = r_h V_h P_{ph} + \frac{K_{th}}{Z_{th}} A_{th} (P_{oe} - P_{oh}) \quad (3-108)$$

下层偏磷酸盐 P_{ph}

$$V_h \frac{dP_{ph}}{dt} = S_e A_{th} P_{pe} - S_h A_s P_{ph} - r_h V_h P_{ph} - \frac{K_{th}}{Z_{th}} A_{th} (P_{pe} - P_{ph}) \quad (3-109)$$

其中:下标 e 和 h 分别代表上层和下层;下标 th 和 s 分别表示斜温区和底部沉淀区的界面; P 和 r 表示净产生和衰减的速度常数; K 表示竖向扩散系数,包括湍流扩散和分子扩散,也包括内波、表面风波以及其他过程对热传递或物质穿越斜温层的影响; $\bar{Z}$ 是平均水深; V 是箱的体积; A 是界面面积; Q_j 是由河流流入湖泊的流量; Q 是流出湖泊的流量; S 是磷的沉淀速度常数。

在冬季,由于上部水温下降,密度增加,产生上、下层的水量循环,由富营养区(上部)和贫营养区(下部)之间磷的平衡,可得如下方程:

对全湖内的正磷酸盐 P_o :

$$V \frac{dP_o}{dt} = Q_j P_{oj} - Q P_o - P_{eu} V_{eu} P_o + r V P_p \quad (3-110)$$

对全湖内的偏磷酸盐 P_p :

$$V \frac{dP_p}{dt} = Q_j P_{pj} - Q P_p + P_{eu} V_{eu} P_o - r V P_p - S A_s P_p \quad (3-111)$$

其中:下标 eu 代表富营养区,其余符号同前。

夏季的分层模型和冬季的循环模型,可用秋季和春季的“翻池”过程形成的完全混合状态的边界条件联系起来,在完全混合时,整个湖库的浓度是均匀分布的,即

$$\begin{aligned} P_o &= \frac{P_{oe} V_e + P_{oh} V_h}{V} \\ P_p &= \frac{P_{pe} V_e + P_{ph} V_h}{V} \end{aligned} \quad (3-112)$$

式(3-112)可作为夏季分层模型和冬季循环模型的初始条件。

(四) 非完全混合水质模型

对于水域宽阔的大湖泊,当其污染源来自某些入湖河道或沿湖厂、矿时,污染往往仅出现在入湖河口与排污口附近的水域,污染物浓度梯度明显。这时若采用均匀混合型水质模型往往会造成很大的误差,因而需要研究污染物在湖水中稀释、扩散规律,采用不均匀混合水质模型进行描述。

污染物在开阔湖面的湖水中的稀释扩散现象较为复杂,不宜简单套用河流中一维扩散方程,一般可用有限容积模型,而且扩散系数应当考虑风浪等更多因素影响。在研究湖泊水质模型时,采用圆柱形坐标较为简便,这样湖泊中的二维扩散问题可简化为一维扩散问题。

1. 湖泊扩散的水质模型

A. B. 卡拉乌舍夫在研究难降解污染物在湖水中心稀释扩散规律时采用了圆柱形坐标,应用质量平衡原理推得如下的扩散方程:

$$\frac{\partial C_r}{\partial t} = \left(M_r - \frac{Q_p}{\phi H} \right) \frac{1}{r} \frac{\partial C_r}{\partial r} + M_r \frac{\partial^2 C_r}{\partial r^2} \quad (3-113)$$

其中: C_r ——所求计算点的污染物浓度, (mg/L);

M_r ——径向湍流混合系数, (m²/d);

Q_p ——排入湖中的废水量, (m³/d);

ϕ ——废水在湖库中的扩散角(根据湖库岸边形状和水流状况确定,中心排放取 2π 弧度,在开阔、平直和与岸边垂直时取 π 弧度);

r ——湖内某计算点到排出口距离, (m)。

当为稳定排放,且边界条件取距排放口充分远的某点 r_0 处的现状值 C_{r_0} ,将式(3-113)积分得:

$$C_r = C_p - (C_p - C_{r_0}) \left(\frac{r}{r_0} \right)^{\frac{Q_p}{\phi H M_r}} \quad (3-114)$$

对于径向湍流混合系数 M_r ,考虑到风浪的影响,可采用下述经验公式计算:

$$M_r = \frac{\rho H^{2/3} d^{1/3}}{f_0 g} \sqrt{\left(\frac{uh}{\pi H} \right)^2 + \bar{u}^2} \quad (3-115)$$

其中: ρ ——水的密度; H ——计算范围内湖库的平均水深;

d ——湖底沉积物颗粒的直径; g ——重力加速度; h ——波高;

f_0 ——经验系数; $\bar{u}$ ——风浪和湖流造成的湖水平均流速。

2. 易降解物质简化的水质模型

当湖水流速很小、风浪不大、湖水稀释扩散作用较弱的情况下,可将式(3-113)中的扩散项忽略,并考虑污染物的降解作用,这样即可得到稳态条件下污染物在湖库中推流和生化降解共同作用下的基本方程:

$$Q_p \frac{dC_r}{dr} = -K_1 C_r H \phi r \quad (3-116)$$

当边界条件取 $r = 0$ 时, $C_r = C_{r_0}$ (C_{r_0} 为排出口浓度),则其解析解为:

$$C_r = C_{r0} \exp\left(-\frac{K_1 \phi H r^2}{172800 Q_p}\right) \quad (3-117)$$

当考察湖库的水质指标溶解氧时,并只考虑 BOD 的耗氧因素与大气的复氧因素,可在前面的条件下推导出湖库的氧亏方程:

$$Q_p \frac{dD}{dr} = (K_1 L - K_2 D) H \phi r \quad (3-118)$$

其解析解为:

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{K_2 \phi H r^2}{2 Q_p}\right) + \frac{K_1 L_0}{K_2 - K_1} \left[\exp\left(-\frac{K_1 \phi H r^2}{2 Q_p}\right) - \exp\left(-\frac{K_2 \phi H r^2}{2 Q_p}\right) \right] \quad (3-119)$$

式中的 D_0 为排放口处的氧亏量。

(五) 狭长湖库移流衰减模型

对于形状狭长、污水从顶端入口附近排入的湖库,可近似看作是一条河流,其水质变化状况可用移流衰减模型来描述和计算:

$$C_l = \frac{C_p Q_p}{Q_h} \exp\left(-K_1 \frac{V}{86400 Q_h}\right) + C_h \quad (3-120)$$

其中: C_l ——狭长湖库出口处污染物的平均浓度, (mg/L);

C_h ——湖库中污染物的现状浓度, (mg/L);

V ——湖库的容积, (m^3); Q_h ——湖水的出流量 (m^3/s)。

C_p 、 Q_p ——分别是废水的浓度 (mg/L) 和排放量 (m^3/s)。

(六) 湖库环流二维稳态混合衰减模型

对于近岸环流显著的大型湖库,横向弥散混合作用显著,可降解污染物的运动转化状况需用二维模型来描述。

岸边稳态排放:

$$C(x, y) = \left[C_h + \frac{C_p Q_p}{H \sqrt{\pi M_y x u}} \exp\left(-\frac{u y^2}{4 M_y x}\right) \right] \exp\left(-K_1 \frac{x}{86400 u}\right) \quad (3-121)$$

非岸边稳态排放:

$$C(x, y) = \left\{ C_h + \frac{C_p Q_p}{2 H \sqrt{\pi M_y x u}} \left[\exp\left(-\frac{u y^2}{4 M_y x}\right) \exp\left(-\frac{u(2a + y)^2}{4 M_y x}\right) \right] \right\} \exp\left(-K_1 \frac{x}{86400 u}\right) \quad (3-122)$$

其中: a ——排放口到岸边的距离, (m); u ——环流的速度, (m/s);

M_y ——横向混合系数, (m^2/s)。

可采用爱—兰(Elder—Leendertse) 公式估计:

$$M_y = 18.57 \nu h / C_z \quad (3-123)$$

其中: ν ——横向的湖流速度, (m/s); h ——预测区域的平均湖水深度, (m);

C_z ——Chezy(谢才) 系数, ($m^{1/2}/s$)。

(七) 其他湖泊、水库的水质模型及软件

1. SELECT

美国陆军工程兵团水道实验站的一维模型 SELECT 可以预测已知密度的水库取水时的垂向范围与分布, 以及给定流量时的水质分布。利用这种模型对取水区的预测时, SELECT 把一些参数(诸如温度、溶解氧和铁)当作守恒性物质来处理、计算其放水的水质, 它可以做单一的程序, 也可以以子程序的形式结合到其他模型中去, 下述的 CE—QUAL—R1 也是如此。

2. CE—QUAL—R1

一维 CE—QUAL—R1 模型用于确定水质参数垂向位置随时间变化的值。它将一个水库概括为垂直方向一系列的水平层, 且每一层内的热能和杂质都均匀分布。它所模拟的基本物理过程包括水面热传递、短波与长波辐射与贯透、对流混合、风与水流诱生的混合、因抽水蓄能的入流而使周围的水体渗气、入流的异重流位置、选择性取水以及温度异重流和溶解的、悬移的固体所造成的分层现象。CE—QUAL—R1 所模拟的化学和生物过程, 包括大气交换、光合作用、吸收有机质、分解氮的硝化作用以及还原物质的化学氧化对溶解氧的影响; 对磷和氯的吸取、排泄和再生; 在需氧和厌氧条件下的硝化和脱硝作用; 碳的循环与碱度、pH 值、CO₂ 的相互作用; 浮游植物的营养关系; 穿过较高营养层次的传递; 岩屑和有机泥沙的聚集与分解; 大肠杆菌的致命程度; 锰、铁、硫在厌氧条件下的积累与再氧化等。

3. COORS 和 LARM

COORS(水库分层计算模型)和 LARM(横向平均的水库模型)都是求解水库中直立平面内的二维对流扩散方程, 二者都具备预测很深的水库在 1 年内分层循环中的温度结构的功能。这两个模型还能够提供水库随时间和空间变化的水动力学条件, 以供水质模型对流部分用。

4. CE—QUAL—W2

前面在讲河流水质模型中已经提到过 CE—QUAL—W2 模型, 事实上, 最初 CE—QUAL—W2 的建立是针对水库的, 该模型也是一个二维模型。

其他相关的水库湖泊模型及软件可参考文献[2][21][22]。

四、近海水域水质模型^[2]

随着沿海工业、近海工程以及海洋开发的迅速发展, 近海水域遭到越来越严重的污染, 使海域环境质量明显下降, 生态环境日趋恶化, 并对生物资源和人体健康产生严重影响。近海水域的污染已成为世界各国所共同关心的环境问题。

为了阐明污染物在近海水域或沿岸水域内的输运规律以及污染物浓度的分布和变化, 一般要运用流体动力学过程来进行描述。而环境流体动力学则普遍采用数值模型和计算机模拟现实的流场和浓度场。

在近海水域环境影响预测中, 为了做到正确选用近海水域流场模型, 需充分考虑海域的主要特征。

(一) 二维流体动力学模型

对于沿岸浅海, 特别是半封闭海湾, 其基本运动是由外来潮波引起的潮汐运动, 即胁振潮。因此, 我们主要研究潮波及潮余流。余流是指经过一个潮汐周期海水微团的净位移。

描述潮波运动的参考坐标系,被置于所谓的“ f -平面”上,即不考虑地球曲率的影响。这种近似描述适用于水平范围远小于地球半径的海域,这对于沿岸海域和海湾是适用的。

通常,选用一个固着于“ f -平面”上的直角坐标系(xoy -平面)和静止海面重合,组成右手坐标系, z 轴向上为正,则描述垂向充分混合海域的平均运动可用下式表示:

$$\begin{aligned}\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[(h+z)u] + \frac{\partial}{\partial y}[(h+z)v] &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv + g \frac{\partial z}{\partial x} + g \frac{u \sqrt{u^2 + v^2}}{C_z^2(h+z)} &= 0 \\ \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} + u \frac{\partial v}{\partial y} + fu + g \frac{v \sqrt{u^2 + v^2}}{C_z^2(h+z)} &= 0\end{aligned}\quad (3-124)$$

其中: C_z ——Chezy(谢才)系数,可按曼宁(Manning)公式计算, ($m^{1/2}/s$);

f ——柯氏参量,反映地球自转影响, $f = 2\omega \sin \varphi$, ω 为地球自转角速度, φ 为北纬纬度;

h ——自静止水面算起的海水深度;

z ——自静止水面算起的水位高度,即代表潮位涨落;

u, v ——分别对应 x, y 轴的流速分量;其余符号同前。

在实际计算中,无论二维问题还是三维问题,由于浅海较强的湍流耗散作用,总是取零值初始条件。因为任何初始能量,经过一定时间后总要耗散掉,故当计算达到一定时间以后初始效应总会消失,而只是由脉振潮在起作用。因此计算可做如下处理。

1. 初值

可以从零开始,也可以利用过去的计算结果或实测值直接输入计算。

2. 边界条件

(1) 陆边界 边界的法线方向流速为零。

(2) 水边界 可以输入根据开边界上已知潮汐周和常数的水位表达式或边界点上的实测水位过程。

(3) 有水量流入的水边界 当流量较大时,边界点的连续方程应增加 $\Delta t Q_{hi} / (2\Delta x \cdot \Delta y)$ 项;当流量较小时可以忽略(Q_{hi} 为流入水量)。

(二) 潮流混合模型

海湾中污染物的输运模型是在潮流流场模型基础上建立的,它用以预测有新的污染负荷进入时海域污染物的浓度分布。常用的二维平流-扩散物质输运模型如下:

$$\begin{aligned}\frac{\partial [(h+z)C]}{\partial t} + \frac{\partial [(h+z)uC]}{\partial x} + \frac{\partial [(h+z)vC]}{\partial y} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left[(h+z)M_x \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[(h+z)M_y \frac{\partial C}{\partial y} \right] + S_p\end{aligned}\quad (3-125)$$

其中: M_x, M_y ——分别是纵向和横向混合系数; S_p ——污染源的源强。

上式一般用于预测持久性污染物的浓度分布,对于非持久性污染物在浓度 C 和进入的污染源源强 S_p 中应考虑污染物的衰减,具体处理方法类似于河流或湖泊的处理。

由于海域实际边界的复杂性,也由于运动方程包含了非线性项,其求解十分困难,一般

只能采用有限差分等数值解法。

第三节 地下水水质模拟

随着工农业生产的发展和人们生活水平的提高,人们对地下水资源数量和质量有更高的要求。然而,与此同时地下水的污染越来越严重。在有些地区,地下水的污染已经达到相当严重的程度,不仅限制了生产建设,还对人体健康造成了很大威胁。

以往对地下水的研究主要侧重于地下水运动问题,有关地下水流运动方面的内容可参考相关书籍^{[23][24][25]}。本书将主要介绍有关地下水的水质模型,从而为制定地下水污染防治对策以及地下水系统规划管理提供理论基础。

一、地下水水质模拟的基本原理^{[2][5]}

(一) 地下水污染物迁移转化

人类活动所产生的各种污染物质绝大多数是从地面随下渗水流经土层,进入含水层,而直接向淡水含水层排泄废弃污染物的情况很少。

污染物进入地下水之后将会发生三种变化:

(1) 稀释 在通常的情况下含水层中的地下水水体要远比含污染物质的下渗水大得多,因为含水层厚度可由几米到几十米,所以污染物进入地下含水层后会由于稀释作用使其浓度大大地降低。

(2) 转化 含水层的颗粒一般比较粗大,比表面积小,只具有较小的吸附能力,还可发生一些厌氧条件下的转化。

(3) 运移 当污染物质进入地下水之后,会产生沿地下水流向(x 方向)的纵向弥散和垂直于流向(y 方向)平行于地下水面的横向弥散以及沿含水层厚度的竖向(z 方向)弥散。此外,随着水体的流动还会产生对流扩散。

(二) 地下水质量的数学模拟

1. 模拟所需条件

数学模拟法基本上就是合成一种实际的或抽象的系统,这个系统的输出被认为在一定的程度上接近原型的输出。模拟模型用来再现原型的某些特点,然后按一定的目标函数对所选的方法或政策进行评价。

一般来说,在制定数学模型时必须具备以下资料:

(1) 有关现象的定律或关系;

(2) 初始条件和边界条件。

2. 模拟的一般过程

地下水污染数值模拟,过程一般分为:

(1) 模拟目标和任务的确定

数值模拟的目标和任务常与所研究区域的污染源类型、污染途径或方式、污染现状以及污染趋势有关。如城镇厂矿供水源地地下水污染的趋势与治理方案的最优选择、各种废水排放和废物堆放可能对地下水造成的污染预测、污染的地表水体对地下水污染的影响及其预测、残留在土壤中的农药化肥及污水灌溉可能对地下水造成的污染预测、人工回灌条件下

对地下水水质造成的影响、海水入侵对滨海地区地下水水质的影响和土地盐碱化等问题的预测等。由于问题不同,数值模拟的目标和任务也各异。针对不同的污染问题需要提出不同的模拟任务:如选择可避免污染的水源地或确定合理的开采水量及开采方式;预测已遭污染的含水层天然或人工净化所需时间、补给的水量和位置;圈定污染范围及发展趋势等。

(2) 数学模型的选择

数学模型的选择主要取决于研究的目的、所要求的精度和已有或可能取得的基础资料。如当研究区域的污染源分布广泛,即面源污染(如农田的化肥、农药或污灌引起的污染),且有些污染运移机理不易搞清(包括植物根系吸收、土壤与污染物间的吸收、降解、离子交换等作用过程),预测目的仅限于预测较大范围内水质的长期变化或预测通过包气带或含水层系统后的水质和水量等,则可采用黑箱型水质模型,这种模型只需较少的输入数据。假如研究局部或中等规模的问题,而且精度要求较高,则要采用对流—弥散型模型,因为这类模型可预测污染物在包气带土层或含水层中的时空运移规律,具有普遍性,是目前的研究重点。

(3) 地下水水质模型的建立

在弄清水文地质条件基础上,如掌握含水层的层次、性质、相互之间的水动力联系、地下水的流向、边界条件等内容后,通过对实体进行概化,建立地下水水质模型。

(4) 求解数学模型

一般采用数值模拟求解地下水污染模型,因此需要编制相应问题的计算机程序,程序的编制内容取决于所处理的具体问题的条件和所使用的计算机性能。使用前应准备好程序要求输入的数据。

(5) 模型的识别、检验及预报

在建立了水量和水质模型后需进行参数识别,将已确定的参数的初值和定解条件代入模型中,对野外试验和区域内已有污染情况进行模拟,看模拟结果是否与野外试验和已有实际污染情况相一致,否则,就要用参数调试法或其他最优化方法进行修正,直到满足精度要求为止。模型参数识别以后,需要对模型进行检验,检验后的模型方可用于预报。

3. 污染物在地下水中迁移的基本理论^[2]

污染了的地下水在含水层中的分布是时间和空间的函数。污染物在地下水运移过程中的变化是相当复杂的。

在理解污染物在地下水中的迁移过程时,需要了解以下作用过程:

(1) 水动力弥散

当多孔介质中两种流体相接触时,某种物质从含量较高的流体向含量较低的流体迁移,使两种流体分界面处形成一个过渡混合带,混合带不断发展扩大,趋于成为均质的混合物质,这种现象称为水动力弥散现象。形成弥散现象的作用称为弥散作用,主要是渗透分散和分子扩散作用。

(2) 分子扩散

两种含某种组分浓度不同的液体在多孔介质中接触时,即使在整个液体静止的条件下也会发生物质的迁移,分界面逐渐变得模糊不清,形成一个过渡带,并随着时间推移逐渐扩大,直到两种液体中的物质浓度完全均匀一致为止。这就是分子扩散所引起的弥散现象。分子扩散作用是由于液体中浓度差(浓度梯度)的物理—化学势引起的,是分子布朗运动的一种现象。如果迁移的距离大于数米或要求预报的期限不是太长时,则在计算预报污染物的分

布时可以不考虑分子扩散作用;只有在没有渗流的条件下研究很短距离的迁移时,或在实验室研究中,才应考虑分子扩散作用。

(3) 渗透分散

物质随渗透水流一同迁移时速度不均所产生的弥散现象称为渗透分散,这常常是自然界引起弥散的主要原因。渗透分散的机制可分为微观的和宏观的。

① 微观渗透分散

从微观来看,渗透分散的机制可以分为三种情况:在多孔介质中,对单个孔管而言,由于液体的粘滞性,受介质表面的摩擦阻力而形成抛物面的实际流速分布,管的中轴线处流速最大;由于孔隙直径的大小不同而使沿孔轴的最大速度发生差异;质点的流线在沿流向方向上弯曲起伏的情况不同,即所走路程的长短不同而引起的沿流向前进速度的差异。这三种情况是同时发生的,综合起来就形成了渗透分散。

② 宏观渗透分散

从地质的观点看微观渗透分散发生在认为是均质的岩石中。自然界除均质岩石外,更多的情况是非均质的,在非均质的岩石中由于各部分岩石的渗透性不同而引起的弥散现象称为宏观渗透分散。宏观渗透分散的机制原则上与微观渗透分散是一致的,仍然是以流速不均匀为主要原因,只不过所研究的单元更大而已。如各层透水性不同的层状含水层,污染水便沿渗透性强的岩层呈舌状侵入,延伸较远。裂隙或溶隙宽度不等的岩石中,污染水沿宽大裂隙或溶隙弥散的很快,而且可以达到很远的距离。在含有透水性不同的局部包裹体的岩石中也会发生舌状弥散。

二、地下水运动^[2]

地下水在土壤孔隙中的流速因孔径和相应的土水势不同而在各个方向上有所变化,难按其真实情况处理。所以在研究地下水的流速时,只能是在一定容积的土层中取其流速的全部平均值来进行研究。

地下水在多孔介质中运动被称为渗流,一般情况下,可使用达西定律对其加以描述。达西定律表达式见式(3-126)

$$q = -K \frac{dH}{dx} \quad (3-126)$$

式中: x ——水的流程; q ——地下水的通量; dH/dx ——水力梯度; K ——渗透系数。

(3-126)式右端的负号表明水流方向由水压或土水势高处向低处流动。 K 由两方面的性质决定:一是土壤本身的导水难易;二是水的性质,如粘滞度及密度等。当为简化而设地下水的粘滞度及密度为定值时,则 K 值只随土壤的导水难易变化。

达西定律运用于地下水的饱水流动和非饱水流动时不尽相同。在饱水流动中土水势为零, K 为常数(不随水压值的大小而变化);但在非饱水流动中, K 是变数,当土壤水吸力不同时, K 值也随之变化。

(一) 饱水条件下的地下水运动

在饱水条件下地下水运动的特点是地下水流动的动力是重力(势)和静水压(势)梯度。

1. 垂直向下流动

垂直向下流动如图 3-9 所示,表面有稳定的水层,水头为 H ,土柱下端在一个固定的水槽上,土柱完全饱水,水流通过土柱的长度为 L 。

根据达西定律,则

$$q = K \frac{\Delta H}{L} = K \frac{H_1 + L}{L} = K \frac{H_1}{L} + K \quad (3-127)$$

其中: H_1, L ——以水柱高度为单位的水头。

2. 垂直向上的流动

同理可得:

$$q = K \frac{\Delta H}{L} = K \frac{H_1 - L}{L} = K \frac{H_1}{L} - K \quad (3-128)$$

3. 水平流动

水平流动如图 3-10 所示,则有:

$$q = K \frac{H_{pL} - H_{p0}}{L} = K \frac{H_1 - H_0}{L} = K \frac{\Delta H}{L} \quad (3-129)$$

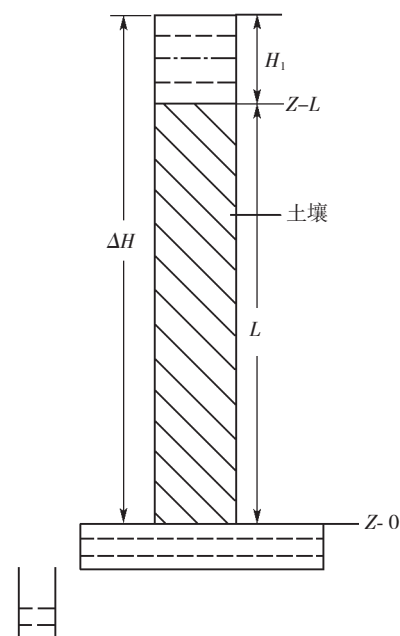


图 3-9 垂直向下的流动

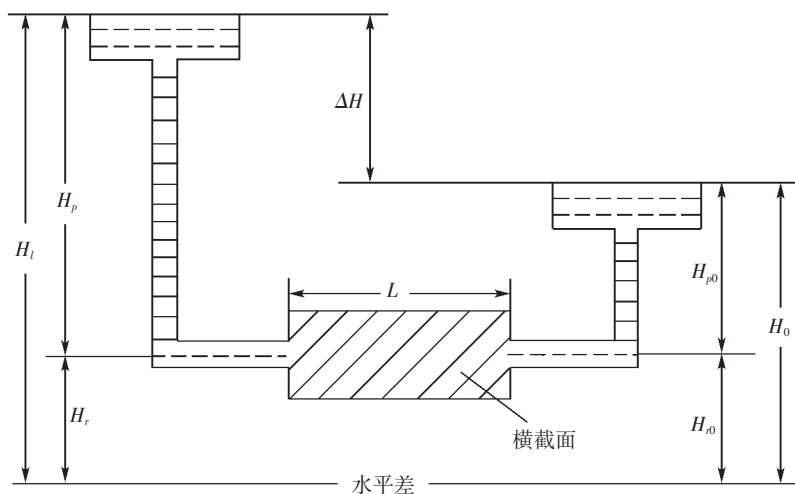


图 3-10 水平流动

影响饱和渗透系数(导水率)的主要因素是孔隙的孔径和数量。一般土壤的实效孔径 $> 0.3\text{mm}$ (土水势 $< -10\text{mbar}$ 的孔隙, $1\text{bar} = 10^5\text{Pa}$), 则水可自由通过; 当实效孔径在 $0.03 - 0.06\text{mm}$ 以上至 0.3mm 的孔径(土水势在 -50 至 -100mbar 到 -10mbar), 在重力作用下, 水也较易通过; 当实效孔径为 0.01mm 时(土水势约为 -300mbar), 水的通过就很慢了。孔

隙的状况是由土壤的质地、结构和密实度决定的。砂土和结构明显的土壤,其粗大孔隙较多,渗透系数(K)也较大。当土壤中裂缝、虫穴、根孔较多时,饱和渗透系数(导水率)也较大。

(二) 非饱水条件下的地下水运动

1. 非饱水流的基本特点

在非饱水条件下,土壤中水流动的推动力主要是基质势梯度(或基质吸力梯度),也有重力作用。基质吸力包括弯月面力和吸附力,在非饱和流动中,土壤水总是从水膜厚处流向水膜薄处、或由弯月面曲率半径大处流向曲率半径小处、由土壤水吸力低处向土壤水吸力高处流动。当一个干燥的土壤变湿润时,湿润前锋的推动力最大,比由重力决定的推动力大几千倍。在饱水条件下所有孔隙都充满水,即都可导水,导水率达最高值。然而在非饱水流动中,则是土壤中的部分孔隙(一般首先是大孔隙)的水被排出,而以空气取代,于是土壤横截面中导水面积相应减少;同时,充水的是导水率较小的细孔隙,因此导水率会大大降低。此外,由于充气的粗孔阻隔作用,土壤中的水必须经过更加曲折的途径向前流动,这样流动途径更加长了。质地粗的砂土当粗孔中的水被排干后,常在土粒接触处存在有楔状的弯月水面(也称为触点水或衔接水)。它们彼此不连接(团粒间孔隙中也有类似情况),于是在饱水条件下是导水最好的通道,而在非饱水时则成了土壤中水流动的阻碍。由于上述原因,一般的土壤由饱水到不饱水后,其导水率都急剧下降。

在饱水条件下,导水性最好的是粗孔多的土壤,但在非饱和条件下,正好相反,是细孔多的土壤(如粘土和壤土)比砂土的导水性好。这是因为在相同的土壤水吸力下,细孔多的土壤充水孔隙多,土壤水的连续程度好。

2. 非饱和水运动的表达式

有人曾把用于饱水流的达西定律应用到非饱水流中,但这时的导水率变为土壤水吸力或土水势的函数,即 $K(\Psi)$, 对于一维情况可写为:

$$q = -K(\Psi) \frac{dH}{dx} \quad (3-130)$$

其中:非饱水流中的 dH 包括 ψ_m 和 ψ_g 两个分势。

三、污染物在地下水中运移的数学模型^[2]

用数学方法描述物质在地下水中的运移模型可分为确定性模型、随机模型和黑箱模型三类。下面分述:

(一) 污染物在地下水中运移的确定性数学模型

取含水层的一个微元体为研究对象,如图 3-11 所示。因为在地下水运动过程中,所含某物质的浓度是时间和空间的函数,可记为 $C(x, y, z, t)$, 其变化由弥散作用(包括分子扩散和渗透分散)、对流项(由于液体平均整体运动而引起的物质通量)和总的吸收作用,即所谓的源汇项(源指由于溶解和解吸附是物质从固相转入水中,汇指物质从水中沉淀和被吸附等减少的作用)三方面作用引起。

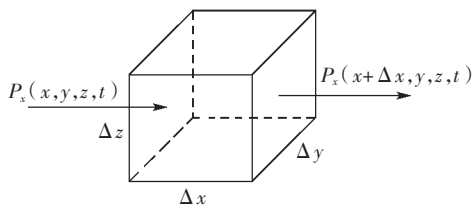


图 3-11 微元体示意图

1. 弥散项

设 p 为单位弥散率——单位时间在单位渗透介质面积上由于弥散而通过的物质含量。
有弥散基本定律:

$$p = -D \cdot \text{grad}C \quad (3-131)$$

式中: D ——弥散系数, 包括分子扩散项和渗透分散项, $[L^2 \cdot T^{-1}]$;

$\text{grad}C$ ——浓度梯度, 负号表示物质向浓度降低的方向迁移, 无量纲。

在 xyz 坐标系中:

$$p_x = -D \frac{\partial C}{\partial x}; \quad p_y = -D \frac{\partial C}{\partial y}; \quad p_z = -D \frac{\partial C}{\partial z}$$

在 x 方向上由于弥散而引起微元体内浓度的变化, 即 x 断面与 $x + \Delta x$ 断面上某物质含量之差 M'_x 为:

$$M'_x = -\frac{\partial p_x}{\partial x} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

同理在 y, z 方向上有:

$$M'_y = -\frac{\partial p_y}{\partial y} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

$$M'_z = -\frac{\partial p_z}{\partial z} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

则在时间 t 内由于弥散使整个微元体中物质浓度的改变量为:

$$M' = -\left(\frac{\partial p_x}{\partial x} + \frac{\partial p_y}{\partial y} + \frac{\partial p_z}{\partial z}\right) \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

2. 对流项

令 q 为单位渗流量, 则根据达西定律:

$$q = -K \cdot \text{grad}h \quad (3-132)$$

其中: K ——渗透系数; h ——水位。

由水的平均整体运动引起微元体内物质浓度的改变量为:

$$M''_x = -\frac{\partial(C \cdot q_x)}{\partial x} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

$$M''_y = -\frac{\partial(C \cdot q_y)}{\partial y} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

$$M''_z = -\frac{\partial(C \cdot q_z)}{\partial z} \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

则有:

$$M'' = -\left(\frac{\partial(C \cdot q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(C \cdot q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(C \cdot q_z)}{\partial z}\right) \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t$$

3. 源汇项

微元体内由于岩石吸收或从岩石释放出来的物质引起的物质浓度的改变量记为 W , 设

微元体内浓度随时间的变化为 $\frac{\partial C}{\partial t}$, 则在 Δt 时段内, 微元体内总的浓度改变量 M 为

$$M = n \frac{\partial C}{\partial t} \cdot \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z \cdot \Delta t \quad (3-133)$$

其中: n ——有效孔隙度。

根据质量守恒定律, 有:

$$M + W = M' + M''$$

将以上各式代入可得:

$$\frac{\partial p_x}{\partial x} + \frac{\partial p_y}{\partial y} + \frac{\partial p_z}{\partial z} + \frac{\partial(C \cdot q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(C \cdot q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(C \cdot q_z)}{\partial z} + W = -n + \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3-134)$$

对上式进行简化:

(1) 若弥散主方向与坐标轴一致, 则有:

$$\begin{bmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{\partial C}{\partial x} \\ -\frac{\partial C}{\partial y} \\ -\frac{\partial C}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \\ -D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \\ -D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \end{bmatrix}$$

(2) 若地下水的主渗方向与坐标轴一致, 则有:

$$\begin{bmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{\partial h}{\partial x} \\ -\frac{\partial h}{\partial y} \\ -\frac{\partial h}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -K_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \\ -K_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \\ -K_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \end{bmatrix}$$

(3) 假定在坐标轴的方向上 D_{xx} 、 D_{yy} 、 D_{zz} 和 K_{xx} 、 K_{yy} 、 K_{zz} 分别为常量。

按照以上三个假定, 则式(3-134)可简化为:

$$\begin{aligned} & D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + K_{xx} \frac{\partial}{\partial x} \left(C \frac{\partial h}{\partial x} \right) + K_{yy} \frac{\partial}{\partial y} \left(C \frac{\partial h}{\partial y} \right) + K_{zz} \frac{\partial}{\partial z} \left(C \frac{\partial h}{\partial z} \right) \\ & = W + n \frac{\partial C}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-135)$$

由于渗透速度 v 与单位流量 q 是相等的, 所以上式也可写为:

$$D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} - v_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} - v_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} = W + n \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3-135a)$$

此即物质在地下水流迁移中, 带有源汇项的三维弥散基本偏微分方程, 是含有两个未知函数 $C(x, y, z, t)$ 和 v (或 h) 的非线性二阶偏微分方程, 其解相当复杂, 目前还没有精确的解

析解。在实际应用中,可通过做一些合理的简化得出较为实用的近似解。

考虑密度变化,对于无源汇项的基本弥散方程也可表示为:

$$\operatorname{div}\left[K'\rho\left(\operatorname{grad}\frac{C}{\rho}\right)\right]-\operatorname{div}(uC)=\frac{\partial C}{\partial t} \quad (3-135b)$$

式中: div ——散度符号; K' ——弥散系数, $K'=D/n$; ρ ——液体密度;

u ——液体的实际流速;其余符号同前。

(二) 污染物在地下水中运移的随机模型

质点从多孔介质中某一点进入,大体沿流向的轨迹运动,但由于各种随机因素则可能偏离轨迹。若投入物质的浓度为 C_0 , A 点的浓度为 $C(n, k)$, 则 A 点的概率为:

$$P_{(n,k)} = \frac{C_{(n,k)}}{C_0} \quad (3-136)$$

相对浓度在横向上的分布可用二项式的系数来描述,以伯努里二项分布表示为:

$$P_k = P_{(x=k)} = C_n^k p^k q^{n-k}, (k=0,1,2,\dots,n) \quad (3-137)$$

$$\text{且 } \sum_{k=0}^n P_k = 1$$

式中: x ——随机值的分布,其已知值 $k=0,1,2,\dots,n$ 时,具有概率 P_k ;

p ——分布的参数,是该研究事件的概率,这里有 $p=1/2, q=1-p=1/2$;

C ——二项式系数。

当 n 较大时,二项分布近似为正态分布。文献[2]中根据实验当 $n=15$ 时用正态分布描述为:

$$C_{(n,k)} = \frac{0.8C_0}{\sqrt{n}} \exp\left(-\frac{k^2}{2n}\right) \quad (3-137)$$

在轴上的浓度 $C(n,0)$ (即当 $k=n/2$) 为:

$$C_{(n,k)} = \frac{0.8C_0}{\sqrt{n}}, (n>5) \quad (3-138)$$

正态分布中的参数之一是离差 σ , 在这里反映的是物质弥散的程度,由式(3-136)应为 $\sigma^2 = n$, 表明弥散程度随远离物质投放点的距离而有规律地增加。式(3-137)表示轴线上的浓度(即横断面上的最大浓度)随 n 增大而减少,即横向弥散程度愈大,轴上的浓度愈小。

式(3-136)表示的分布函数是一个不连续的函数,因 n 和 k 都只能取整数,可通过下列简单的修正变为连续函数:

$$\text{令 } x = \gamma_1 \cdot k \cdot d; \quad y = \gamma_2 \cdot n \cdot d$$

其中: γ_1, γ_2 —— x, y 轴的介质材料系数,对均匀介质 $\gamma_1 = \gamma_2$;

d ——孔隙介质的颗粒直径。

经变换可得连续分布的公式:

$$C_{(x,y)} = \frac{0.8C_0 \sqrt{\gamma_2 d}}{\sqrt{y}} \exp\left(-\frac{x^2 \gamma_2}{2\gamma_1^2 y d}\right) \quad (3-139)$$

(三) 污染物在地下水中运移的黑箱模型

污染物输入输出的含水层可看作一个黑箱,箱子的内部结构可以不明确,可以通过研究输入输出的关系得到其综合效应。知道了黑箱的综合效应后,就可根据输入信息来预报输出结果,或根据输出的观测资料反求出潜在的输入。这对于研究侵入某些污染物的复杂大型体系是很适合的。例如对于一个由含水层和一些河流组成的流域单元,河水可饮用;含水层中的地下水有可能被雨水淋滤后的工厂废物污染;地下水是河水的补给源,则从地下水中带出的污染物又会污染河水而影响河水水质。此时含水层可看作一个黑箱,其特征(综合效应)为 A ,从废物中进入的污染物是输入 $e(t)$,而从含水层排放出的污染物则是输出 $s(t)$ 。如果通过观测研究得到含水层的最大允许输出 $s(t)$,来反求允许的潜在输入量 $e(t)$,则可据此限定工厂废物的堆放量和存放时间。

黑箱模型的基本原理是把污染物的进入比作输入信息 $e(t)$ (为时间 t 的函数),在含水层中,由于物理、化学、生物等作用及弥散作用使污染物浓度发生变化,将这些复杂的作用综合为一个算符 A 来表示。变化后的污染情况可作为输出信息 $s(t)$ (也是时间 t 的函数),则可表示为:

$$s = Ae \quad (3-140)$$

通常作如下假定:

1. 转化 $e \rightarrow s$ 存在,即这里有一个算符 A ,则 $s = Ae$;
2. s 是 e 的线性函数,即 A 为线性系统,所以如果有 $e \rightarrow s$,则有 $\lambda e \rightarrow \lambda s$ (λ 是常数),且如果有 $e_1 \rightarrow s_1$ 和 $e_2 \rightarrow s_2$,则 $e_1 + e_2 \rightarrow s_1 + s_2$;
3. 输入 e 在时间上的任一变化使输出 s 也在时间上发生相应的变化(即由 $e \rightarrow s$ 的变化形式转化为事件的变换);
4. 变换 A 是连续的,即如果当 n 趋于无限时,序列 $e_n(t)$ 趋近于 0,则序列 $s_n(t) - Ae_n(t)$ 也趋近于 0。在数学上可以证明,这种线性系统的变换是一个卷积,记为

$$s = Ae$$

算符 A 反映了模型的特征。 A 可称为含水层对于污染的“脉冲—响应”或“单位—响应”,也即传递函数。输入 e 称为激励或激励函数,而输出 s 称为响应或响应函数。只要求出 A ,则这个模型可用于两方面:当 e 已知,可计算出 s (这是卷积);当 s 已知,则可计算 e (反卷积)。虽然卷积的数学运算并不复杂,但反卷积却是一个不稳定的数值运算,需要一些特殊的方法才能取得较好的效果。

参 考 文 献

- [1] 傅国伟. 河流水质数学模型及其模拟计算. 北京:中国环境科学出版社,1987
- [2] 郑彤,陈春云. 环境系统数学模型. 北京:化学工业出版社,2003
- [3] 程声通,陈毓玲. 环境系统分析. 北京:高等教育出版社,1990
- [4] W·金士博. 水环境数学模型. 北京:中国建筑工业出版社,1987
- [5] 刘兆昌,张兰生,聂永丰等. 地下水系统的污染与控制. 北京:中国环境科学出版社,1991

- [6] 谢永明. 环境水质模型概论. 北京:中国科学技术出版社,1996
- [7] Linfield C. Brown, Thomas O. Barnwell, Jr. The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E — UNCAD: Documentation and User Manual[R]. Athens, GA: US Environmental Protection Agency, Environmental Research Laboratory, 1987
- [8] DiToro D M, Sifitpatrick J J. Documentation for Water Quality Analysis Simulation Program(WASP) and Model Verification Program(MVP)[C]. Duluth, MN: US Environmental Protection Agency,1983
- [9] Ambrose R B, Wool T A, Connolly J P. WASP4, A Hydrodynamic and Water Quality Model— Model Theory, User's Manual, and Programmer's Guide[C]. Athens, GA: US Environmental Protection Agency,1988
- [10] Ambrose R B, Wool T A, Martin J L, et al. WASP5. x, A Hydrodynamic and Water Quality Model— Model Theory, User's Manual, and Programmer's Guide[C]. Draft: Environmental Research Laboratory, US Environmental Protection Agency, 1993
- [11] Tim A. Wool. Water Quality Analysis Simulation Program (WASP)version6.0 DRAFT: User's Manual[C]. Region4, Atlanta,GA,US Environmental Protection Agency, MS Tetra Tech,Inc. ,2001
- [12] Better Assessment Science Integrating point and Nonpoint Sources, BASINS Version3.0, User's Manual[R]. US Environmental Protection Agency,2001
- [13] Robert L. Runkel. One — Dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS): A Solute Transport Model for Streams and Rivers[R]. U.S. Geological Survey water — Resources Investigations Report 98 — 4018,1998
- [14] MIKE11: users & reference manual[R]. Danish Hydraulics Institute, Hørsholm, Denmark. ,1993
- [15] MIKE21 User Guide and Reference Manual[R]. Danish Hydraulic Institute, 1996
- [16] Irina Chubarenko, Irina Tchepikova. Modelling of man—made contribution to salinity increase into the Vistula Lagoon(Baltic Sea)[J]. Ecological Modelling, 2001,138:87 — 100
- [17] MIKE 3 Eutrophication Module, User guide and reference manual, release2.7[R]. Danish Hydraulic Institute, 1996
- [18] Paul H. Martin, Eugene J. LeBoeuf, Edsel B. Daniel, et al. Development of a GIS — based spill management information system[J]. Journal of hazardous materials,2004, B112: 239 — 252
- [19] USEPA. Hydrodynamic and water quality model of Christina River Basin, Final report[R]. United States Environmental Protection Agency,Region III, Philadelphia,PA,2000
- [20] John M. Hamrick,William B. Mills. Analysis of water temperatures in Conowingo Pond as influenced by the Peach Bottom atomic power plant thermal discharge[J]. Environmental science & policy,2000, 3:S197 — S209
- [21] 孙颖,陈肇和,范晓娜等. 河流及水库水质模型与通用软件综述. 水资源保护,2001,2:7 — 11
- [22] 徐祖信,廖振良. 水质数学模型研究的发展阶段与空间层次[J]. 上海环境科学,2003,22(2):79 — 85
- [23] 薛禹群. 地下水水力学原理. 北京:地质出版社,1986
- [24] 孙训正. 地下水污染 —— 数学模型和数值方法. 北京:地质出版社,1989
- [25] 钱家忠,汪家权. 中国北方型裂隙岩溶水模拟及水环境质量评价. 合肥:合肥工业大学出版社,2003

第四章 水环境系统模拟数值方法

第一节 概 述

对所建立的数学模型只有极少数的简单情况可以求得解析解。虽然解析解是精确解,但对于绝大多数的实际问题是无法求得解析解的,因而用模拟方法(simulation)求解是一种很好的选择。模拟分为物理模拟(analog)和数值模拟(modeling)两类。

水环境系统的数学模拟,就是把实际的水环境系统各类问题,进行简化和概化,用一个数学模型来描述,然后对数学模型求解。模型的求解方法主要有解析法和数值法。由于解析法只适用于非常简单的条件,所以对于大多数的实际问题,要用数值法来求解。

数值方法随其在各领域的应用得到了不断发展^{[1][2][3]}。从最初的有限差分法(Finite difference method,简称 FDM)和有限单元法(FEM),发展到后来的有限差分法(FDM)、有限单元法(Finite element method,简称 FEM)、边界单元法(Boundary element method,简称 BEM)和有限分析法(Finite analysis method,简称 FAM)等多种方法并存。每一种数值方法本身在解决具体问题的过程中也不断地被发展和完善,例如从有限单元法中派生出的混合有限元法(HFEM)、特征有限元法(CFEM)以及随机有限元法(SFEM)等等。下面简单介绍有限差分法、有限元方法及其应用。

第二节 有限差分法

有限差分法是一种古典的近似的数值计算方法,其理论浅显易懂、编写程序简单、计算方便。随着计算机技术的普及与发展,有限差分法已被广泛地应用于科研、生产中。

以地下水流动及溶质运移问题为例进行说明。利用有限差分法求解这些问题的基本步骤是:(1)对计算区和计算时间进行剖分,以有限个空间离散点和时间离散点分别替代连续的计算区和计算时间;(2)在这些离散点上,按照数学上差商($\Delta F/\Delta x$,或 $\Delta F/\Delta t$)替代微商(dF/dx ,或 dF/dt)的方法,将描述地下水流动及溶质运移的数学模型化为差分方程即线性代数方程组;(3)求解线性代数方程组,可得到数学模型在离散点上的近似解。因此可见,离散化、差分方程的建立以及实际问题的处理尤为重要,下面阐述:

一、离散化

如果我们将一个三维的含水层系统划分为一个三维网格系统,整个含水层被剖分为若干层(layer),每一层又剖分为若干行(row)和若干列(column),这样含水层就被剖分成许多小长方体,如图 4-1。每一个小长方体称为单元(格点)。把各长方体的交点或长方体的中心点称为节点。

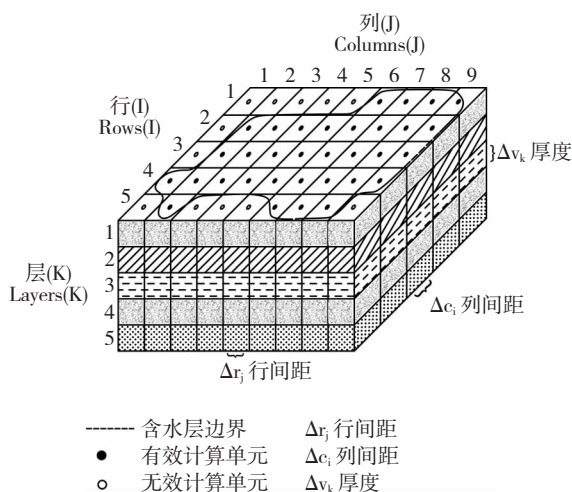


图 4-1 三维含水层的空间离散

首先我们对编号作一些约定:行次序是沿 y 方向,编号为 i ,行距为 $\Delta r_j (\Delta y)$,行的延伸方向和 x 轴平行,下标 j 随 x 值而增加。列次序是沿 x 方向,编号为 j ,列距为 $\Delta c_i (\Delta x)$,列的延伸方向和 y 轴平行,下标 i 随 y 值的增加而增加。层次序是自上而下,编号为 k ,间距为 Δv_k 。

二、地下水稳定运动方程的差分近似

设在图 4-1 中选取任一层 k ,该层的水头 $H(x, y, k)$ 如图 4-2(a) 所示。

设 (i, j) 点的水头为 $H_{i,j}$,则在 i 行其邻域 $(i, j-1)$ 点和 $(i, j+1)$ 点的水头 $H_{i,j-1}$ 和 $H_{i,j+1}$ 可利用泰勒(Taylor)级数展开:

$$H_{i,j+1} = H_{i,j} + \Delta x \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 H}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \dots \quad (4-1)$$

$$H_{i,j-1} = H_{i,j} + (-\Delta x) \frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{i,j} + \frac{(-\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{(-\Delta x)^3}{3!} \frac{\partial^3 H}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \dots \quad (4-2)$$

经整理后有

$$\frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{6} \frac{\partial^3 H}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \dots \quad (4-3)$$

或

$$\frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{H_{i,j} - H_{i,j-1}}{\Delta x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \Big|_{i,j} - \dots \quad (4-4)$$

在(4-3)和(4-4)式中,如右端仅取一项,则存在截断误差,该二式变为

$$\frac{\partial H}{\partial x} \Big|_{i,j} = \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (\text{向前差分}) \quad (4-5)$$

$$\left. \frac{\partial H}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{H_{i,j} - H_{i,j-1}}{\Delta x} + 0(\Delta x) \quad (\text{向后差分}) \quad (4-6)$$

符号 $0(\Delta x)$ 表示当 Δx 足够小时,截断误差的绝对值小于 $c\Delta x$ (c 为任意常数)。将式(4-3)和(4-4)相加,消去二阶导数以上的项,得到中心差分的表达式

$$\left. \frac{\partial H}{\partial x} \right|_{i,j} = \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2\Delta x} + 0(\Delta x^2) \quad (4-7)$$

如果将式(4-3)和式(4-4)相减,得到

$$\left. \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \right|_{i,j} = \frac{H_{i,j+1} - 2H_{i,j} + H_{i,j-1}}{(\Delta x)^2} + 0(\Delta x^2) \quad (4-8)$$

或

$$\left. \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{H_{i,j+1,k} - 2H_{i,j,k} + H_{i,j-1,k}}{(\Delta x)^2} \quad (4-9)$$

类似地

$$\left. \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{H_{i-1,j,k} - 2H_{i,j,k} + H_{i+1,j,k}}{(\Delta y)^2} \quad (4-10)$$

$$\left. \frac{\partial^2 H}{\partial z^2} \right|_{i,j,k} \approx \frac{H_{i,j,k+1} - 2H_{i,j,k} + H_{i,j,k-1}}{(\Delta z)^2} \quad (4-11)$$

因此,当 $\Delta x = \Delta y$ 为方形网格时,二维拉普拉斯(Laplace)方程

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = 0$$

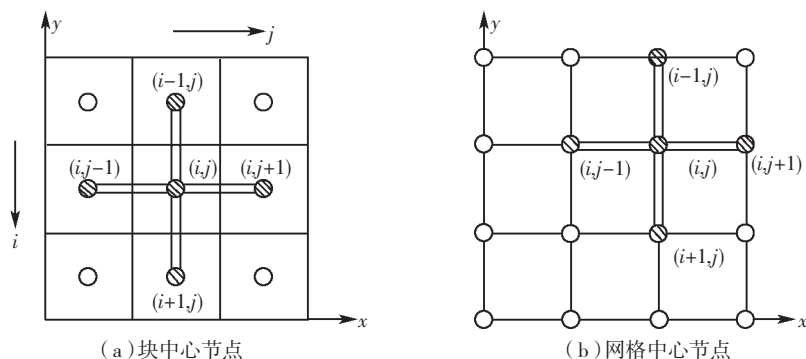
的差分格式为

$$H_{i,j} = \frac{H_{i-1,j} + H_{i+1,j} + H_{i,j-1} + H_{i,j+1}}{4} \quad (4-12)$$

上式表明,地下水作二维稳定运动时,某一节点的水头为相邻节点水头的平均值。式(4-12)称为五点格式。类似的,当 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$ 时,三维拉普拉斯方程的差分格式为

$$H_{i,j,k} = \frac{H_{i-1,j,k} + H_{i+1,j,k} + H_{i,j-1,k} + H_{i,j+1,k} + H_{i,j,k-1} + H_{i,j,k+1}}{6} \quad (4-13)$$

有限差分的计算模式有两种,一种为块中心节点,即节点为各个单元的中心,为格点,此时每个网格都是一个小均衡单元,因此这类剖分网格称为均衡网格;另一种称为网格中心节点,节点为各单元的角点,这类剖分网格称节点网格。见图4-2。必须注意,节点网格本身并非小均衡单元。

图 4-2 有限差分法的计算模式(据 P. S. Huyakorn 和 G. F. Pinder, 1983)^[1]

实际的二维地下水运动常常有抽水井和垂向补给 W , 此时的微分方程为

$$T \frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + T \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} + W - Q\delta(x - x_0, y - y_0) = 0 \quad (4-14)$$

式中

T ——导水系数;

W ——垂向补给强度;

Q ——固定的抽水量。

令

$$\begin{cases} R = W - \frac{Q}{\Delta x^2} & \text{抽水井节点} \\ W & \text{其他节点} \end{cases} \quad (4-15)$$

则地下水运动的微分方程变为泊松(Poisson)方程:

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = -\frac{R}{T} \quad (4-16)$$

当 $\Delta x = \Delta y$ 时的差分方程为

$$H_{i,j} = \frac{H_{i-1,j} + H_{i+1,j} + H_{i,j-1} + H_{i,j+1} + (\Delta x)^2 R/T}{4} \quad (4-17)$$

三、地下水非稳定运动方程的差分近似

设有如下的二维非稳定运动的方程

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial y^2} = \frac{\mu^*}{T} \frac{\partial H}{\partial t} - \frac{R}{T} \quad (4-18)$$

式中 $\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}$ 和 $\frac{\partial^2 H}{\partial y^2}$ 的差分表达式和前述相同。对时间的偏导数可表达为

$$\frac{\partial H}{\partial t} = \frac{H_{i,j}^{k+1} - H_{i,j}^k}{\Delta t} \quad (4-19)$$

μ^* ——贮水系数, $[L^{-1}]$;

$H_{i,j}^{k+1}$ —— (i, j) 点在 $k+1$ 时刻的水头, [L];

$H_{i,j}^k$ —— (i, j) 点在 k 时刻的水头, [L]。

那么对于空间导数 $\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}$ 和 $\frac{\partial^2 H}{\partial y^2}$ 也有取哪一时刻水头的问题, 因此可以有几种差分格式。

1. 显式差分格式

此时对空间导数都取 k 时刻的水头, 则式(4-18)的差分表达式为

$$\frac{H_{i,j+1}^k - 2H_{i,j}^k + H_{i,j-1}^k}{\Delta x^2} + \frac{H_{i+1,j}^k - 2H_{i,j}^k + H_{i-1,j}^k}{\Delta y^2} = \frac{\mu^*}{T} \frac{H_{i,j}^{k+1} - H_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{R_{i,j}^k}{T} \quad (4-20)$$

式(4-20)称为显式差分格式(Explicit finite difference approximation)。

如果令 $\Delta x = \Delta y = a$, 并且因为 k 时刻的水头已知, 移到方程的右端, 得

$$H_{i,j}^{k+1} = (1 - \frac{4T\Delta t}{\mu^* a^2}) H_{i,j}^k + \frac{4T\Delta t}{\mu^* a^2} \left(\frac{H_{i+1,j}^k + H_{i-1,j}^k + H_{i,j+1}^k + H_{i,j-1}^k}{4} \right) + \frac{R_{i,j}^k \Delta t}{\mu^*} \quad (4-21)$$

显式差分格式易于计算, 但解的收敛和稳定是有条件的。在二维情况下只有当

$$\frac{T\Delta t}{\mu^* a^2} \leq 0.25 \quad \text{时,}$$

其解才收敛和稳定, 当前这一格式已很少应用。

2. 隐式差分格式

隐式差分取 $\frac{\partial^2 H}{\partial x^2}$ 和 $\frac{\partial^2 H}{\partial y^2}$ 的水头时, 不再用前一时刻 k 的值, 而是取 k 时刻和 $k+1$ 时刻的加权平均, 如

$$\frac{\partial^2 H}{\partial x^2} = \alpha \frac{H_{i,j+1}^{k+1} - 2H_{i,j}^{k+1} + H_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta x} + (1-\alpha) \frac{H_{i,j+1}^k - 2H_{i,j}^k + H_{i,j-1}^k}{\Delta x^2} \quad (4-22)$$

式中 α 为权重, 其值在 $0-1$ 之间。当 $\alpha = 0$ 时, 即为显示格式, 当 $\alpha = 1$ 时, 式(4-22)右端第二项为 0, 即 H 完全取 $k+1$ 时刻的未知水头, 称为全隐式格式, 当 $\alpha = \frac{1}{2}$ 时, H 中 k 时刻和 $k+1$ 时刻的水头各占一半, 称为克兰克—尼柯尔松(Crank—Nicolson)格式。

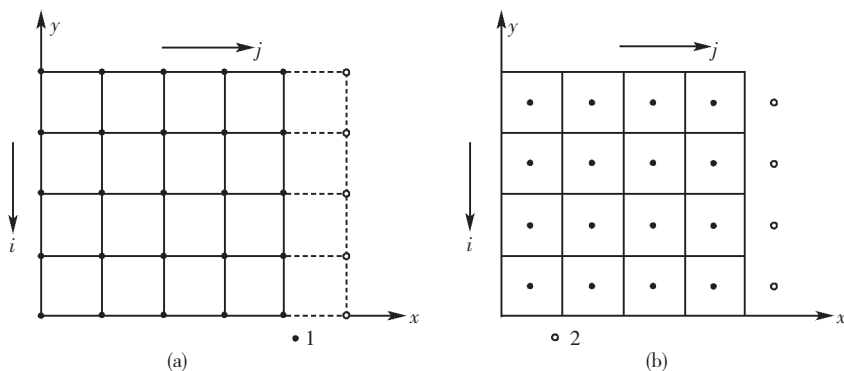
$\frac{\partial^2 H}{\partial y^2}$ 和 $\frac{\partial^2 H}{\partial z^2}$ 也可类似处理。方程式(4-18)的全隐式差分表达式为

$$\frac{H_{i,j+1}^{k+1} - 2H_{i,j}^{k+1} + H_{i,j-1}^{k+1}}{\Delta x^2} + \frac{H_{i+1,j}^{k+1} - 2H_{i,j}^{k+1} + H_{i-1,j}^{k+1}}{\Delta y^2} = \frac{\mu^*}{T} \frac{H_{i,j}^{k+1} - H_{i,j}^k}{\Delta t} - \frac{R_{i,j}^k}{T} \quad (4-23)$$

式(4-23)中包含有 5 个未知数 $H_{i,j}^{k+1}, H_{i+1,j}^{k+1}, H_{i-1,j}^{k+1}, H_{i,j+1}^{k+1}, H_{i,j-1}^{k+1}$, 因而不能直接求解。而必须对每一时间水平上的所有节点都写出类似式(4-23)的方程, 形成一个线性代数方程组, 然后用迭代法或消去法求解。

四、边界条件的处理

块中心节点和网格中心节点在处理边界条件时稍有不同, 下面作一介绍。

图 4-3 边界条件的有限差分处理(朱学愚等,1987)^[2]

1. 节点; 2. 虚节点; (a) 网络中心节点; (b) 块中心节点

1. 第一类边界条件

第一类边界条件, 边界上的水头已经给出。如为网络中心节点, j 列位于边界上, 则

$$H_{i,j} = H_b \quad (4-24)$$

如为块中心节点, 区域边界和块边界一致, 则要在区域外半个空间步长($\Delta x/2$) 处引进一列虚节点, 如图 4-3(b), 虚节点为 $j+1$ 列, 则有

$$\frac{1}{2}(H_{i,j} + H_{i,j+1}) = H_b \quad (4-25)$$

2. 第二类边界条件

先考虑网络中心节点, 设边界条件为

$$\frac{\partial H}{\partial X} = \frac{1}{T}q_b \quad (4-26)$$

q_b 为已知的单宽流量。如果区域边界和最右面一列(j 列) 节点吻合, 则要在边界外映射出一列虚节点 $j+1$ 列, 见图 4-3(a), 则边界条件式(4-26) 表达为

$$\frac{H_{i,j+1} - H_{i,j-1}}{2\Delta x} = \frac{1}{T}q_b \quad (4-27)$$

如为不透水边界, $q_b = 0$, 则有

$$H_{i,j+1} = H_{i,j-1} \quad (4-28)$$

如为块中心节点, 则在区域外 $\Delta x/2$ 映射一列虚节点($j+1$ 列), 则边界条件为

$$\frac{H_{i,j+1} - H_{i,j}}{\Delta x} = \frac{1}{T}q_b \quad (4-29)$$

对于不透水边界, 有

$$H_{i,j+1} = H_{i,j} \quad (4-30)$$

第三节 有限单元法

一、有限单元法的基本概念

(一) 概述

有限单元法(Finite element method) 简称有限元法或 FEM,是采用“分片逼近”来近似求解偏微分方程的一种数值方法。该方法想象解区域由有限个小的、相互联系的亚区域组成。这些亚区域常采用简单的形状(如三角形,四边形,四面体,立方体等),称为单元。这些单元集合起来,代表不同几何形状的解区域。假定在每一单元内,函数(如地下水运动中的水头)取简单的表达式。如二维问题,单元内水头假定满足平面方程。我们用有限个单元的拼合平面拟合实际的水头平面。

本书以地下水流动问题介绍有限单元法的基本原理。有限元法在地下水流动问题中的应用始于 1968 年,并逐渐成为解决实际的复杂水文地质问题的有效方法。有限单元法是通过剖分和插值的方法将描述地下水流动的定解问题化为代数方程组进行求解的。依据建立代数方程组的途径不同,有限单元法又分为 Galerkin 有限元法、变分有限元法和均衡法。

变分有限元法也称 Ritz 有限元法。该方法以变分原理和剖分插值为基础。首先应用变分原理把定解问题的求解等价于求某个泛函的极小值问题,再用剖分插值把求泛函极小值的问题化成求解线性方程组。

Galerkin 有限元法以剩余加权法为基础。首先,利用剖分、插值将定解问题离散化,提出一含有若干未知数的近似解(此处未知数为未知结点的水头值)。将该近似解代入原定问题后产生的误差,称之为剩余函数。使剩余函数在区域内的加权积分为零,导出相应的代数方程组,并求解从而得出近似解。

均衡有限元法是利用均衡原理,对区域剖分后形成每一个小均衡子域,并建立相应的水均衡方程,将方程联立形成一代数方程组。

尽管以上三种有限元法所依据的原理不同,但当三者采用相同的剖分和插值解决同一地下水流动问题时,最终所得到的代数方程组是一致的。三种方法各有优缺点。Ritz 有限元法便于误差估计和收敛性讨论,但对某些问题却很难找到与之对应的泛函极值问题。Galerkin 法不便于误差分析等理论研究,但不需要寻找相应的泛函形式。均衡法简单、直观,但在数学上认为是不严密的。由于 Galerkin 有限元法在反映水文地质概念方面比较清楚,又无需寻找相应的泛函形式,因此在水文地质计算中应用较广。故本节重点阐述。

(二) 伽辽金法的基本原理

伽辽金法也即权剩余法。设有一微分方程定义于由边界 $\Gamma\Omega$ 围成的区域上:

$$L(u) - f = 0 \quad (4-31)$$

式中: L ——微分算子;

u ——未知函数;

f ——常数项。

首先用试函数 $\hat{u}$ 代替 u

$$\hat{u} = \sum_{l=1}^n N_l C_l \quad (4-32)$$

式中: N_l ——定义于整个解区域的线形无关的基函数;

C_l ——待求的未知参数。

因为 $\hat{u}$ 仅仅是 u 的近似值, 不能完全满足式(4-31), 将它代入式(4-31)后, 存在一个剩余

$$\varepsilon = L(\hat{u}) - f \quad (4-33)$$

然后将剩余 ε 在整个解区域 Ω 上求数值积分, 并令它等于零, 即

$$\int_{\Omega} W_l \varepsilon d\Omega = \int_{\Omega} W_l [L(\hat{u}) - f] d\Omega = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, n) \quad (4-34)$$

式中的 W_l 为权函数。如果取权函数为基函数, 即

$$W_l = N_l$$

则

$$\int_{\Omega} N_l [L(\hat{u}) - f] d\Omega = 0 \quad (4-35)$$

当待求函数为水头 H 时, 并取未知函数 C_l 为各单元节点的水头值, 则试函数为

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^{n^e} N_l H_l \quad (4-36)$$

式中:

N_l ——在单元 e 上分片定义的基函数;

H_l ——单元节点上的水头值;

n^e ——单元节点的数目, 三角形单元为 3, 四边形单元为 4, 六面体单元为 8。

将式(4-36)式的 $\hat{H}$ 代替式(4-35)式中的 $\hat{u}$, 得

$$\int_{\Omega} N_l [L(\hat{H}) - f] d\Omega = \sum_{e=1}^M \int_{\Omega} N_l [L(\hat{H}) - f] d\Omega = 0 \quad (4-37)$$

这样得到一个方程组。求解方程组即可得到各节点的水头值。

(三) 变分法的基本原理

变分法是将求解偏微分方程问题等价于寻找泛函的极小值问题。泛函

$$E = \int_{\Omega} F(x, u, \frac{du}{dx}, \frac{d^2u}{dx^2}, \dots) dx \quad (4-38)$$

接着把区域 Ω 离散成 M 个单元, 每一单元记作 Ω^e , 在每一单元中, 未知函数用试函数 (Trial fuction) $\hat{u}$ 代替

$$\hat{u} = \sum_{l=1}^{n^e} N_l(x) u_l \quad (4-39)$$

式中

$N_l(x)$ ——基函数,是一套线性无关的函数;

u_l ——单元各节点上的 u 值;

n^e ——单元的节点数。

假定总泛函等于各单元泛函之和,即

$$E = \sum_{e=1}^M E^e \quad (4-40)$$

式中

E^e ——单元 e 的泛函;

M ——区域 Ω 内单元的总数。

要使泛函 E 为极小,其必要条件为对节点函数值的导数为零。如果取未知函数 u 为水头 H ,则

$$\frac{\partial E}{\partial H_l} = \sum_{e=1}^M \frac{\partial E^e}{\partial H_l} = 0 \quad (4-41)$$

对每一单元求导数后,可得

$$[G]^e \{H\}^e - \{F\}^e = 0 \quad (4-42)$$

式中

$[G]^e$ ——单元渗透矩阵;

$\{F\}^e$ ——常数项列向量;

$\{H\}^e$ ——水头列向量。

最后对各单元求和,得到总渗透矩阵:

$$[G]\{H\} = \{F\} \quad (4-43)$$

虽然伽辽金法和变分法的推导方法不同,但最后的结果是完全一样的。所以下面本书只介绍伽辽金法,首先介绍基函数。

(四) 基函数

基函数一般用各次多项式表示。其中,线性函数用得最多。

1. 一维问题

一维问题的 m 阶多项式为

$$P_m(x) = \sum_{i=1}^m \alpha_i x^{i-1} \quad (4-44)$$

当 $m = 2$ 时,即为一维的线性插值公式

$$P_2(x) = \hat{H} = \alpha_1 + \alpha_2 x \quad (4-45)$$

在节点上试函数应取节点上的水头,有

$$\hat{H}(x_1) = H_1; \hat{H}(x_2) = H_2 \quad (4-46)$$

于是有

$$\begin{bmatrix} H_1 \\ H_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{Bmatrix} \quad (4-47)$$

解出

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{L} \begin{bmatrix} x_2 & -x_1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} H_1 \\ H_2 \end{Bmatrix}$$

式中 $L = x_2 - x_1$ 。将式(4-47)代回式(4-45),得

$$\hat{H}(x) = \frac{1}{L}(x_2 - x)H_1 + \frac{1}{L}(x - x_1)H_2 \quad (4-48)$$

可求出单元基函数为

$$\begin{cases} N_1^e = \frac{1}{L}(x_2 - x) \\ N_2^e = \frac{1}{L}(x - x_1) \end{cases} \quad \text{当 } x_1 \leq x \leq x_2 \text{ 时} \quad (4-49)$$

其图形见图 4-4。

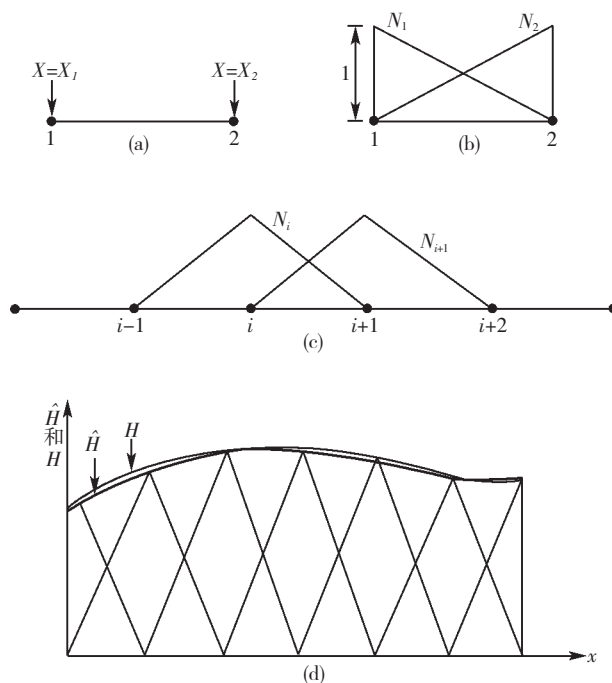


图 4-4 一维单元和线性基函数

- a) 一维线性单元; b) 单元基函数; c) 节点 i 和 $i+1$ 的基函数;
 d) 用试函数 $\hat{H}$ 逼近 H (据 P. S. Huyakorn 和 G. F. Pinder, 1983)

当我们把单元集合在一起时,总的基函数表达式为

$$N_l = \begin{cases} \frac{x - x_{l-1}}{x_l - x_{l-1}} & \text{当 } x_{l-1} \leq x \leq x_l \text{ 时} \\ \frac{x_{l+1} - x}{x_{l+1} - x_l} & \text{当 } x_l \leq x \leq x_{l+1} \text{ 时} \end{cases} \quad (4-50)$$

基函数的形状像一顶帽子。在本节点取值为 1, 而在相邻节点取值为零。在两节点之间的点, 如在 i 和 $i+1$ 之间的点 N_i 和 N_{i+1} 的取值都在 0 到 1 之间, 图 4-4c。因此 $\hat{H}$ 仅仅是真实水头的分片线性近似。

2. 二维三角形单元

对于二维问题, 一般表达式为

$$P_m(x, y) = \sum_{k=1}^n \alpha_k x_i y_j \quad i + j = m \quad (4-51)$$

当 $m = 1$ 时为线性插值公式

$$P_1(x, y) = \hat{H}(x, y) = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 y \quad (4-52)$$

对于典型的三角形单元, 节点 i, j, k 按逆时针的顺序编号。在三角形的三个接点 i, j, k 上的试函数取该点的水头值 (H_1, H_2, H_3) , 则有

$$\begin{Bmatrix} H_1 \\ H_2 \\ H_3 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & y_1 \\ 1 & x_2 & y_2 \\ 1 & x_3 & y_3 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{Bmatrix} \quad (4-53)$$

经推导可求得:

$$\hat{H}(x, y) = \frac{1}{2A} [(a_j + b_i x + c_i y) H_i + (a_i + b_j x + c_j y) H_j + (a_k + b_k x + c_k y) H_k] \quad (4-54)$$

式中:

$$\begin{cases} a_i = x_j y_k - x_k y_j & b_i = y_j - y_k & c_i = x_k - x_j \\ a_j = x_k y_i - x_i y_k & b_j = y_k - y_i & c_j = x_i - x_k \\ a_k = x_i y_j - x_j y_i & b_k = y_i - y_j & c_k = x_j - x_i \end{cases} \quad (4-55)$$

A 为三角形单元 i, j, k 的面积, 计算公式为

$$A = \frac{1}{2} \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i \\ 1 & x_j & y_j \\ 1 & x_k & y_k \end{vmatrix} \quad (4-56)$$

由式(4-36)和式(4-54)的对比, 可知

$$N_l = \frac{1}{2A} (a_l + b_l x + c_l y) \quad (l = i, j, m) \quad (4-57)$$

三角形单元上的基函数有如下性质：

- (1) N_l 在节点 l 上 (l 可分别为 i, j, k) 为 1, 在其他两个节点上为零。
- (2) N_l 沿着三角形的边随距离作线形变化。
- (3) 在三角形中心处, $N_l = 1/3$ 。
- (4) 在节点 l 的对边, $N_l = 0$
- (5) 在单元内的任一点, 都有 $N_i + N_j + N_k = 1$
- (6) 单元内任一点的坐标 (x, y) , 都可由基函数及三节点的坐标求得

$$\begin{cases} x = x_i N_i + x_j N_j + x_k N_k \\ y = y_i N_i + y_j N_j + y_k N_k \end{cases} \quad (4-58)$$

把节点 l 周围的所有三角形都集合在一起形成一个拼块 D 。在 D 中基函数 N_l 是各单元分片定义的, 在节点 l 上都是 1, 但在拼块 D 的边界 B 上及边界以外都是零。其形状如同一个角锥, 如图 4-5。

将式(4-57)代入式(4-54), 得

$$\hat{H}(x, y) = N_i H_i + N_j H_j + N_k H_k \quad (4-59)$$

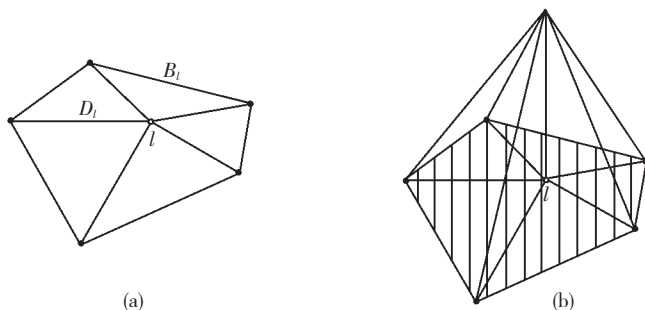


图 4-5 三角形单元和线形基函数

a) 以节点 l 为中心的拼块 b) 拼块上单元基函数 N_l 的图形

3. 二维四边形单元

对于任意的四边形单元, 依其四条边的形状可分为双线性单元、二次边单元和三次边单元。双线性单元的四条边都是直线, 节点在四边形的顶点; 二次边单元, 除四角为节点外, 在每条边的中点各加一个节点, 一个单元有 8 个节点; 三次边单元的每条边的次数和节点数不同, 见图 4-6。对于任意四边形单元一般用等参有限元法求解。

下面介绍双线性单元, 即 4 个节点的单元。首先进行坐标变换。引进局部坐标 (ξ, η) , 该坐标也称“等参”坐标。原坐标 (x, y) 称为总体坐标。利用坐标变换可把总体坐标下的形状不规则的四边形变换成 (ξ, η) 坐标系中的 2×2 的正方形区域。原来四边形的四个角点 i, j, k, m 在 (ξ, η) 坐标中为 $(-1, -1), (1, -1), (1, 1), (-1, 1)$ 。见图 4-7。

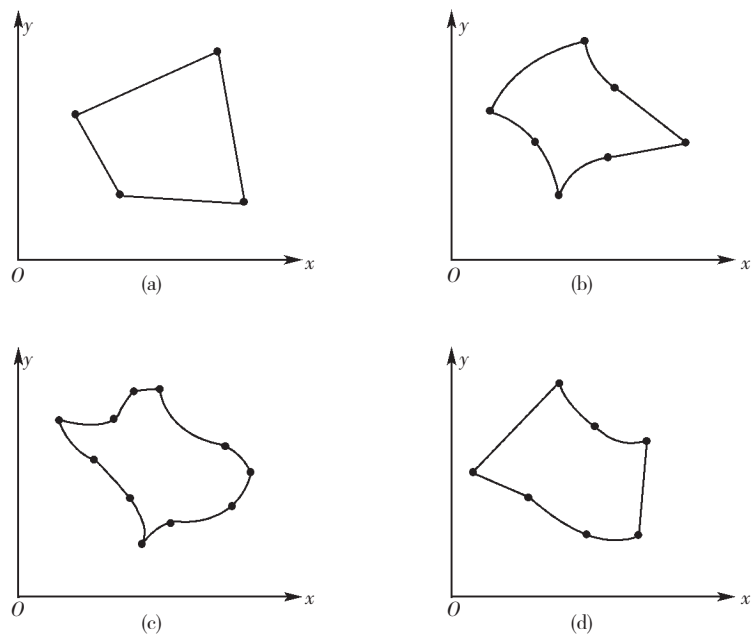


图 4-6 几种典型的任意四边形单元

a) 双线性单元; b) 二次边单元; c) 三次边单元; d) 混合边单元

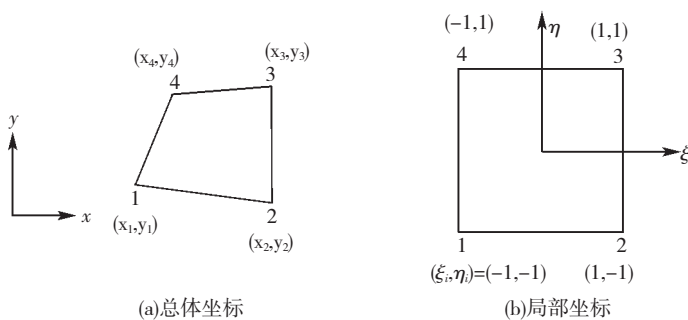


图 4-7 双线性四边形单元

总体坐标和局部坐标之间的变换公式为

$$\begin{cases} x = N_i(\xi, \eta)x_i + N_j(\xi, \eta)x_j + N_k(\xi, \eta)x_k + N_m(\xi, \eta)x_m \\ y = N_i(\xi, \eta)y_i + N_j(\xi, \eta)y_j + N_k(\xi, \eta)y_k + N_m(\xi, \eta)y_m \end{cases} \quad (4-60)$$

基函数也应具有如下性质

$$N_l(\xi, \eta) = \begin{cases} 1 & \text{在 } l \text{ 节点, } l = i, j, k, m \\ 0 & \text{在其他节点} \end{cases}$$

$$\sum_{l=i,j,k,m} N_l = 1 \quad (4-61)$$

四边形单元的节点编号也和三角形单元一样,是逆时针的。编号从左下角开始,依次为 i, j, k, m 。因此

$$\begin{cases} N_i(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta) \\ N_j(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta) \\ N_k(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta) \\ N_m(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta) \end{cases} \quad (4-62)$$

或写成一般的表达式

$$N_l(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_l)(1 + \eta_l) \quad (4-63)$$

以 l 点为中心的拼块上的基函数形状也是一角锥。四边形单元内任一点的水头,可按下列式求得

$$\hat{H} = N_i(\xi, \eta)H_i + N_j(\xi, \eta)H_j + N_k(\xi, \eta)H_k + N_m(\xi, \eta)H_m \quad (4-64)$$

如果需提高精度,单元的边可选用二次或三次曲线,因而一个单元上有更多的节点。此时角点的基函数为

$$N_l(\xi, \eta) = \alpha_l \beta_l \quad (4-65)$$

式中

$$\alpha_l = \frac{1}{4}(1 + \xi_l)(1 + \eta_l) \quad (4-66)$$

$$\beta_l = \beta_\xi + \beta_\eta$$

β_ξ 和 β_η 的取值见表 4-1。

表 4-1 参数 β_ξ 和 β_η

边的次数	β_ξ	β_η
线性的	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$
二次的	$\xi_l - \frac{1}{2}$	$\eta_l - \frac{1}{2}$
三次的	$\frac{9}{8}\xi^2 - \frac{5}{8}$	$\frac{9}{8}\eta^2 - \frac{5}{8}$

(1) 二次单元

角点

$$N_l(\xi, \eta) = \frac{1}{4}(1 + \xi_l)(1 + \eta_l)(\xi_l + \eta_l - 1) \quad (4-67)$$

边中点节点

$$\begin{cases} N_l(\xi, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \xi^2)(1 + \eta\eta_l) & \text{当 } \xi = 0, \eta = \pm 1 \text{ 时} \\ N_l(\xi, \eta) = \frac{1}{2}(1 - \xi\xi_l)(1 + \eta^2) & \text{当 } \xi = \pm 1, \eta = 0 \text{ 时} \end{cases} \quad (4-68)$$

(2) 三次单元

角点

$$N_l(\xi, \eta) = \frac{1}{32}(1 + \xi\xi_l)(1 + \eta\eta_l)[9(\xi^2 + \eta^2) - 10] \quad (4-69)$$

边 1/3 处节点

$$\begin{cases} N_l(\xi, \eta) = \frac{9}{32}(1 - \xi^2)(1 + 9\xi\xi_l)(1 + \eta\eta_l) & \text{当 } \xi_l = \pm \frac{1}{3}, \eta_l = \pm 1 \text{ 时} \\ N_l(\xi, \eta) = \frac{9}{32}(1 + \xi\xi_l)(1 - \eta^2)(1 + 9\eta\eta_l) & \text{当 } \xi_l = \pm 1, \eta_l = \pm \frac{1}{3} \text{ 时} \end{cases} \quad (4-70)$$

4. 三维四面体单元

把空间区域 D 剖分为有限个四面体单元, 每个单元有四个节点, 编号为 i, j, k, m 。其编号顺序按右手螺旋法则, 见图 4-8。如水头在四个顶点的值依次为 H_i, H_j, H_k, H_m 。而在四面体内部近似假设水头按线形函数分布。和前面类似, 水头试函数为

$$\hat{H} = N_i H_i + N_j H_j + N_k H_k + N_m H_m \quad (4-71)$$

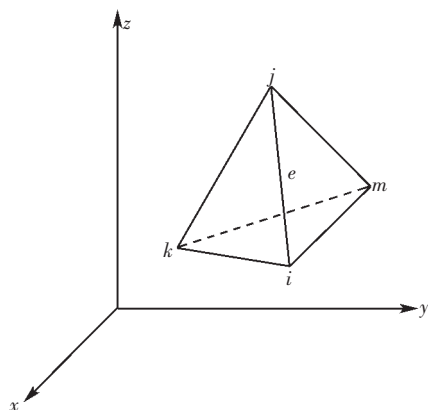


图 4-8 四面体单元

基函数为:

$$N_i = \frac{1}{6V} \begin{vmatrix} 1 & x & y & z \\ 1 & x_j & y_j & z_j \\ 1 & x_k & y_k & z_k \\ 1 & x_m & y_m & z_m \end{vmatrix} \quad (4-72)$$

$$N_j = \frac{1}{6V} \begin{vmatrix} 1 & x & y & z \\ 1 & x_k & y_k & z_k \\ 1 & x_m & y_m & z_m \\ 1 & x_i & y_i & z_i \end{vmatrix} \quad (4-73)$$

$$N_k = \frac{1}{6V} \begin{vmatrix} 1 & x & y & z \\ 1 & x_m & y_m & z_m \\ 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_j & y_j & z_j \end{vmatrix} \quad (4-74)$$

$$N_m = \frac{1}{6V} \begin{vmatrix} 1 & x & y & z \\ 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_j & y_j & z_j \\ 1 & x_k & y_k & z_k \end{vmatrix} \quad (4-75)$$

式中：\$V\$ 为四面体单元的体积

$$N = \frac{1}{6} \begin{vmatrix} 1 & x_i & y_i & z_i \\ 1 & x_j & y_j & z_j \\ 1 & x_k & y_k & z_k \\ 1 & x_m & y_m & z_m \end{vmatrix} \quad (4-76)$$

基函数也有下列性质

$$N_l(x_i, y_i, z_i) = \begin{cases} 1 & \text{当 } i = l \text{ 时} \\ 0 & \text{当 } i \neq l \text{ 时} \end{cases} \quad (4-77)$$

$$N_i + N_j + N_k + N_m = 1 \quad (4-78)$$

5. 三维六面体单元

对于任意的六面体单元,也可用前述的“等参”的办法处理。任一个单元有 8 个节点,设其编号为 1,2,3,4,5,6,7,8。见图 4-9。将整体坐标 \$x, y, z\$ 上的任意形状的六面体单元变换为局部坐标 \$\xi, \eta, \zeta\$ 上的立方体单元。相应点的坐标为 1(-1, -1, -1), 2(1, -1, -1), 3(1, 1, -1), 4(-1, 1, -1), 5(-1, -1, 1), 6(1, -1, 1), 7(1, 1, 1), 8(-1, 1, 1)。

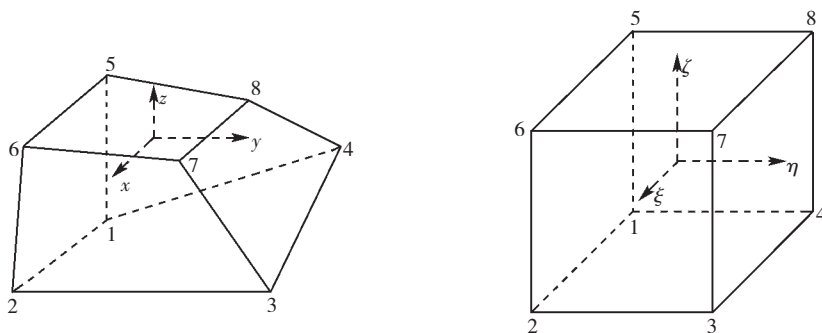


图 4-9 空间等参数单元

基函数的表达式由单元的方次决定。

(1) 线性单元。此时节点仅仅为 8 个角点。有

$$N_l = \frac{1}{8} (1 + \xi_l)(1 + \eta_l)(1 + \zeta_l) \quad (l = 1, 2, \dots, 8) \quad (4-79)$$

此时在单元 e 上的变量变换公式为

$$\begin{cases} x = \sum_{l=1}^8 x_l N_l \\ y = \sum_{l=1}^8 y_l N_l \\ z = \sum_{l=1}^8 z_l N_l \end{cases} \quad (4-80)$$

e 上的水头试函数为

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^8 H_l N_l \quad (4-81)$$

(2) 二次单元。此时除了 8 个角点为节点外, 每一个边的中点也是节点, 共 16 个节点。

角点:

$$N_l = \frac{1}{8}(1 + \xi_l)(1 + \eta_l)(1 + \zeta_l)(\xi_l + \eta_l + \zeta_l - 2) \quad (4-82)$$

边中点:

$$N_l = \frac{1}{4}(1 - \xi^2)(1 + \eta_l)(1 + \zeta_l) \quad \text{当 } \xi_l = 0, \eta_l = \zeta_l = \pm 1 \text{ 时} \quad (4-83)$$

其余的边中点依次类推。

(3) 三次单元。此时除 8 个角点为节点外, 每边的三等分点处各有二个节点, 每个单元共 24 个节点。

角点:

$$N_l = \frac{1}{64}(1 + \xi_l)(1 + \eta_l)(1 + \zeta_l)[9(\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) - 19] \quad (4-84)$$

边点: 位于 $\xi_l = \pm \frac{1}{3}, \eta_l = \pm 1, \zeta_l = \pm 1$ 处

$$N_l = \frac{9}{64}(1 - \xi^2)(1 + \xi_l)(1 + \eta_l)(1 + \zeta_l) \quad (4-85)$$

其余的点类推。

二、地下水问题的有限单元法

(一) 二维稳定流问题, 三角形单元, 线性插值。

在非均质各向同性含水层中, 二维流动的数学模型如下:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}(T \frac{\partial H}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(T \frac{\partial H}{\partial y}) = 0 & \text{在 } \Omega \text{ 内} \\ H = H_b(x, y) & \text{在 } \Gamma_1 \text{ 上} \\ T \frac{\partial H}{\partial x} \cos(n, x) + T \frac{\partial H}{\partial y} \cos(n, y) = q & \text{在 } \Gamma_2 \text{ 上} \end{cases} \quad (4-86)$$

式中

Ω ——计算区域;

Γ_1 ——第一类边界;

Γ_2 ——第二类边界;

H_b ——第一类边界上的已知水头;

n ——第二类边界的外法线方向;

q ——第二类边界上的法向单宽流量,流入为正,流出为负。

方程(4-86)的权剩余方程为

$$\iint_{\Omega} N_l \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \right) \right] dx dy = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, NN) \quad (4-87)$$

式中 NN 为区域 Ω 中剖分的节点数。因为基函数 N_l 仅在拼块 D_l 内不为零,在区域 Ω 的其他部分均为零,因此式(4-87)变为

$$\iint_{D_l} N_l \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \right) \right] dx dy = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, NN) \quad (4-88)$$

对上式进行分部积分,得

$$\iint_{D_l} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} N_l \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} N_l \right) \right] dx dy - \iint_{D_l} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) dx dy = 0$$

对上式的第二项应用格林公式(Green's Theorem),把在拼块 D_l 上的二重积分化为该拼块边界 B_l 上的曲线积分,即

$$\iint_{D_l} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} N_l \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} N_l \right) \right] dx dy = \oint_{B_l} N_l T \frac{\partial \hat{H}}{\partial n} ds \quad (4-89)$$

在所有的内节点上, B_l 上的 N_l 均为零,故 $\oint_{B_l} N_l T \frac{\partial \hat{H}}{\partial n} ds = 0$, 只有在边界 B_l 和第二类边

界 Γ_2 的部分, $N_l \neq 0$, 而 $T \frac{\partial \hat{H}}{\partial n} = q$, 因此

$$\int_{\Gamma_2} N_l q ds - \iint_{D_l} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) dx dy = 0 \quad (4-90)$$

因为基函数 N_l 是按单元分片定义的,上式可写作:

$$\sum_{e=1}^M \left[\iint_e \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} \right) dx dy - \int_{\Gamma_2} N_l q ds \right] = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, NN) \quad (4-91)$$

式中

M ——区域中的单元数;

e ——区域中某一单元。

因为由式(4-59)

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= N_i H_i + N_j H_j + N_k H_k \\
\frac{\partial \hat{H}}{\partial x} &= \frac{\partial N_i}{\partial x} H_i + \frac{\partial N_j}{\partial x} H_j + \frac{\partial N_k}{\partial x} H_k \\
\frac{\partial N_i}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{2A} (a_i + b_i x + c_i y) \right] = \frac{1}{2A} b_i
\end{aligned} \tag{4-92}$$

类似地

$$\begin{aligned}
\frac{\partial N_j}{\partial x} &= \frac{1}{2A} b_j & \frac{\partial N_k}{\partial x} &= \frac{1}{2A} b_k \\
\frac{\partial N_i}{\partial y} &= \frac{1}{2A} c_i, \frac{\partial N_j}{\partial y} = \frac{1}{2A} c_j, \frac{\partial N_k}{\partial y} = \frac{1}{2A} c_k
\end{aligned} \tag{4-93}$$

故

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial x} = \frac{1}{2A} (b_i H_i + b_j H_j + b_k H_k) \tag{4-94}$$

类似地

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial y} = \frac{1}{2A} (c_i H_i + c_j H_j + c_k H_k) \tag{4-95}$$

对于每一单元,有

$$Q_l^e = \iint_e (T^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + T^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y}) dx dy - \int_{\Gamma_2^e} N_l q ds \tag{4-96}$$

将式(4-92)至式(4-95),代入式(4-96),得

$$Q_l^e = \frac{T^e}{A^2} [(b_i H_i + b_j H_j + b_k H_k) b_i + (c_i H_i + c_j H_j + c_k H_k) c_i] \iint_e dx dy - \int_{\Gamma_2^e} q N_l ds \tag{4-97}$$

$$\iint_e dx dy = A \tag{4-98}$$

另 $\int_{\Gamma_2^e} q N_l ds = F_l$, 则

$$Q_l^e = \frac{T^e}{A} [(b_i b_i H_i + b_i b_j H_j + b_i b_k H_k) b_i + (c_i c_i H_i + c_i c_j H_j + c_i c_k H_k) c_i] - F_l$$

经整理后,得

$$\begin{Bmatrix} Q_i^e \\ Q_j^e \\ Q_k^e \end{Bmatrix} = \frac{T^e}{4A} \begin{bmatrix} b_i b_i + c_i c_i & b_i b_j + c_i c_j & b_i b_k + c_i c_k \\ b_j b_i + c_j c_i & b_j b_j + c_j c_j & b_j b_k + c_j c_k \\ b_k b_i + c_k c_i & b_k b_j + c_k c_j & b_k b_k + c_k c_k \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} H_i \\ H_j \\ H_k \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} F_i \\ F_j \\ F_k \end{Bmatrix} \tag{4-99}$$

或简化为

$$\{Q^e\} = [G]^e \{H\}^e - \{F\}^e \tag{4-100}$$

矩阵 $[G]^e$ 称为单元渗透矩阵。

伽辽金方法要求在整个解区域上的权积分为零,即要求

$$\sum_{e=1}^M Q^e = 0 \quad (4-101)$$

或条件

$$\sum_{e=1}^M [G]^e \{H\}^e = \sum_{e=1}^M \{F\}^e \quad (4-102)$$

上式的左端就是把各单元渗透矩阵集合起来,形成总渗透矩阵。图4-10就是由单元矩阵形成总渗透矩阵的一个例子。该例共有六个单元8个节点,边界上均为第二类边界节点。单元和节点的编号见图4-10。把每一单元的渗透矩阵计算出来,并安放到总渗透矩阵的相应位置上,然后相加,得到总渗透矩阵。

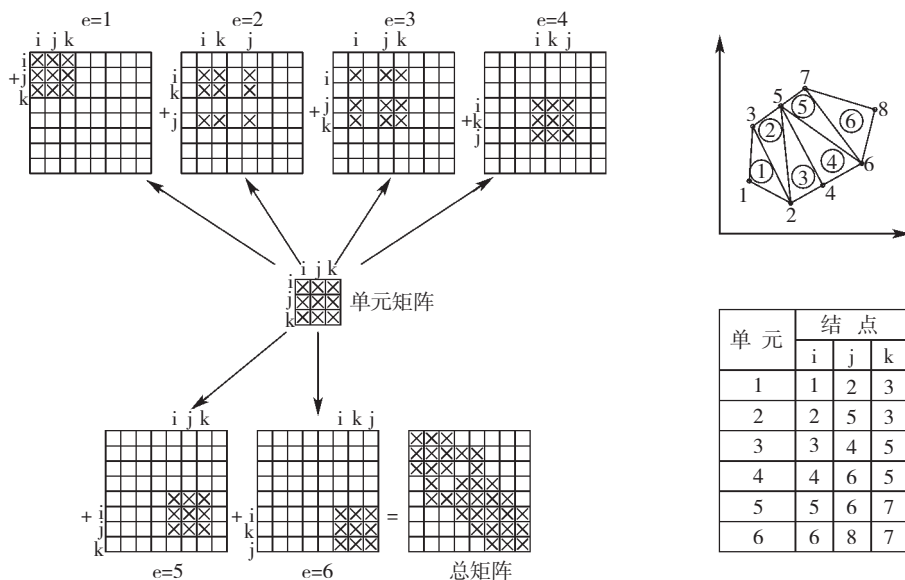


图4-10 由单元渗透矩阵形成总渗透矩阵示意图(根据 Cheng)^[3]

式(4-102)写作

$$[G]\{H\} = \{F\} \quad (4-103)$$

式中 $[G]$ 即为总渗透矩阵。

对于第一类边界条件,因为水头是已知值,不用计算。下面仅对第二类边界条件作些讨论。图4-11表示了第二类边界的两种情况。1. 每一单元边界上 q 为常数。设 ilm 为和第二边界重合的单元边界。单元 e_1 的边界流量为 q_1 ,单元 e_2 为 q_2 。与节点 l 有关的单元只有 e_1 和 e_2 ,故总渗透方程中

$$F_l = \int_i^l q_1 N_l ds + \int_l^m q_2 N_l ds \quad (4-104)$$

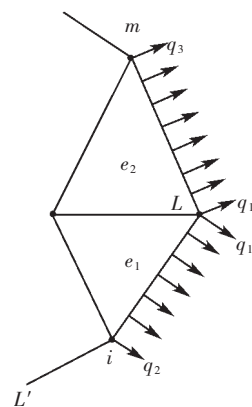


图4-11 有限元法处理第二类边界示意图

因为 N_l 按线形规律变化, 在 l 节点为 1, 在 i, m 节点为零, 故有

$$F_l = q_1 \int_0^{L_1} (1 - \frac{s}{L_1}) ds + q_2 \int_0^{L_2} (1 - \frac{s}{L_2}) ds \quad (4-105)$$

式中

L_1 ——单元 e_1 上的 il 边长;

L_2 ——单元 e_2 上的 lm 边长;

S ——由点 l 算起的距离。

式(4-105)积分后得

$$F_l = \frac{1}{2} q_1 L_1 + \frac{1}{2} q_2 L_2 = \frac{1}{2} (q_1 L_1 + q_2 L_2) \quad (4-106)$$

2. 各单元边界上的 q 按线形规律变化

在 e_1 上, $q = q_1 + \frac{s}{L_1} (q_2 - q_1)$

在 e_2 上, $q = q_1 + \frac{s}{L_2} (q_3 - q_1)$

因此

$$\begin{aligned} F_l &= \int_i^l q N_l ds + \int_l^m q N_l ds \\ &= \int_0^{L_1} \left[q_1 + \frac{s}{L_1} (q_2 - q_1) \right] \left[1 - \frac{s}{L_1} \right] ds + \int_0^{L_2} \left[q_1 + \frac{s}{L_2} (q_3 - q_1) \right] \left[1 - \frac{s}{L_2} \right] ds \\ &= \frac{L_1}{2} \left[q_1 + \frac{q_2 - q_1}{3} \right] + \frac{L_2}{2} \left[q_1 + \frac{q_3 - q_1}{3} \right] \end{aligned} \quad (4-107)$$

(二) 二维非稳定流问题, 三角形单元, 线形插值

在非均质各向同性含水层中, 二维地下水非稳定流的数学模型如下:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} (T \frac{\partial H}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (T \frac{\partial H}{\partial y}) + R = S \frac{\partial H}{\partial t} & \text{在 } \Omega \text{ 内} \\ H = H_0(x, y) & \text{当 } t = 0 \text{ 时} \\ H = H_0(x, y, t) & \text{在 } \Gamma_1 \text{ 上} \\ T \frac{\partial H}{\partial x} \cos(n, x) + T \frac{\partial H}{\partial y} \cos(n, y) = q & \text{在 } \Gamma_2 \text{ 上} \end{cases} \quad (4-108)$$

式中

R ——单位时间、单位面积上垂直方向的水交换量, 包括各种入渗补给、潜水蒸发和面平均的水井抽水, $[LT^{-1}]$;

S ——贮水系数, $[L^{-1}]$; 或给水度, 无量纲;

H_0 ——初始水头, $[L]$;

n ——第二类边界的外法线方向;

q ——第二类边界上的法线方向单宽流量, $[L^2 T^{-1}]$ 。

式(4-108)的权剩余方程为

$$\iint_{\Omega} N_i \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \right) + R \right] dx dy = \iint_{\Omega} N_i S \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} dx dy \quad (4-109)$$

和稳定流类似处理,进行分部积分并运用格林公式,可得

$$\sum_{e=1}^M \left\{ \iint_e \left(T^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_i}{\partial x} + T^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_i}{\partial y} \right) dx dy \iint_e N_i S^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} dx dy - \iint_e N_i R dx dy - \int_{\Gamma_2^e} N_i q ds \right\} = 0 \quad (4-110)$$

对于任意的三角形单元的 i 节点,有

$$Q_i^e = \frac{T^e}{4A} [(b_i b_i + c_i c_i) H_i(t) + (b_i b_j + c_i c_j) H_j(t)] + S^e \left[\frac{dH_i(t)}{dt} \iint_e N_i N_i dx dy + \frac{dH_j(t)}{dt} \iint_e N_i N_j dx dy + \frac{dH_k(t)}{dt} \iint_e N_i N_k dx dy \right] - R \iint_e N_i dx dy - \int_{\Gamma_2^e} N_i q ds \quad (4-111)$$

通过坐标变换,可求得基函数的积分值

$$\begin{aligned} \iint_e N_i dx dy &= \iint_e N_j dx dy = \iint_e N_k dx dy = \frac{1}{3} A \\ \iint_e N_i N_i dx dy &= \iint_e N_j N_j dx dy = \iint_e N_k N_k dx dy = \frac{1}{6} A \\ \iint_e N_i N_j dx dy &= \iint_e N_j N_k dx dy = \iint_e N_i N_k dx dy = \frac{1}{12} A \end{aligned}$$

将以上结果代入式(4-111),则对于单元 e 有

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} Q_i^e \\ Q_j^e \\ Q_k^e \end{Bmatrix} &= \frac{T^e}{4A} \begin{bmatrix} b_i b_i + c_i c_i & b_i b_j + c_i c_j & b_i b_k + c_i c_k \\ b_j b_i + c_j c_i & b_j b_j + c_j c_j & b_j b_k + c_j c_k \\ b_k b_i + c_k c_i & b_k b_j + c_k c_j & b_k b_k + c_k c_k \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} H_i(t) \\ H_j(t) \\ H_k(t) \end{Bmatrix} \\ &+ \frac{A}{12} S^e \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \text{其后乘以} \begin{Bmatrix} \frac{dH_i(t)}{dt} \\ \frac{dH_j(t)}{dt} \\ \frac{dH_k(t)}{dt} \end{Bmatrix} - \frac{A}{3} R^e \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} F_i \\ F_j \\ F_k \end{Bmatrix} \quad (4-112) \end{aligned}$$

伽辽金方法要求在整个 Ω 上权积分为零,即

$$\sum_{e=1}^M Q^e = 0$$

则有

$$\sum_{e=1}^M [G]^e \{H(t)\}^e + \sum_{e=1}^M [C]^e \left\{ \frac{dH(t)}{dt} \right\}^e = \sum_{e=1}^M \{R\}^e + \sum_{e=1}^M \{F\}^e \quad (4-113)$$

或简记为

$$[G]\{H(t)\} + [C]\left\{ \frac{dH(t)}{dt} \right\} = \{R\} + \{F\} \quad (4-114)$$

上式与稳定流公式最大的差别在于水头是时间 t 的连续函数。求解时要对时间 $H(t)$ 进行离散。离散情况如图 4-12 所示。因为初始条件是给定的,故当时间 $t = 0$ 或时间水平为 1 时的水头值已知,可利用它求出 $t = 1 \cdot \Delta t$ 即时间水平 2 时的水头值,如此重复做下去,可求得全部时间水平的水头值。时间水平一般用上标表示。

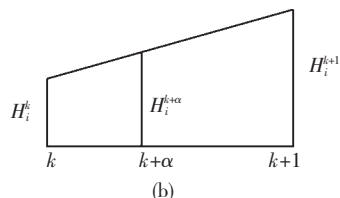
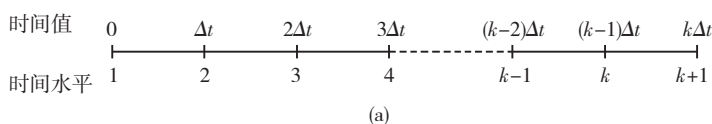


图 4-12 时间近似

a) 离散化, b) $H_i^{k+\alpha}$ 值估计 (根据 P. S. Huyakorn 和 G. F. Pinder)

如果时间水平 k 的水头为已知水头, $k+1$ 为待求的水头。则式(4-113)中 $H(t)$ 应当取二者之间 $k+\alpha$ 的时刻的值, $0 \leq \alpha \leq 1$ 。

$$H^{k+\alpha} = (1-\alpha)H^k + \alpha H^{k+1} \quad (4-115)$$

如果假设在 k 和 $k+1$ 之间的时段,水头线形变化,有

$$\left(\frac{dH}{dt} \right)^{k+\alpha} = \frac{H_{k+1} - H_k}{\Delta t} \quad (4-116)$$

如果 R 和 q 在一个时间段内变化不大,将式(4-115)和式(4-116)代入式(4-114),得

$$[G]\{(1-\alpha)H^k + \alpha H^{k+1}\} + [C]\left\{ \frac{H^{k+1} - H^k}{\Delta t} \right\} = \{R\} + \{F\} \quad (4-117)$$

把未知项都放在左边,已知项放在右边,得

$$\alpha[G]\{H^{k+1}\} + \frac{1}{\Delta t}[C]\{H^{k+1}\} = \frac{1}{\Delta t}[C]\{H^k\} - (1-\alpha)[G]\{H^k\} + \{R\} + \{F\} \quad (4-118)$$

当 α 取不同值时,得到不同格式的时间近似:

(1) 当 $\alpha = 0$ 时,为显式格式,此时式(4-118)变为

$$\frac{1}{\Delta t}[C]\{H^{k+1}\} = \frac{1}{\Delta t}[C]\{H^k\} - [G]\{H^k\} + \{R\} + \{F\} \quad (4-119)$$

(2) 当 $\alpha = 1$ 时, 为全隐式格式, 此时有

$$([G] + \frac{1}{\Delta t}[C])\{H^{k+1}\} = \frac{1}{\Delta t}[C]\{H^k\} + \{R\} + \{F\} \quad (4-120)$$

(3) 当 $\alpha = \frac{1}{2}$ 时, 为克兰克 — 尼柯耳松格式, 此时有

$$(\frac{1}{2}[G] + \frac{1}{\Delta t}[C])\{H^{k+1}\} = (\frac{1}{2}[C] - \frac{1}{2})\{H^k\} + \{R\} + \{F\} \quad (4-121)$$

(2) 和 (3) 两种格式是无条件稳定的, 故用得较多。

(三) 三维非稳定流问题, 六面体单元, 等参 8 节点

设有如下的三维非稳定流问题

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x}(K \frac{\partial H}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K \frac{\partial H}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(K \frac{\partial H}{\partial z}) + W = S_s \frac{\partial H}{\partial t} & (x, y, z) \in \Omega \\ H(x, y, z, 0) = H_0(x, y, z) \\ H(x, y, z, t) = \varphi(x, y, z, t) & (x, y, z) \in s_1 \\ K \frac{\partial H}{\partial n} = q & (x, y, z) \in s_2 \end{cases} \quad (4-122)$$

式中

K ——渗透系数, $[LT^{-1}]$

H ——水头, $[L]$;

S_s ——贮水率, $[L^{-1}]$;

W ——源、汇项, $[T^{-1}]$;

Ω ——研究的区域;

S_1 ——第一类边界曲面;

S_2 ——第二类边界曲面;

H_0 ——初始水头, $[L]$;

φ ——第一类边界上水头, $[L]$;

q ——第二类边界上的单位面积流量, 流入为正, 流出为负, $[LT^{-1}]$ 。

我们将空间区域 Ω 剖分为有限个六面体单元, 取单元的 8 个角点为节点。和二维情况类似, 对式 (4-122) 写出权剩余方程, 进行分部积分并运用格林公式, 得

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^M \left\{ \iiint_e (K^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + K^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} + K^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial z} \frac{\partial N_l}{\partial z}) dx dy dz + \iint_e N_l S_s^e \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} dx dy dz \right. \\ & \quad \left. - \iint_e N_l W dx dy dz - \iint_{S_2^e} N_l q ds = 0 \quad (l = 1, 2, \dots, 8) \right. \end{aligned} \quad (4-123)$$

从 (4-81) 式, 单元 e 上的水头试函数为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^8 H_i N_i$$

则

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\sum_{i=1}^8 H_i N_i \right) \quad (4-124)$$

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \sum_{i=1}^8 N_i \frac{dH_i}{dt} \quad (4-125)$$

式(4-123)可简记为

$$\sum_{e=1}^M Q^e = 0$$

每一 Q^e 单元上有 8 个节点, 将式(4-124)、式(4-125)代入式(4-123)

$$\begin{aligned} Q_L^e = & \sum_{i=1}^8 H_i^e \iiint_e K^e \left[\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_L}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_L}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_L}{\partial z} \right] dx dy dz \\ & + \sum_{i=1}^8 \frac{dH_i}{dt} \iiint_e S_i^e N_i N_L dx dy dz + \iiint_e N_L W^e dx dy dz - \iint_{S_2^e} N_L q ds \quad (L = 1, 2, \dots, 8) \end{aligned} \quad (4-126)$$

对于单元 e , 有

$$\begin{Bmatrix} Q_1^e \\ Q_2^e \\ \vdots \\ Q_7^e \\ Q_8^e \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{18} \\ g_{21} & g_{22} & \cdots & g_{28} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ g_{71} & g_{72} & \cdots & g_{78} \\ g_{81} & g_{82} & \cdots & g_{88} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} H_1^e \\ H_2^e \\ \vdots \\ H_7^e \\ H_8^e \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \cdots & s_{18} \\ s_{21} & s_{22} & \cdots & s_{28} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ s_{71} & s_{72} & \cdots & s_{78} \\ s_{81} & s_{82} & \cdots & s_{88} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{dH_1^e}{dt} \\ \frac{dH_2^e}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dH_7^e}{dt} \\ \frac{dH_8^e}{dt} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} E_1^e \\ E_2^e \\ \vdots \\ E_7^e \\ E_8^e \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} Q_1' \\ Q_2' \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (4-127)$$

式中

$$g_{il} = \iiint_e K^e \left[\frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_L}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_L}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_L}{\partial z} \right] dx dy dz \quad (4-128)$$

$$S_{il} = \iiint_e S_i^e N_i N_L dx dy dz \quad (4-129)$$

$$E_L = \iiint_e W^e N_L dx dy dz \quad (4-130)$$

Q_1' 和 Q_2' 为边界流入量。

因为单元为任意形状的六面体,在总体坐标下对它求三重积分比较困难。所以我们通过坐标变换,把它变换为局部坐标 (ξ, η, ζ) 下的正方形,用等参有限元方法求解。

在两种坐标系中,基函数的导数有如下关系:

$$\frac{\partial N_l}{\partial \xi} = \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial N_l}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \xi}$$

$$\frac{\partial N_l}{\partial \eta} = \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial N_l}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial N_l}{\partial \zeta} = \frac{\partial N_l}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_l}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_l}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial \zeta}$$

若记

$$[J] = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \quad (4-131)$$

称为雅可比(Jacobi) 矩阵。则有

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_l}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_l}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_l}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = [J] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_l}{\partial x} \\ \frac{\partial N_l}{\partial y} \\ \frac{\partial N_l}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (4-132)$$

J 称为雅可比行列式

$$J = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix} \quad (4-133)$$

和三角形单元的公式(4-58)类似,空间单元内任一点 (x, y, z) 的坐标也可由8个节点的坐标和基函数求得

$$\begin{cases} x = \sum_{i=1}^8 x_i^e N_i \\ y = \sum_{i=1}^8 y_i^e N_i \\ z = \sum_{i=1}^8 z_i^e N_i \end{cases} \quad (4-134)$$

则

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^8 x_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^8 y_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial z}{\partial \xi} = \sum_{i=1}^8 z_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \end{cases} \quad (4-135)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^8 x_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^8 y_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial z}{\partial \eta} = \sum_{i=1}^8 z_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \end{cases} \quad (4-136)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial x}{\partial \zeta} = \sum_{i=1}^8 x_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial y}{\partial \zeta} = \sum_{i=1}^8 y_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial z}{\partial \zeta} = \sum_{i=1}^8 z_i^e \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{cases} \quad (4-137)$$

为了把 g_{il} 在 (x, y, z) 坐标系中的表达式(4-128) 转变为 (ξ, η, ζ) 坐标系中的表达式, 要对每一项都进行转换。

$$\frac{\partial N_i}{\partial x} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix} \quad (l = 1, 2, \dots, 8) \quad (4-138)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial y} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial N_i}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial N_i}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{vmatrix} \quad (l = 1, 2, \dots, 8) \quad (4-139)$$

$$\frac{\partial N_i}{\partial z} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{vmatrix} \quad (l = 1, 2, \dots, 8) \quad (4-140)$$

参数坐标系和原坐标系体积元素之间的关系为

$$dx dy dz = |J| d\xi d\eta d\zeta \quad (4-141)$$

式中

$|J|$ 为雅可比行列式的绝对值。

在参数坐标系 (ξ, η, ζ) 中, 式(4-128) 变为

$$g_{il} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 K^e \left\{ \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_l}{\partial x} + \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_l}{\partial y} + \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_l}{\partial z} \right\} |J| d\xi d\eta d\zeta \quad (4-142)$$

相应地,

$$s_{il} = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 S_i^e N_i N_l |J| d\xi d\eta d\zeta \quad (4-143)$$

$$E_l = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 W^e N_i N_l |J| d\xi d\eta d\zeta \quad (4-144)$$

公式(4-142) 中的 $\frac{\partial N_i}{\partial x}, \frac{\partial N_i}{\partial y}, \frac{\partial N_i}{\partial z}$ 在参数坐标系中的值, 按公式(4-138)、(4-139)、(4-140) 计算。雅可比行列式 J 用式(4-133) 计算。

下面讨论第二类边界条件。如单元 e 的一个面(如 1234 面) 落在第二类边界面 s_2 上。该面在参数坐标系上为 $\zeta = -1$ 。曲面 1234 的参数方程为

$$x = \left[\sum_{i=1}^8 x_i^e N_i \right]_{\zeta} = -1$$

$$y = \left[\sum_{i=1}^8 y_i^e N_i \right]_{\zeta} = -1$$

$$z = \left[\sum_{i=1}^8 z_i^e N_i \right]_{\zeta} = -1$$

如用 N_{Di} 表示曲面 1234 上的基函数, D 表示该曲面, 则

$$N_{Di}(\xi, \eta) = [N_i(\xi, \eta, \zeta)]_{\zeta=-1} = \frac{1}{8}(1 + \xi \xi_i)(1 + \eta \eta_i)(1 - \zeta_i) \quad (i = 1, 2, 3, 4) \quad (4-145)$$

在 1234 面上任一点坐标为

$$\begin{cases} x = \sum_{i=1}^4 x_i^e N_{Di}(\xi, \eta) \\ y = \sum_{i=1}^4 y_i^e N_{Di}(\xi, \eta) \\ z = \sum_{i=1}^4 z_i^e N_{Di}(\xi, \eta) \end{cases} \quad (4-146)$$

水头 H 在该面上的插值公式为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^4 H_i^e N_{Di}(\xi, \eta) \quad (4-147)$$

因此,式(4-126)中的

$$\iint_{s_2^e} N_l q \, ds = \iint_D q N_D \, ds$$

D 指 1234 面。

$$ds = \sqrt{EG - F^2} d\xi d\eta \quad (4-148)$$

式中

$$E = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \xi}\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^4 x_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^4 y_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^4 z_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right)^2 \quad (4-149)$$

$$G = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\frac{\partial z}{\partial \eta}\right)^2 = \left(\sum_{i=1}^4 x_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^4 y_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right)^2 + \left(\sum_{i=1}^4 z_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right)^2 \quad (4-150)$$

$$F = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial z}{\partial \xi} \frac{\partial z}{\partial \eta} = \left(\sum_{i=1}^4 x_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right) \left(\sum_{i=1}^4 x_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right) + \left(\sum_{i=1}^4 y_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right) \left(\sum_{i=1}^4 y_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right) + \left(\sum_{i=1}^4 z_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \xi}\right) \left(\sum_{i=1}^4 z_i^e \frac{\partial N_{Di}}{\partial \eta}\right) \quad (4-151)$$

因此

$$Q_L' = \iint_D q N_D \, ds = \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 q N_D \sqrt{EG - F^2} d\xi d\eta \quad (4-152)$$

对于每一个单元都可写出如式(4-127)的表达式。式中许多在参数坐标系下的三重积分,用高斯求积公式计算。然后将各单元的结果相加,并令其等于零。得到

$$[G]\{H(t)\} + [S]\left\{\frac{dH}{dt}\right\} = \{E\} + \{Q\} \quad (4-153)$$

式中的 $\left\{\frac{dH}{dt}\right\}$ 和二维情况同样处理。如取全隐式格式,有

$$([G] + \frac{1}{\Delta t}[S])\{H^{k+1}\} = \frac{1}{\Delta t}[S]\{H^k\} + \{E\} + \{Q\} \quad (4-154)$$

即可求解。

第四节 水环境系统模拟实例

根据中国北方裂隙岩溶地下水的大量研究成果表明,虽然溶蚀裂隙发育不均匀,但地下水流具有统一的水面,可以近似地运用多孔介质渗流理论模型来描述^{[10][11][12]}。考虑到如果采用二维模型计算裂隙岩溶含水层,很难求出含水层之间的越流补给量,故采用非均质各向异性三维非稳定流数学模型,并利用等参有限元技术进行数值求解。本次研究是在详细调查研究区水文地质资料的基础上,将数学模型应用于济南泉群区域裂隙岩溶地下水流数值模拟,并严格按照《地下水资源管理模型工作要求(简称工作要求)》(GB/T14497—93)来进行。

一、水文地质概念模型

(一) 模拟范围

地下水流场模拟范围的确定,应该以研究区水文地质条件为依据,同时还应充分考虑地下水系统的完整性和独立性。济南泉群区域地下水系统的形成和发育,均位于一个比较完整的地下水系统内,在较长时期内,有相对固定的补给量和排泄量。其模拟范围为:在平面上,西部以马山断裂为界;北部从马山断裂北端长清县城北—平安店—小金庄,折向北至小清河,以小清河为界,东北部边界以500米埋深灰岩顶板线为界线;东部以文祖断裂西侧的埠村向斜轴为界;南边界至泰山北麓山脊线,即以分水岭为界。模拟面积 2614.90km^2 。在垂向上,考虑到裂隙岩溶一般在浅部较为发育(在断裂带和岩体接触带可达—200m以下),所以本次模拟垂向范围上起潜水面,下至—160m水平标高深度,研究区北部最小垂向计算深度180m,而在研究区南部,最高计算深度达400m。

(二) 含水层结构的概化

从水文地质角度分析,研究区含水系统主要包括第四系孔隙含水层和裂隙岩溶含水层。对研究区的含水系统来说,研究重点为裂隙岩溶含水系统,该系统在地貌上分为两部分,一部分是裸露和半裸露的岩溶丘陵区,主要分布于研究区的中、南部;另一部分为浅埋于冲、洪、湖积平原之下的隐伏岩溶区,分布于研究区的北部。尽管由于隔水地层的分割阻挡,但由于裂隙、断层切割,各层间有一定的水力联系,仍可将裂隙岩溶含水层概化为单一的、存在越流补给的裂隙岩溶含水系统处理。

岩溶含水系统在裸露或半裸露区为潜水,在数值计算中分为两部分处理,上层为潜水,下层为承压水;而在覆盖区为承压水。由于研究区岩溶岩性及构造控水特性明显,岩溶发育程度及富水程度不均匀,渗透特征沿方向变化大,因此岩溶分布具有明显的水平和垂直分带特征。考虑到研究区存在分层取水,自来水厂、工矿企业用水大部分取自承压的裂隙岩溶含水层,而农业、农村的生活及灌溉用水大部分取自埋深较浅的潜水含水层。岩溶水除在裸露或半裸露区直接接收大气降水补给以外,还接受第四系越流、水库渗漏、河流侧渗侧向补给等,地下水就存在垂向分运动。另外,研究区内有分层观测孔(岩溶水27眼,孔隙水9眼),因此,本研究区裂隙岩溶含水系统的结构及水动力学条件可概化为非均质各向异性的无压——承压三维非稳定流。

(三) 边界条件

研究区的边界条件可概化为两类边界条件:隔水边界和径流边界即第一类边界和第二类边界,具体如下:

北部边界:沿长清县城北—平安店—小金庄、向北至小清河的一段,在现状条件下,与黄河冲积平原形成的含水层有水量交换,可作为补给边界或径流边界。小清河作为北部边界的一段,与研究区地下水有水量交换,枯水期,小清河水位低于研究区内第四系水位,起排泄地下水的作用。丰水期,小清河水位升高,可以补给研究孔隙水含水层,所以小清河一段亦可作为径流边界。由于地下500m灰岩顶板上覆盖孔隙含水层,灰岩可作为隔水边界,但其上部覆盖的孔隙含水层与研究区外地下水有水量交换,所以第一层为径流边界,第二层为隔水边界。

东部边界:为文祖断裂附近,埠村向斜分布在断裂西侧,是一条隔水断裂,可作为隔水边

界。

南部边界:泰山北麓山脊线可作为零流量边界。

西部边界:在马山断裂南端,季家庄—马东—岗辛庄一线,为隔水断裂,可作为隔水边界;岗辛庄—新周庄,经勘查试验证明具有弱透水性,断裂两侧有微量的水量交换,看作径流边界;新周庄—老屯,经抽水试验,断裂两侧水位同上下,透水性较强,亦作为径流边界处理。研究区的边界条件见图4-13中。

此外,为增强模型的收敛性,位于研究区边界上的历城区14号、历城区38号及历城区S—51号观测孔作为第一类边界条件上定点动水位处理。

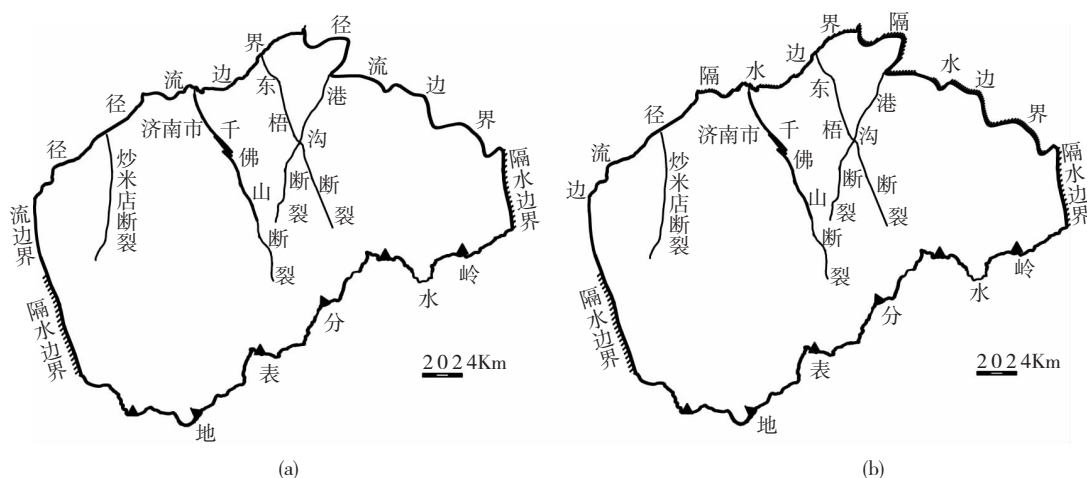


图4-13 研究区边界条件示意图

(a) 第一层计算边界条件;(b) 第二、三层计算边界条件

(四) 地下水补给及排泄项的处理

1. 地下水开采量

现状条件下,研究区地下水开采以城市自来水、工矿企业自备井开采、农村农业生活灌溉用水以及乡镇企业用水为主。目前济南市各城区的企业自备开采井有320多眼,采水量主要集中在东郊水源地及济南市南郊、西郊等地,济南市有大小水厂9座,均开采岩溶地下水,主要分布在西郊水源地、东郊水源地以及市区的几座水厂,尽管目前市区部分自来水厂已停止取水,但其余部位开采的地下水量仍很可观。历城区、长清县及章丘市还分布着数量众多的农村生活和农业灌溉井、城镇用水开采井。对于开采井,在剖分时将其放在节点上处理,以简化计算。

2. 入渗及越流补给量

垂向入渗及越流补给量主要包括降雨入渗,地表水体的渗漏以及第四系孔隙水的越流补给等。在碳酸盐岩裸露半裸露区,裂隙岩溶含水层直接接受大气降水的入渗补给。另外,还接受地表水如水库的入渗补给,在三维数值模拟时,这些仅发生在地表一层。在有第四系孔隙含水层覆盖的研究区北部以及南部山区部分区域,孔隙水不同程度的补给岩溶水,其补给量可通过三维数值模拟求出。由于研究区内各处的入渗强度不一,所以应根据地层构造、岩石特性、地形地貌特征等进行参数分区,分别赋给初始值,在模拟过程中给予识别,并最终确定。

3. 蒸发量

研究区岩溶水位埋深一般接近或超过蒸发临界值,计算时不必考虑岩溶水的蒸发量,但是蒸发量对孔隙水的影响很大,尤其在有第四系孔隙含水层覆盖的区域及西部的平原地区,地下水埋深一般较浅(小于5米),潜水蒸发量较大。从地下水系统的观点出发,蒸发量的大小影响了孔隙水水位的变化,进一步影响了岩溶水水位的变化,因此在模拟过程中,本文对潜水蒸发系数给予分区、赋值和识别。

4. 侧渗量

侧渗量是指由外部流入或流出研究区的侧向交换量。模拟过程中首先给出各流量边界面上的单元流量,经模拟识别,并最终确定。

综上所述,对研究区水文地质条件概化后,模型可归结为:非均质各向异性的无压——承压裂隙岩溶三维非稳定流数学模型。

二、计算区剖分及坐标系选取

(一) 剖分方法

根据研究区水文地质特性建立的数学模型,很难求得其解析解,只能借助于计算机强大的计算功能,编程序求其数值解,本文应用有限元技术求解。首先对研究区进行平面四边形剖分。在剖分过程中,把开采井、观测孔定为节点,研究区内有奥陶系、寒武系、变质岩以及第四系等含水层分界线,由西向东,依次分布有炒米店断裂、千佛山断裂、东梧断裂、港沟断裂等,剖分时以这些边界线为控制线,避免一个单元格跨越岩体界线。在泉群分布区域,为提高数值模拟精度,适当加密剖分。

(二) 剖分图样及说明

根据水文地质概念模型,对计算研究区进行六面体单元剖分并进行线性插值。根据第四系地层与碳酸盐岩地层的分布关系,同时考虑岩溶的垂直分带特征,将研究区分为三层:第一层,无压水面至其以下50米深度;第二层,无压水面下50米至-80米标高水平面;第三层,-80米标高水平面至-160米标高水平面。在山区与平原交接地带,由于孔隙水与岩溶水垂向补给关系密切,所以将其处理为具有统一的地下水面。这样,研究区共剖分为三层,3294个单元,4680个节点。第一、二、三层网格分布俯视图相同,只是纵向坐标不同而已,第二层剖分网格及观测孔位置见图4-14。

(三) 坐标系的选取

根据研究区的地质及水文地质条件,通常认为渗透系数张量的一个主轴方向与岩层的走向大致相同,另一个方向与岩层的走向大致垂直,即补给济南市泉群的地下水流动优势流方向。因此本文中计算时,将标准直角坐标系沿逆时针方向旋转 10° ,使坐标系 x 、 y 方向分别与 K_{xx} 、 K_{yy} 方向一致,这样可以简化第一节中介绍的数学模型。

三、数值模拟及模型校正

对地下水流动系统进行数值模拟的全部意义在于:用数学模型可“真实”地反映客观实体,以解释过去,说明现在和预测未来。只完成建立数学模型及其求解过程,数学模拟尚未结束,还需要进行模型参数识别和检验,这是数学模拟必不可少的重要一步。

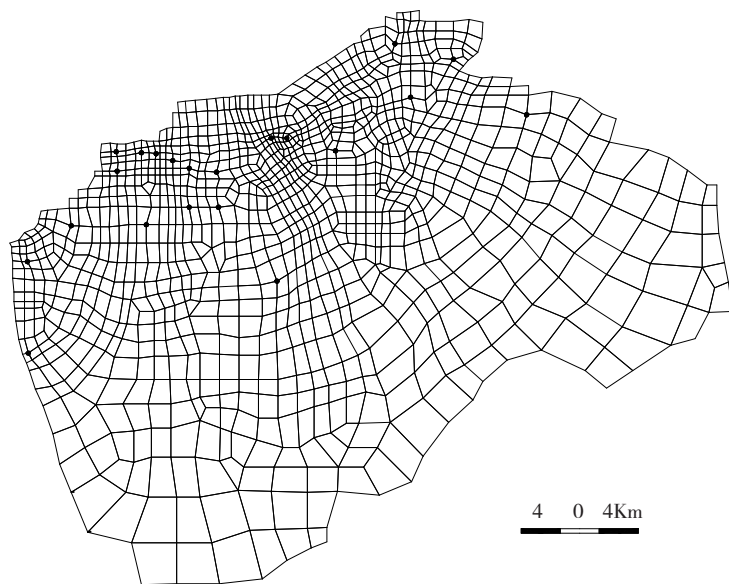


图 4-14 模拟研究区第二层单元剖分及观测孔
(黑点为岩溶地下水观测孔)

模型参数识别也即解逆问题,它是根据抽水试验资料或实际开采量和水位资料,进行数值计算,求得水文地质参数,从而验证数学模型。由于解逆问题的不适定性,长期以来它一直是建模工作者不能很好解决的问题。参数分区是参数识别过程中关键的一步,本文根据模拟研究区的地质构造、岩石特性及岩溶发育程度等,并结合长期以来对我国北方型裂隙岩溶水演变规律的研究成果将模拟研究区的渗透系数、贮水率、给水度、降水入渗系数及蒸发系数等分为若干参数分区。见图 4-15,图 4-16,图 4-17,图 4-18。

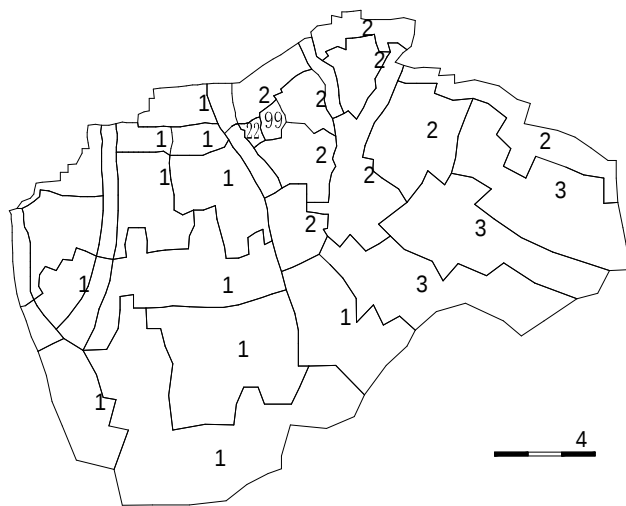


图 4-15 研究区第一层渗透系数及给水度分区图

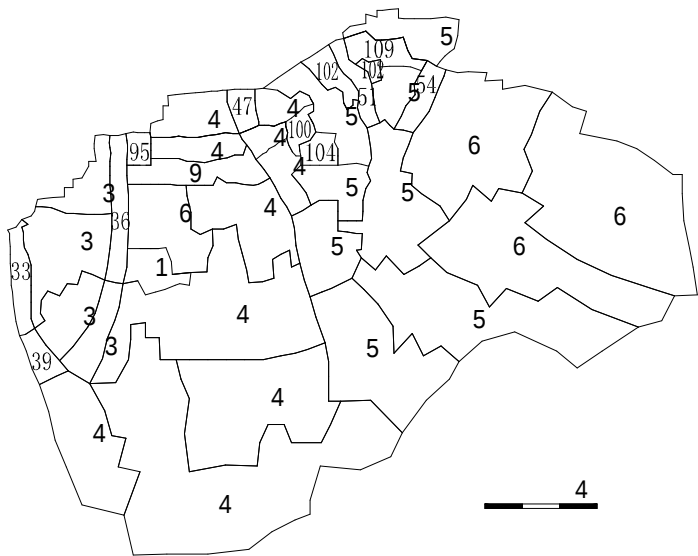


图 4-16 研究区第二层渗透系数及贮水率分区图

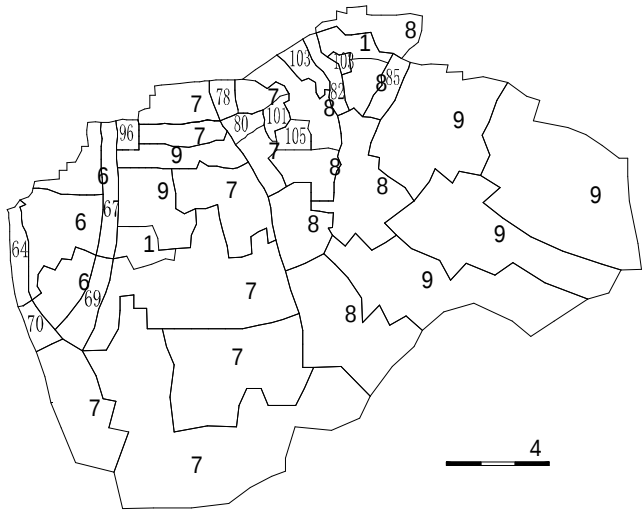


图 4-17 研究区第三层渗透系数及贮水率分区图

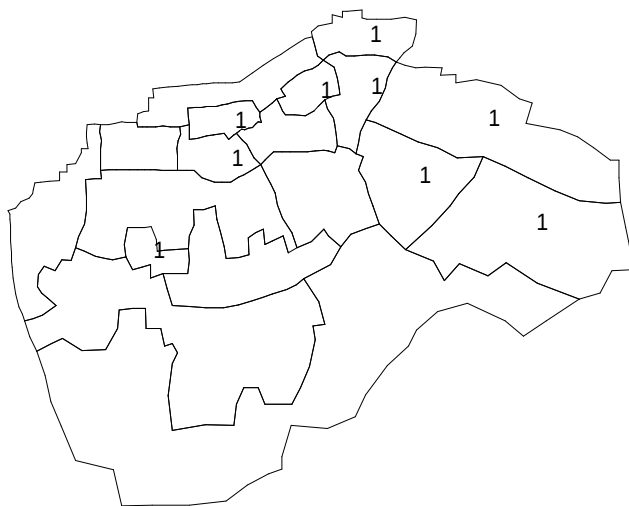


图 4-18 研究区降水入渗系数及蒸发系数分区图

模型参数的识别采用间接法,即假定同一个参数分区内水文地质参数相同。首先给每个参数分区分别赋参数初值,带入有限元模型中计算出观测孔的水头,并将观测孔的计算水头与实测水头进行比较,使数据差别达到最小,其评价函数的表达式为:

$$E = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N W_j (H_{ij}^c - H_{ij}^0)^2 \quad (4-155)$$

式中:

M ——时段总数;

N ——观测孔总数;

W_j ——各观测孔的权函数;

H_{ij}^c —— i 时段末 j 号观测孔中某点的计算水头,对于岩溶水观测孔取第二层和第三层间的节点,第四系孔隙水观测孔取第一层节点;

H_{ij}^0 —— i 时段末 j 号观测孔的实测水头。

调整参数,当目标函数 E 达到“最小”,同时根据《工作要求》(GB/T14497—93) 中规定“对于降深小的地区,要求水位拟合小于 0.5m 的绝对误差必须占已知水位节点的 70% 以上;对于降深较大的地区(大于 5m),要求水位拟合小于 10% 的相对误差节点必须占已知水位节点的 70% 以上”,则认为参数达到了“最优”。同时还要注意到“对水文地质条件复杂的地区,拟合精度可适当降低”。对于研究区来说,地形、岩性变化强烈,尤其是干佛山断裂、马山断裂、玉符河沿线流域以及东、西郊水源地一带,岩浆岩分布凌乱,侵入体以“舌状”包围奥陶系灰岩,岩体附近多为富水区,地下水开采量大,岩性、地形变化大,数值模拟时,计算值和实际观测值相对误差控制在 10% 以内的占已知水位节点总数的 70% 以上。对于市区泉群附近的观测孔,是本文数值模拟的重点区域,模拟过程中予以较高的误差要求。

模型的拟合时间从 2001 年 1 月 1 日起,至 2001 年 12 月 31 日结束。2001 年是一个比较典型的水文年,研究区内平均年降水量 570.033mm,属平水年份,另外 2001 年 8 月 18 日至 2001 年 9 月 4 日,从卧虎山水库放水,进行玉符河人工补源回灌试验后,以玉符河崔马段为

中心,地下水位有不同程度的上升。在这一年中,济南岩溶地下水系统加入了大量的人工调控因素,选用这一年为数学模拟阶段,更能体现济南泉群研究区域地下水系统的动态变化。时间步长以1旬计算,全年共36个时段。2001年的水位模拟结束后,采用2002年全年的水位资料进行模型校正,时间步长和时段数与模拟阶段相同。在整个拟合校正过程中,以研究区内观测孔实际观测水位作为模型识别的依据。

模型识别后各种有关裂隙岩溶含水层的参数见表4-2和表4-3。经模型识别的各种参数基本符合水文地质勘察结果。根据2001年1月1日各观测孔水位,经计算机仿真刻画的济南市岩溶地下水计算初始流场,也基本反映了研究区在该时刻地下水流场的实际状况。

表4-2 济南泉群研究区降水入渗系数及蒸发系数拟合参数

分区号	1	2	3	4	5	6
降水入渗系数	0.27	0.19	0.21	0.29	0.26	0.25
蒸发系数	0.19	—	—	—	—	0.023
分区号	7	8	9	10	11	12
降水入渗系数	0.26	0.27	0.32	0.21	0.38	0.31
蒸发系数	—	0.24	—	0.023	—	—
分区号	13	14	15	16	17	18
降水入渗系数	0.09	0.33	0.31	0.38	0.22	0.32
蒸发系数	—	0.0088	—	—	0.0088	0.023

注:表中“—”符号表示不考虑蒸发

表 4-3 济南泉群研究区域地下水流数值模拟拟合参数

剖分层号	分区 编号	主轴方向渗透系数(m/d)			给水度或 贮水率	主要地层代号及构造带
		K _{xx}	K _{yy}	K _{zz}		
第 一 剖 分 层	1	1.12	1.36	0.009	0.052	Q 马山断裂带
	2	0.065	0.077	0.0004	0.056	Q
	3	0.18	0.31	0.0004	0.036	Q 炒米店断裂带
	4	0.39	0.76	0.0009	0.038	Q 千佛山断裂带
	5	0.28	0.49	0.0028	0.055	O 千佛山断裂带
	6	0.78	0.52	0.0036	0.049	Q 港沟断裂带
	7	0.021	0.036	0.011	0.038	O 千佛山断裂带
	8	0.40	0.67	0.039	0.053	∈ 马山断裂带
	9	0.023	0.035	0.002	0.048	O
	10	0.021	0.026	0.008	0.041	∈
	11	1.02	1.12	0.00005	0.046	Q
	12	1.18	1.26	0.0233	0.058	Q
	13	0.49	0.72	0.0019	0.051	O
	14	2.96	1.86	0.088	0.042	O
	15	1.48	0.58	0.0005	0.061	O
	16	1.38	0.38	0.0003	0.058	∈
	17	0.0011	0.0018	0.0002	0.041	Art
	18	0.002	0.069	0.001	0.033	Art
	19	0.12	0.26	0.0001	0.058	O 千佛山断裂带
	20	0.24	0.37	0.16	0.043	∈
	21	2.76	4.38	0.0038	0.038	Q
	22	1.68	1.78	0.0178	0.042	C _{3t}
	23	2.56	4.09	0.058	0.052	C _{3t}
	24	0.75	0.89	0.0196	0.036	C _{3t}
	25	0.76	1.62	0.005	0.044	O 港沟、东梧断裂带
	26	1.85	2.96	0.0038	0.046	Q
	27	8.58	12.56	0.188	0.052	Q
	28	1.32	1.58	0.16	0.058	Q
	29	1.25	2.79	0.12	0.056	O
	30	1.11	1.24	0.062	0.068	O
	31	0.36	0.22	0.18	0.052	∈
	32	0.08	0.17	0.0178	0.062	Art
	99	0.10	0.11	0.12	0.04	C _{3t}
	108	3.98	5.06	0.014	0.052	Q

(续表)

剖分层号	分区 编号	主轴方向渗透系数(m/d)			给水度或 贮水率	主要地层代号及构造带
		K _{xx}	K _{yy}	K _{zz}		
第 二 剖 分 层	33	0.88	1.18	0.16	0.0003	∈ _{3f} —O 马山断裂带
	34	3.08	4.16	0.19	0.00004	∈ _{3f} —O
	35	2.29	3.41	0.07	0.0003	∈ _{3f} —O
	36	1.8	3.8	0.04	0.00009	O ₂ 炒米店断裂带
	37	3.2	3.06	0.96	0.00026	∈ ₂
	38	0.52	4.56	1.95	0.00009	∈ ₂ 炒米店断裂带
	39	0.58	0.18	0.066	0.0003	∈ ₂ 马山断裂带
	40	0.031	0.22	0.025	0.0003	∈ ₂ 马山断裂带
	41	1.41	0.81	0.62	0.00009	变质岩
	42	3.28	1.23	0.88	0.0003	变质岩
	43	2.59	0.68	0.32	0.00009	∈ _{2z}
	44	0.79	1.8	0.59	0.0001	O
	45	86.8	70.6	4.6	0.0002	O
	46	0.0001	0.0001	0.0001	0.00001	火成岩
	47	0.88	2.16	1.05	0.0003	火成岩 千佛山断裂带
	48	3.06	15.8	2.19	0.0001	∈ ₃ —O 千佛山断裂带
	49	258.0	299.0	4.68	0.000018	∈ ₃ —O 泉群位置
	50	12.8	18.8	3.20	0.0002	∈ ₃ —O
	51	2.50	8.80	2.25	0.0005	O 东梧断裂带
	52	12.8	10.8	1.23	0.00009	O
	53	38.0	49.3	3.18	0.0003	C
	54	60.4	104.6	10.8	0.0005	O 港沟断裂带
	55	15.6	25.2	3.36	0.0004	∈ ₃ —O 港沟、东梧断裂带
	56	4.8	6.8	2.28	0.0005	∈ ₃ —O
	57	4.48	4.96	1.96	0.0002	∈ ₃ —O 千佛山断裂带
	58	4.16	5.38	2.36	0.0001	变质岩
	59	1.65	3.77	0.84	0.0003	变质岩
	60	25.6	20.4	6.20	0.0003	∈ ₂
	61	8.8	9.3	1.8	0.00006	O
	62	27.7	28.8	2.40	0.0002	O
	63	2.90	3.80	0.86	0.0001	O
	95	38.7	42.8	4.20	0.0006	O
	97	20.8	26.2	2.08	0.0004	O
	100	8.80	10.9	2.40	0.00003	∈ ₃ —O
	102	0.35	5.0	2.60	0.0004	火成岩
	104	16.8	22.8	1.33	0.000012	∈ ₃ —O
	106	3.80	4.80	2.30	0.00005	∈ ₂
	109	48.8	47.9	5.80	0.00003	O

(续表)

剖分层号	分区 编号	主轴方向渗透系数(m/d)			给水度或 贮水率	主要地层代号及构造带
		K _{xx}	K _{yy}	K _{zz}		
第 三 剖 分 层	64	0.38	1.08	0.19	0.00007	∈ _{3f} —O 马山断裂带
	65	1.96	1.72	0.77	0.0005	∈ _{3f} —O
	66	2.19	2.16	0.98	0.0003	∈ _{3f} —O
	67	1.6	5.20	0.018	0.00008	O ₂ 炒米店断裂带
	68	3.60	4.80	0.72	0.0004	∈ ₂
	69	0.39	3.56	1.52	0.0004	∈ ₂ 炒米店断裂带
	70	0.23	0.095	0.021	0.00008	∈ ₂ 马山断裂带
	71	0.028	0.059	0.018	0.0003	∈ ₂ 马山断裂带
	72	0.32	0.69	0.18	0.0003	变质岩
	73	2.06	1.53	0.41	0.0004	变质岩
	74	1.70	0.59	0.40	0.0008	∈ _{2z}
	75	0.63	1.08	0.026	0.0002	O
	76	73.8	63.6	2.55	0.0002	O
	77	0.105	0.088	0.031	0.0001	火成岩
	78	1.02	3.52	0.021	0.0005	火成岩 千佛山断裂带
	79	1.95	12.8	1.70	0.0002	∈ ₃ —O 千佛山断裂带
	80	228.0	252.0	1.88	0.000024	∈ ₃ —O 泉群位置
	81	10.6	15.8	2.20	0.0003	∈ ₃ —O
	82	1.60	6.80	1.78	0.00006	O 东梧断裂带
	83	1.80	2.80	0.58	0.00008	O
	84	36.8	37.5	2.87	0.0005	C
	85	56.6	97.6	10.8	0.0006	O 港沟断裂带
	86	14.8	23.6	3.24	0.0003	∈ ₃ —O 港沟、东梧断裂带
	87	3.80	5.90	0.077	0.0004	∈ ₃ —O
	88	1.86	3.26	1.24	0.0002	∈ ₃ —O 千佛山断裂带
	89	2.58	3.66	1.58	0.0001	变质岩
	90	1.46	1.70	0.80	0.00032	变质岩
	91	20.1	21.6	1.95	0.0003	∈ ₂
	92	5.8	8.80	1.20	0.00005	O
	93	28.6	24.9	1.42	0.0002	O
	94	1.32	2.63	0.09	0.0004	O
	96	33.8	38.6	4.88	0.0004	O
	98	18.2	17.6	1.86	0.0003	O
	101	6.80	8.50	1.80	0.0002	∈ ₃ —O
	103	0.26	4.20	1.80	0.0003	火成岩
	105	15.6	18.6	1.07	0.000013	∈ ₃ —O
	107	2.80	3.90	1.50	0.00006	∈ ₂
	110	38.6	47.9	3.68	0.0002	O

模型识别结果:在数值模拟的时间段,观测孔总数为 36 个,其中有 4 个位于第一类边界条件上,作为第一类边界上定点动水位来处理,其余的 32 个观测孔中,包括 16 个岩溶水观

测孔,7个遥测井岩溶水观测孔,9个孔隙水观测孔。观测孔在各时段的相对误差全部小于10%的为25个,占总的观测孔数的78.1%,其中趵突泉和黑虎泉两个遥测井观测孔的绝对误差在0.5m以内的时段数在占该孔在模拟阶段的77.8%和80.6%。其余观测孔拟合相对误差虽然不是全部小于10%,但大于10%的时段数均在10个以内,平均合格率达到80.6%。用2002年的地下水观测孔水位进行模型校正时,有效观测孔数变为29个,岩溶水观测孔15个,孔隙水观测孔7个,遥测井数不变,占拟合时观测孔数的90.6%,(其中岩溶水和孔隙水占各自观测孔的比率分别为95.6%和77.8%),将所有观测孔的相对误差控制在10%,合格的观测孔数为21个(包括岩溶水观测孔15个,孔隙水观测孔5个),合格率为72.4%。如果将相对误差提高到15%,则合格的观测孔数增加为24个,合格率为79.3%。

上述所描述的误差控制相对于总面积为2614.9km²的济南泉群研究区域来说,因为地形地貌、岩性变化强烈,有些观测孔的年内变幅达30m以上,甚至在相临两个时段水位变化有10m之多,这些都反映了济南地区岩溶地下水时空变化强烈,在如此大的研究区域内,农村、农业灌溉用水和岩溶水开采量的统计,在数字统计上表现为不完全精确,也会影响数值模拟的精度。在本文中,模拟结果所达到的精度在《地下水资源管理模型工作要求》(GB/T14497—93)中是允许的。造成误差的原因除了模型误差和计算误差以外,计算值为节点即某一深度上的点的水位,例如,岩溶水观测孔在模型中处于第二层和第三层之间的节点,该点标高为-80m,则计算值即为该深度处的水位,而实测水位则为全部孔所在位置,即观测孔汇水高度的平均水位,两者之间有一定的差别,也是增加误差的因素。

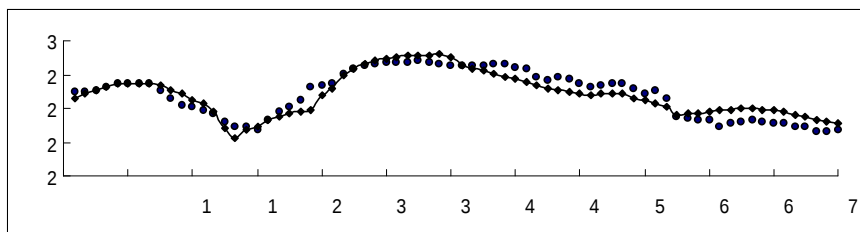
根据国标《地下水资源管理模型工作要求》(GB/T14497—93)规定:对于水文地质条件复杂的地区,地下水位和水质浓度的拟合精度均可适当降低。本文仅考虑地下水位,济南泉群研究区域的水文地质条件相当复杂,符合国标可适当降低拟合精度的条件,将相对误差提高至10%,上述结果完全符合标准。根据模型计算,2001年模拟的初始时刻、4月份(一般情况下地下水位最低)、10月份(一般情况下,经过雨季地下水位上升)及年底时刻的流场分布均与实际情况有较好的吻合,表明数学模型具有较高的可信度。

研究区模拟识别和模型校正的计算结果见图4-19至图4-21。

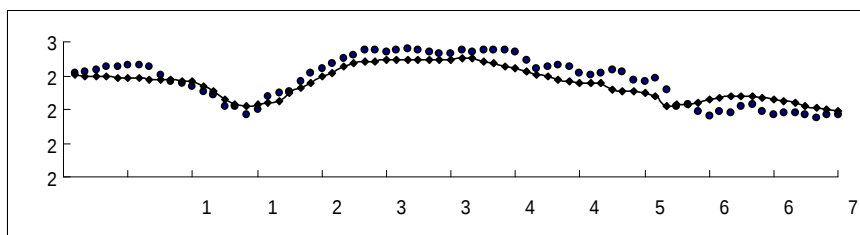
由图可知,模拟拟合效果良好,误差较大的点一般在3—6月份之间的计算点,究其原因,这主要与济南地区的降雨量分布有关,在这一阶段,一年中的降雨丰水期还没到来,实际地下水水位一般在这时达到最低。误差也可能是由于模型本身和观测孔的结构状况造成的。

从总体上看,模型校正阶段误差比2001年模拟阶段稍大,但误差效果仍比较令人满意。误差分析如下:2002年属于罕见的干旱年份,年降水量仅为379.3mm,部分地区大量开采地下水以弥补因降水量缺少导致地表水蓄水量不足的问题,有些区域地下水陡然下降,水位波动较大,一般情况下,模拟误差也较大,造成上述误差的原因也可能是与含水介质局部强烈的非均质性有关,在降水量等外来补给源严重不足时,含水介质强烈的局部非均质性对地下水流场的影响表现为特别强烈,模型难以细致的“模拟”局部。

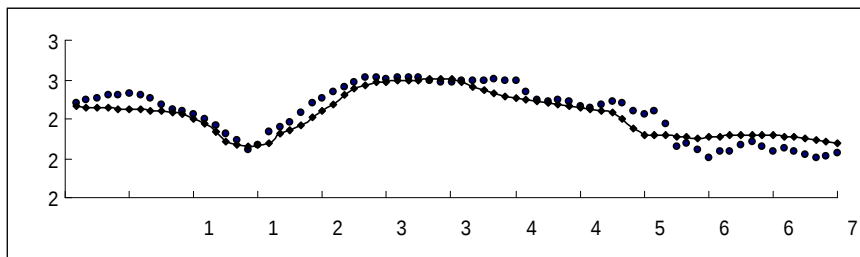
槐荫区 S-8 号(2705 节点)



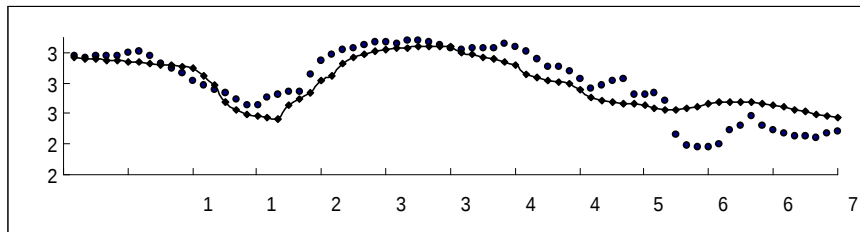
长清县 82A 号(2753 节点)



长清县 S-83 号(2780 节点)



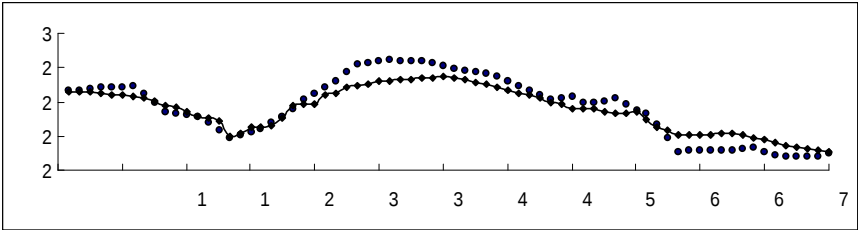
长清县 S-80 号(2820 节点)



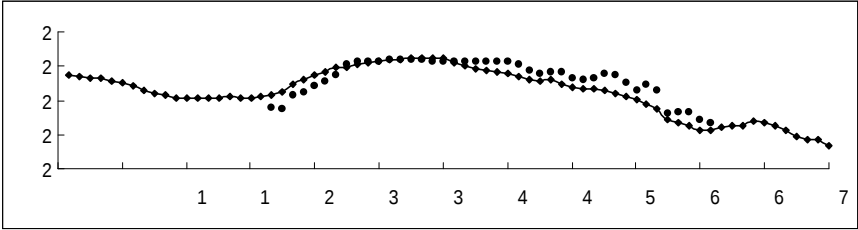
• 观测值 —•— 计算值

图 4-19 模拟校正阶段典型岩溶水观测孔水位拟合对比曲线(一)

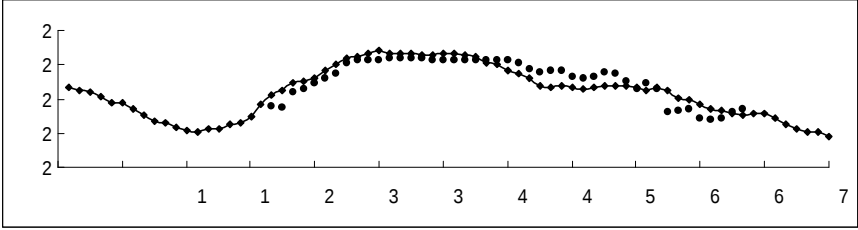
市中区 S-9 号(2881 节点)



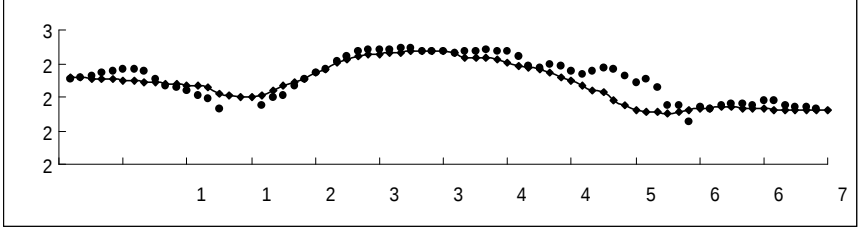
黑虎泉遥测井(2435 节点)



趵突泉遥测井(2439 节点)



槐荫区 S-7 号(2708 节点)



• 观测值 → 计算值

图 4-20 模拟校正阶段典型岩溶水观测孔水位拟合对比曲线(二)

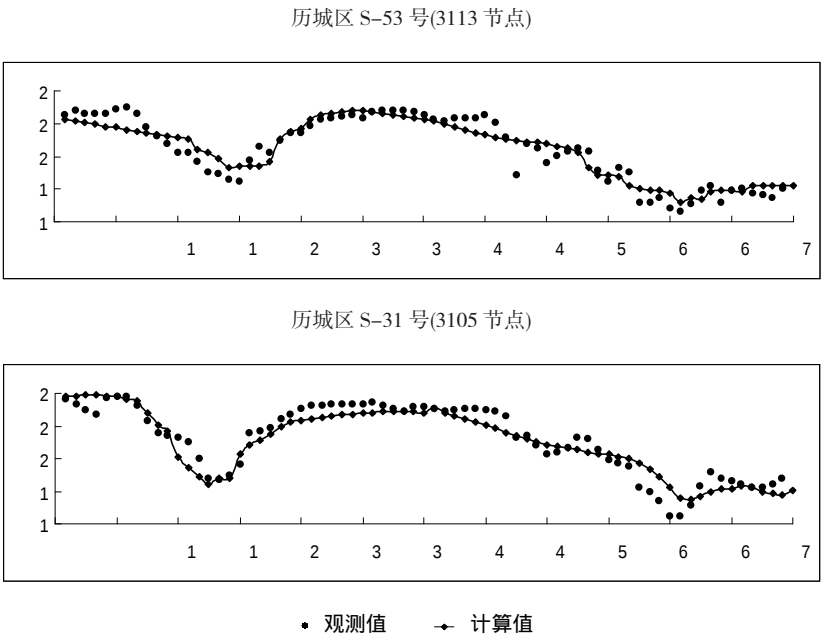


图 4-21 模拟校正阶段典型岩溶水观测孔水位拟合对比曲线(三)

为了检验模型的“仿真”程度,表 4-4 给出了模拟阶段地下水系统水量均衡关系。由于 2001 年属于平水年份,表现为地下水位稍微抬升。在模拟期间,岩溶水地下水的总补给量大于排泄量,相应地,观测孔水位表现为总体升高。上述结果反映在模拟期内,模型与实际情况具有良好的吻合性,模拟结果合理,表明模型可用来预报地下水动态。

表 4-4 模型模拟阶段地下水量均衡关系 单位: m^3

均衡期	I : 补给项 = ① + ② + ③ + ④				II : 排泄项 = ⑤ + ⑥		I - II 均衡项
	①	②	③	④	⑤	⑥	
2001	287786900	14899800	13654000	1214400	245363500	72170000	21600
2002	207862380	15866400	8621000	892600	201741000	40836000	- 934620

注:①—⑥ 分别代表降水入渗补给、流量边界侧渗、地表水渗漏、第四系垂向补给、人工开采以及自流排泄。其中人工开采包括工业、农业和镇村生活用水。

参 考 文 献

[1] 钱家忠,汪家权,葛晓光,张寿全,李如忠. 我国北方型裂隙岩溶水流及污染物运移模型研究进展. 水科学进展,2003,14(4):509—512

[2] 钱家忠,吴剑锋,董洪信,朱学愚. 徐州市张集水源地裂隙岩溶水三维等参有限元模型. 水利学报,2003,(3):37—41

[3] 钱家忠,李如忠,吴剑锋,葛晓光,朱学愚. 徐州张集水源地浅层地下水动态及其对不同开采方案响应. 地理科学,2003,23(5):592—596

[4] Huyakorn,P. S. ,G. F. Pinder. Computational Methods in Subsurface Flow[M]. New York:Academic Press. ,1983

-
- [5] 朱学愚,钱孝星,刘新仁. 地下水资源评价[M]. 南京:南京大学出版社,1987
- [6] 陈崇希,唐仲华. 地下水流动问题数值方法[M]. 武汉:中国地质大学出版社,1990
- [7] 王志谦. 淮河入海水道河口段水流数值模拟及分析[D]. 南京:河海大学,2001
- [8] [美] 陈景仁. 湍流模型及有限分析法[M]. 上海:上海交通大学出版社,1989
- [9] 李炜. 黏性流体的混合有限分析解法[M]. 北京:科学出版社,2000
- [10] 钱家忠,汪家权. 我国北方型裂隙岩溶水模拟模型及水环境质量评价. 合肥工业大学出版社,2003. 1
- [11] 钱家忠,吴剑锋,朱学愚,李如忠. 时序马尔可夫模型和有限元模型在我国北方裂隙岩溶水资源评价中的应用——以徐州市张集水源地裂隙岩溶水为例. 地质论评,2003,49(1):107—112
- [12] 吴剑锋,朱学愚,钱家忠,钱修阔. GASAPF方法在徐州市裂隙岩溶水资源管理模型中的应用. 水利学报,2000,289(12):7—13

第五章 水环境系统管理模型

随着社会经济的发展,管理的地位和作用显得更加突出,管理的对象和规模也越来越大,在层次结构上也越来越复杂,从而使预测、决策、控制和协调等管理活动越来越复杂和困难。因此,决策者和管理者不能仅仅依靠在实践中摸索经验,也不可能仅仅凭借自己的经验和直觉进行管理,而是必须熟悉现代管理理论和管理科学,掌握科学的管理方法,才能使管理工作稳定、有序地顺利进行。

第一节 概 述

水环境系统是与人们生产生活息息相关的重要系统,因此对水环境系统进行有效合理地管理,不论对当前还是对今后都具有十分重要的意义。

水环境管理模型是环境科学和管理学的重要内容,是这两个学科的有机组合。水环境管理的对象是水环境系统,涉及到经济系统和社会系统。对水环境系统进行管理,需要对环境管理方法有一定研究。比如对于水污染控制,过去一直是采用浓度控制的环境管理方法来控制工业企业的排污和防治环境污染。但是,水体的环境容量是有限的,当某水体所容纳的污染物超过该水体的环境容量时,就会造成水环境污染。而浓度控制法,只考虑污染物的浓度是否达到规定的排放标准,不考虑纳污水体的环境容量。而现在推行的总量控制方法则克服了浓度控制的弊端,以环境容量作为控制排污的依据,使环境污染控制效果更佳。所以,开展环境管理方法研究,对于提高环境管理的水平和效果具有重要的意义。而进行水环境系统的总体规划控制则涉及到水环境管理模型。通常的水环境管理模型主要是指水环境管理的数学方法和模型的应用。这是由于环境保护工作实行环境管理定量化的需要,是环境管理中不可缺少的工具和手段。

水环境管理是要实现系统的最优化,因此与最优化理论、遗传算法理论等优化技术结合得较为紧密。由于前面已对最优化的理论基础进行了介绍,本章主要采用一些实际的例子来介绍具体的水环境管理模型。

第二节 线性规划管理模型

水环境系统线性规划管理模型,将线性规划的基础理论与水环境系统的控制管理目标结合,具体过程如下:

一、水污染控制中的线性规划^[1]

有若干排污口流入某江,各口有污水处理站,江面各段的流量和污水浓度分别为 Q_k 和 C_k ,工厂污水的流量和浓度为 ΔQ_k 和 u_k ,污水处理站流出的流量和浓度分别为 ΔQ_k 和 u_k^* (如

图 5-1 所示)。其中流量单位: m^3/s ; 浓度单位: mg/L 。

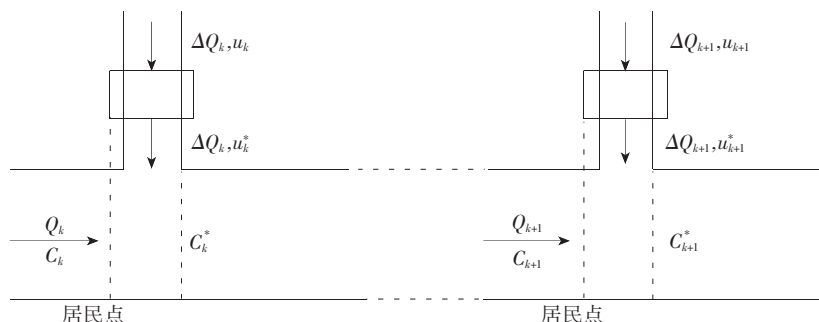


图 5-1 分段治理江水污染示意图

污染物浓度的递推关系应满足水质自净方程:

$$C_{k+1} = \left(\frac{Q_k}{Q_{k+1}} C_k + \frac{\Delta Q_k}{Q_{k+1}} u_k^* \right) e^{-\alpha_k} \quad (5-1)$$

其中: α_k 是与江段地理位置相关的系数, 称 $\beta_k = e^{-\alpha_k}$ 为自净系数。

尽管国家对各种排污有严格的标准, 但由于经济原因不可能使整个江面全面达到标准, 因此, 要考虑一种合理的安排尽量使居民点处的江水合乎标准, 这样就有有一个对排污口的位置安排问题, 以及灵活考虑排污口的治理问题。比如有个排污口离居民点较远, 尽管排污超标, 但通过流水的自净作用在到达居民点前已合乎标准了, 那么为了节约资金, 也可暂时不予治理, 或者提出一个更宽松的标准。于是希望解决如下问题:

1. 根据流来的江水水质和国家规定的水质标准, 来确定各排污口的排放量和最大允许污染物浓度;
2. 在使各段检测点(居民点)的污染物浓度不超过国家标准 C 的条件下, 使投入污水处理的总资金最少;
3. 如果不考虑 C_1 、 C_2 只考虑使 C_3 符合标准 C (重点控制方案), 标准如何制定?
4. 设计一些最简的数据来计算分析。

(一) 模型的假设和说明

该问题是在一定约束条件下的最优化问题, 并且约束条件是线性的, 因此可以用线性规划模型加以解决。为了使问题简化, 做如下假设:

1. 国家的污染控制标准是多指标的, 取其主要的一项, 以污染物浓度来表示;
2. 各排污口排出的污水量和污水的污染物浓度一定, 即 Q_k 和 u_k 为常数;
3. 污染处理即要降低污染物浓度, 一般说来, 使污水处理的污水浓度差 $u - u^*$ 越大, (u^* 为处理后的污水浓度) 要求的投入越多(包括技术、设备及能耗等), 这种投入以资金投入计算。为了简单起见, 不妨设污水处理费用与污水浓度差 $u - u^*$ 成正比, 也与污水水量 ΔQ_k 成正比, 即

$$T_k = r_k \Delta Q_k (u_k - u_k^*) \quad (5-2)$$

其中: r_k ——比例系数, 实际上表示了第 k 个污水处理站的每流量单位降低每个浓度单位所

需的资金, r_k 的大小可以反映污水处理的技术水平, 在这里暂不讨论, 一般可将 r_k 看作常数。

4. 污水浓度递推关系满足水质自净方程(5-1), 可改写为:

$$\begin{aligned} C_{k+1} &= \beta_k C_k^* \\ C_k^* &= \frac{1}{Q_k + \Delta Q_k} (Q_k C_k + \Delta Q_k u_k^*) \end{aligned} \quad (5-3)$$

显然, 有 $0 < \beta_k < 1$ 。 β_k 为自净因子(也可称为自净系数)与河流状态(水量、污染程度、地质状况、温度等)有关, 在某一段江水中, 由于地理位置相差不大可以看作常数。自净因子的获取可以利用监测数据等资料, 采用参数估计的方法计算获得。

5. 定义单位时间流过某一断面的污染物的总量为此断面的污染通量 V_k , 显然污水治理站的流入污水通量为:

$$V_k = \Delta Q_k u_k \quad (5-4)$$

流出通量为:

$$V_k^* = \Delta Q_k u_k^* \quad (5-5)$$

定义

$$\lambda_k = \frac{V_k - V_k^*}{V_k} \quad (5-6)$$

为第 k 个污水处理站的治理系数。显然 λ_k 反映了治理能力, 一般 $0 \leq \lambda_k < 1$, $\lambda_k = 0$ 表示未治理, 而越接近于 1, 则其治理效果也越好。治理系数也可看作是对污水治理要求达到的一项指标, 与投资也是密切相关的。将式(5-6) 改写为:

$$V_k^* = (1 - \lambda_k) V_k \quad (5-7)$$

将式(5-4)、(5-5) 代入式(5-2) 得到:

$$T_k = r_k (V_k - V_k^*) = r_k V_k \lambda_k \quad (5-8)$$

由此可见, 污水处理的费用与处理系数 λ_k 成正比, 与污水的污染通量 V_k 成正比。

6. 设定 ΔQ_k 比 Q_k 小得多, 即污水的流量比江水流量小得多, 且在整个一段范围内流量 Q_k 为常数。即 $Q_k + \Delta Q_k = Q$, 则污水进入江水混合后的浓度为:

$$\begin{aligned} C_k^* &= \frac{Q_k C_k + \Delta Q_k u_k^*}{Q_k + \Delta Q_k} = C_k + \frac{1}{Q} \Delta Q_k u_k^* \\ &= C_k + \frac{1}{Q} (1 - \lambda_k) V_k = C_k + \frac{V_k}{Q} - \frac{V_k}{Q} \lambda_k \end{aligned} \quad (5-9)$$

则自净方程简化为:

$$C_{k+1} = C_k^* \beta_k \quad (5-10)$$

(二) 全面水质控制模型(模型 A)

本模型要求使江水水质全面达到质量标准, 即使各污染点的污水与江水均匀混合后都

能达到卫生标准,也即 $C_k^* \leq C$ 。

建立控制模型:

$$\begin{aligned} \min T &= \sum r_k \Delta Q_k (u_k - u_k^*) \\ s. t. &\begin{cases} C_k^* \leq C \\ C_k^* = C_k + \frac{\Delta Q_k}{Q} u_k^* \\ C_{k+1} = C_k^* \beta_k \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-11)$$

将 u_k 作为已知(污染点的污染浓度),将治理系数 λ_k 作为变量,再由式(5-8)和式(5-9),则模型 A 可以改写为:

$$\begin{aligned} \min T &= \sum_{k=1}^n r_k V_k \lambda_k \\ s. t. &\begin{cases} C_k^* \leq C \\ C_k^* = C_k + \frac{V_k}{Q} - \frac{V_k}{Q} \lambda_k \\ C_{k+1} = C_k^* \beta_k \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-12)$$

显然,目标函数是关于 λ_k 的线性函数,而约束条件关于 λ_k 也是线性的,于是本模型归结为线性规划问题得以解决。下面设计一些简单的数据进行计算和分析。

模型 A_1 设

$$\begin{cases} C_1 = 1(\text{mg/L}), Q = 1000(10^{12} \text{L/min}) \\ u_1 = u_2 = u_3 = 100(\text{mg/L}) \\ \Delta Q_1 = \Delta Q_2 = \Delta Q_3 = 5(10^{12} \text{L/min}) \\ \beta_1 = \beta_2 = 0.9 \\ r_1 = r_2 = r_3 = 1(\text{每个流量单位,每降低一个浓度单位需 1 万元}) \\ C = 1 \end{cases} \quad (5-13)$$

则

$$r_k V_k = r_k \Delta Q_k u_k = 500 = V_k$$

$$C_1 \leq 1$$

$$C_1^* = 1 + \frac{500}{1000} - \frac{500}{1000} \lambda_1 = 1.5 - 0.5 \lambda_1$$

$$C_2 = 0.9C_1^* = 1.35 - 0.45\lambda_1$$

$$C_2^* = 1.35 - 0.45\lambda_1 + 0.5 - 0.5\lambda_2 = 1.85 - 0.45\lambda_1 - 0.5\lambda_2$$

$$C_3 = 0.9C_2^* = 1.665 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2$$

$$C_3^* = 1.665 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2 + 0.5 - 0.5\lambda_3 = 2.165 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2 - 0.5\lambda_3$$

因此,可归结为:

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. \quad &\begin{cases} C_1^* = 1.5 - 0.5\lambda_1 \leq 1 \\ C_2^* = 1.85 - 0.45\lambda_1 - 0.5\lambda_2 \leq 1 \\ C_3^* = 2.165 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2 - 0.5\lambda_3 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-14)$$

采用计算机求解得到:

$$\lambda_1 = 0.27, \lambda_2 = 0.80, \lambda_3 = 0.80 \quad (5-15)$$

$$\min T = 936 (\text{万元}) \quad (5-16)$$

模型 A_2 改变自净系数

$$\begin{cases} C_1 = 1 (\text{mg/L}), Q = 1000 (10^{12} \text{L/min}) \\ u_1 = u_2 = u_3 = 100 (\text{mg/L}) \\ \Delta Q_1 = \Delta Q_2 = \Delta Q_3 = 5 (10^{12} \text{L/min}) \\ \beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.8 \\ r_1 = r_2 = r_3 = 1 \\ C = 1 \end{cases} \quad (5-17)$$

该问题可归结为:

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. \quad &\begin{cases} C_1^* = 1.5 - 0.5\lambda_1 \leq 1 \\ C_2^* = 1.85 - 0.45\lambda_1 - 0.5\lambda_2 \leq 1 \\ C_3^* = 1.98 - 0.36\lambda_1 - 0.4\lambda_2 - 0.5\lambda_3 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-18)$$

解得:

$$\lambda_1 = 0.27, \lambda_2 = 0.80, \lambda_3 = 0.60 \quad (5-19)$$

$$\min T = 835(\text{万元}) \quad (5-20)$$

模型 A_3 改变各污染点的污染浓度

$$\left\{ \begin{array}{l} C_1 = 1(\text{mg/L}), Q = 1000(10^{12}\text{L/min}) \\ u_1 = 80, u_2 = 100, u_3 = 120(\text{mg/L}) \\ \Delta Q_1 = \Delta Q_2 = \Delta Q_3 = 5(10^{12}\text{L/min}) \\ \beta_1 = \beta_2 = 0.9 \\ r_1 = r_2 = r_3 = 1 \\ C = 1 \end{array} \right. \quad (5-21)$$

则

$$r_1 V_1 = \Delta Q_1 u_1 = 400 = V_1$$

$$r_2 V_2 = \Delta Q_2 u_2 = 500 = V_2$$

$$r_3 V_3 = \Delta Q_3 u_3 = 600 = V_3$$

该问题归结为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \min T = 100(4\lambda_1 + 5\lambda_2 + 6\lambda_3) \\ s. t. \left\{ \begin{array}{l} C_1^* = 1.4 - 0.4\lambda_1 \leq 1 \\ C_2^* = 1.76 - 0.36\lambda_1 - 0.52\lambda_2 \leq 1 \\ C_3^* = 2.184 - 0.324\lambda_1 - 0.45\lambda_2 - 0.6\lambda_3 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1, k = 1, 2, 3 \end{array} \right. \end{array} \right. \quad (5-22)$$

用计算机求解得到：

$$\lambda_1 \approx 0.72, \lambda_2 \approx 0.27, \lambda_3 \approx 0.83 \quad (5-23)$$

$$\min T = 921(\text{万元}) \quad (5-24)$$

下面对三组模型的解进行分析。由式(5-14)可知,污水在各排放点之后与江水混合后的水质要求(C_j^*)合乎标准,即使江水全面符合标准。

比较式(5-13)中的 $\beta_1 = \beta_2 = 0.9$ 和式(5-17)中的 $\beta_1 = 0.9, \beta_2 = 0.8$, 显然 β_2 减少, 实际上江水的自净能力更强(或江道距离更长等因素造成的), 这样使 $C_i^* (i = 1, 2, 3)$ 都达到标准所需, 总需由 936 万元降至 835 万元。

比较式(5-13)中的 $u_1 = u_2 = u_3 = 100$ 和式(5-21)中的 $u_1 = 80, u_2 = 100, u_3 = 120$, 式(5-21)是将污染较严重的 $u_3 = 120$ 放在下游, 污染较轻的放在上游的方案, 这样使 $C_i^* (i = 1, 2, 3)$ 都达到标准 C 时, 总费用由 936 万元减少至 921 万元。在规划污染源时, 应该考虑在上游不宜新建污染较严重的工厂。

(三) 居民点水质控制模型(模型 B)

模型 A 的要求是使江水各点水质都达到质量标准,即 $C_i^* (i = 1, 2, 3) \leq C$ 。现在将此条件放宽,使居民点前的水质达到标准,即 $C_i \leq C$,也就是说,污染源后的水质不管,只要求经过自然净化,使居民点前面的取水处符合标准即可。

在参数为式(5-13)的条件下

模型 B_1

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. \quad &\begin{cases} C_1 \leq 1 \\ C_2 = 1.35 - 0.45\lambda_1 \leq 1 \\ C_3 = 1.665 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-25)$$

由计算机计算得到:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\approx 0.78, \lambda_2 \approx 0.78, \lambda_3 = 0 \\ \min T &= 780(\text{万元}) \end{aligned}$$

模型 B_2 在参数为式(5-17)的条件下

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. \quad &\begin{cases} C_1 \leq 1 \\ C_2 = 1.35 - 0.45\lambda_1 \leq 1 \\ C_3 = 1.48 - 0.36\lambda_1 - 0.4\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-26)$$

计算得到:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &\approx 0.78, \lambda_2 \approx 0.5, \lambda_3 = 0 \\ \min T &= 640(\text{万元}) \end{aligned}$$

模型 B_3 在参数式(5-21)的条件下

$$\begin{aligned} \min T &= 100(4\lambda_1 + 5\lambda_2 + 6\lambda_3) \\ s. t. \quad &\begin{cases} C_1 \leq 1 \\ C_2 = 1.26 - 0.36\lambda_1 \leq 1 \\ C_3 = 1.584 - 0.324\lambda_1 - 0.45\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-27)$$

计算得到:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0.78, \lambda_2 = 0.78, \lambda_3 = 0 \\ \min T &= 780(\text{万元}) \end{aligned}$$

模型 B 与模型 A 比较,由于水质控制的范围缩小了,由全面水质污染控制缩小为居民点(上游)水质控制,使治理费用也随之减少,这是充分利用了江水自净功能的结果。

(四) 重点城市水质控制模型(模型 C)

考虑重点城市 C_3 符合标准,这样可得

模型 C_1 (以式(5-13) 为参数)

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. &\begin{cases} C_3 = 1.665 - 0.405\lambda_1 - 0.45\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-28)$$

计算得到:

$$\lambda_1 \approx 0.78, \lambda_2 \approx 0.5, \lambda_3 \approx 0$$

$$\min T = 400(\text{万元})$$

模型 C_2 (以式(5-17) 为参数)

$$\begin{aligned} \min T &= 500 \sum_{k=1}^3 \lambda_k \\ s. t. &\begin{cases} C_3 = 1.48 - 0.36\lambda_1 - 0.4\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-29)$$

计算得到:

$$\lambda_1 \approx 0.22, \lambda_2 \approx 0.27, \lambda_3 \approx 0$$

$$\min T = 245(\text{万元})$$

模型 C_3 (以式(5-21) 为参数)

$$\begin{aligned} \min T &= 100(4\lambda_1 + 5\lambda_2 + 6\lambda_3) \\ s. t. &\begin{cases} C_3 = 1.584 - 0.324\lambda_1 - 0.45\lambda_2 \leq 1 \\ 0 \leq \lambda_k < 1 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-30)$$

计算得到:

$$\lambda_1 = 0.41, \lambda_2 = 0.27, \lambda_3 = 0$$

$$\min T = 295(\text{万元})$$

模型 C_2 与模型 C_1 比较,由于 β_2 从 0.9 降为 0.8,所以总费用由 400 万元降为 245 万元。模型 C_3 与模型 C_1 比较,由于 $u_1 = 100$ 变为 $u_1 = 80$,所以总费用由 400 万元减少至 295 万元。

从模型 A 到模型 B 到模型 C,都是由于控制范围的逐渐缩小而使得总费用降低。当然,这里的数据是设定的,不一定合乎实际,但是计算结果反映了对江水污染控制的规律,是合乎人们的常识的。在实际中可以根据实际数据,用此模型算出各污染点的治理系数。这些数据可以作为控制污染的参考数据。 λ_k 越大,说明这个污染点越需要加强治理, λ_k 越小,治理的要求就可以降低,这样也可以得出治理的轻重缓急。

二、线性规划在滇池草海污染目标控制优化决策中的应用^[2]

综合整治滇池草海污染的目的,就是使滇池水质在一定时期内达到某个污染控制目标以确保其得到改善。但由于造成滇池污染的因素较多,治理措施因此也是多种多样的。为了实现总目标,需要上马一系列的工程措施,使各子目标得以实现,并在保证总目标实现的前提下使费用(工程投资)最节省。这实际上就转变为一个目标优化问题,因此可将实际问题进行适当的归纳和分析,按照线性规划的原理建立数学模型求解最优规划方案。

(一) 滇池草海污染治理工程最优目标控制规划模型的建立

1. 目标函数的确定

综合治理草海水污染最优目标控制决策的目的是保证工程上马以后使草海水质达到或优于预期等级,同时又使用于各项工程的投资最节省。其数学表达式如下:

$$\min Z = \min \sum_{j=1}^n Z_j X_j \quad (5-31)$$

其中:

Z_j —— j 项工程投资费用;

X_j —— j 项工程的决策变量。

2. 决策变量的分析

整治草海污染目标规划的决策变量所代表的就是所有单项治理工程,这些单项工程的规模,由于受其他条件的限制,只能给出有限的几种选择。但究竟在综合治理系统中选择哪个规模上马尚未确定,这取决于线性规划模型的计算结果。而对每个具体的工程而言,在规划中只能有两种可能,即上马或是不上马。具体对 j 项工程决策变量 X_j 来说,取“0”表示该工程不上马,取“1”表示上马。则所有决策变量可以表达为:

$$X_j = 0 \text{ 或 } X_j = 1 \quad (j = 1, 2, \dots, n)$$

3. 约束条件的分析

(1) 项目选择约束

在滇池草海水污染治理工程中,各种污染物决定了工程项目的多样性,而对每一项工程而言,又有多种规模选择。假定对策 i 项工程有 m 个可选的规模,根据对决策变量取值范围的分析,整个规划在项目选择上将受到下列约束方程的作用:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^m X_j &\leq 1 \\ \sum_{j=m+1}^{2m} X_j &\leq 1 \\ \sum_{j=2m+1}^{3m} X_j &\leq 1 \end{aligned}$$

$$\sum_{j=(i-1)m+1}^{im} X_j \leq 1$$

(2) 水质目标约束

水质目标约束就是保证草海水质经工程治理获得改善的程度一定要达到或者优于计划中水质目标的控制值。在这里,治理工程与水质的响应关系研究已由中国环科院承担完成。他们提供的关系式如下:

$$a \cdot win + b \cdot A_s + c \cdot A_p + d \leq [c] \quad (5-32)$$

其中:

$[c]$ ——草海水质目标控制值;

A_s ——规划的底泥疏挖面积;

A_p ——规划的水生生物净化工程水面面积;

$$a = 1/(Q + K_s \cdot V);$$

$$b = -K_s/(Q + K_s \cdot V);$$

$$c = -d/(Q + K_s \cdot V);$$

$$d = A_0 \cdot K_s/(Q + K_s \cdot V)。$$

式中: A_0 ——湖泊底泥面积(近似取湖底面积);

K_s ——底泥 $N \cdot P$ 释放速率($\text{mg}/(\text{m}^2 \cdot \text{d})$);

Q ——草海入水流量;

V ——草海容积。

为了满足线性规划的形式,对(5-32)式作如下约定:

$$win = w_{01} + w_{02} + \cdots + w_{0n} - w_1 X_1 - w_2 X_2 - w_3 X_3 - \cdots - w_n X_n$$

其中:

win ——排放入草海的污染负荷;

$w_{01}, w_{02}, \cdots, w_{0n}$ ——单项工程可能面对的污染负荷;

$w_1, w_2, \cdots, w_n$ ——单项工程可能削减的污染负荷。

$$A_s = A_{s1} \cdot X_1 + A_{s2} \cdot X_2 + \cdots + A_{sn} \cdot X_n$$

其中:

$A_{s1}, A_{s2}, \cdots, A_{sn}$ ——单项工程底泥疏挖面积;

$$A_p = A_{p1} \cdot X_1 + A_{p2} \cdot X_2 + \cdots + A_{pn} \cdot X_n$$

其中:

A_p ——规划的水生生物面积。

因为目标控制规划需要考虑 TP、TN、BOD₅、COD 这四个水质指标,故(5-32)式的约束方程有四个。

(二) 规划模型的求解计算

草海水污染目标控制规划计算需要处理较大量的数据,计算工作量大,一般而言手工计算难于实现。通过将该规划的计算过程编写成计算机程序,整个计算过程就能在微机上完成。

1. 决策变量的拟定

根据各部门提出的治理规划和目标,拟出综合整治草海水污染的决策变量及目标函数(见表 5-1);模型中需要的其他参数经过充分论证并已确定,计算之前以数据表的形式存入计算机中。

表 5-1 综合整治草海水污染决策变量及目标函数表

工程编号	决策变量	工程名称	工艺	规划规模 $10^4 \text{ m}^3/\text{d}$	目标函数 (亿元)
1	X_1	一污水处理厂	一级处理	4	0.2
2	X_2	一污水处理厂	二级处理	4	0.6
3	X_3	一污水处理厂	三级处理	4	1.0
4	X_4	三污水处理厂	一级处理	2	0.25
5	X_5	三污水处理厂	二级处理	2	0.75
6	X_6	三污水处理厂	三级处理	2	1.15
7	X_7	东风坝前置库		3.0 km^2	0.05
8	X_8	底泥疏挖		3.01 km^2	1.087
9	X_9	大型水生生物		0.75 km^2	0.0398

2. 最优目标控制决策方案的确定

规划的目的就是要在上述决策变量中找出满足水质控制要求的最优目标控制方案。由模型计算获得综合整治草海水污染中期最优目标控制决策(见表 5-2)。表 5-2 中的结果是从 2^9 个预选方案中选出的。

表 5-2 最优目标控制规划方案

工程组合	投资(亿元)	控制项目	预测水质(mg/L)	控制目标(mg/L)
2.5.8.9	2.4768	TP	0.193	0.3
		TN	2.829	3
		BOD_5	8.611	10
		COD	9.114	10

(三) 小结

以数学规划模型的计算结果为选择优化方案的手段,这在一定程度上可减少人为判断的片面性影响,逻辑上增加方案的科学性和客观性。值得注意的是,这类模型在从实际问题归纳为数学方程的阶段是至关重要的,它直接影响所获得的数学函数对实际问题反应的真实性。各类参数的使用要有充分的论证和实验基础,否则模型的使用效果就会受到影响。

第三节 非线性规划管理模型

将非线性规划的基础理论与水环境系统的控制管理目标相结合,可组成水环境系统非线性规划管理模型,本节采用了活性污泥法系统方案的优化设计这一例子具体说明其应用过程^[3]。

目前,活性污泥法工艺系统的方案设计大多采用基于经验取值和直觉估计上的传统设计法进行。显然,这种设计方法形成的方案效果是保守和粗略的。此处将非线性规划的方法和系统最优化的思想引入活性污泥法 A^2/O 工艺系统的方案设计中,试图用数值求解方法并借助高速电脑的计算功能,直接获得一个“最优”工艺系统设计方案的近似数值解。

(一) 污水处理工艺设计的最优化问题

1. 活性污泥法系统的数学模型

以一个典型的适合中、大型城市污水处理厂采用的具有除磷脱氮功能的常规 A^2/O 工艺系统(见图 5-2)作为建构系统数学模型的基本概念(框架)模型。该系统包括了污水、污泥、外(内)回流、旁流等多级子系统。作为系统优化问题的外部条件——系统污染物特性组分及流量详见表 5-3。表 5-3 中各污染物特性组分均基于 IAWQ—ASM 理论进行划分,其取值为典型的城市污水水质。在此基础上,建构了包含各污染物特性组分物料平衡关系以及出水水质约束关系在内的完整 A^2/O 工艺系统数学模型。该系统模型由 105 个变量(状态变量、决策变量和中间变量)及 97 个独立系统方程构成,其中属于等式约束条件的系统方程有 89 个(略),属于不等式约束条件的系统方程有 8 个。本文仅对有关出水水质约束的系统边界方程作一简述,见式(5-33)。

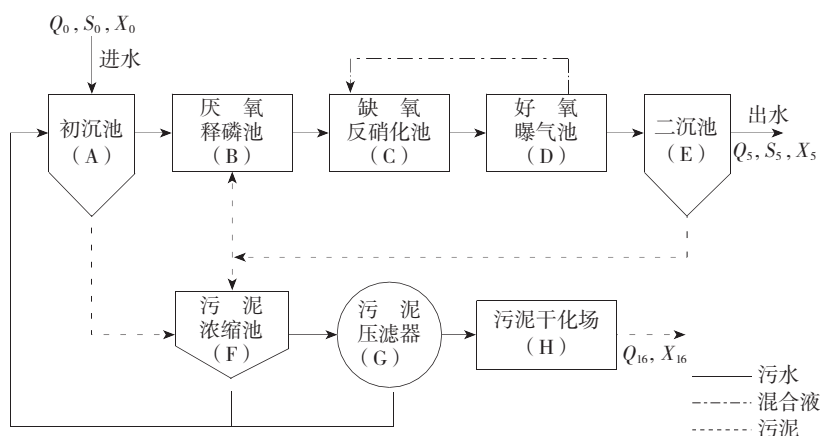


图 5-2 常规 A^2/O 工艺系统流程

$$\begin{aligned}
 S_{NH_4^+,e} + S_{NO_3^-,e} + f_N X_{VSS,e} &\leq C_{NT, \text{标准}} \\
 S_{PO_4^{3-},e} + f_P X_{VSS,e} &\leq C_{TP, \text{标准}} \\
 S_{1,e} + S_{S,e} + f_{CV} X_{VSS,e} &\leq C_{COD, \text{标准}} \\
 X_{TSS,e} &\leq X_{TSS, \text{标准}}
 \end{aligned}
 \tag{5-33}$$

其中:

下标 e——表示出水组分;

f_N ——表示挥发性悬浮物中 N 的密度;

f_P ——表示挥发性悬浮物中 P 的密度;

f_{CV} ——表示挥发性悬浮物浓度与 COD 单位的转换比例;

不等式右边代表污水综合排放一级标准;式(5-33)中其余符号含义见表 5-3。

表 5-3 模型中的污染物特性组分及水量

组分			组分的简明定义	数值
溶解性组分	1	$S_{O_2} / gO_2 / m^3$	溶解氧	0
	2	$S_s / gCOD / m^3$	快速生物降解基质	150
	3	$S_{NH_4^+} / gN / m^3$	氨氮	25
	4	$S_{NO_3^-} / gN / m^3$	硝态氮	0
	5	$S_{PO_4^{3-}} / gP / m^3$	磷酸盐(溶解性无机正盐)	3.5
	6	$S_I / gCOD / m^3$	惰性不可生物降解基质	30
	7	$S_{ALK} / molHCO_3^- / m^3$	碱度(以 HCO_3^- 计)	5
颗粒性组分	8	$X_1 / gCOD / m^3$	惰性不可生物降解有机物	80
	9	$X_s / gCOD / m^3$	慢速可生物降解有机物	180
	10	$X_B \begin{cases} X_H / gCOD / m^3 \\ X_S / gCOD / m^3 \end{cases}$	异养菌微生物	60
	11		自养菌微生物	0
综合性指标	12	$C_{COD} / gCOD / m^3$	总 COD 含量	500
	13	$C_{TN} / gN / m^3$	总 N 含量	43.6
	14	$C_{TP} / gP / m^3$	总 P 含量	6.5
	15	$X_{NVSS} / gTSS / m^3$	非挥发性悬浮物浓度	80
	16	$X_{VSS} / gTSS / m^3$	挥发性悬浮物浓度	216
	17	$X_{TSS} / gTSS / m^3$	总颗粒悬浮物含量	296
	18	$Q_0 / m^3 / h$	进水水量(稳态均值)	4167

2. 优化设计目标的数学描述(目标函数)

目标函数模型:

$$F = \omega_1 f_{TC} + \omega_2 f_{OM} = \omega_1 \sum_{i=1}^N CC_i + \omega_2 \tau \sum_{i=1}^N OM_i \tag{5-34}$$

其中:

- F —— 系统总费用;
- CC_i —— 第 i 个单元构筑物的初始投资费用;
- OM_i —— 第 i 个单元构筑物的运行维护费用;
- N —— 概念模型中的 8 个单元构筑物;
- $\omega_1、\omega_2$ —— 两级子目标权重系数;
- τ —— 工艺系统设计生命周期内的折现因子。

其中,各种费用均通过各单元构筑物的费用函数(模型)予以表达,单元构筑物的费用函数模型用幂函数形式表示为:

$$C_j = a_j X_j^{b_j} \tag{5-35}$$

其中:

- C_j —— 第 j 个单元构筑物的建设投资费用或运行维护费用;
- X_j —— 第 j 个单元构筑物的建设投资费用或运行维护费用影响最大的关键设计变量;
- $a_j、b_j$ —— 分别为第 j 个工艺单元费用函数中的回归参数。

表 5-4 是系统模型中对优化目标函数影响最大的 8 个决策变量(X_j)。

表 5-4 对目标函数影响最大的关键决策变量

工艺单元构筑物	关键决策变量	
	初始投资费用	运行、维护费用
初沉池(A)	A_A	A_A
厌氧释磷池(B)	V_B	V_B
缺氧反硝化池(C)	V_C	V_C
好氧曝气池(D)	V_D, AFR	V_D, AFR
二次沉淀池(E)	A_E	A_E
污泥浓缩池(F)	A_F	A_F
污泥压滤器(G)	A_G	A_G
污泥干化场(H)	A_H	A_H

注: A 为构筑物有效面积; V 为构筑物的有效容积; AFR 为系统总曝气量; 下标表示相应的构筑物。

3. 最优化问题的形成

前述两部分共同构成一个具有标准形态的最优化问题, 该问题的数学表达式为:

$$\begin{aligned} & \min F(x) \\ & s. t. \begin{cases} h_i(x) = 0, i = 1, 2, \dots, l_1 \\ g_i(x) \leq 0, i = l_1 + 1, \dots, l \end{cases} \end{aligned} \quad (5-36)$$

其中:

$x = (x_1, \dots, x_n)^T$ ——代表最优化问题中的状态变量、决策变量或中间变量;

$h_i(x) = 0$ ——表示(1)节中的工艺系统设计需要的各个严格等式约束集合;

$g_i(x) \leq 0$ ——表示满足(1)节中工艺系统包含出水水质标准在内的各个不等式约束集合。

当式(5-36)中只要有一个为非线性函数关系式时, 此时的最优化问题就可以用非线性规划方法予以求解。这里构件的最优化问题在形态上不具有特殊性, 因此属于一般的非线性约束优化问题。

(二) 非线性约束最优化问题的求解

序列(逐步)二次规划法(Sequential Quadratic Programming, SQP)是一类重要而有效的求解一般大型非线性约束优化问题的数学规划方法, 简称 SQP 法。对于 1 节中污水工艺设计所形成的一般非线性约束最优化问题, SQP 的求解思路是形成基于拉格朗日函数二次近似的二次规划子问题。

1. SQP 法寻优求解步骤

(1) 给定初始数据。给定初始点(初始可行解) x_0 , 初始的 Hessian 矩阵 B_0 , 惩罚因子 r , 收敛精度 ϵ 。令 $k = 0$ 。

(2) 求解二次规划子问题

$$\begin{aligned} & \min \nabla f(x^k)^T d + 0.5 d^T B^k d \\ & s. t. \begin{cases} g_i(x^k) + \nabla g_i(x^k)^T d \leq 0, i = 1, \dots, l_1 \\ h_i(x^k) + \nabla h_i(x^k)^T d \leq 0, i = l_1 + 1, \dots, l \end{cases} \end{aligned} \quad (5-37)$$

设得解 $\hat{d}^k$ 和 kT 乘子 $\hat{\mu}_i^k (i = 1, \dots, l)$ 。若 $\hat{d}^k \leq (\epsilon, \dots, \epsilon)^T \in R^n$, 停止计算, 输出 x^k 。否则,

进行下一步。

(3) 求解二次规划子问题。求解

$$\begin{aligned} & \min p^{kT}d + 0.5d^TB^kd \\ & s. t. \begin{cases} g_i(x^k) + q_i^{kT}d \leq 0, i = 1, \dots, l_1 \\ h_i(x^k) + q_i^{kT}d = 0, i = l_1 + 1, \dots, l \end{cases} \end{aligned} \quad (5-38)$$

其中:

$$\begin{aligned} p^k = & \nabla f(x^k) - 0.5 \sum_{i=1}^{l_1} \hat{\mu}_i^k [\nabla g_i(x^k + \hat{d}^k) - \nabla g_i(x^k)] \\ & - 0.5 \sum_{i=l_1+1}^l \hat{\mu}_i^k [\nabla h_i(x^k + \hat{d}^k) - \nabla h_i(x^k)] \end{aligned} \quad (5-39)$$

$$q_i^k = \begin{cases} 0.5 [\nabla g_i(x^k + \hat{d}^k) + \nabla g_i(x^k)], i = 1, \dots, l_1 \\ 0.5 [\nabla h_i(x^k + \hat{d}^k) + \nabla h_i(x^k)], i = l_1 + 1, \dots, l \end{cases} \quad (5-40)$$

解得最优解 $\hat{d}^k$ 。

(4) 求迭代步长。

令

$$\begin{aligned} F_r(x, d) = & f(x) + \nabla f(x)^Td + 0.5d^TB^kd \\ & + r \left[\sum_{i=1}^{l_1} \max\{0, g_i(x) + \nabla g_i(x)^Td\} + \sum_{i=l_1+1}^l |h_i(x) + \nabla h_i(x)^Td| \right] \end{aligned} \quad (5-41)$$

$$F_r(x) = f(x) + r \left[\sum_{i=1}^{l_1} \max\{0, g_i(x)\} + \sum_{i=l_1+1}^l |h_i(x)| \right] \quad (5-42)$$

$$x(\alpha) = x^k + \alpha \hat{d}^k + \alpha^2 (\hat{d}^k - \bar{d}^k) \quad (5-43)$$

求 α^k , 使

$$F_r(x(\alpha^k)) \leq F_r(x^k) + \alpha^k [\bar{F}_r(x^k, \hat{d}^k) - F_r(x^k)], 0 < \sigma < 1 \quad (5-44)$$

(5) 求下一个迭代点和迭代矩阵

$$x^{k+1} = x^k + \alpha^k \bar{d}^k + (\alpha^k)^2 (\hat{d}^k - \bar{d}^k) \quad (5-45)$$

在 x^{k+1} 处用拟牛顿法中的 BFGS(由 Broyden, Fletcher, Goldfarb 和 Shanno 等独立提出的拟牛顿法称为 BFGS 法) 更新矩阵 B^k , 得到 B^{k+1} 。令 $k = k + 1$ 转入第 ② 步。

采用 SQP 法求解非线性约束优化问题时的迭代次数通常较少, 这是因为在搜索区域内, SQP 法可以自动获得最佳的搜索方向和搜索步长信息。

2. 非线性规划方法的 Matlab 实现

Matlab 强大的数值分析及非线性优化编译功能为求解活性污泥工艺系统设计的最优化问题提供了强有力的计算支持平台。基于非线性约束最优化的基本数学原理, Matlab 中

SQP 法的计算程序实现将分为以下三个步骤。

(1) 拉格朗日函数 Hessian 矩阵 B^k 的更新:

在每一次主要迭代过程中,都将用到前述 BFGS 法计算拉格朗日函数的 Hessian 矩阵的拟牛顿近似矩阵 B^{k+1} 。其更新公式为:

$$B^{k+1} = B^k + \frac{q^k(q^k)^T}{(q^k)^T S^k} - \frac{(B^k)^T B^k}{(S^k)^T B^k S^k}$$

$$S^k = x^{k+1} - x^k \quad (5-46)$$

$$q^k = \nabla f(x^{k+1}) + \sum_{i=1}^n \lambda_i \nabla g_i(x^{k+1}) - (\nabla f(x^k) + \lambda_i \nabla g_i(x^k))$$

其中:

$\lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 为拉格朗日乘子的估计。

(2) 二次规划问题的求解:采用前面介绍的方法求解。

(3) 一维搜索和目标函数的计算:由 Matlab 自动完成。

在寻优求解过程中,Matlab 可以直接调用的模块函数包括:fmincon 函数,其功能是求解多变量有约束非线性函数的最小值;nonlcon 函数,其功能是用来计算非线性不等式约束或者非线性等式约束。

主函数程序及子函数程序均以 M 文件编写。fmincon 函数作为主控函数对两个子程序函数进行调用。子程序函数分别由系统模型中的各种等式或不等式约束以及非线性目标函数构成;程序中同时还定义了模型参数矩阵 $P(81,1)$ 以及模型变量矩阵 $X(105,1)$ 等。

(三) 活性污泥法系统工艺方案优化算例

在稳态下,根据图 5-2 流程以及表 5-3 中的进水水质水量对 A^2/O 除磷脱氮工艺系统处理城市污水的可行性方案进行设计(设计规模 $10 \text{ 万 m}^3/\text{d}$)。在运行优化模型之前,需要确定一组模型变量(关键设计变量)的初始可行解。根据传统的经验设计方法计算获得一组工艺控制参数,并以此作为程序运行所需的寻优初始可行点 $x_i^0 (i = 1, 2, \dots, n)$ 以及方案结果比较的参考值。模型求解时取定的目标权重系数 ω_1, ω_2 分别为 0.8 和 0.2,工艺系统的设计生命周期为 $20a$,折现因子 $\tau = 9.82$ 。

方案优化结果

表 5-5 对比了经寻优求解后的方案结果与传统设计方案结果。从表 5-5 可知,在系统模型约束范围内,优化设计方案对工艺系统中各关键工艺参数进行了自适应调整,使优化后方案比原传统设计方案节省投资及运行维护费用(以等年值计)达 19.2%,从而大大提高了设计方案的经济可行性。

这里将活性污泥法除磷脱氮 A^2/O 工艺方案设计过程整合为一个非线性约束规划的最优化问题,并在 Matlab 平台上,借助 SQP 的寻优方法,探索研究了求解“最优”工艺设计方案的方法,取得了优于传统设计方案的效果。同时,活性污泥工艺系统方案的传统设计方法发展为系统设计方法奠定了一定的理论基础。所提出的优化模型及寻优求解方法,不仅适用于对活性污泥法工艺系统方案进行优化设计,同时还可发展用于对设计方案的经济性评估提供决策参考,也可以根据需要对整个活性污泥工艺过程进行仿真和模拟。

表 5-5 传统设计方案与优化方案的比较

关键设计变量		初始可行解 (传统设计方案)	优化方案
好氧曝气池	初沉池面积 A_A/m^2	2084	1536.1
	厌氧释磷池容积 V_B/m^3	5000	5347.5
	缺氧池容积 V_C/m^3	21112	21063.7
	V_D/m^3	45000	39384.2
	AFR/m^3 空气 /h	86838	72804.2
	二次沉淀池面积 A_E/m^2	4167	4583.3
	污泥浓缩池面积 A_F/m^2	1106	790.6
	污泥压滤器面积 A_G/m^2	1433	963.4
	污泥干化场面积 A_H/m^2	1110	838.7
工艺方案总费用 $F/\text{万元}/a$		14896.2	12036.4
部分 工艺 设计 参数 的优 化调 整	初沉池表面负荷 $q_A/\text{m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$	2.0	2.48
	混合也回流比 $R_{\text{内}}$	3.5	2.98
	污泥回流比 $R_{\text{外}}$	0.2	0.28
	系统总泥龄 $\theta_{\text{总}}/\text{h}$	219	236.76
	二沉池表面负荷 $q_E/\text{m}^3/(\text{m}^2 \cdot \text{h})$	1.0	1.06
	污泥混合液浓度 $/\text{g}/\text{m}^3$	3287.6	3784.38

第四节 动态规划管理模型

将动态规划的基础理论与水环境系统的控制管理目标相结合,即可组成水环境系统动态规划管理模型,本节采用两个例子说明其应用的具体过程。

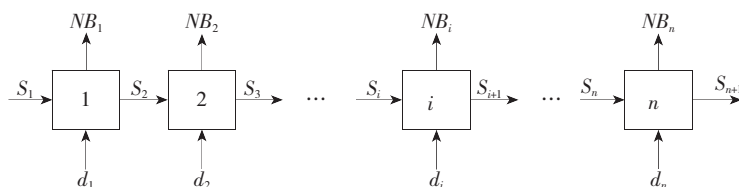
一、动态规划及其在水资源工程中的应用^[4]

现代水环境系统分析在实际应用中会遇到许多问题,如其目标函数和约束方程大多是非线性的,系统输入也经常是随机的,这就很难用线性规划求解,且水资源开发利用中的不少问题具有动态性。首先,这些问题本身是动态的,需要连续决策,如运行问题、水库优化调度问题等;其次,规划初期可供使用的资料总是有限的,随着时间的推移,逐渐累积资料以及信息的反馈,需要不断地修改决策,采用线性规划很不方便。要了解问题最优解的结构和动态变化过程,必须考虑采用另外的方法。最合适的方法是动态规划法。

在最优化问题中,常有这样一类问题,它是一种随时间而变化的活动过程,可以按时间过程将其划分成若干个互相联系的连续阶段,对每一个阶段都要作出一定的决策,但每个阶段的最优决策的选择不能只孤立地考虑本阶段所取得的效果,必须把整个过程中的各个阶段联系起来考虑,要求所选择的各个阶段决策的集合——策略,能使整个过程的总效果达到最优,这样一种解决整个动态过程的最优化问题的方法称为动态规划法,它是数学规划的一个重要分支。

(一) 连续决策过程的最优化

多阶段连续决策过程是一个系统从起始状态 S_1 开始, 经过一系列变化, 到达终状态 S_n , 其状态变化经历 n 个连续的阶段, 对每一个阶段需要作出决策 $d_i (i = 1, 2, \dots, n)$, 从而得到整个过程的一个决策系列——最优策略, 使系统取得最优效益(图 5-3)。第 i 阶段的效益函数 $NB_i = NB_i(S_i, d_i)$ 和第 i 阶段末的状态 $S_{i+1} = S(S_i, d_i)$ 都是第 i 阶段初始状态 S_i 和第 i 阶段所作决策 d_i 的函数, 这就是系统的状态转移方程。

图 5-3 n 个阶段的连续决策过程

系统的总效益 $NB = \sum_{i=1}^n NB_i = \sum_{i=1}^n NB_i(S_i, d_i)$ 。对于一个有 n 个阶段的连续决策问题, 每个策略 D 是一个 n 维向量, 即 $D = (d_1, d_2, \dots, d_n)$ 。若每个阶段的决策变量有 m 种可能取值, 则可能的策略数有 m^n 个。动态规划的任务就是要从这些众多的策略中选择一个最优策略 $D^* = (d_1^*, d_2^*, \dots, d_n^*)$, 以使系统的总效益最优。实际工作中有两类这样的分阶段连续决策问题: 一类是前述的按时间划分阶段的动态问题, 如系统运行、水库调度及系统扩容等问题。另一类则以空间域或物理实体(工程结构)划分阶段, 如输水管道的线路选择、投资分配、水量分配、能源分配以及结构物的优化设计等问题, 这是一类与时间因素无关的静态多变量优化的决策问题, 但可比拟为随时间而变的动态过程, 即人为地把这种静态的、多变量决策问题引入“时间因素”, 化为多阶段决策过程, 用动态规划法求解。

典型的动态规划问题的数学模型具有如下形式:

$$\begin{aligned}
 &\text{最优化 } Z = \sum_{i=1}^n Z_i(x_i) \\
 &s. t. \begin{cases} \sum_{i=1}^n g_i(x_i) \leq G \\ x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \quad (5-47)
 \end{aligned}$$

Z 是所研究问题的目标函数, $Z_i(x_i)$ 仅是 n 个决策变量之一 (x_i) 的函数, 这些函数仅需满足单值函数的一般要求, 它们并不受线性、凸性甚至连续性的限制。

动态规划的解能揭示问题最优解的内在结构和动态过程, 这是动态规划的最大优点。然而, 并非所有多阶段连续决策问题均可应用动态规划求解, 而只限于一些特定形式的目标函数可应用动态规划求解。动态规划考虑每个决策在连续决策过程中的独立影响, 必须要求目标函数是一系列函数的代数和, 而每个函数仅是一个决策变量的函数, 因此动态规划的实质是把一个较复杂的动态过程优化决策问题转化为许多阶段的单变量的静态规划问题。为说明连续决策过程最优化的原理和应用动态规划求解问题的方法, 讨论一个具有代表性的问

题——水量分配问题。设现有 Q 的水量可供分配至 n 个供水用户, 用户分别用序号 $i = 1, 2, \dots, n$ 表示。已知分配 x_i 水量至用户 i 所获得的净收益是分配水量 x_i 的非线性函数 $NB_i(x_i)$ (图 5-4)。问题是要决定分配给每个用户 i 的水量 x_i 以使整个供水系统的总净效益 NB 最大。

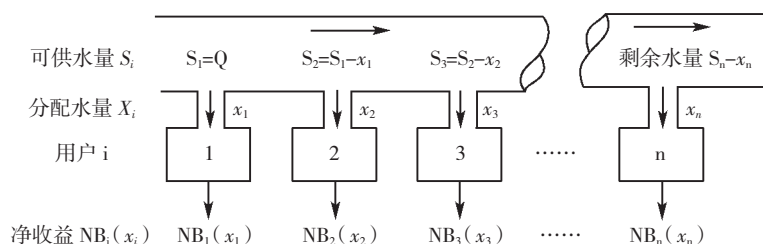


图 5-4 水量的连续分配过程

对上述问题, 可以如下数学模型表述:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{i=1}^n NB_i(x_i) \\ & s. \ t. \begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i \leq Q \\ x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (5-48)$$

这个模型与前述的一般动态规划模型式(5-47)几乎完全一样, 只是约束 $g_i(x_i)$ 代之以简单的 x_i 而已。这是一个水量分配的连续决策问题。这里, 分配至用户 i 的水量 x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) 是待定的决策量, 而对每个用户的水量分配, 可视为决策过程的一个决策阶段。状态变量 S_i (可供水量) 定义为可供余下的 $(n-i+1)$ 个用户 (或阶段) 分配使用的总水量。而状态转移方程 $S_{i+1} = S_i - x_i$ 定义下阶段的状态, 它是当前状态 S_i 和当前分配水量 (或决策) x_i 的函数。作了上述定义后, 现在可逐阶段地讨论水量的最优分配过程。

分配过程始于第 1 阶段。先假定仅有一个用户接受水量的各种分配方案, 各种分配方案中使净效益最大的目标函数值 $F_1^*(S_1)$ 可用下式表示:

$$F_1^*(S_1) = \max_{\substack{0 \leq x_1 \leq S_1 \\ 0 \leq S_1 \leq Q}} [NB_1(x_1)] \quad (5-49)$$

确定 $F_1^*(S_1)$ 的方法: 先在允许范围内计算相应于 x_1 与 S_1 的所有可能组合的 $NB_1(x_1)$ 值, 然后进行比较, 选择其中最大的 $NB_1(x_1)$ 值为 $F_1^*(S_1)$, 其相应的决策 $x_1^*(S_1)$ 即为最优决策。显然, $x_1^*(S_1)$ 和 $F_1^*(S_1)$ 都是状态变量 S_1 的函数。

现考虑在决策过程中有两个决策阶段的情况。第 1 阶段 (用户) 已经由式(5-49)作了优化决策, 不管有多少水量 x_2 要分配在第 2 阶段使用, 在第 2 阶段作出决策后, 剩余的水量 ($S_2 - x_2$) 显然应以最优的方式在第 1 阶段使用, 即 $x_1^*(S_2 - x_2)$, 产生最优目标值 $F_1^*(S_2 - x_2)$ 。对于这两个阶段总的净收益就是每阶段净收益之和, 故

$$F_2^*(S_2) = \max_{\substack{0 \leq x_2 \leq S_2 \\ 0 \leq S_2 \leq Q}} [NB_2(x_2) + F_1^*(S_2 - x_2)] \quad (5-50)$$

如在决策过程中存在 2 个以上的阶段(用户),则其分析方法完全相同。一般对于有 k 个阶段的连续决策过程,则有以下式:

$$F_k^*(S_k) = \max_{\substack{0 \leq x_k \leq S_k \\ 0 \leq S_k \leq Q}} [NB_k(x_k) + F_{k-1}^*(S_k - x_k)] \quad (5-51)$$

求解式(5-51)即可得 $x_k^*(S_k)$ 和 $F_k^*(S_k)$ 。显然,对于最后的用户(第 n 阶段),则有以下式:

$$F_n^*(S_n) = \max_{\substack{0 \leq x_n \leq S_n \\ 0 \leq S_n \leq Q}} [NB_n(x_n) + F_{n-1}^*(S_n - x_n)] \quad (5-52)$$

求解式(5-52)可得 $x_n^*(S_n)$ 和 $F_n^*(S_n)$ 。整个水量分配问题的求解可得一系列最优决策 $x_i^*(S_i)$, ($i = 1, 2, \dots, n$) 及相应的总的最大净收益 $F_n^*(S_n)$ 。

从上述用动态规划求解水量分配问题的过程,可归纳如下三点:

1. 由式(5-49)~(5-52)可知,总最大净收益由两部分组成,即现阶段决策所致的净收益和其余各阶段的最大净收益。
2. 式(5-49)~(5-52)通常称为迭代(或递推)方程,因为它们必须严格地按次序求解,每个迭代方程代表一个阶段,作出一个阶段的最优决策,但每个方程的求解又取决于它们以前方程的解,第 1 个迭代方程(5-49)对于求得问题的完全解是十分必需的,从某种意义上说,它也是解题的边界条件,是独立的。
3. 前述的解法是从第 1 阶段开始至第 n 阶段结束,以顺序向前的方式求解,称为顺序法。同样也可从第 n 个阶段开始后退至第 1 阶段,以逆序向后的方式求解,称为逆序法。上述水量分配问题的逆序动态规划求解的迭代方程如下:

$$F_n^*(S_n) = \max_{\substack{0 \leq x_n \leq S_n \\ 0 \leq S_n \leq Q}} [NB_n(x_n)] \quad (5-53)$$

$$F_{n-1}^*(S_k) = \max_{\substack{0 \leq x_{n-1} \leq S_{n-1} \\ 0 \leq S_{n-1} \leq Q}} \quad (5-54)$$

.....

$$F_k^*(S_k) = \max_{\substack{0 \leq x_k \leq S_k \\ 0 \leq S_k \leq Q}} [NB_k(x_k) + F_{k+1}^*(S_k - x_k)] \quad (5-55)$$

.....

$$F_1^*(S_1) = \max_{\substack{0 \leq x_1 \leq S_1 \\ 0 \leq S_1 \leq Q}} [NB_1(x_1) + F_2^*(S_1 - x_1)] \quad (5-56)$$

应该指出,对有些问题采用顺序法和逆序法可得出相同的结果,但对某些问题则有时只能使用其中之一,求得问题的最优解。

(二) 动态规划法的最优化原理

建立递推方程组是动态规划的核心,一个与多阶段连续决策过程相关联的最优化问题至少包含有和阶段数相等的未知决策变量,递推关系式把整个问题变成一系列比较简单的子问题,每个子问题只包含一个未知的决策变量。这样使设计过程十分简单,因为求解许多

单变量问题要比求解一个复杂的多变量问题容易得多,也快得多。整个递推方程组的建立是以动态规划的下述最优化原理为根据的:“一个过程的最优决策具有这样的性质,即无论其初始状态和初始决策如何,从这一决策所导致的新状态开始,以后的一系列决策必须是最优的。”回顾和检验前述的每个递推方程,不难发现每个递推方程的结构都是严格遵循最优化原理的。

(三) 示例

研究一个污水处理厂,它包含五道连续工序,经过这些工序的处理,至少可净化输入污水的 90%。假定 $R_i (i=1,2,\dots,5)$ 是第 i 道工序净化的污水量,必须满足的条件是: $0 \leq R_1 \leq 30, 0 \leq R_2 \leq 30, 0 \leq R_3 \leq 10, 0 \leq R_4 \leq 20, 0 \leq R_5 \leq 30$ 。每道工序的费用 $C_i(I_i, R_i)$ 是个非线性函数,取决于进入该工序 i 的污水量 I_i 和通过该工序净化的污水量 R_i (%),如表 5-6 所示。

表 5-6 费用函数

工序 i			1	2	3	4	5	工序 i			1	2	3	4	5
进入污水量 I_i	净化污水量 R_i	年费用 $C_i(I_i, R_i)$						进入污水量 I_i	净化污水量 R_i	年费用 $C_i(I_i, R_i)$					
100	20	5						60	30						9
100	30	10						50	10				7	3	4
80	10				3	3	1	50	20					5	8
80	20				9		2	50	30						10
80	30				13			40	10				8	5	5
70	10				4	5	2	40	20					7	12
70	20				10		3	40	30						18
70	30				15			30	10					8	8
60	10					6	2	3	30	20				10	12
60	20					4	6		20	10					8

本问题是寻求每道工序的最佳净化污水量 R_i , 以使总净化污水量达 90%, 而所需费用最小。污水处理流程如图 5-5 所示。

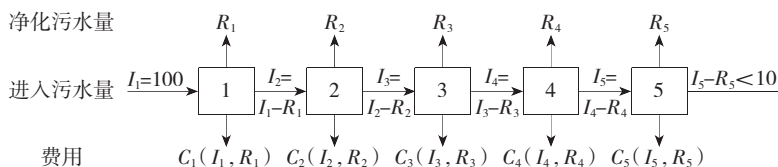


图 5-5 污水处理过程示意图

本问题可视为一个多阶段的连续决策问题,这里的每道工序作为一个阶段,进入每道工序的污水量 I_i 是状态变量,净化的污水量 R_i 是决策变量。这样,上述问题的数学模型为:

$$\min_{i=1}^5 C_i(I_i, R_i)$$

$$s. t. \begin{cases} \sum_{i=1}^5 R_i \leq 90 \\ 0 \leq R_1 \leq 30 \\ 0 \leq R_2 \leq 30 \\ 0 \leq R_3 \leq 10 \\ 0 \leq R_4 \leq 20 \\ 0 \leq R_5 \leq 30 \end{cases}$$

模型可用逆序动态规划法求解,其递推方程为:

$$\begin{aligned} F_5^*(I_5) &= \min_{0 \leq R_5 \leq 30} C_5(I_5, R_5) \\ F_4^*(I_4) &= \min_{0 \leq R_4 \leq 20} [C_4(I_4, R_4) + F_5^*(I_4 - R_4)] \\ F_3^*(I_3) &= \min_{0 \leq R_3 \leq 10} [C_3(I_3, R_3) + F_4^*(I_3 - R_3)] \\ F_2^*(I_2) &= \min_{0 \leq R_2 \leq 30} [C_2(I_2, R_2) + F_3^*(I_2 - R_2)] \\ F_1^*(I_1) &= \min_{0 \leq R_1 \leq 30} [C_1(I_1, R_1) + F_2^*(I_1 - R_1)] \end{aligned}$$

求解离散动态规划问题的最好方法是表解法,决策过程的每个阶段的计算均列表进行。

表 5-7 至表 5-11 相应于上述 5 个迭代方程。

表 5-7 $I_5 - F_5^*(I_5) - R_5^*$

状态变量 I_5	20	30	40
$F_5^*(I_5)$	8	12	18
R_5^*	10	20	30

表 5-8 $I_4 - F_4^*(I_4) - R_4^*$

状态变量 I_4	$C_4(I_4, R_4) + F_5^*(I_4 - R_4)$		$F_4^*(I_4)$	R_4^*
	$R_4: 10$	20		
30	8 + 8 = 16		16	10
40	5 + 12 = 17	7 + 8 = 15	15	20
50	3 + 18 = 21	5 + 12 = 17	17	20
70		4 + 18 = 22	22	20

表 5-9 $I_3 - F_3^*(I_3) - R_3^*$

状态变量 I_3	40	50	60	70
$F_3^*(I_3)$	8 + 16 = 24	7 + 15 = 22	6 + 17 = 23	5 + 22 = 27
R_3^*	10	10	10	10

表 5-10 $I_2 - F_2^*(I_2) - R_2^*$

状态变量	$C_2(I_2, R_2) + F_2^*(I_2 - R_2)$			$F_2^*(I_2)$	R_2^*
I_2	$R_2 : 10$	20	30		
70	$4 + 23 = 27$	$10 + 22 = 32$	$15 + 24 = 39$	27	10
80	$3 + 27 = 30$	$9 + 23 = 32$	$13 + 22 = 35$	30	10

表 5-11 $I_1 - F_1^*(I_1) - R_1^*$

状态变量	$C_2(I_2, R_2) + F_3^*(I_2 - R_2)$		$F_1^*(I_1)$	R_1^*
I_1	$R_1 : 20$	30		
100	$5 + 30 = 35$	$10 + 27 = 37$	35	20

从表 5-11 得最小费用 $F_1^*(I_1) = 35$, 其相应的决策变量: 第 1 道工序的净化污水量 $R_1^* = 20$ 。再根据图 5-5 所示的污水处理过程, 其他四道工序的最佳净化污水量分别为: $R_2^* = 10, R_3^* = 10, R_4^* = 20, R_5^* = 30$, 这就是导致净化污水至少 90% 的最小费用的最佳策略。再检验一下最佳策略, 发现它确实满足所有的约束条件。

(四) 多维动态规划

以上讨论的问题限于每个阶段具有一个决策变量和一个约束条件, 这是一维动态规划。若每个阶段具有多个决策变量, 约束条件也多于一个, 则这类问题称为多状态决策问题, 即所谓多维动态规划。为便于说明, 也不失一般性, 研究一个二维问题, 其数学模型的一般形式为:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{i=1}^n B_i(x_i, y_i) \\ & s. t. \begin{cases} \sum_{i=1}^n x_i \leq Q_1 \\ \sum_{i=1}^n y_i \leq Q_2 \\ x_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n \\ y_i \geq 0, i = 1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (5-57)$$

此时, 适用于一维问题求解的迭代方程组必须进行修改, 即考虑两个决策变量 (x_i, y_i) 和两个状态变量 (S_1, S_2) , 具有如下形式:

对于第 1 阶段

$$F_1^*(S_{11}, S_{21}) = \max_{\substack{0 \leq x_1 \leq S_{11}, 0 \leq y_1 \leq S_{21} \\ 0 \leq S_{11} \leq Q_1, 0 \leq S_{21} \leq Q_2}} [B_1(x_1, y_1)] \quad (5-58)$$

式中状态变量 S 的第 1 个下标与决策变量相对应 (即 $x \rightarrow 1, y \rightarrow 2$), 第 2 个下标表示阶段序 (下同)。

对于第 2 阶段:

$$F_2^*(S_{12}, S_{22}) = \max_{\substack{0 \leq x_2 \leq S_{12}, 0 \leq y_2 \leq S_{22} \\ 0 \leq S_{12} \leq Q_1, 0 \leq S_{22} \leq Q_2}} [B_2(x_2, y_2) + F_1^*(S_{12} - x_2, S_{22} - y_2)] \quad (5-59)$$

.....

对于第 k 阶段:

$$F_K^*(S_{1K}, S_{2K}) = \max_{\substack{0 \leq x_K \leq S_{1K}, 0 \leq y_K \leq S_{2K} \\ 0 \leq S_{1K} \leq Q_1, 0 \leq S_{2K} \leq Q_2}} [B_K(x_K, y_K) + F_{K-1}^*(S_{1K} - x_K, S_{2K} - y_K)] \quad (5-60)$$

从概念上说,推导上述迭代方程是不难的,只要取 x_i, y_i, S_{1i} 和 S_{2i} 的所有可能组合即可求解,然而实际计算远比一维问题复杂得多。

在水环境系统管理水资源工程中,更为常见和一般的情况是从多个水库(水源)向多个不同的需水用户供水的问题,这就是一个多维动态规划的典型实例。多维动态规划问题的求解,在理论上和方法上均无多大困难。然而实践表明,当维数大于 4 时,用一般的动态规划方法求解,其计算工作量大得惊人,即使应用现代高速大容量电子计算机也难于胜任,因为随着状态变量数(维数)的增加,每个阶段需要检验的状态组合数及计算工作量将按指数律急剧地增加,这就是通常所谓的多状态决策动态规划问题的“维数灾”。它限制了动态规划的应用。近年来,不少学者作了大量的研究工作,力图克服这一实用上的障碍,但至今尚未见有通用的、令人满意的解决办法。

二、水资源系统的动态管理模型^[5]

(一) 概述

多阶段管理问题—多阶段决策最优化问题,就是使有限的资源量发挥最大的效益。设 $x_k, y_k (k = 1, 2, \dots, n)$ 分别表示地表水资源和地下水资源的决策变量。 $g_k(x_k, y_k)$ 表示资源利用得到的效益函数, k 表示阶段划分标号,并假定地表水资源允许(最大)开发量为 Q_1 , 地下水资源允许开采量为 Q_2 , 则上述问题的数学规划模型为:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{k=1}^n g_k(x_k, y_k) \\ & s. t. \begin{cases} \sum_{k=1}^n x_k \leq Q_1 \\ \sum_{k=1}^n y_k \leq Q_2 \\ x_k \geq 0, k = 1, 2, \dots, n \\ y_k \geq 0, k = 1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (5-61)$$

由最优化原则^[6] 可得到如下递推方程:

$$\begin{cases} f_k(q_{xk}, q_{yk}) = \max\{g_k(x_k, y_k) + f_{k-1}(q_{xk} - x_k, q_{yk} - y_k)\} \\ 0 \leq x_k \leq q_{xk}, k = 2, \dots, n \\ 0 \leq y_k \leq q_{yk}, k = 2, \dots, n \\ f_1(q_{x1}, q_{y1}) = g_1(q_{x1}, q_{y1}), k = 1, \dots, n \end{cases} \quad (5-62)$$

对于水资源实际问题来讲, $x_k, y_k (k = 1, 2, \dots, n)$ 求解递推方程, 必须对式(5-62) 采用离散化的格式。 $[0, Q_1]$ 分割成 m_1 个等份, $[0, Q_2]$ 分割成 m_2 个等份。

经过上述离散后, 式(5-62) 变为:

$$\begin{aligned} & \max \sum_{k=1}^n \bar{g}_k(\bar{x}_k, \bar{y}_k) \\ s. t. & \begin{cases} \sum_{k=1}^n \bar{x}_k = m_1 \\ \sum_{k=1}^n \bar{y}_k = m_2 \\ 0 \leq \bar{x}_k \leq m_1, \bar{x}_k \text{ 为整数}, k = 1, 2, \dots, n \\ 0 \leq \bar{y}_k \leq m_2, \bar{y}_k \text{ 为整数}, k = 1, 2, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (5-63)$$

式(5-63) 已成为离散化的格式, 可以借助计算机求解。

(二) 应用实例

河北邯郸东部水资源开发区, 可以对地表水和地下水综合利用。地表水(主要指河流)和地下水的动态变化表现出受气候和降水等因素的影响, 四季变化分明。经过实地调查、分析和计算, 得知该开采区域, 地表水资源允许开发量为 40.22 万立方米 / 年, 地下水资源允许开采量为 199.65 万立方米 / 年。

以上问题应用动态规划方法来求解, 具体步骤如下:

1. 建立模型

由题意知道, 可划分为四个阶段, 即 $n = 4$, 同时知道, $Q_1 = 40.22 \approx 40$, $Q_2 = 199.65 \approx 200$ 。此处近似取值是为了处理问题方便且不会影响应用效果。因此该区域水资源管理问题的数学模型为:

$$\begin{aligned} & \max\{g_1(x_1, y_1) + g_2(x_2, y_2) + g_3(x_3, y_3) + g_4(x_4, y_4)\} \\ s. t. & \begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 \leq 40 \\ y_1 + y_2 + y_3 + y_4 \leq 200 \\ x_k \geq 0, y_k \geq 0, k = 1, 2, 3, 4 \end{cases} \end{aligned}$$

2. 决策变量离散化

根据实际问题, 对地表水来说, 将 $[0, 40]$ 分割成四个等份, 即得到 $P_x = 4 + 1 = 5$ 离散点(值); 对地下水来说, 将 $[0, 200]$ 分割成二十等份, 得到 $P_y = 20 + 1 = 21$ 个离散点。因为现在考虑的是二维问题, 所以共构成 $21 \times 5 = 105$ 个离散点(交叉点)。

3. 效益函数的具体化

根据具体问题,将效益函数表示成如下形式:

$$g_k(x_k, y_k) = a_k x_k + b_k y_k$$

其中: a_k 、 b_k 分别表示地表水和地下水的综合效益系数。一般情况下,综合效益系数与单位水资源的收益、水资源的动态变化特征、水资源量的供需平衡状态、资源开发的难易程度、水资源输送的途径等有关。究竟哪个因素占主导地位,要视具体问题而定。

这里计算所用的综合效益系数如表 5-12、表 5-13 所示。表中综合效益系数的确定主要考虑了区域水资源的动态变化特征及相互转化关系。

表 5-12 地表水综合效益系数表

决策量	0	10	20	30	40
$k = 1$	0	1.05	1.05	1.04	1.04
$k = 2$	0	1.10	1.10	1.08	1.08
$k = 3$	0	1.50	1.50	1.45	1.45
$k = 4$	0	1.05	1.10	1.00	1.05

表 5-13 地下水综合效益系数表

决策量	0	10—50	60—100	110—150	160—200
$k = 1$	0	1.50	1.51	1.50	1.45
$k = 2$	0	1.30	1.31	1.30	1.28
$k = 3$	0	1.04	1.05	1.04	1.03
$k = 4$	0	1.10	1.11	1.10	1.08

4. 求解决策变量

经计算机程序解算,最后得到四个阶段的最优决策过程如表 5-14 所示:

表 5-14 最优决策过程表

阶段	地表水	地下水	效益值
$k = 1$	0	90	
$k = 2$	0	106	
$k = 3$	38	0	
$k = 4$	2	4	
最大效益值			384.00

最终结果表明,在每年的第一季度和第二季度应尽可能地开采地下水;而到了第三季度,要充分利用地表水,使地下水得到一个补给的机会;到了第四季度(冬季),需要量较小,可将地表水和地下水各调用一部分。这个结论,与当地调查的情况是相符合的。

通过这个实例,得到以下几点结果:

(1) 用动态规划方法解决水资源管理的多阶段决策问题,效果是显著的。这是因为它能够反映出水资源本身及其效益因素随时间变化的客观实际。

(2) 这里提出的综合效益系数实质上是个权数。具体问题一旦给定,合理地确定综合效益系数是十分重要的。建议以后用模糊数学方法对有关因素进行综合评判后再给出综合效

益系数。还应指出,效益函数在不同的条件下可以采用不同的构造形式。

(3) 实例在涉及地表水和地下水的物理模型时,采用了单个单元模型^[7]。对于多个单元的多阶段管理模型来说,仍可运用动态规划方法求解。

第五节 遗传算法管理模型

遗传算法是模拟生物在自然环境中的遗传和进化过程而形成的一种自适应全局优化概率搜索算法。它最早由美国密执安大学的 Holland 教授提出,起源于 20 世纪 60 年代对自然和人工自适应系统的研究。20 世纪 70 年代 De Jong 基于遗传算法的思想在计算机上进行了大量的纯数值函数优化计算实验。在一系列研究工作的基础上,20 世纪 80 年代由 Goldberg 进行归纳总结,形成了遗传算法的基本框架^[8]。

一、遗传算法概述

生命的基本特征包括生长、繁殖、新陈代谢和遗传与变异。生命是进化的产物,现代的生物是在长期进化过程中发展起来的。

遗传算法模拟的是怎样的生物进化模型呢?假设对相当于自然界中的一群人的一个种群进行操作,第一步的选择是以现实世界中的优胜劣汰现象为背景的;第二步的重组交叉则相当于人类的结婚和生育;第三步的变异则与自然界中偶然发生的变异是一致的。人类偶然出现的返祖现象便是一种变异。由于包含着对模式的操作,遗传算法不断地产生出更加优良的个体,正如人类向前进化一样。所采用的遗传操作都与生物尤其是人类的进化过程相对应。如果再仔细分析遗传算法的操作对象种群,实际上它对应的是一群人,而不是整个人类。一群人随着时间的推移而不断地进化,并具备越来越多的优良品质。然而,由于他们的生长、演变、环境和原始祖先的局限性,经过相当一段时间后,他们将逐渐进化到某些特征相对优势的状态,定义这种状态为平衡态。当一个种群进化到这种状态,这种种群的特性就不再有大的变化了。一个简单的遗传算法,从初始化开始,并且各项参数都设定,也会达到平衡态。此时种群中的优良个体仅包含了某些类的优良模式,因为该遗传算法的设置特性参数使得这些优良模式的各个串位未能得到平等的竞争机会。

对一个最优化问题,遗传算法将 n 维决策向量 $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$ 用 n 个记号 $X_i (i = 1, 2, \dots, n)$ 所组成的符号串 X 来表示:

$$X = X_1 X_2 \cdots X_n \Rightarrow X = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$$

把每一个 X_i 看作一个遗传基因,它的所有可能取值称为等位基因,这样, X 就可看做是由 n 个遗传基因所组成的一个染色体。一般情况下,染色体的长度 n 是固定的,但对一些问题 n 也是可以变化的。根据不同的情况,这里的等值基因可以是一组整数,也可以是某一范围内的实数值,或者是纯粹的一个记号。最简单的等位基因是由 0 和 1 这两个整数组成的,相应的染色体就可表示为一个二进制符号串。这种编码所形成的排列形式 X 是个体的基因型,与它对应的 X 值是个体的表现型。通常个体的表现型和其基因型是一一对应的,但有时也允许基因型和表现型是多对一的关系。染色体 X 也称为个体 X ,对于每一个个体 X ,要按照一定的规则确定出其适应度。个体的适应度与其对应的表现型 X 的目标函数值相关联, X

越接近于目标函数的最优点,其适应度越大;反之,其适应度越小。

遗传算法中,决策变量 X 组成了问题的解空间。对问题最优解的搜索是通过对染色体 X 的搜索过程来进行的,从而由所有的染色体 X 就组成了问题的搜索空间。

生物的进化是以集团为主体的。与此相对应,遗传算法的运算对象是由 M 个个体所组成的集合,称为群体。与生物一代一代的自然进化过程相类似,遗传算法的运算过程也是一个反复迭代过程,第 t 代群体记做 $P(t)$,经过一代遗传和进化后,得到第 $t+1$ 代群体,它们也是由多个个体组成的集合,记做 $P(t+1)$ 。这个群体不断地经过遗传和进化操作,并且每次都按照优胜劣汰的规则将适应度较高的个体更多地遗传到下一代,这样最终在群体中将会得到一个优良的个体 X ,它所对应的表现型 X 将达到或接近于问题的最优解 X^* 。

生物的进化过程主要是通过染色体之间的交叉和染色体的变异来完成的。与此相对应,遗传算法中最优解的搜索过程也模仿生物的这个进化过程,使用所谓的遗传算子(Generation Operators)作用于群体 $P(t)$ 中,进行下述遗传操作,从而得到新一代群体 $P(t+1)$ 。

选择(Selection):根据各个个体的适应度,按照一定的规则或方法,从第 t 代群体 $P(t)$ 中选择出一些优良的个体遗传到下一代群体 $P(t+1)$ 中。

交叉(Crossover):将群体 $P(t)$ 内的各个个体随机搭配成对,对每一对个体,以某个概率(称为交叉概率,Crossover Rate)交换它们之间的部分染色体。

变异(Mutation):对群体 $P(t)$ 中的每一个个体,以某一概率(称为变异概率,Mutation Rate)改变某一个或某一些基因座上的基因值为其他的等位基因。

基于对自然界中生物遗传与进化机理的模仿,针对不同的问题,很多学者设计了许多不同的编码方法来表示问题的可行解,开发出了许多种不同的遗传算子来模仿不同环境下的生物遗传特性。这样,由不同的编码方法和不同的遗传算子就构成了各种不同的遗传算法。但这些遗传算法都有共同的特点,即通过对生物遗传和进化过程中选择、交叉、变异机理的模仿,来完成对问题最优解的自适应搜索过程。基于这个共同特点,Goldberg 总结出了一种统一的最基本的遗传算法——基本遗传算法(Simple Genetic Algorithms,简称 SGA^[10])。基本遗传算法只使用选择算子、交叉算子和变异算子这三种基本遗传算子,其遗传进化操作过程简单,容易理解,是其他一些遗传算法的雏形和基础,它不仅给各种遗传算法提供了一个基本框架,同时也具有一定的应用价值。

1. 基本遗传算法的构成要素

(1) 染色体编码方法

基本遗传算法使用固定长度的二进制符号串来表示群体中的个体,其等位基因是由二值符号集 $\{0,1\}$ 所组成的。初始群体中各个个体的基因值可用均匀分布的随机数来生成,如:

$$X = 1101010110101001$$

就可表示一个个体,该个体的染色体长度是 $n = 16$ 。

(2) 个体适应度评价

基本遗传算法根据与个体适应度成正比的概率来决定当前群体中每个个体遗传到下一代群体中的机会多少。为正确计算这个概率,这里要求所有个体的适应度必须为正数或零。这样,根据不同种类的问题,必须预先确定好由目标函数值到个体适应度之间的转换规则,特别是要预先确定好当目标函数值为负数时的处理方法。

(3) 遗传算子

基本遗传算法使用下述三种遗传算子：

- 选择运算使用比例选择算子；
- 交叉运算使用单点交叉算子；
- 变异运算使用基本位变异算子或均匀变异算子。

(4) 基本遗传算法的运行参数

基本遗传算法有下述 4 个运行参数需要提前设定：

- M : 群体大小, 即群体中所含个体的数量, 一般取为 20—100。

T : 遗传运算的终止进化代数, 一般取为 100—500。

p_c : 交叉概率, 一般取为 0.4—0.99。

p_m : 变异概率, 一般取为 0.0001—0.1。

需要说明的是, 这 4 个运行参数对遗传算法的求解结果和求解效率都有一定的影响, 但目前尚无合理选择它们的理论依据。在遗传算法的实际应用中, 往往需要经过多次试算后才能确定出这些参数合理的取值大小或取值范围。

2. 基本遗传算法描述

下面给出基本遗传算法的伪代码描述。

基本遗传算法可定义为一个 8 元组：

$$SGA = (C, E, P_0, M, \varphi, \Gamma, \Psi, T) \quad (5-64)$$

其中：

C ——个体的编码方法；

E ——个体适应度评价函数；

P_0 ——初始群体；

M ——群体大小；

Φ ——选择算子；

Γ ——交叉算子；

Ψ ——变异算子；

T ——遗传运算终止条件。

3. 基本遗传算法的实现

根据上面对基本遗传算法构成要素的分析和算法描述, 可以很方便地用计算机语言来实现这个基本遗传算法。现对具体实现过程中的问题作以下说明。

(1) 个体适应度评价

在遗传算法中, 以个体适应度的大小来确定该个体被遗传到下一代群体中的概率。个体的适应度越大, 该个体被遗传到下一代的概率也越大; 反之, 个体的适应度越小, 该个体被遗传到下一代的概率也越小。基本遗传算法使用比例选择算子来确定群体中各个个体遗传到下一代群体中的数量。为正确计算不同情况下各个个体的遗传概率, 要求所有个体的适应度必须为正数或零, 不能是负数。

对于求目标函数最小值的优化问题, 理论上只需简单地对其增加一个负号就可将其转化为求目标函数最大值的优化问题, 即：

$$\min f(X) = \max(-f(X)) \quad (5-65)$$

当优化目标是求函数最大值,并且目标函数总取正值时,可以直接设定个体的适应度 $F(x)$ 就等于相应的目标函数值 $f(x)$,即:

$$F(X) = f(X) \quad (5-66)$$

但实际优化问题中的目标函数值有正也有负,优化目标有求函数最大值,也有求函数最小值,显然上面两式保证不了所有情况下个体的适应度都是非负数这个要求。所以必须寻求出一种通用且有效的由目标函数值到个体适应度之间的转换关系,由它来保证个体适应度总取非负值。

为满足适应度取非负值的要求,基本遗传算法一般采用下面两种方法之一将目标函数值 $f(x)$ 变换为个体的适应度 $F(x)$ 。

方法一:对于求目标函数最大值的优化问题,变换方法为:

$$F(X) = \begin{cases} f(X) + C_{\min}, & \text{if } f(X) + C_{\min} > 0 \\ 0, & \text{if } f(X) + C_{\min} \leq 0 \end{cases} \quad (5-67)$$

式中, $C_{\min}$ 为一个适当地相对比较小的数,它可用下面几种方法来选取。

- 预先指定的一个较小的数。
- 进化到当前代为止的最小目标函数值。
- 当前代或最近几代群体中的最小目标函数值。

方法二:对于求目标函数最小值的优化问题,变换方法为:

$$F(X) = \begin{cases} C_{\max} - f(X), & \text{if } f(X) < 0 \\ 0, & \text{if } f(X) \geq C_{\max} \end{cases} \quad (5-68)$$

式中, $C_{\max}$ 为一个适当地相对比较大的数,它可用下面几种方法之一来选取:

- 预先制定的一个较大的数。
- 进化到当前代为止的最大目标函数值。
- 当前代或最近几代群体中的最大目标函数值。

(2) 比例选择算子

选择算子或复制算子的作用是从当前代群体中选择出一些比较优良的个体,并将其复制到下一代群体中。最常用和最基本的选择算子是比例选择算子。所谓比例选择算子,是指个体被选中并遗传到下一代群体中的概率与该个体的适应度大小成正比。

比例选择实际上是一种有退还随机选择,也叫做赌盘(Roulette Wheel)选择,因为这种选择方式与赌博中的赌盘操作原理颇为相似。整个赌盘(如图5-6所示)被分为大小不同的一些扇面,分别对应着价值各不相同的一些赌物品。当旋转着的赌盘自然停下来时,其指针所指扇面上的物品就归赌博者所有。虽然赌盘的指针具体停止在哪一个扇面是无法预测的,但指针指向各个扇面的概率却是可以估计的,它与各个扇面的圆心角大小成正比:圆心角越大,停在该扇面的可能性也越大;圆心角越小,停在该扇面的可能性也越小。与此类似,在遗传算法中整个群体被各个个体所分割,各个个体的适应度在全部个体的适应度之和中所占比例也大小不一,这个比例值瓜分了整个赌盘盘面,它们也决定了各个个体被遗传到下

一代群体中的概率。

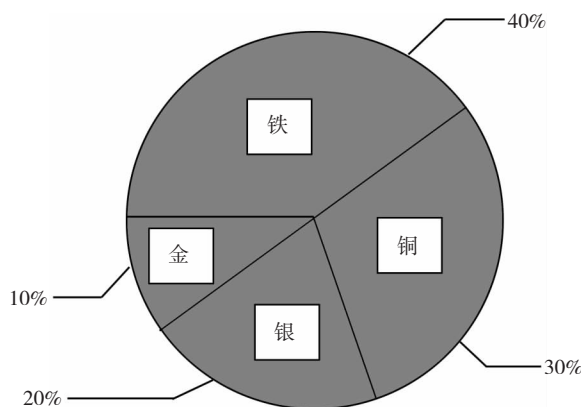


图 5-6 赌盘示意图

比例选择算子的具体执行过程是：

- ① 先计算出群体中所有个体的适应度的总和；
- ② 其次计算出每个个体的相对适应度的大小，即为个体被遗传到下一代群体中的概率；
- ③ 最后再使用模拟赌盘操作（即 0 到 1 之间的随机数）来确定各个个体被选中的次数。

(3) 单点交叉算子

单点交叉算子是最常用和最基本的交叉操作算子。算子的具体执行过程如下：

- ① 对群体中的个体进行两两随机配对

若群体大小为 M ，则共有 $[M/2]$ 对相互配对的个体组。其中 $[x]$ 表示不大于 x 的最大的整数。

② 对每一对相互配对的个体，随机设置某一基因座之后的位置为交叉点。若染色体的长度为 n ，则共有 $(n-1)$ 个可能的交叉点位置。

③ 对每一对相互配对的个体，依设定的交叉概率 p_c 在其交叉点处相互交换两个个体的部分染色体，从而产生两个新的个体。

单点交叉运算的示意如下所示：

$$\begin{array}{rcl}
 \begin{array}{l} A: 10110111 \\ B: 00011100 \end{array} & \xrightarrow{\text{单点交叉}} & \begin{array}{l} A': 10110111 \\ B': 00011100 \end{array} \\
 \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} & & \begin{array}{c} \vdots \\ \vdots \end{array} \\
 \text{交叉点} & &
 \end{array}$$

(4) 基本位变异算子

基本位变异算子是最简单和最基本的变异操作算子。对于基本遗传算法中用二进制编码符号串所表示的个体，若需要进行变异操作的某一基因座上的原有基因值为 0，则变异操作将该基因值变为 1；反之，若原有基因值为 1，则变异操作将其变为 0。

基本位变异算子的具体执行过程是：

- ① 对个体的每一个基因座，依变异概率 p_m 指定其为变异点；
- ② 对每一个指定的变异点，对其基因值做取反运算或用其他等位基因值来代替，从而产生出一个新的个体。

基本位变异运算的示意如下所示：

$A: 1\ 0\ 1\ 0\ \boxed{1}\ 0\ 1\ 0\ 1\ 0 \xrightarrow{\text{基本位变异}} A': 1\ 0\ 1\ 0\ \boxed{0}\ 0\ 1\ 0\ 1\ 0$

变异点

(5) 遗传算法的应用步骤

遗传算法提供了一种求解复杂系统优化问题的通用框架,它不依赖于问题的领域和种类。对一个需要进行优化计算的实际应用问题,一般可按下述步骤来构造求解该问题的遗传算法。

第一步:确定决策变量及其各种约束条件,即确定出个体的表现型 X 和问题的解空间。

第二步:建立优化模型,即确定出目标函数的类型(是求目标函数的最大值还是求目标函数的最小值?)及其数学描述形式或量化方法。

第三步:确定表示可行解的染色体编码方法,也即确定出个体的基因型 X 及遗传算法的搜索空间。

第四步:确定解码方法,即确定出由个体基因型 X 到个体表现型 X 的对应关系或转换方法。

第五步:确定个体适应度的量化评价方法,即确定出由目标函数值 $f(X)$ 到个体适应度 $F(X)$ 的转换规则。

第六步:设计遗传算子,即确定出选择运算、交叉运算、变异运算等遗传算子的具体操作方法。

第七步:确定遗传算法的有关运行参数,即确定出遗传算法的 M 、 T 、 p_c 、 p_m 等参数。

由上述构造步骤可以看出,可行解的编码方法、遗传算子的设计是构造遗传算法时需要考虑的两个主要问题,也是设计遗传算法时的两个关键步骤。对不同的优化问题需要使用不同的编码方法和不同操作的遗传算子,它们与所求解的具体问题密切相关,因而对所求解问题的理解程度是遗传算法应用成功与否的关键。

图 5-7 所示为遗传算法的主要构造过程示意图。

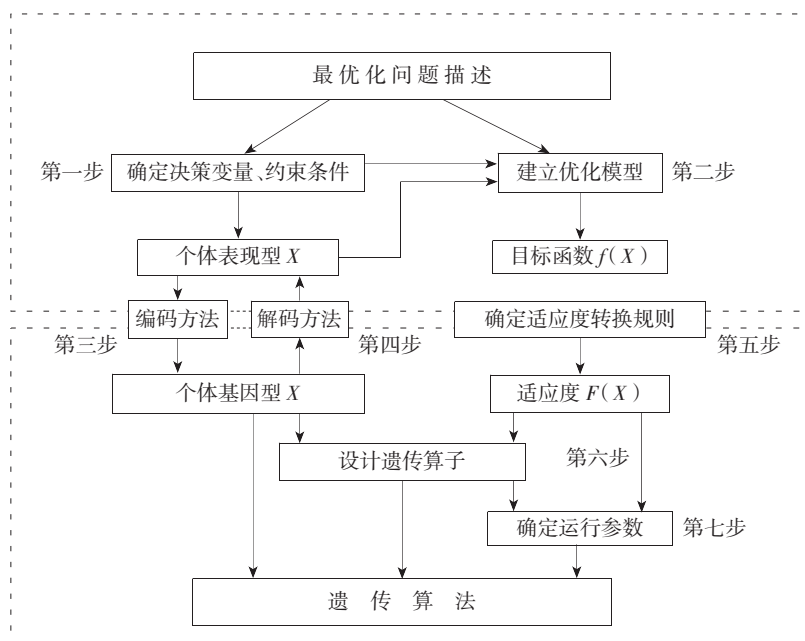


图 5-7 遗传算法的主要构造过程示意图

二、遗传算法管理模型

遗传算法是一种优化算法,将其应用于水环境系统的各种管理模型中就形成了遗传算法水环境系统的管理模型。在此,以例子予以说明。

(一) 分布参数地下水管理模型的遗传算法研究^[11]

地下水管理模型是地下水科学管理的有效工具,它运用优化方法,给出系统目标的最优决策方案。1959年 Todd^[12] 提出了地下水管理的概念,1970年 Maddock^[13] 提出线性地下水系统的单位脉冲响应函数,并用响应矩阵法建立了分布参数地下水水力管理模型;1974年 Aguada^[14] 将地下水有限单元模型与线性规划结合,用嵌入法建立了地下水管理模型。20世纪80年代以来,随着水资源短缺以及不合理使用产生的问题日益突出,地下水管理问题受到重视,管理模型研究得到了长足的进展。地下水问题涉及社会、经济、环境、技术等方面,因而管理模型往往具有多目标、多层次、非线性、大系统特点。因此,寻求对各类复杂地下水管理模型的求解方法,成为该研究领域的一个重要方面。非线性地下水管理模型是研究的难点和热点。基于梯度的寻优方法,目前尚无通用的、有效的求解方法。由于遗传算法是一种基于生物进化原理的全局优化方法,可解决非线性、不连续的优化问题,在这里将讨论该算法在分布参数地下水管理模型中的应用。

1. 分布参数地下水管理模型

分布参数系统的参数以及系统的输入、输出与空间位置有关。分布参数地下水系统的水力状态方程为:

$$\operatorname{div}(K \cdot \operatorname{grad} \varphi) + q = S \frac{\partial \varphi}{\partial t} \quad (5-69)$$

其中:

φ —— 地下水位, (m);

K —— 含水层的渗透系数, (m/d), $K = (K_x, K_y, K_z)$;

S —— 含水层的重力给水度(无压含水层)或弹性给水度(承压含水层);

q —— 系统的源点或汇点。

上式加入初始和边界条件,即形成地下水流体的定解问题。可采用数值方法,如有限单元法、有限差分法或边界元法建立模拟模型。其目的是:① 用已有观测数据对地下水系统进行识别;② 给定系统输入,预测地下水状态;③ 与管理模型耦合,控制地下水状态。

对于单目标分布参数地下水管理模型,一般可表示为:

$$\begin{aligned} \min z &= f(X, \varphi) \\ \text{s. t. } &\begin{cases} g_i(X, \varphi) = 0, (i = 1, 2, \dots, n) \\ w(X, \varphi) = 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (5-70)$$

其中:

X —— 决策变量向量,包括工程设施变量、产业结构变量以及地下水开采有关的运行决策变量;

φ —— 地下水系统的状态变量,如水位;

$g_i(X, \varphi) = 0$ 为 n 个约束条件, 如资源、需求、环境等方面的约束;

$w(X, \varphi) = 0$ 为地下水均衡约束, 即地下水的状态方程式(5-69)。对于分布参数系统, 可运用解析法或数值法建立模拟模型, 表示地下水系统的输入—输出关系。

有两种方法将模拟模型耦合到地下水管理模型之中。嵌入法将模拟模型整体(如有限单元法所形成的线性方程组)作为管理模型的等式约束, 隐式给出地下水系统的输入—输出关系。如果目标函数和其他约束条件都是线性的, 则可用线性规划求解。该方法的优点是简单直观, 直接将模拟模型耦合到管理模型之中, 误差小; 缺点是对于解决离散点多、多时段的管理问题, 管理模型的状态变量和约束条件过多, 模型规模大, 以至于数学上难以求解。响应矩阵法假设地下水系统为线性的, 用模拟模型求出地下水系统的单位脉冲响应函数, 地下水系统状态表示为决策变量的线性组合, 称之为代数技术函数^[13], 显式给出了系统输入—输出关系。该方法只将所需控制点的代数技术函数作为约束条件, 与嵌入法相比, 模型规模大大减小, 是目前解决实际问题时被广泛应用的方法。但当地下水系统为高度非线性时, 通过线性化处理所求出的单位脉冲响应函数误差很大。对于这种情况, 用嵌入法建立管理模型较为合理。

当管理模型(5-70)为线性时, 可用线性规划求解; 当为非线性时, 传统的数学规划方法无通用的求解方法。大部分地下水系统以及所建立的管理模型为非线性的, 因此研究非线性分布参数地下水管理模型的求解方法具有普遍意义。

2. 实例

羊庄盆地位于山东省西南, 为一完整的岩溶水系统, 汇流区面积 160km^2 。为了对地下水位进行预调和控制, 用有限单元法建立了汇流区平面二维地下水流模拟模型, 共剖分 175 个结点、301 个单元。

以模拟区内 3 个水源地总抽水量最大为目标, 约束条件是为了控制水位下降并保证一定的供水量。采用嵌入法建立分布参数地下水管理模型, 将有限单元模拟模型耦合到遗传算法中求解。作为比较, 用响应矩阵法建模, 用线性规划求解。结果证明(表 5-15), 两种算法所得解、最优值以及地下水流场十分接近, 说明遗传算法可用于解决分布参数地下水管理模型。

表 5-15 两种算法优化抽水量计算结果比较

结点	水源地	抽水量 / $10^4\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$	
		遗传算法	单纯形法
11	龙山头	1.98	2.10
37	魏庄	2.16	2.65
50	魏庄	3.30	2.65
53	羊庄	9.68	9.70
111	后石湾	1.20	1.00
130	后石湾	0.70	1.00
总计		19.02	19.10

此外, 还建立了以抽水费用最低为目标的管理模型。非线性目标函数为:

$$\min z \sum_{k=1}^T \sum_{i=1}^m \frac{1}{(1+r)^k} CQ_i (D_i - h_i)$$

其中:

m ——抽水井点总数,此处 $m = 28$;

T ——管理期限, $T = 15$;

r ——折旧率;

Q_i ——决策变量,即各井点地下水开采量(m^3/d);

D_i ——第 i 结点地面标高, (m);

h_i ——井水位标高, (m);

$D_i - h_i$ ——水泵扬程;

C ——将单位体积的地下水量提升单位高度所需费用, (元/ $\text{m}^3 \cdot \text{d}$)。

管理模型的约束条件主要有:(1) 水均衡约束。将所建立的分布参数岩溶水系统数学模型作为水均衡约束,直接代入管理模型之中;(2) 水位约束。对各结点水位降深及泉排量进行约束;(3) 水量约束。对各水源地开采量进行约束。目标函数和约束条件共同构成羊庄岩溶水系统水资源经济管理模型。根据遗传算法进行运算求解。优化结果表明,用遗传算法可以很好地解决动态非线性地下水管理问题,充分体现了遗传算法的广泛适用性。

(二) 遗传算法在水污染控制系统规划中的应用^[15]

在水污染控制系统规划中研究最多、技术上最为成熟的一类问题就是排放口最优化处理问题,下面就以这类问题作为主要研究对象。

1. 排放口最优化处理的数学模型

排放口最优化处理是在一定的水质约束和技术约束条件下,寻求各污水处理厂最佳处理效率的组合。这个问题的基础是各污染源的污水处理规模不变,通过调整各个处理厂的处理效率,使得整个区域的污水处理费用最低,这里根据所研究的堵河沿岸 3 个主要排污口污水处理效率的最优化问题,其数学模型表达如下:

$$\min F = 927.327\eta_1^2 + 461.134\eta_2^2 + 861.514\eta_3^2 + 449.995 \text{ 万元}$$

$$s. t. \begin{cases} \eta_1 \geq 0.899, \\ \eta_2 + 4.717\eta_1 - 5.077 \geq 0 \\ \eta_3 + 0.767\eta_1 + 0.163\eta_2 - 0.848 \geq 0 \\ 0 \leq \eta_i \leq 1, (i = 1, 2, 3) \end{cases}$$

其中:

η_i ——第 i 个排放口的污水处理效率。

此非线性规划模型是个典型的二次规划问题,采用二次规划算法,求得其精确最优解为:

$$\eta_1 = 0.987, \eta_2 = 0.421, \eta_3 = 0.023, F_{\min} = 1435.447 \text{ 万元}$$

2. 用遗传算法求解排放口最优化处理问题

应用遗传算法求解堵河的排放口最优化处理问题,目标函数与约束条件均不变,具体步骤如下:

(1) 整理模型

此模型为一有约束的非线性规划模型,而遗传算法一般只能直接求解无约束优化问题,

因此,采用罚函数的办法将约束条件纳入原目标函数中,得出新的目标函数.以 F 表示原目标函数, S_1 、 S_2 、 S_3 分别表示约束集中的前 3 个约束条件,最后一个处理效率的上下限约束将在随后的编码步骤中考虑,在此可暂时不讨论.这样可得一个新的目标函数:

$$\min\{F' = F + \sum_{i=1}^3 M_i\}$$

$\forall i$,若满足约束 S_i ,则 $M_i = 0$,否则 $M_i = 10000.0$ 。

(2) 确定编码方式

模型中共有 3 个决策变量,即 3 个排污口的污水处理效率,由约束可知, $0 \leq \eta_i \leq 1$,因此可用一个 10 位的二进制串表示一个变量,这样在区间 $[0,1]$ 中可得 $2^{10} = 1024$ 个离散点,每个点的取值为:

$$X_j = \frac{1}{1024-1} \times (j-1), (j = 1, 2, \dots, 1024)$$

由于有 3 个决策变量,所以总共需 30 位二进制串表示一个解,我们的任务就是要求出这个由 1024^3 个解组成的解空间中的最优解.虽然这个最优解不一定是原问题伪精确最优解,但它至少将非常接近于精确最优解.事实上,若要追求更高的精度并不难,可采用更多位的二进制串表示一个变量.所以从理论上讲,遗传算法求得的最优解可无限逼近精确最优解,当然精度越高,计算工作量就越大.对排放口最优化处理问题而言,将区间 $[0,1]$ 均匀离散为 1024 个点,其精度已足以满足要求。

(3) $t = 0$ 时,随机产生包括 100 个染色体的初始种群。

(4) 对 100 个染色体进行解码,然后根据目标函数 F' 对它们进行评价,若 100 个解中的最优解连续 10 代保持不变,而且种群的平均适应度在连续 10 代中变化小于 10^{-8} ,则转第(9)步,否则转第(5)步。

(5) 根据染色体的适应度进行选种,共选出 50 对染色体。

(6) 进行杂交,产生 100 个新染色体。

(7) 以概率 $p_m = 0.02$ 从 100 个新染色体中选取 2 条染色体进行突变操作。

(8) $t = t + 1$ 时,转入第④步。

(9) 得出最优解,计算终止。

在此,得出的最优解如下:

$$\eta_1 = 0.988, \eta_2 = 0.415, \eta_3 = 0.023, F_{\min} = 1435.720 \text{ 万元}$$

显然,此解与用二次规划算法求得的精确最优解十分接近,目标函数值的相对误差仅为 0.019%,足以满足工程规划的精度要求。

当然,也可将遗传算法应用于其他的非线性规划问题的求解中。

以上各小节分别结合具体的例子介绍了线性规划、非线性规划、动态规划和遗传算法管理模型.在今后的水环境系统管理中,可以将更多的先进的管理技术和方法引入,从而建立更加合理的管理模型,实现系统目标的最优化。

参 考 文 献

- [1]童季贤. 污水治理控制工程中的一个数学模型. 西南交通大学学报, 1997, 32(6): 683—687
- [2]李波. 线性规划在滇池草海污染目标控制优化决策中的应用. 云南环境科学, 1997, 16(3): 7—9
- [3]庞煜, 龙腾锐, 张承刚等. 非线性规划在活性污泥法系统方案优化设计中的应用. 给水排水, 2004, 30(3): 31—35
- [4]方乐润. 动态规划及其在水资源工程中的应用(一). 黑龙江水专学报, 1997, 3: 1—6
- [5]李树文, 金瞰昆, 孟文芳等. 水资源系统的动态管理模型与应用. 河北建筑科技学院学报, 2000, 17(2): 54—56
- [6]中国人民大学数学教研室. 运筹学通论[M]. 北京: 中国人民大学出版社, 1987
- [7]J. Bear. Hydraulics of Groundwater[M]. Rotterdam; A. A. Balkma, 1979
- [8]周明, 孙树栋. 遗传算法原理及应用. 北京: 国防工业出版社, 1999
- [9]王小平, 曹立明. 遗传算法——理论、应用与软件实现. 西安: 西安交通大学出版社, 2002
- [10]Goldberg D E. Genetic algorithms in Search, Optimization and Machine Learning. Addison—Wesley, 1989
- [11]崔亚莉, 邵景力, 魏加华. 分布参数地下水管理模型的遗传算法研究. 现代地质, 1999, 13(3): 363—366
- [12]Todd D K. Ground water hydrology. New York; John Wiley, 1959
- [13]Maddock T III. Algebraic technological function from a simulation model. Water resource Res, 1972, 8(1): 129—134
- [14]Aguada E. Rernson I. Groundwater hydraulics in aquifer management. J Hydrsul Div Am Soc Civ Eng, 1974, 100(HY1): 103—118
- [15]刘首文, 冯尚友. 遗传算法及其在水污染控制系统规划中的应用. 武汉水利电力大学学报, 1996, 29(4): 95—99

第六章 随机模拟模型及求解方法

随机模拟方法通常是将影响水环境组成因子变化的因素或因子变化过程的本身看作一个离散的随机过程,采用一系列随机方法进行模拟预测。随机模拟方法主要是采用数学方法研究水环境系统,一般并没有考虑影响水环境系统变化的物理、化学和生物等因素,没有阐明其变化的内在机理,但由于采用随机模拟模型一般是针对某一个特定的水环境系统,加之其理论自身的完善性,常常在模拟水环境中也能取得较好的效果。因此,随机模拟模型也被大量地应用对水环境系统的模拟预测中。

第一节 概 述

建立数学模型、进行定量分析计算(其中也包含计算机模拟和优化技术)是近代工程,包括实验室模型技术的主要方法。然而,不管模拟的精度如何,它们总是在一些理想化的假定或条件下进行预测或估算的。于是所获得的资料就未必能完全反映真实的情况。

在实际的水环境系统模拟中,水环境因素变化受复杂的自然因素影响,许多与自然过程或自然现象有关的现象本身就具有随机的性质,因此采用确定性的观点来处理可能会引起一些结果的偏离。当这些随机因素的影响不可忽略时,采用随机方法进行处理可能会得到更好的模拟效果。

马尔可夫法是一种随机过程预测法,其状态和时间参数都是离散的,可以用于描述某种复杂系统状态的转移。马尔可夫法的特点是:无需依据大量的历史统计资料而通过对近期情况的分析可以预测出将来的情况,为制定长远规划和对策提供参考信息。目前,采用马尔可夫法进行未来状态的预测,取得了较好的效果。

人工神经网络(Artificial Neural Networks,简记作 ANNs),是对人类大脑系统的一种描述;它是一个并行、分布处理结构,它由处理单元及信号通道互连而成;它也是一个数学模型,可以用电子线路来实现,也可以用计算机程序来模拟。它具有通过学习获取知识解决问题的能力,是人工智能的一种重要研究方法。随着计算机技术的不断发展,特别是在人工智能领域研究的不断深入,人工神经网络作为一种重要的研究方法将会与水环境系统模拟结合得更加紧密。

非线性科学发展迅速,近年来最重要的两个体系是分形理论和混沌理论,人们把分形理论、耗散理论和混沌理论称为 20 世纪科学史上的三大发现,混沌和分形这两个理论既有相对的独立性,其相互之间又有一定联系。混沌理论揭示了客观世界系统结构或系统行为有序与无序的相对性,它从动力学观点研究不可积系统轨道的不稳定性,有助于消除确定论和随机论两套对立理论体系的鸿沟。

分形理论创立于 20 世纪 70 年代,其研究对象是自然界和社会活动中广泛存在的无序(无规则)而具有自相似性的系统。分形理论借助于自相似原理,考察隐藏于混乱现象中的精细结构;为人们从局部认识整体、从有限认识到扩展认识提供新的方法;同时也为现代科

学技术提供新的思想和方法。

第二节 马尔可夫法

一、马尔可夫法基本概念

(一) 马尔可夫过程

马尔可夫过程是研究某一事件的状态及状态之间转移规律的随机过程,是随机过程的一个分支。其最基本的特征是“无后效性”,即已知某一随机过程在“现在”的条件下,其“将来”与“过去”是相互独立的,也即某一序列将来的状态或取值只与它现在的状态及取值有关,而与以前状态无关,它是一个时间和状态离散的时间序列。马尔可夫过程可以定义如下^{[1][2]}:给定随机过程 $\{X(t), t \in T\}$,如果对于参数中任意 n 个时刻 $t_i, i = 1, 2, \dots, n, t_1 < t_2 < \dots < t_n$,有

$$\begin{aligned} P\{X(t_n) < x_n \mid X(t_1) = x_1, X(t_2) = x_2, \dots, X(t_{n-1}) = x_{n-1}\} \\ = P\{X(t_n) < x_n \mid X(t_{n-1}) = x_{n-1}\} \end{aligned} \quad (6-1)$$

其中, $x_1, x_2, \dots, x_n$ 为相应时刻 $t_1, t_2, \dots, t_n$ 时对 $X(t)$ 的观测值。

一个马尔可夫过程相当于一组轨道,当在其所有过去的观测值一致的条件下,在规定时刻状态值的条件概率只与最近过去值相关,而与到达此过去值的历史无关。若假定一个马尔可夫过程 $\{x_n, n \in T\}$,其参数集 T 为离散时间序列: $T = \{1, 2, \dots, n\}$,则相应 x_n 可能取值的全体组成的状态空间是一离散的状态集 $E = \{x_i, i = 1, 2, \dots, n\}$ 。

(二) 马尔可夫链^[1]

设 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \dots\}$ 为随机序列,其状态空间为 $E = \{0, 1, 2, \dots\}$ 。如果对于任意非负整数 k 及 $n_1 < n_2 < \dots < n_l < m$ 以及 $i_{n_1}, i_{n_2}, \dots, i_{n_l}, i_m, i_{m+k} \in E$,其马尔可夫性

$$\begin{aligned} P\{X(m+k) = i_{m+k} \mid X(n_1) = i_1, \dots, X(n_l) = i_{n_l}, X(m) = i_m\} \\ = P\{X(m+k) = i_{m+k} \mid X(m) = i_m\} \end{aligned} \quad (6-2)$$

成立,则称 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \dots\}$ 为离散参数马尔可夫链,简称为马氏链。马氏链是马尔可夫过程的一种特殊情况,它表明事物的状态由过去转变为现在,又由现在向将来发展,就像一根链条一样一环接一环,没有后效性。

(三) 转移概率^[1]

设 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \dots\}$ 为马尔可夫链, $E = \{0, 1, 2, \dots\}$,称条件概率

$$P_{ij}(m, k) = P\{X(m+k) = j \mid X(m) = i\} \quad (6-3)$$

为马氏链 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \dots\}$ 在 m 时刻的 k 步转移概率。其直观意义为质点于 m 时刻处于状态 i ,再经过 k 步或 k 个单位时间后处于状态 j 的条件概率。特别地,当 $k = 1$ 时, $P_{ij}(m, 1) = P\{X(m+1) = j \mid X(m) = i\}$ 称为一步转移概率,简称为转移概率。将矩阵称为马氏链 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \dots\}$ 在时刻 m 时的 k 步转移矩阵,而将一步转移矩阵 $P(m, 1)$ 简称为转移矩阵。

$$P(m, k) = (p_{ij}(m, k)) (i, j \in E) = \begin{bmatrix} p_{00}(m, k) & p_{01}(m, k) & \cdots & p_{0n}(m, k) & \cdots \\ p_{10}(m, k) & p_{11}(m, k) & \cdots & p_{1n}(m, k) & \cdots \\ \cdots & \cdots & & \cdots & \\ p_{n0}(m, k) & p_{n1}(m, k) & \cdots & p_{nm}(m, k) & \cdots \end{bmatrix}$$

(四) 齐次马尔可夫链^[1]

若马氏链 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \cdots\}$ 的转移概率 $p_{ij}(m, k)$ 与 m 无关,即有下式

$$\begin{aligned} p_{ij}(m, k) &= P\{X(m+k) = j \mid X(m) = i\} = p_{ij}(k) \\ p_{ij}(m, 1) &= P\{X(m+1) = j \mid X(m) = i\} = p_{ij}(1) \end{aligned} \quad (6-4)$$

成立,则称马氏链 $\{X(n), n = 0, 1, 2, \cdots\}$ 为齐次马尔可夫链,简称齐次马氏链。其 k 步转移矩阵记为 $P(m, k) = P(k) = (p_{ij}(k)) \quad ij \in E$

齐次马尔可夫链的转移概率性质如下:

$$\textcircled{1} 0 \leq p_{ij}(k) \leq 1, \sum_{j \in E} p_{ij}(k) = 1; \textcircled{2} p_{ij}(k+l) = \sum_{r \in E} p_{ir}(k) \cdot p_{rj}(l)$$

二、马尔可夫水质预测模型

(一) 非加权式马尔可夫水质预测模型

1. 模型的建立

假设初始时刻 $t = 0$ 时事件处于状态 i 的概率为 $P_i(0)$,从状态 i 转移到状态 j 的概率为 P_{ij} ,在 $t = 1$ 时处于状态 j 的概率为 $P_j(1)$,则有 $P_j(1) = P_i(0)P_{ij}$ 。

同理可得: $P_j(n+1) = P_i(n)P_{ij}$

若在 $t = n$ 时刻事件有 $1, 2, \cdots, N$ 种状态,则该事件在 $t = n+1$ 时转入状态 j 的概率为

$$P_j(n+1) = P_1(n)P_{1j} + P_2(n)P_{2j} + \cdots + P_N(n)P_{Nj} = \sum_{i=1}^N P_i(n)P_{ij}; (i, j = 1, 2, \cdots, N)$$

称 $P(0) = (P_1(0), P_2(0), \cdots, P_N(0))$ 为初始状态概率向量,其中 $\sum_{j=1}^N P_j(0) = 1$,且

$$P(n) = (P_1(n), P_2(n), \cdots, P_N(n))$$

则非加权式马尔可夫预测模型可表示为:

$$P(n+1) = P(n) \times P \quad (6-5)$$

$$\text{其中, } P = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1N} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2N} \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ P_{N1} & P_{N2} & \cdots & P_{NN} \end{bmatrix}$$

由切普曼—柯尔莫哥洛夫(Chapman—Kologorov)方程^[3]可以导出 n 步转移概率公式,得

$$P(n) = P_{(0)} \times P^n \tag{6-6}$$

2. 概率转移矩阵 P 的构造

一般地,对某观测断面的某观测指标,其实测数据可构成原始时间序列 $\{X(q)\} = \{X(1), X(2), \dots, X(q), \dots\}$, (其中 q 为实测数据 $X(q)$ 的观测时刻)。根据预报内容的特点和实际要求,可将上述实测值划分为 N 个区间,得到状态空间 $Q = \{1, 2, \dots, N\}$ 。假设已知时刻为 $y_1, y_2, \dots, y_m$, m 时段中水体某水质指标为状态 i 的总数是 M_i , 第 y_m 时刻水质指标为状态 i 的数目是 m_i 。则应有不等关系存在: $0 \leq m_i \leq 1; 0 \leq M_i \leq m; 1 \leq i \leq N$ 。

再设这 m 时段中相邻时刻各段面水质指标由状态 i 变为状态 j 的总数是 n_{ij} , 则有 $0 \leq n_{ij} \leq m - 1$, (其中 $i, j = 1, 2, \dots, N$)。令 $P_{ij} = n_{ij} / (M_i - m_i)$, 则 P_{ij} 满足:

$$(1) 0 \leq P_{ij} \leq 1, i, j = 1, 2, \dots, N; (2) \sum_{i=1}^N P_{ij} = 1, i = 1, 2, \dots, N$$

至此,水质预测非加权式马尔可夫过程模型的状态概率转移矩阵构造完成。

3. 应用

以淮河安徽段的水质模型为例,对本方法作一应用介绍,选取淮河安徽段石头埠监测站点 2001 年的溶解氧 20 周监测值作实例分析,溶解氧值(浓度单位为 mg/L) 和状态见表 6-1。

表 6-1 溶解氧周监测值及状态

时段	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
DO	7.14	8.01	7.62	7.75	6.71	7.08	6.77	6.01	5.66	4.1
状态	2	1	1	1	2	2	2	2	3	3
时段	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
DO	4.44	3.9	2.64	3.16	3.63	3.17	1.37	3.45	3.48	3.28
状态	3	4	5	4	4	4	5	4	4	4

(1) 数据处理及模型的建立

参照 GB3838-2002 的五类水质标准,将 DO 浓度序列分为五个级别,某些级别数据根据 DO 实际浓度分布进行了调整。见下表:

表 6-2 DO 状态分类

状态	1	2	3	4	5
数值区间	$x \geq 7.5$	$6 \leq x < 7.5$	$4 \leq x < 6$	$3 \leq x < 4$	$x < 3$

以 1-17 周的数据为基础,预测后 3 周的状态。根据前 17 周的状态分类,可得:

$$\begin{aligned} n_{11} &= 2 & n_{12} &= 1 & n_{13} &= 0 & n_{14} &= 0 & n_{15} &= 0 & M_1 &= 3 & m_1 &= 0 \\ n_{21} &= 1 & n_{22} &= 3 & n_{23} &= 1 & n_{24} &= 0 & n_{25} &= 0 & M_2 &= 5 & m_2 &= 0 \\ n_{31} &= 0 & n_{32} &= 0 & n_{33} &= 2 & n_{34} &= 1 & n_{35} &= 0 & M_3 &= 3 & m_3 &= 0 \\ n_{41} &= 0 & n_{42} &= 0 & n_{43} &= 0 & n_{44} &= 2 & n_{45} &= 2 & M_4 &= 4 & m_4 &= 0 \\ n_{51} &= 0 & n_{52} &= 0 & n_{53} &= 0 & n_{54} &= 1 & n_{55} &= 0 & M_5 &= 2 & m_5 &= 1 \end{aligned}$$

$$\text{构造出的状态转移矩阵为: } P = \begin{vmatrix} 2/3 & 1/3 & 0 & 0 & 0 \\ 1/5 & 3/5 & 1/5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2/4 & 2/4 \\ 0 & 0 & 0 & 1/1 & 0 \end{vmatrix}$$

(2) 模型预报

以第 17 周为基准, 预测 18—20 周的 DO 浓度变化趋势, 取 $P(0) = (0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1)$, 由预报模型分别得到 18—20 周的 DO 浓度变化趋势见表 6-3。

表 6-3 18—20 周的 DO 浓度变化的状态向量

预报周	$P(n)$	状态向量					Σ
		1	2	3	4	5	
18	$P(1)$	0	0	0	1	0	1.000
19	$P(2)$	0	0	0	0.500	0.500	1.000
20	$P(3)$	0	0	0	0.750	0.250	1.000

(3) 模型可靠性检验

从表 6-3 可以看出, 第 18 周、19 周和 20 周的 DO 状态分别为状态 4、介于状态 4 和 5 之间、状态 4, 对照表 6-1 可知预测正确。总体来看, 马尔可夫预测模型的可信度还是较高的, 但为了保证其预测的准确性, 应该及时为模型增加信息, 这对通过较少数据建立的模型来说更加重要。

(二) 加权式马尔可夫水质预测模型

由于各阶自相关系数能够刻画各种滞时下的水质指标间的相关关系及其强弱程度, 因此可以考虑先分别依据前面若干时段的水质指标对该时段指标进行预测, 然后按照前面各时段与该时段的相应关系的强弱加权求和, 这就是加权马尔可夫链的预测思想^[4]。采用加权马尔可夫思想进行预测可以充分利用已有信息, 达到合理预测的目的。

1. 加权马尔可夫预测的基本步骤

基于以上思路, 加权马尔可夫预测实现的基本步骤可分为:

- (1) 计算水质指标序列的各阶自相关系数 r_k ;
- (2) 对各阶自相关系数进行归一化处理, 并将处理后的系数作为各种滞时(步长)的马尔可夫链的权重;
- (3) 对水质指标的监测指按照标准确定各时段指标的状态;
- (4) 按前述方法计算各种滞时下的转移矩阵;
- (5) 根据状态矩阵结合权重进行预测。

2. 实例分析

取石头埠监测站点 2001 年的溶解氧 20 周监测值, 溶解氧值(浓度单位为 mg/L) 和状态同表 6-1。

取 1—17 周作预测, 18—20 周作检验。

- (1) 由于序列本身并不长, 阶数取得过高意义并不显著, 为说明加权马尔可夫方法, 取 3

阶进行计算,自相关系数分别为: $r_1 = 0.782, r_2 = 0.639, r_3 = 0.529$

(2) 将各阶自相关系数归一化后作为各种滞时的马尔可夫链的权重,分别为 $\omega_1 = 0.401, \omega_2 = 0.328, \omega_3 = 0.271$

(3) 参照 GB3838—2002 的五类水质标准,将 DO 浓度序列分为五个级别,同表 2-2。

(4) 经计算得到各种滞时的转移矩阵,如下:

$$P_1 = \begin{vmatrix} 2/3 & 1/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 3/5 & 1/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 & 0/3 \\ 0/4 & 0/4 & 0/4 & 2/4 & 2/4 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix} \quad P_2 = \begin{vmatrix} 1/3 & 2/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 2/5 & 2/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0/3 & 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix}$$

$$P_3 = \begin{vmatrix} 0/3 & 3/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 1/5 & 3/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 \\ 0/2 & 0/2 & 0/2 & 1/2 & 1/2 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix}$$

(5) 根据第 15,16,17 周的 DO 浓度及其相应的状态转移矩阵对第 18 周的 DO 状态进行预测,结果见表 6-4。

表 6-4 第 18 周 DO 状态预测

初始周	滞时(周)	初始状态	状态	1	2	3	4	5
			权重					
17	1	5	0.401	0/1	0/1	0/1	1/1	0/1
16	2	4	0.328	0/3	0/3	0/3	2/3	1/3
15	3	4	0.271	0/2	0/2	0/2	1/2	1/2
P_i 加权求和				0	0	0	0.755	0.245

知第 18 周状态为 4,查表得确为 4。将第 18 周的状态代入,以第 16—18 周的状态对第 19 周进行预测,转移矩阵分别为:

$$P'_1 = \begin{vmatrix} 2/3 & 1/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 3/5 & 1/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 & 0/3 \\ 0/4 & 0/4 & 0/4 & 2/4 & 2/4 \\ 0/2 & 0/2 & 0/2 & 2/2 & 0/2 \end{vmatrix} \quad P'_2 = \begin{vmatrix} 1/3 & 2/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 2/5 & 2/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0/4 & 0/4 & 0/4 & 3/4 & 1/4 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix}$$

$$P'_3 = \begin{vmatrix} 0/3 & 3/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 1/5 & 3/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 \\ 0/2 & 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix}$$

将加入第 18 周后的序列重新计算自相关系数,并归一化,得 $\omega_1 = 0.411, \omega_2 = 0.323, \omega_3 = 0.266$ 。根据第 16, 17, 18 周的 DO 浓度及其相应的状态转移矩阵对第 19 周的 DO 状态进行预测,结果见表 6-5。

表 6-5 第 19 周 DO 状态预测

初始周	滞时(周)	初始状态	状态 权重	1	2	3	4	5
18	1	4	0.411	0/4	0/4	0/4	2/4	2/4
17	2	5	0.323	0/1	0/1	0/1	1/1	0/1
16	3	4	0.266	0/3	0/3	0/3	2/3	1/3
P_i 加权求和				0	0	0	0.706	0.294

判断第 19 周 DO 状态为 4,经查表知第 19 周 DO 的状态确为 4。将第 19 周的状态代入,以第 17—19 周的状态对第 20 周进行预测,转移矩阵分别为:

$$P''_1 = \begin{vmatrix} 2/3 & 1/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 3/5 & 1/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 & 0/3 \\ 0/5 & 0/5 & 0/5 & 3/5 & 2/5 \\ 0/2 & 0/2 & 0/2 & 2/2 & 0/2 \end{vmatrix} \quad P''_2 = \begin{vmatrix} 1/3 & 2/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 2/5 & 2/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 1/3 & 1/3 & 1/3 \\ 0/4 & 0/4 & 0/4 & 3/4 & 1/4 \\ 0/2 & 0/2 & 0/2 & 2/2 & 0/2 \end{vmatrix}$$

$$P''_3 = \begin{vmatrix} 0/3 & 3/3 & 0/3 & 0/3 & 0/3 \\ 1/5 & 1/5 & 3/5 & 0/5 & 0/5 \\ 0/3 & 0/3 & 0/3 & 2/3 & 1/3 \\ 0/4 & 0/4 & 0/4 & 3/4 & 1/4 \\ 0/1 & 0/1 & 0/1 & 1/1 & 0/1 \end{vmatrix}$$

将加入第 19 周后的序列重新计算自相关系数,并归一化,得 $\omega_1 = 0.398, \omega_2 = 0.337, \omega_3 = 0.266$ 。根据第 17, 18, 19 周的 DO 浓度及其相应的状态转移矩阵对第 20 周的 DO 状态进行预测,结果见表 6-6。

表 6-6 第 20 周 DO 状态预测

初始周	滞时(周)	初始状态	状态	1	2	3	4	5
			权重					
19	1	4	0.398	0/5	0/5	0/5	3/5	2/5
18	2	4	0.337	0/4	0/4	0/4	3/4	1/4
17	3	5	0.266	0/1	0/1	0/1	1/1	0/1
P_i 加权求和				0	0	0	0.758	0.242

判断第 20 周 DO 状态为 4, 经查表知第 20 周 DO 的状态确为 4。

三、讨论

1. 无论是非加权式马尔可夫模型还是加权式马尔可夫模型, 都不能准确地预测未来时间段中预测指标的具体数值, 而只能给出一个状态区间, 该状态区间反映了指标的变化趋势。但可以设想如果对状态区间不断细分, 则采用马尔可夫模型确定指标的变化状态区间可不断向具体数值趋近。

2. 当数据量较小时, 往往所作出的转移矩阵并不能真实地反映出变化趋势, 状态矩阵随机性较强, 数据越少越易受到单个样本值的影响, 可能会出现真实变化概率较小而转移概率反而大的异常现象。因此, 为了能更准确的构造状态转移矩阵, 应尽可能多地收集资料, 以更真实地反映变化趋势。

3. 对于非加权式马尔可夫模型, 单步预测可能会受到基准年份状态的影响, 若取的基准年份状态较异常, 可能影响预测效果, 所以在资料较充足的情况下可以采取多基准年份迭加预测的方法增加预测精度。

4. 对于加权式马尔可夫模型, 在预测中考虑了不同滞时下的状态转移, 用归一化后的自相关系数做权重可以比较充分地利用现有数据, 达到较合理的预测目的。

第三节 人工神经网络

一、人工神经网络概述

当今科学技术发展的重要标志之一是采用计算机代替人脑的部分劳动, 现代计算机的电子元件运算速度为纳秒(10^{-9} 秒) 级, 比人脑神经细胞毫秒(10^{-3} 秒) 级的反应时间要快得多; 但在图像识别、判断、联想、记忆回溯、语言理解和决策等方面人脑往往只需一秒左右即可完成复杂的处理, 而现有任何计算机决不可能在如此时间限制中完成类似任务, 所以人们希望能得到一种既可高速运算又可拥有类似人类决策识别能力的新型处理系统, 人工神经网络也就应运而生。

所谓人工神经网络(Artificial Neural Network, 简称 ANN) 是一种在模拟大脑神经网络结构和功能基础上所构建的信息处理网络, 也可以看作是对人脑神经网络构建的理论化的数学模型。人工神经网络是由大量简单元件相互连接而成的复杂网络系统, 具有高度的非线性, 因而可以进行复杂的逻辑操作和非线性关系的实现等功能^[5]。

(一) 人工神经网络生物学基础

人工神经网络^{[5][6]}是在对人脑神经网络系统模拟基础上产生的,为深入认识其原理,有必要对其生物学原型进行了解。

1. 人脑神经系统结构

自生命诞生以来,生物脑神经系统经过漫长发展特别是人类直立行走以后,使人脑的神经系统达到了高度的智能。人脑可分为左、右两个半球,称为大脑,担负认知、语言、记忆等功能;其后部的一小块称为小脑担负高级运动控制等功能。大、小脑表面覆盖一层脑皮质,下面连接有众多的神经纤维。神经纤维是人脑的重要组成部分,在脑与感觉器官、运动器官之间起联络作用,包括上行性和下行性神经。

2. 神经元

神经系统的基本构造单元是神经细胞,也即神经元,一个复杂的神经网络是由各种类型不同的神经元按不同的结合方式构成的。通过神经元的可塑性使人脑具有学习、记忆和认知等不同的智能行为。每个神经元包含三个主要组成部分:细胞体、树突和轴突(也称为轴索),在两个神经细胞之间的相互接触点称为突触,神经网络图参见图 6-1。

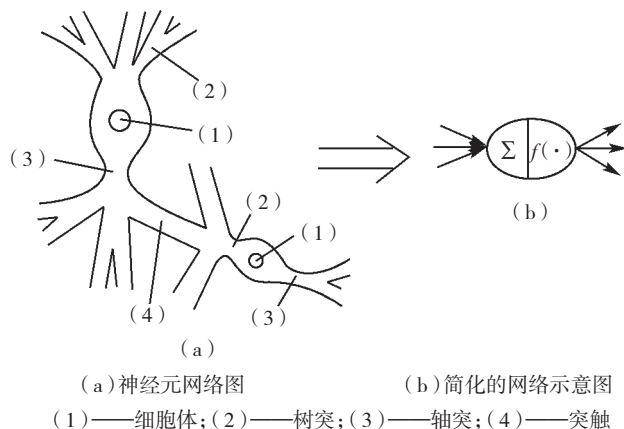


图 6-1 神经网络结构图及其简化结构图

细胞体:是神经元的控制中心,它响应并解释来自各个树突的信息,并通过轴突输出信息。

树突:是神经元的信息接收器,其作用为接受并解释来自其他神经细胞或细胞轴突的信息,这些信息或者刺激(激励)、或者可抑制一个树突。当树突接受一定的信息组合后将会向细胞体发出信号。

轴突:作为神经元信息的传输器,它将动作信号传送出去,解放化学物质去刺激或抑制相邻神经元的树突。一个神经元的轴突可分枝延伸,与不同类型的神经元连接状态不同。

信息在神经元中的处理过程如下:一个神经细胞的树突在突触处从其他神经细胞接收信号(刺激性或抑制性),所有树突接收到的信号都传输到细胞体进行处理。若在一个时间间隔中,某一细胞接受到的刺激信号量足够大,以致使该细胞被激活而产生一个脉冲信号。这一信号将沿着细胞的轴突传输出去,并通过突触传递到其他神经细胞中,各个神经细胞(神经元)相互连接形成神经网络处理信息。人们根据人脑神经网络的基本构造和功能,建立人工神经网络 ANN 模拟人脑处理信息。

(二) 人工神经网络的特点

人工神经网络由于是建立在生物神经网络基础上,因而具有许多优点^{[5][6][7]}。

1. 高度的并行分布处理:由于信息的处理依靠结构简单且相同的大量神经元同时协同完成,对信息的存储和学习功能则依靠其相互之间连接强度的变化实现,虽然每个单元功能简单有限,但大量单元并行处理,使其处理能力和运行速度大大提高。

2. 具有自组织、自适应、自学习能力:人工神经网络并不是被动地执行预编程序,而是通过训练和学习获取网络的权值和结构,使网络行为适应于规定任务,呈现出很强的自学习、自适应能力。

3. 高度非线性全局作用:从全局看,人工神经网络的整体性能并不是网络局部性能的简单迭加,而是某种集体性行为。每个神经元接受其他神经元的输入并通过并行网络产生输出,影响其他神经元,从而实现了从输入状态到输出状态的空间非线性映射。

4. 将信息处理和存储单元合二为一,通过改变权值进行控制,且可以处理模拟的、模糊的和随机的信息。

5. 人工神经网络采用分布式的存储方式使得网络容错性能良好,并具有联想记忆功能。

(三) 人工神经网络的应用

正是由于人工神经网络具备了如此多的优点,其应用领域也较为广泛,主要适应于 ① 最优化问题的计算,包括路由选择、货物调度、系统规划等组合优化、条件约束优化问题的求解;② 模式识别与模式信息处理,包括图形图像识别、语音识别、雷达声纳识别、药物结构关系识别等;③ 信息智能化处理,包括市场分析、模糊评判、逻辑推理、语言翻译、知识表达等;④ 信号处理,包括噪声抑制、数据压缩、自适应均衡、预测估值、通信编码解码等内容;⑤ 复杂控制和实时优化控制,如机器人控制系统、智能及鲁棒控制、变结构优化控制等。目前国内外在这些领域的研究很广泛^{[8][9][10][11]}。

随着神经网络研究的不断深入和在其他领域的广泛应用,环境工作者也已经开始关注其在环境领域的应用。目前已经有不少关于人工神经网络在水质模拟预测方面的报道,比如魏文秋等^[12] 引入神经网络技术建立水质预测模型,在四川沱江的实际应用中取得了较好的预测精度。郭劲松等人^[13] 将人工神经网络方法引入到河流水质模型建模中,采用长江干流重庆段的实测水质样本进行训练和检验,建立了 BOD—DO 耦合 BP 人工神经网络水质模型,获得了较好的预测效果。此外还有一些应用^{[14][15]} 也取得了较好的模拟预测效果,可见人工神经网络的确为水质模拟预测提供了一种新的精度较高的方法。

二、人工神经网络基本原理

在本节中将简要介绍人工神经网络的基本原理^{[5][6][7]}。

(一) 几个基本概念

1. 单个人工神经元模型

类似于人脑神经元,单个人工神经元模型也是人工神经网络的基本单元,其最基本的结构为多输入—单输出的非线性元件,如图 6-2 所示。该神经元具有 r 个输入分量 p_j ($j = 1, 2, \dots, r$), 每个输入具有相应的权值分量 w_j ($j = 1, 2, \dots, r$), 在建模中常

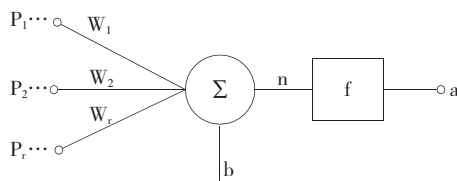


图 6-2 单个人工神经元模型图

加入一个额外输入分量 b , 称为偏差或阈值。输入分量与权值分量相乘求和后成为激活函数 f 的一个输入, 另一输入为偏差 b 。以矩阵形式表示输入 p 与权值 w 为: $P = [p_1 p_2 \cdots p_r]^T$, $W = [w_1 w_2 \cdots w_r]$, 则单个人工神经元模型输出矢量为

$$A = f(W * P + b) = f\left(\sum_{j=1}^r w_j p_j + b\right) \quad (6-7)$$

2. 激活函数(Activation transfer function)

激活函数可以看作是人工神经元和神经网络的核心, 它可控制输入对输出的激活作用、对输入输出进行函数转换, 并在很大程度上决定了神经网络的性能。下面是实际中常见的激活函数:

(1) 阈值型: 可将任意输入转化为 0 或 1 的输出, 激活函数 f 为单位阶跃函数, 其输入输出关系为 $A = f(W * P + b) = \begin{cases} 1, W * P + b \geq 0 \\ 0, W * P + b < 0 \end{cases}$

(2) 线性型: 其输入输出关系为 $A = f(W * P + b) = W * P + b$

(3) Sigmoid 型(S型): S型激活函数将任意输入压缩到 (0, 1) 范围内, 形成类似 S 形状的图形。S 型激活函数一般包括两种, 一种为对数 S 型函数, 函数关系为 $f = \frac{1}{1 + e^{-x}}$; 一种为双曲正切 S 型函数, 关系式为 $f = \frac{1 - e^{-2x}}{1 + e^{-2x}}$ 。S 型激活函数具有非线性放大增益, 对任意输入的增益等于在输入—输出曲线中该点处的曲线斜率, 当输入由 $-\infty$ 增为 0, 其增益由 0 增为最大; 当输入由 0 增为 $+\infty$, 其增益又由最大逐渐降为 0, 且总为正。

3. 神经网络模型

将两个或两个以上简单神经元并联使每个神经元具有相同输入矢量 P , 则组成一个神经元层, 其中每个神经元产生一个输出, 这样构成一个单层神经网络。将两个以上的单层神经网络连接, 前一层网络的输出成为后一层网络的输入, 这样就组成了一个神经网络, 其每一层都有一个权矩阵 W , 一个偏差矢量 B 和一个输出矢量 A 。多层神经网络每一层起不同的作用, 其最后一层成为网络输出层, 其他层构成隐含层。

按照网络拓扑结构可将人工神经网络分为前向网络和反馈网络。前向网络特点是信号的流向是从输入指向输出, 而反馈网络的输出信号则通过与输入连接返回到输入端, 形成回路。

(二) 反向传播(BP) 人工神经网络

反向传播网络(Back-propagation Network, 即 BP 网络) 是一种多层前向神经网络, 它将 δ 学习规则(也称为 $W-H$ 规则) 一般化, 并使误差反向传播。目前大部分人工神经网络模型采用的是 BP 网络或其变化形式, 本书实例也采用 BP 网络模拟水质, 因此对 BP 神经网络作一介绍。

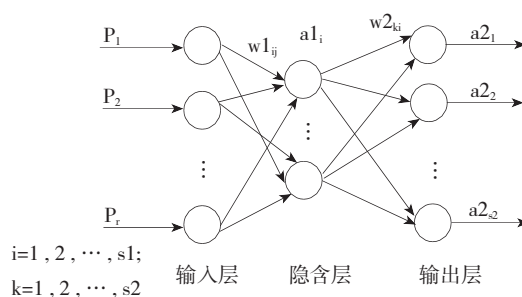


图 6-3 BP 人工神经网络结构图

1. BP 神经网络基本构造

一个 BP 神经网络模型可分为输入层、隐含层和输出层,各层间采用全连接方式,同一层单元之间不连接。图 6-3 是一个含一个隐含层的 BP 神经网络模型结构。

BP 网络经常采用 S 型对数或正切激活函数和线性函数,由于 S 型激活函数是比较光滑的任意界面,使得 BP 网络的容错性能较好。且由于激活函数连续可微,可以严格利用梯度法进行推算,其权值修正的解析式十分明确,这种算法即为误差反向传播法,简称 BP 算法。

2. BP 网络学习规则及网络训练^[5]

BP 网络学习规则属于 δ 学习规则,其基本思想为:对 r 个输入学习样本 $P^1, P^2, \dots, P^r$, 与其对应的输出样本为 $T^1, T^2, \dots, T^r$ 。学习的目的是用网络的实际输出 $A^1, A^2, \dots, A^r$ 与目标输出 $T^1, T^2, \dots, T^r$ 间的误差修改权值,使 $A^i (i = 1, 2, \dots, r)$ 与期望的 T^i 尽可能接近,即使网络输出层的误差平方和最小。它通过不断在相对于误差函数斜率下降方向上计算网络权值和偏差的变化来逼近目标值,每次权值和偏差的改变与网络误差的影响成正比,并以反向传播方式传递到每一层。因此包括两部分内容:信息正向传递和误差反向传播。

以图 6-3 为例,为说明方便,设输入为 P , 包含神经元 r 个,隐含层含 $s1$ 个神经元,其激活函数为 $f1$;输出层含 $s2$ 个神经元,相应于激活函数 $f2$;输出为 A ,目标输出为 T 。

(1) 信息正向传递

设隐含层中第 i 个神经元的输出为

$$a1_i = f1\left(\sum_{j=1}^r w1_{ij} p_j + b1_i\right), i = 1, 2, \dots, s1 \quad (6-8)$$

输出层第 k 个神经元的输出为

$$a2_k = f2\left(\sum_{i=1}^{s1} w2_{ki} a1_i + b2_k\right), k = 1, 2, \dots, s2 \quad (6-9)$$

定义的误差函数为

$$E(W, B) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{s2} (t_k - a2_k)^2 \quad (6-10)$$

(2) 权值变化

① 输出层的权值变化计算:对从第 i 个输入到第 k 个输出的权值为

$$\Delta w2_{ki} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w2_{ki}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a2_k} \cdot \frac{\partial a2_k}{\partial w2_{ki}} = \eta (t_k - a2_k) \cdot f2' \cdot a1_i = \eta \cdot \delta_{ki} \cdot a1_i \quad (6-11)$$

其中:

$$\delta_{ki} = (t_k - a2_k) \cdot f2' = e_k \cdot f2'$$

$$e_k = t_k - a2_k$$

η 为神经网络的学习速率,在实际运用中, η 取值不宜过大, η 值越大每次权值的改变越激烈,可能导致学习过程中发生振荡。 η 值的适宜选择可以达到快速准确的选择结果。

类似地对于偏差的变化有:

$$\Delta b_{2_{ki}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial b_{2_{ki}}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_{2_k}} \cdot \frac{\partial a_{2_k}}{\partial b_{2_{ki}}} = \eta(t_k - a_{2_k}) \cdot f'_{2'} = \eta \cdot \delta_{ki} \quad (6-12)$$

② 隐含层的权值变化计算:对从第 j 个输入到第 i 个输入的权值有

$$\begin{aligned} \Delta w_{1_{ij}} &= -\eta \frac{\partial E}{\partial w_{1_{ij}}} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_{2_k}} \cdot \frac{\partial a_{2_k}}{\partial a_{1_i}} \cdot \frac{\partial a_{1_i}}{\partial w_{1_{ij}}} \\ &= \eta \sum_{k=1}^{s_2} (t_k - a_{2_k}) \cdot f'_{2'} \cdot w_{2_{ki}} \cdot f'_{1'} \cdot p_j = \eta \cdot \delta_{ij} \cdot p_j \end{aligned} \quad (6-13)$$

其中: $\delta_{ij} = e_i \cdot f'_{1'}$, $e_i = \sum_{k=1}^{s_2} \delta_{ki} w_{2_{ki}}$, $\delta_{ki} = e_k \cdot f'_{2'}$, $e_k = t_k - a_{2_k}$

类似地可以得到偏差的变化为:

$$\Delta b_{1_i} = \eta \cdot \delta_{ij} \quad (6-14)$$

③ 误差的反向传播

误差反向传播过程实质上是通过计算输出层的误差 e_k , 将其与输出层激活函数的一阶导数 $f'_{2'}$ 相乘得到 δ_{ki} 。隐含层中并没有直接给出目标矢量, 故利用输出层的 δ_{ki} 进行误差反向传播求出隐含层权值变化量 $\Delta w_{2_{ki}}$ 。然后计算 $e_i = \sum_{k=1}^{s_2} \delta_{ki} w_{2_{ki}}$, 并通过将 e_i 与该层激活函数的一阶导数 $f'_{1'}$ 相乘得到 δ_{ij} , 以此为基础求出前层权值变化量 $\Delta w_{1_{ij}}$ 。如果含有一层以上的隐含层则不断利用此方法以此类推, 直到将输出误差 e_k 层层反推到第一层为止。

④ BP 神经网络的训练

对一个 BP 神经网络, 在训练时需计算网络的加权输入矢量、网络输出矢量和误差矢量, 然后求误差平方和。当训练矢量的误差平方和小于目标误差平方和时, 训练停止, 否则在输出层计算误差变化并用反向传播学习规则调整权值, 反复此过程直到满足要求为止。

因此一个典型的 BP 学习算法步骤如下:

- ① 初始化神经网络及学习参数(如设置网络的初始权值矩阵、学习速率 η 等);
- ② 采用训练模式训练网络直到满足学习的要求;
- ③ 信息前向传递:对给定的训练模式计算网络的输出并与期望输出进行比较, 如有误差则转入执行 ④, 否则返回 ②;
- ④ 误差反向传播:首先计算同一层单元的误差, 然后修正权值, 返回到 ②。

3. BP 网络训练的优化算法^[5]

BP 网络训练的实质是一个非线性目标函数的优化问题, 传统的 BP 算法采用的是梯度下降法求权值变化, 训练速度较慢。因此本文介绍几种基于数值优化方法的网络训练算法。

(1) 拟牛顿法

拟牛顿法是一种常见的快速优化方法, 利用了一阶和二阶导数的信息, 基本形式为:第一次迭代的搜索方向确定为负梯度方向, 即搜索方向 $S(X^{(0)}) = -\nabla f(X^{(0)})$, 以后各次迭代搜索方向由 $S(X^{(k)}) = -(H^{(k)})^{-1} \nabla f(X^{(k)})$ 确定, 其中 $H^{(k)}$ 为二阶导数矩阵(海森矩阵)。则

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \eta^{(k)} S(X^{(k)}) = X^{(k)} - \eta^{(k)} (H^{(k)})^{-1} \nabla f(X^{(k)}) \quad (6-15)$$

拟牛顿法克服了梯度下降法收敛较慢的缺点, 但由于神经网络参数众多常导致海森矩

阵计算复杂,人们提出了正割拟牛顿法和 BFGS 拟牛顿法改进。

(2) 共轭梯度法

共轭梯度法首先沿负梯度方向 $S(X^{(0)}) = -\nabla f(X^{(0)})$ 搜索,然后沿当前搜索方向的共轭方向搜索以迅速达到最优值,搜索方向由下式确定。

$$\begin{aligned} S(X^{(k)}) &= -\nabla f(X^{(k)}) + \beta^{(k)} S(X^{(k-1)}) \\ X^{(k+1)} &= X^{(k)} + \eta^{(k)} S(X^{(k)}) \end{aligned} \quad (6-16)$$

共轭梯度法收敛速度比常规梯度下降法要快,适于权值较多的网络。

(3) Levenberg — Marquardt 法

Levenberg — Marquardt 法实际上是梯度下降法与牛顿法的结合。其搜索方向为

$$S(X^{(k)}) = -(H^{(k)} + \lambda^{(k)} I)^{-1} \nabla f(X^{(k)}) \quad (6-17)$$

若令 $\eta^{(k)} = 1$, 则 $X^{(k+1)} = X^{(k)} + S(X^{(k)})$ 。初始时 λ 可取一个很大的数,此时 $L-M$ 法相当于步长很小的梯度下降法;随着最优点的不断接近, λ 减小到 0, 则 $S(X^{(k)})$ 从负梯度方向转向牛顿法方向。一般地, 当 $f(X^{(k+1)}) < f(X^{(k)})$, 减小 λ , 否则需增大 λ 。虽然 $L-M$ 法也需计算海森矩阵, 但由于 BP 网络训练时目标函数常具有平方和形式, 则海森矩阵可通过雅可比矩阵进行近似计算 $H = J^T J$, 而利用标准的反向传播技术计算雅可比矩阵比计算海森矩阵相对要容易很多。当网络权值较少时采用 Levenberg — Marquardt 法收敛非常迅速。

由于建立的水质神经网络并不复杂, 所以本书中的例子将采用 Levenberg — Marquardt 法进行网络的训练, 收敛速度较快。

三、实例研究

以水质的模拟预测为例, 虽然水质模型机理较为清晰, 但它将影响水质变化的诸多因素加以考虑, 就需要大量的监测资料, 这样模型中需要测量的环境因子就很多, 且有时难于测量, 并且环境的水文条件具有很大的随机性也会导致水环境数学模型输出的不确定性, 同时河流水质系统中许多机理尚未完全清楚使得很多过程还不能或较难用数学模型表述, 这也是现在水质模拟中的一个瓶颈。相反, 神经网络方法是一种基本上可以不依赖于模型的方法, 通过模拟人脑神经网络而具有较强的自适应和自学习功能, 比较适用于那些具有不确定性和高度非线性的对象, 因此可以被用于进行水质模拟预测。

本小节尝试采用 BP 神经网络, 用 Levenberg — Marquardt 法加速网络样本训练。模拟河段为淮河淮南段, 水质监测自上游到下游共设了 5 个监测断面, 依次为: 峡山口断面、凤台渡口断面、石头埠断面、胡大涧断面、新城口断面。所用的监测资料取自文献^[15], 共选取了 14 组监测数据, 分别为 1996 年枯水期、丰水期, 1997—2000 各年枯水期、平水期和丰水期的水质监测数据。为说明 BP 神经网络的应用, 以对凤台渡口断面 DO、COD_{Mn}、BOD₅ 的预测为例。

峡山口断面位于凤台渡口断面上游, 故其中的水质因子将影响下游的水质变化, 以峡山口断面水质监测指标为输入, 样本共有 14 组数据, 选取前 12 组数据用于训练网络, 后两组数据检验预测。输入变量包括: pH、溶解氧 DO、COD_{Mn}、BOD₅、非离子氨、亚硝酸盐和硝酸盐, 其值见表 6-7。

表 6-7 峡山口断面水质指标监测数据

数据序号	pH	溶解氧	COD _{Mn}	BOD ₅	非离子氨	亚硝酸盐	硝酸盐
1	7.8	6.65	7.65	3	0.087	0.128	0.6
2	6.94	3.4	4.6	3	0.014	0.075	0.71
3	8	10.15	6.22	3.83	0.064	0.082	0.89
4	8.35	5.9	5.67	5.17	0.281	0.184	1.06
5	7.43	4.3	4.98	3	0.044	0.115	0.78
6	7.56	8.97	6.33	3.33	0.022	0.095	1.32
7	7.26	6.4	5.18	3.5	0.018	0.147	0.86
8	7.06	5	5.15	1	0.024	0.093	0.75
9	6.93	8.7	6.4	3.2	0.004	0.148	0.84
10	7.34	3.7	3.8	1.7	0.016	0.148	1.96
11	7.74	5	4.5	2.3	0.041	0.12	1.05
12	7.63	10.65	4.21	2.42	0.011	0.044	0.77
13	6.74	6.19	5.5	6.33	0.004	0.072	1.42
14	7.5	3.75	4.6	3.27	0.002	0.153	0.72

注:上表各指标单位除 pH 外均为 mg/L。数据序号 1 代表 1996 年枯水期,2 为 1996 年丰水期,3—5 分别代表 1997 年枯、平、丰水期,7—9 分别代表 1998 年枯、平、丰水期,以此类推。

建立 BP 神经网络,输入节点为 7 个,逐个输出即输出节点为 1。虽然隐含层层数和节点数尚没有较统一的计算方法,但在实际设计中一般应优先考虑包含 1 个隐含层的 3 层 BP 网络。一般地,通过增加隐含层节点数来获得较低的误差,其训练效果比增加隐含层数目更易实现。本文中隐含层节点数可以通过文献^[16]所列出的方法和规则初步确定节点数,并进行增加节点的试算,经试算采用 1 个隐含层 5 个节点的结构。应用 MATLAB 软件调用工具箱并编制相应程序,隐含层采用“tansig”函数,输出层采用“purelin”函数,训练选取 Levenberg—Marquardt 法,训练目标采用均方误差 MSE,在本文设为 0.0001。分别计算了用峡山口水质监测数据模拟凤台渡口断面的 DO、COD_{Mn} 和 BOD₅,结果参见表 6-8。

表 6-8 凤台渡口断面训练及预测检验结果

数据序号	溶解氧	拟合值	相对误差 %	COD _{Mn}	拟合值	相对误差 %	BOD ₅	拟合值	相对误差 %
1	6.17	6.17	0	7.6	7.58	0.26	4.17	4.17	0
2	4.18	4.17	0.24	5.15	5.17	-0.39	4.00	4.00	0
3	10.25	10.25	0	6.30	6.31	-0.16	3.67	3.67	0
4	5.85	5.85	0	5.40	5.40	0	5.00	5.00	0
5	4.23	4.26	-0.71	4.92	4.91	0.20	3.17	3.17	0
6	8.95	8.95	0	6.80	6.80	0	4.67	4.67	0
7	6.70	6.70	0	5.30	5.29	0.19	3.33	3.33	0
8	4.80	4.80	0	5.03	5.03	0	1.33	1.31	1.50
9	8.60	8.60	0	6.00	6.00	0	2.50	2.50	0
10	3.40	3.40	0	4.00	4.00	0	2.30	2.30	0
11	4.20	4.19	0.24	4.60	4.60	0	1.30	1.32	-1.54
12	10.73	10.73	0	4.32	4.32	0	2.59	2.59	0
13	5.94	5.99	-0.84	5.59	5.40	3.40	6.67	6.66	0.15
14	3.72	3.82	-2.67	5.00	5.22	-4.40	3.52	3.53	-0.28

模拟凤台渡口各水质指标时相应的训练过程误差记录参见图 6-4、6-5、6-6。由于 Levenberg—Marquardt 法训练时收敛速度很快,在模拟 DO、COD_{Mn}、BOD₅ 时分别经过 621、197 和 39 步即达到了训练目标。

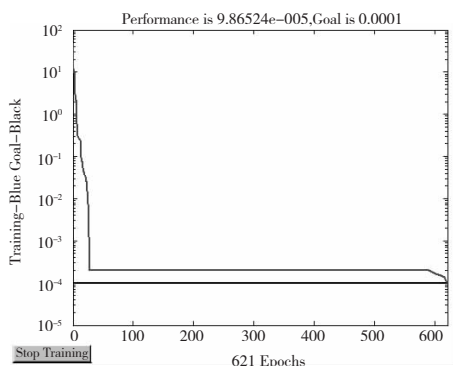


图 6-4 网络训练过程误差记录(模拟 DO)

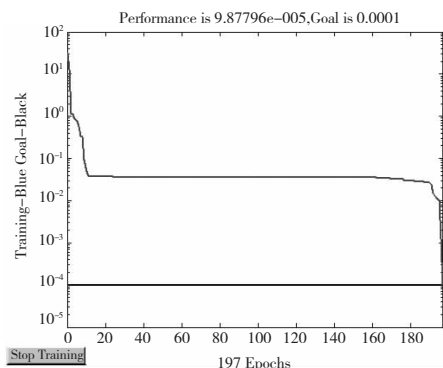


图 6-5 网络训练过程误差记录(模拟 COD_{Mn})

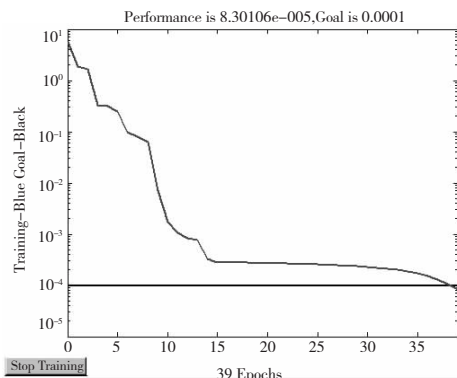


图 6-6 网络训练过程误差记录(模拟 BOD₅)

从结果可以看出,采用 BP 神经网络法对水质进行模拟可以取得较好的效果,尤其是训练数据模拟效果很好,预测检验的结果也都在可以接受的范围内。结果表明采用神经网络法对水质进行模拟预测是可行的。当然,BP 神经网络结构的选择、样本的多少都可能会影响到预测的效果和达到目标所花费的时间,所以在实际中应该结合具体情况使用该方法。

四、小结

人工神经网络法是一种非线性的不依靠数学模型的模拟预测方法,它通过模拟人脑结构和处理问题的方式以简单的神经元组成了神经网络,可用于处理各种复杂的问题。水质模拟预测涉及到许多方面的因素,是很复杂的非线性系统模拟预测,因此将人工神经网络引入到河流水质模拟预测工作中将会对预测的精度提高有一定的价值。同时如何合理地选择神经网络结构、优化其在水质模拟、水环境系统模拟中的应用是今后环境工作者需要深入研究的课题之一。可以预见人工神经网络将在水环境系统模拟预测中逐渐发挥重要作用。

第四节 混沌预测法在水质模拟预测中的应用

混沌(Chaos)是1975年首次作为科学名词出现在科技文献中的,其发展非常迅速,被许多科学家推崇,如著名物理学家 J. Ford 认为是它是 20 世纪与量子力学、相对论并称的物理学的三次大革命之一^[18],而混沌科学的倡导者之一 M. Shlesiner 也曾说过:“20 世纪科学将永远铭记的只有三件事,那就是相对论,量子力学与混沌”^[19]。作为物质科学与数学科学相融合的边缘科学,混沌学讨论了很多方面的问题,如系统对初值的敏感依赖性、拓扑传递性和混合性、Lyapunov 指数、分维数、吸引子(包括周期吸引子、拟周期吸引子和奇怪吸引子)等,在许多方面得到了广泛而深入的应用,比如生物学、心理学、物理学、天文学、气象学、经济学、地震预报、化学反应的混沌现象甚至音乐、艺术等领域^{[20][21][22][23]}。

在实际中,我们所面对的可能常常不是具备固定的或较完备数学表达形式的水环境系统(比如河流系统,可能很多河流并未建立起较理想的水质模型),而是一些离散的监测数据。这些监测值的时间序列一方面是原始的粗糙的但同时也是最为客观真实的,可以检验一切模型的正误。因此,从这些时间序列出发寻找并研究客观现象的动力学性质并应用于预测,将具有重要的实用价值。所以采用对复杂系统有较好解释和预测能力的混沌理论进行水环境系统的模拟预测应该是一种比较有实际意义的尝试。

一、混沌理论概述

(一) 混沌的概念

可以说,混沌时刻存在于我们生活之中:气候的变化、飞行中的飞机性态、地下油管内油的流动性态、点燃的香烟的烟纹涡卷、自来水龙头滴水的花样由稳态变为随机等都会出现混沌现象,这些性态的变化也都会遵循同一条或同一类新发现的定律。

所谓的混沌,就是一种貌似无规则的运动,在确定性非线性系统中不需附加任何随机因素就可出现的类随机行为^[24]。事实上,混沌现象是介于确定关系和随机关系之间的,是一种对现有确定性模式的推广与拓宽。决定论规律的非线性是混沌存在的必要条件;而非线性系统的内在对称性则赋予混沌行为以某种结构和秩序^[18]。一般地,对于确定的初始值,如果明确其动力系统则可以推知该系统的长期行为甚至可追溯其过去的行为及性态。但大量的实例也证明:由于这种内在随机性的存在,造成了很多非线性系统对初值依赖的敏感性,即会产生“蝴蝶效应”。因此,混沌行为的最本质特点——非线性系统对初始条件的极端敏感性造成了系统长期预测的不准确性。但是由于系统在貌似随机的运动过程中可能会遵循一条简单的规则又说明了混沌现象具有短期预测的可能性。

(二) 有关混沌的例子

有关混沌的最主要的例子是 Logistic 映射^{[18][19]}。Logistic 映射有时也被称为虫口模型,可以用于反映昆虫变化。通常认为在某一范围内在不受其他物种影响下单一一种类的昆虫繁衍,其子代数量远大于亲代数量,即许多昆虫的种群是由单一世代构成的,在历代间无重叠。设 x_n 是某种昆虫第 n 年内的个体数目, n 只取整数,第 $n+1$ 年数目为 x_{n+1} ,则二者关系可描述为

$$x_{n+1} = f(x_n), (n = 1, 2, \dots) \quad (6-18)$$

Logistic 映射是最简单的虫口模型,其表述为:

$$x_{n+1} = x_n(a - bx_n), (n = 1, 2, \dots) \quad (6-19)$$

设 $a = b = \mu$, 则有:

$$x_{n+1} = \mu x_n(1 - x_n), (n = 1, 2, \dots) \quad (6-20)$$

Logistic 映射具有确定的数学表达,通过计算机处理可以得到变量 x 的值随 μ 值的变化而变化的情况。图 6-7 是对初值 x_0 取 0.5 后,对 μ 取 0.4、2.7、3.2 和 3.99 得到的虫口模型的时间序列, μ 为 0.4 和 2.7 时 Logistic 映射处于定态,当 μ 为 3.2 时 Logistic 映射处于周期状态,而当 μ 为 3.99 时 Logistic 映射处于混沌状态。可见一个简单的迭代模型当参数发生变化后经迭代会产生不同的结果,其状态会由周期转变为混沌。

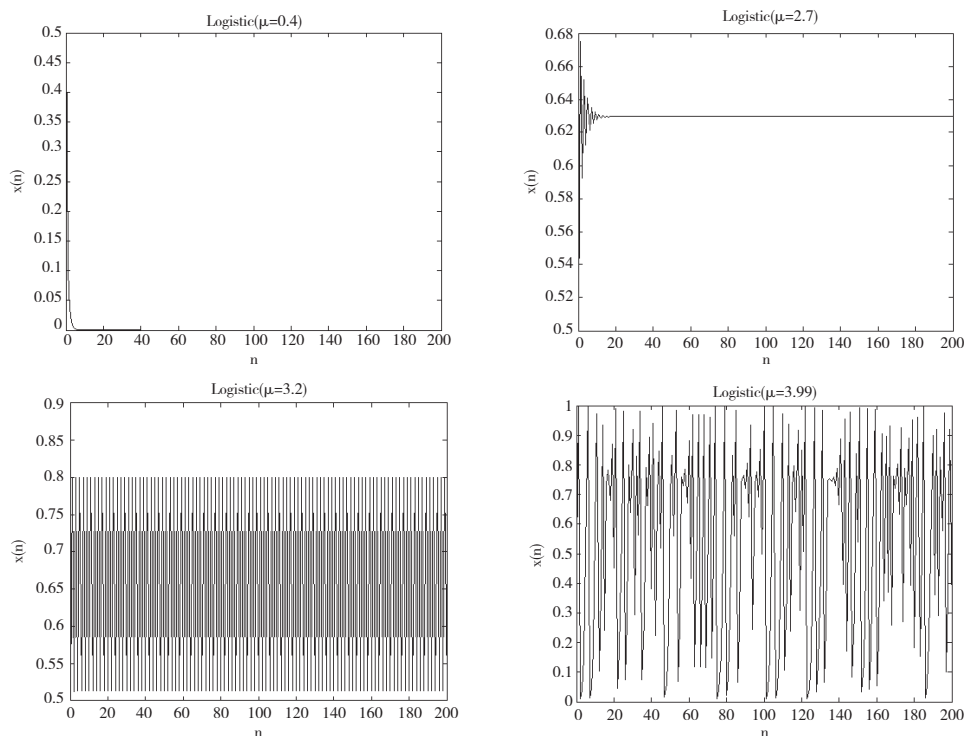


图 6-7 Logistic 映射的时间序列

(三) 混沌吸引子及其特征量

当一个混沌系统产生的轨迹经一定时间的变化后最终会产生一种有规则的、有形的轨迹,这种轨迹是混沌系统最终形成的运动状态在相空间中的不变流形或点集,被称为混沌吸引子。混沌吸引子的特征量^[18]是刻画吸引子某个方面的特征量,从微观角度是指构成吸引子的骨架的不稳定周期的数目、种类及其特征值;从宏观层次上是指使用对整个吸引子或无穷长的轨道平均后得到的特征量,如 Lyapunov 指数、维数等。

1. Lyapunov 指数^[18]

混沌运动的基本特点是对初值条件的敏感性,两个很靠近的初值产生的轨道可以随时

间推移按指数方式分离,这一现象可以采用 Lyapunov 指数描述。正的 Lyapunov 指数意味着混沌,也即 Lyapunov 指数的重要作用之一是判断系统的混沌行为。

在一维动力系统 $x_{n+1} = F(x_n)$ 中,导数 $\left| \frac{dF}{dx} \right|$ 的值决定了初始两点迭代后的分离或靠拢。当初始两点在迭代一次后,若 $\left| \frac{dF}{dx} \right| > 1$ 则迭代使两点分离;若 $\left| \frac{dF}{dx} \right| < 1$ 则迭代使两点靠拢。但在不断的迭代过程中 $\left| \frac{dF}{dx} \right|$ 的值随时发生变化,从而使轨迹有时分离有时靠拢。为表示从总体看相邻两状态的分离情况,必须对时间或迭代次数取平均。为此,可设平均每次迭代所引起的指数分离中的指数为 λ ,则原来相距为 ε 的两点经 n 次迭代后相距为

$$\varepsilon e^{n\lambda(x_0)} = |F^n(x_0 + \varepsilon) - F^n(x_0)|$$

取极限 $\varepsilon \rightarrow 0, n \rightarrow \infty$,则有

$$\lambda(x_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{F^n(x_0 + \varepsilon) - F^n(x_0)}{\varepsilon} \right| = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left| \frac{dF^n(x)}{dx} \right|_{x=x_0}$$

$$\text{化简为 } \lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \ln \left| \frac{dF^i(x)}{dx} \right|_{x=x_i}$$

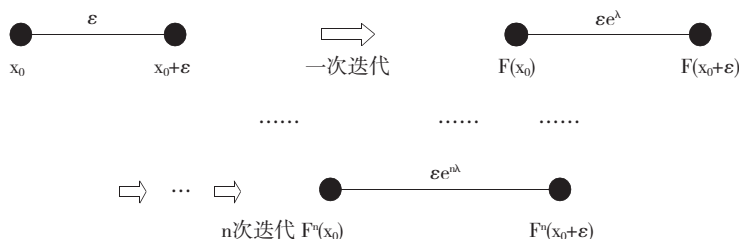


图 6-8 迭代过程

经这样计算得到的 λ 值即为 Lyapunov 指数,它表示系统在多次迭代过程中的平均每次迭代引起的指数分离中的指数。若 $\lambda < 0$ 则表示相邻点最终靠拢为一点,这对应于稳定的不动点和周期运动;当 $\lambda > 0$ 则意味相邻点最终要分离,对应于轨道的局部不稳定。在 Lyapunov 指数中,最小的 Lyapunov 指数决定了轨道收缩的快慢,最大的 Lyapunov 指数决定了轨道发散的快慢。当最大 Lyapunov 指数大于 0 时则系统具有混沌特性。

2. 关联维数

非线性系统的相空间可能维数很高甚至无穷,而吸引子的维数一般低于相空间维数。关联维数也即吸引子维数,是对反映系统自相似结构的混沌吸引子的表征,度量了吸引子中一个数据点的存在对另一个数据点状态的影响程度。一个混沌系统的主要动态总可以由有限个一阶微分方程刻画,这些必须的微分方程的最少数就是该系统的自由度。当一个相空间维数达到自由度时若再增加维数,则关联维数就已经没有显著意义了。因此,有限、低维、非整数维数是反映系统混沌性的重要标志^[25]。在非线性动力学中通常采取用关联积分函数计算关联维数的方法来鉴别混沌过程和随机过程。对于关联维数的具体计算在下面章节中有较详细叙述。

二、混沌时间序列的判别方法^[18]

在实际测量过程中,由于方法和计算工具等的限制,使得时间序列不可避免的带有噪声。这些噪声的出现将引起时间序列分析的困难甚至结论的错误。因此,如何区分噪声和服从确定规律的信号(特别是混沌)是非常有意义的。

(一) 功率谱方法

频率 f 与相应的功率 $E(f)$ 间的指数关系,在一些物理现象的某些频率中是适用的。如设 β 为功率谱指数, $\beta = 0$ 对应白噪声; $\beta = 2$ 对应褐色噪声; $0 < \beta < 1.5$ 对应于 $\frac{1}{f}$ 杂音,这是功率谱与振动数的倒数成正比摆动的总称。对应于湍流的惯性区, $\beta = 5/3$ 。

$$E(f) = |\hat{x}(f)|^2 \propto f^{-\beta} \quad (6-21)$$

故有

$$E(\lambda f) = \lambda^{-\beta} E(f) \quad (6-22)$$

功率谱的幂函数形式说明,物理系统的观测资料在频率 f 空间中跨越很宽的尺度,却有自相似结构。时间序列的图像看上去是不规则的,但其功率谱却可能呈现出规则性。

1. 谱图若具有单峰(或几个峰),则对应于周期(和拟周期)序列;
2. 若无明显的峰值或峰连成一片,则对应于湍流或混沌序列。

实验中可直接测量的对象之一,是时间序列 $x_1, x_2, \dots, x_N$ 的功率谱。对 N 个采样值加上周期条件 $x_{N+j} = x_j$, 计算自关联函数(离散卷积)

$$C_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i x_{i+j} \quad (6-23)$$

然后对 C_j 完成离散傅氏变换,计算傅氏系数

$$P_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N C_j e^{\frac{i2\pi kj}{N}} \quad (6-24)$$

如果应用快速傅氏变换算法(FFT),可以直接由 x_i 作快速傅氏变换,得到系数

$$\begin{cases} a_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \cos \frac{\pi i j}{N} \\ b_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \sin \frac{\pi i j}{N} \end{cases} \quad (6-25)$$

然后计算 $P'_k = a_k^2 + b_k^2$, 由许多组 $\{x_i\}$ 得到一批 $\{P'_k\}$, 求平均后即趋近于前面定义的功率谱 P_k 。为有效地使用快速傅氏变换算法,时间序列的长度 N 应取 2 的幂次。

时间序列自然的包含了两个“时间常数”,即采样间隔 τ 和总采样时间 $N\tau$, 这两个时间常数的倒数,分别决定两个特征频率:

$$\begin{aligned} f_{\max} &= \frac{1}{2\tau} \\ f_{\min} &= \Delta f = \frac{1}{N\tau} \end{aligned} \quad (6-26)$$

这里 $f_{\min}$ 是以此种采样数据所能观测的最高频率。为反映高频部分,就必须缩短采样间隔。 $f_{\min} = \Delta f$ 是两个相邻傅立叶系数的频率差。

采用离散采样永远不能单值地确定被研究的系统的频率结构。离散采样时总会出现虚假的高频部分。由于周期性的边界条件,这些虚假的高峰会“反射”回频率区间 $(0, f_{\max})$ 内,造成所谓混淆现象(*aliasing*)。混淆现象原则上不能消除,只能设法减弱。常用方法是令 $f_{\max}$ 显著地超过系统的实际主频率 f_0 ,如

$$f_{\max} = kf_0$$

其中 $k = 4 - 8$,然后在所得的频率谱中只取 f_0 以下部分。这样就可将来自混淆现象的假峰有效地降低甚至小到背景以下。

另一方面,分频的出现对于识别混沌具有重要意义。设计功率谱计算方案时,就必须要求能分辨出一定的分频。所谓“分辨出”,就是要求相应的峰由若干个点(如 s 个点)构成,在功率谱中形成有把握确认的结构。因此有

$$s\Delta f = \frac{f_0}{p} \quad (6-27)$$

从以上几个简单的数学关系式消去 τ 和 f_0 ,得到

$$N = 2ksp$$

通常 N 由计算机的能力决定。

这样,进行功率谱分析之前必须做如下工作:

1. 对于系统基频 f_0 和计算能力允许的 N ,要做到心中有数。
2. 定 k ,确定采样间隔 $\tau = \frac{1}{2kf_0}$ 。对于实验工作,就确定了应当选用的模数转换器(ADC)的频率;对于理论计算,就决定了每次迭代几次或积分几步采一个点,而决不是把所有的迭代点都送去做傅立叶变换。
3. 在 s 和 p 中寻求妥协。在通常的研究过程中,可在经验基础上尽量减少 s ,以达到较高的频率分辨。为绘制供发表的频谱时,就不得不增加 s 而牺牲 p ,或一味地取相当大的 N 。
4. 若原始数据来自包含大量噪声与外界干扰的测量,还应当考虑适当的滤波或光滑化。

(二) 主分量分析(PCA 分布)

主分量分析(PCA)是近年来提出的一种能有效识别混沌和噪声的方法。其具体计算步骤如下:若已知给定的一维时间序列为 $\{x_1, x_2, \dots, x_N\}$,采样间隔为 τ_s 进行相空间重构,选取的嵌入维数为 d ,则由该时间序列形成的轨线矩阵 $X_{l \times d}$ ($l = N - (d - 1)$) 如下

$$X_{l \times d} = \frac{1}{l^{\frac{1}{2}}} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_d \\ x_2 & x_3 & \cdots & x_{d+1} \\ \cdots & \cdots & & \cdots \\ x_l & x_{l+1} & \cdots & x_N \end{bmatrix} = \frac{1}{l^{\frac{1}{2}}} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \cdots \\ X_l \end{bmatrix}$$

计算协方差矩阵 A 为:

$$A_{d \times d} = \frac{1}{l} X_{l \times d}^T X_{l \times d} \quad (6-28)$$

然后计算协方差矩阵 A 的特征值 $\lambda_i (i = 1, 2, \dots, d)$ 和相应的特征向量 $U_i (i = 1, 2, \dots, d)$ 。将特征值按大小排列:

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_d$$

则特征值 λ_i 和特征向量 U_i 称为主分量。求出所有特征值的和 γ 为

$$\gamma = \sum_{i=1}^d \lambda_i \quad (6-29)$$

以指标 i 为 X 轴, $\ln(\lambda_i/\gamma)$ 为 Y 轴得到的图, 称为主分量谱。由于混沌信号和噪声的主分量分布之间存在着显著差异, 即噪声的主分量谱图应是一条与 X 轴接近平行的直线, 而混沌信号的主分量应是一条过定点且斜率为负的直线。所以可用主分量分布标准方差 σ_p 作为识别混沌和噪声的一种特征。

(三) Poincare 截面法

在相空间中适当选取一截面(要有利于观察系统的运动特征和变化, 如截面不能和轨线相切, 更不能包含轨线), 称此截面为 Poincare 截面, 相空间的连续轨迹与 Poincare 截面的交点称为截点。设纪录得到的 Poincare 点为: $B_0, B_1, \dots, B_n, \dots$ 。这样就在 Poincare 截面上让系统连续运动, 降为低维的离散点之间的映射

$$B_{n+1} = TB_n \quad (6-30)$$

上述 T 称为 Poincare 映射。

通过观察 Poincare 截面上截点的情况可以判断是否发生混沌。当 Poincare 截面上有且仅有一个不动点或少数离散点时, 运动是周期的; 当 Poincare 截面上是一封闭曲线时, 运动是准周期的; 当 Poincare 截面上是一些成片的具有分形结构的密集点时, 运动便是混沌的。

(四) Lyapunov 指数

Lyapunov 指数作为沿轨道长期平均的结果, 是一种整体特征, 其值总是实数, 可正、可负, 也可能为零。

在 Lyapunov 指数 $\lambda < 0$ 的方向, 相体积收缩, 运动稳定, 且对初始条件不敏感; 在 Lyapunov 指数 $\lambda > 0$ 的方向轨道迅速分离, 长时间行为对初始条件敏感, 运动成混沌状态; $\lambda = 0$ 对应于稳定边界, 属于一种临界情况, 若系统最大 Lyapunov 指数 $\lambda > 0$, 则该系统一定是混沌的。所以, 时间序列的最大 Lyapunov 指数是否大于零可作为该时间序列是否为混沌的一个判定依据。

奇怪吸引子是不稳定($\lambda > 0$) 和耗散($\lambda < 0$) 两种因素竞争的结果。

(五) 指数衰减法

因为混沌时间序列的关联积分是指数衰减的, 而噪声时间序列是指数衰减的, 因此可以通过考察关联积分 $C(r)$ 的图形判断其是混沌或噪声序列。

(六) 频闪法

对于相平面上的连续运动轨道, 每隔一定时间间隔观测一次轨道上的代表点, 可以得到

一系列的离散点,研究轨道运动,就归结为研究这些离散点的运动。观测的时间间隔称为采样周期,观测到的轨道上的代表点称为采样点。每隔一定时间间隔观测一次,相当于上一次的频闪。这样,对于定态,观测到的是一个固定点;对于周期运动,因轨道是闭曲线,所以观测到的是一个不动点。若采样点是分布于一定区域内的密集点,并且具有层次结构,则相应的运动是混沌的。

其他混沌的判断方法还包括 $C-C$ 方法、局部可变神经网络法、代替数据法等,可参考文献[18]。

三、时间序列的重构相空间^[18]

在确定性基础上,对序列动力学因素的分析,目前广泛采用的是延迟坐标状态空间重构法。一般来说,非线性系统的相空间可能维数很高,甚至无穷,但在大多数情况下维数并不知道。在实际问题中,对于给定的时间序列 $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n, \dots$,通常是将其扩展到三维甚至更高维的空间中去,以便把时间序列中蕴藏的信息充分显露出来,这就是延迟坐标状态空间重构法。

最初提出相空间重构的目的在于在高维相空间中恢复混沌吸引子。系统任意分量的演化是由与混沌吸引子相互作用着的其他分量所决定的。因此,这些相关分量的信息就隐含在任意分量的发展过程中。这样,就可以从某一分量的一批时间序列数据中提取和恢复出系统原来的规律,这种规律是高维空间下的一种轨迹。也即,由一个混沌系统产生的轨迹经过一定时期的变化后,最终会做一种有规律的运动,产生一种有规则的、有形的轨迹(混沌吸引子),这种轨迹在经过类似拉伸和折叠后转化成与时间相关的序列时,却呈现出混乱的、复杂的规律。由混沌系统的策动因素是相互影响的,因而在时间上先后产生的数据点也是相关的。Packard 等建议用原始系统中的某变量的延迟坐标来重构相空间,Takens 证明了可以找到一个合适的嵌入维,即如果延迟坐标的维数 $m \geq 2d+1$, d 是动力系统的维数,在这个嵌入维空间里可以把有规律的轨迹(吸引子)恢复出来。也即在重构的 R^m 空间里的轨线上原动力系统保持微分同胚,从而为混沌时间序列的预测奠定了坚实的理论基础。

Takens 定理: M 是 d 为流形, $\varphi: M \rightarrow M$, φ 是一个光滑的微分同胚, $y: M \rightarrow R$, y 有二阶连续导数, $\phi(\varphi, y): M \rightarrow R^{2d+1}$, 其中

$$\phi(\varphi, y) = (y(x), y(\varphi(x)), y(\varphi^2(x)), \dots, y(\varphi^{2d}(x)))$$

则 $\phi(\varphi, y)$ 是 M 到 R^{2d+1} 的一个嵌入。

G-P 算法,对于时间序列 $x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n, \dots$,如果能适当选定嵌入维数 m 和时间延滞 τ ,重构相空间

$$Y(t_i) = [x(t_i), x(t_i + \tau), x(t_i + 2\tau), \dots, x(t_i + (m-1)\tau)] \quad i = 1, 2, \dots$$

按照 Takens 定理就可以在拓扑等价的意义下恢复吸引子的动力学特性了。

一个比较适用的方法是由 Grassberger 和 Proccacia 提出的, G-P 算法的主要步骤如下:

- (1) 利用时间序列,先给定一个较小的值 m_0 ,对应一个重构的相空间。
- (2) 计算关联函数 $C(r)$ 。
- (3) 对于 r 的某个适当范围,吸引子的维数 d 与累计分布的函数 $C(r)$ 应满足对数线性

关系,即 $d(m) = \ln C(r) / \ln r$ 。从而由拟合求出对应于 m_0 的关联维数估计值 $d(m_0)$ 。

(4) 增加嵌入维数 $m_1 > m_0$, 重复计算步骤 ② 和 ③, 直到相应的维数估计值 $d(m)$ 不再随着 m 增长而是在一定误差范围内不变为止。此时得到的 d 即为吸引子的关联维数。如果 d 随着 m 的增长而增长, 并不收敛于一个稳定的值, 则表明所考虑的系统是一个随机时间序列。

在重构相空间中, 时间延迟 τ 和嵌入维数 m 的选取具有十分重要的意义, 同时这种选取也是很困难的。由多种方法可以选取时间延迟 τ 和嵌入维数 m , 可参考相关文献。在这里介绍一种方法:

1. 嵌入滞时 τ 的确定

虽然嵌入理论并未对嵌入滞时 τ 进行限制, 但在实际工作中嵌入滞时 τ 不宜过大也不宜过小。如果 τ 值过小, 将会使重建的系统相空间轨道由于相关性较强而挤压在对角线方向上, 从而不能正确展示系统的动力特征, 此即冗余重合现象 (Redundance)。 τ 值过大, 将使系统中一个时刻的状态和其后的状态在因果关系上变得毫不相关, 使轨道上相邻点投影到不相关方向, 引起不恰当组合 (Irrelevance), 这样使得即使很简单的轨道看上去也极为复杂并且也将减少可使用的有效数据点^[26]。对嵌入滞时的选取有自相关函数法、广义相关函数法、互信息法等, 例如采用自相关函数法, τ 值选择自相关函数第一次小于 $1/e = 0.368$ 或小于 0 时所对应的滞时^[26]。

2. 关联维数与嵌入维数 m

关联维数也即吸引子维数, 本文采用 Grassberger 和 Procaccia 提出的 G-P 算法计算关联维数。

对重构 m 维相空间的 N 个相点, 取任意一点 X_i , 计算其余 $N-1$ 个点到 x_i 的距离。 $r_{ij} = |X_i, X_j| = d(X_i, X_j) = \left[\sum_{k=0}^{m-1} (x_{i+k\tau} - x_{j+k\tau})^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ 。对所有 $X_i (i = 1, 2, \dots, N)$ 重复这一过程, 得到关联积分函数: $C_m(r) = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N H(r - r_{ij})$, 式中, H 为 Heaviside 函数: $H(x) = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ 1, & x > 0 \end{cases}$ 。如果一个时间序列存在吸引子, 则有 $C_m(r) = r^D$, 其中 D 即为关联维数, 且有 $D = \frac{\ln C_m(r)}{\ln r}$ 。

由上式可看出, 固定维数 m , 随着 r 的增长, $C_m(r)$ 应以速率 r^D 增长。给定一些 m 值, 分别考察 $\ln C_m(r)$ 与 $\ln r$ 的拟合关系, 随着 m 值的不断增加, D 值通常会最终收敛到其真实值。收敛的维数 m 即为饱和嵌入维数, 相应的 D 即为系统的关联维数。

四、Lyapunov 指数的计算

混沌运动的基本特点是运动对初始条件极为敏感。相空间中的相邻两点所产生的轨道, 随时间推移按指数方式分离, Lyapunov 指数就是定量描述这一现象的量。一般地, 正的 Lyapunov 指数代表的方向对吸引子起支撑作用, 而负的 Lyapunov 指数对应的收缩方向在抵消膨胀方向的作用后贡献吸引子维数的分数部分。在实际应用中不需要计算所有的 Lyapunov 指数而只需计算最大 Lyapunov 指数就足够了, 1983 年, 格里波基证明只要最大 Lyapunov 指数大于零, 就可以肯定系统混沌现象的存在了^[18]。对于 Lyapunov 指数的计算

除了定义法外,还有其他计算方法,可查阅文献[18]。这里重点介绍两种方法:

(一) Wolf 方法

Wolf 等人提出的直接基于相轨线、相平顺、相体积等演化来计算最大 Lyapunov 指数,具体计算步骤如下:

设混沌时间序列 $x_1, x_2, \dots, x_k, \dots$, 嵌入维数 m , 时间延迟 τ , 则重构相空间

$$X(t_i) = (x(t_i), x(t_i + \tau), \dots, x(t_i + (m-1)\tau)) \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

取初始点 $X(t_0)$, 设其与最近邻点 $X_0(t_0)$ 的距离为 L_0 , 追踪这两点的时间演化, 直到 t_1 时刻, 其间距超过某规定值 $\varepsilon > 0$, $L'_0 = |X(t_1) - X_0(t_1)| > \varepsilon$, 保留 $X(t_1)$, 并在 $X(t_1)$ 邻近另找一个点 $X_1(t_1)$, 使得 $L_1 = |X(t_1) - X_1(t_1)| < \varepsilon$, 并使之夹角尽可能的小, 继续上述过程, 直至 $X(t)$ 到达时间序列的终点 N , 这时追踪演化过程的总迭代次数为 M , 则最大 Lyapunov 指数为 $\sigma = \frac{1}{t_M - t_0} \sum_{i=0}^M \ln \frac{L'_i}{L_i}$ 。图 6-9 是 Wolf 方法的计算示意图。

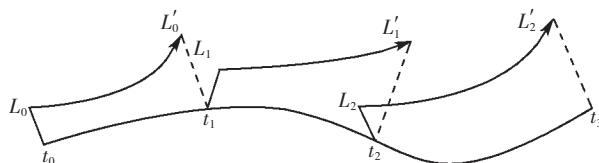


图 6-9 Wolf 方法示意图

(二) p-范数方法

p-范数方法是 1993 年 Gyorgy Barna 和 Ichiro Tsuda 提出的一种计算 Lyapunov 指数的改进方法, 这种方法的目的是在 Wolf 方法和 Jacobian 方法间建立桥梁。如果选择适当的参数 p , 可以避免 Wolf 方法和 Jacobian 方法的共同不足: (a) 对轨道分布不均匀情况计算效果差; (b) 对生物系统效果差。

采用 p-范数方法的具体步骤如下:

1. 用时间延迟 τ 和嵌入维 m 重构时间序列, 不妨设相空间为 m 维轨道上 N 个离散时间间隔为 Δt 的点;
2. 设相空间中点 $x(t)$ 处的单位切向量为 e , 选取较小的 $\varepsilon > 0$;
3. 在点 $x(t)$ 选取邻近点 $x(l_i \Delta t)$, 构成小向量 x_i , 即

$$x_i = x(l_i \Delta t) - x(t_0), (i = 1, 2, \dots, n)$$

其中 l_i 满足条件

$$|x(l_i \Delta t) - x(t_0)| < \varepsilon, l_i \in \{1, 2, \dots, N\}$$

构造矩阵 $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$

不妨设特定的线性组合 y 满足条件

$$Xy \approx e, y \in R^n, X'y \approx e'$$

其中 e' 是 e 的演变值, X' 是 X 的经过时间 Δt 后的演变矩阵。即

$$X' = (x'_1, x'_2, \dots, x'_n)$$

这里 x'_i 满足条件

$$x'_i = x(l_i + 1)\Delta t) - x(t + \Delta t), (i = 1, 2, \dots, n)$$

4. 选取适当的参数 p 值, 解下列范数方程

$$\|y\|_p + \gamma \|\tilde{X}y - e\|_2 = \min, p \in [0, +\infty], \gamma \rightarrow \infty$$

这里有

$$\tilde{x}_i = \omega(\|x_i\|_2)x_i, x \in X, \tilde{x} \in \tilde{X}$$

其中全函数的选取比较灵活, 目的是使 X 中的向量 x 单位化, 如

$$\omega(z) = \begin{cases} \frac{1}{z}, & \text{if } r_{\min} < z < r_{\max} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

$$\text{或 } \omega(z) = \begin{cases} 1, & \text{if } r_{\min} < z < r_{\max} \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

5. 计算得到 Lyapunov 指数为

$$\lambda = \frac{1}{N\Delta t} \sum_{j=0}^{N-1} \ln \frac{\|e(j+1)\Delta t\|}{\|e(j\Delta t)\|} \quad (6-31)$$

五、混沌时间序列的预测^[18]

随着混沌科学的发展, 使得可以不必事先建立主观模型, 而直接根据数据序列本身所计算出来的客观规律 (Lyapunov 指数) 进行预测, 这样可以避免预测的人为主观性, 提高预测的精度和可信度。

(一) 全域预测法

当对混沌时间序列进行预测时, 应该注意到混沌是确定的, 即混沌服从一定的规则。实际上它具有有限的预测能力。虽然它们对初始条件极为敏感, 同时也不可能得到完全准确的测量, 然而在它们的可预测能力丢失之前, 对于一个短的时间长度, 对它们的预测还是可以获得, 并可能比基于一般统计方法的预测能力要好。

设时间序列为 $\{x(t), t = 1, 2, \dots\}$, 嵌入维数为 m , 延迟时间为 τ , 则重构相空间为

$$Y(t) = (x(t), x(t+\tau), \dots, x(t+(m-1)\tau)) \in R^m, \text{ 其中 } t = 1, 2, \dots, N$$

根据 Takens 定理: 对合适的嵌入维数及延迟时间, 重构相空间在嵌入空间中的“轨线”在微分同胚意义下与原系统是“动力等价”的^[18]。因此存在一个光滑映射 $f: R^m \rightarrow R^m$, 使得:

$$Y(t+1) = f(Y(t)), \quad t = 1, 2, \dots$$

$$\text{或 } (x(t+\tau), x(t+2\tau), \dots, x(t+m\tau)) = f((x(t), x(t+\tau), \dots, x(t+(m-1)\tau))) \\ t = 1, 2, \dots$$

这样的 f 在理论上应该唯一, 但实际上由于数据的有限性使得真正的 f 不可能求出, 而

只能由有限数据构造映射 $\hat{f}: R^m \rightarrow R^m$, 使 $\hat{f}$ 充分逼近 f 。所谓全域法就是将相轨迹中的全部点作为拟合对象, 找出其中规律, 拟合一个光滑的函数或 m 维曲面, 使 $\sum_{t=0}^N [Y(t+1) - \hat{f}(Y(t))]^2$ 达到最小值的 $\hat{f}: R^m \rightarrow R^m$ 。

上述方法即称为全域预测法。全域法一般适用于 f 不是很复杂, 同时噪声干扰比较小的时候。对于其他情况, 可考虑采用局域法。

(二) 局域预测法[18]

局域法是将相空间轨迹的最后一点作为中心点, 把离中心点最近的若干轨迹点作为相关点, 然后对相关点作出拟合, 再估计轨迹下一点的走向, 最后从预测出的轨迹点的坐标中分离出所需要的预测值。相对全域法, 局域法在大多数情况下适用。

采用相空间重构预测算法, 就是要寻找“历史上情况最相似之处”。以一阶局域法^[18]为例, 所谓一阶局域法, 就是指以 $X(t+1) = a + bX(t)$ 来拟合第 n 点周围的小邻域。设第 n 点

的邻域包括点 $t_1, t_2, \dots, t_p$, 则上式可表示为
$$\begin{bmatrix} X(t_1+1) \\ X(t_2+1) \\ \dots \\ X(t_p+1) \end{bmatrix} = a + b \begin{bmatrix} X(t_1) \\ X(t_2) \\ \dots \\ X(t_p) \end{bmatrix},$$
 可用最小二乘法

计算 a 和 b , 在通过 $X(N+1) = a + bX(N)$ 得到相空间中轨迹的趋势, 从而从 $X(N+1)$ 中分离出时间序列的预测值。

(三) 基于混沌吸引子的预测模型

混沌吸引子之外的任一状态点都有与其邻近状态点共同运动的趋势, 进入吸引子域; 吸引子内的任一状态点与其邻近状态点都有保持在该吸引子域内形成分形结构的运动趋势。因此通过找出预测点的若干临近相关点, 用这些相关点与其后续时间序列的函数关系近似代替预测点与其后续时间序列的函数关系, 可以估计下一点的走向, 并分离出预测值^[27]。本文采用文献^[27]所提出的预测模型如下

$$X(N+1) = \frac{\sum_{i=1}^p X_{Ni} \frac{R - d_i}{R - d_m}}{\sum_{i=1}^p \frac{R - d_i}{R - d_m}} \quad (6-32)$$

其中: $X(N+1)$ 为预测得到的空间轨迹点; X_{Ni} 为预测点 $X(N)$ 邻域内的各点, p 为邻域内点的个数; d_i 和 d_m 分别为邻域内各点到预测点的空间距离和最小距离; R 为邻域半径。当计算得到 $X(N+1)$ 后将其最后一维取出即得到 x_{n+1} 的预测值。

(四) 基于最大 Lyapunov 指数的预报模式[18]

Lyapunov 指数作为量化对初始轨道的指数发散和估计系统的混沌量, 是系统的一个很好的预报参数。其预报模式如下:

不妨设 Y_M 为预报的中心点, 相空间中的最近的邻点为 Y_k , 其距离为 $d_M(0)$, 最大 Lyapunov 指数为 λ_1 , 即

$$\begin{aligned} d_M(0) &= \min_j \|Y_M - Y_j\| = \|Y_M - Y_k\| \\ \|Y_M - Y_{M+1}\| &= \|Y_k - Y_{k+1}\| e^{\lambda_1} \end{aligned} \quad (6-33)$$

其中 Y_{M+1} 点只有最后一个分量 $x(t_{n+1})$ 未知,故 $x(t_{n+1})$ 是可预测的。

其余的混沌预测方法可以参考相关的混沌理论及应用方面的专业书籍和文献。

第五节 分形理论

一、引言

在人类社会和自然界(包括本文所研究的河流水质系统)中都广泛存在着混乱、无序、不规则的复杂现象,近年来非线性科学的兴起对研究这些现象提供了不同于传统方法的研究途径。分形理论是非线性科学的重要组成部分之一,它的提出为描述和揭示隐藏于复杂或混乱现象中的本质结构提供了理论基础。分形是诞生于 20 世纪 70 年代的一个新兴理论,当 Benoit B Mandelbrot 首次通过对英国海岸线长度的测量而提出“英国的海岸线有多长”这个简单而深刻的问题时,就已预示了分形理论及分形几何学的强大生命力。如果用分形的观点看待自然界及事物的发展变化,人们就可以发现这个世界上很多用传统理论难以圆满解释的自然现象及社会现象采用分形理论则能得到较合理的解释。作为一种新兴理论,分形理论仍存在许多需要完善和改进的地方,但随着众多科学工作者的努力其理论本身也日趋成熟。现在分形理论正在越来越多地被引入到众多学科(如化学、物理学、医学、材料学、图形学等)的研究^{[28][29][30][31]}中,推动这些学科的发展。由于采用分形理论还发现了各学科现象间的相似性,因此分形学有可能成为连接各学科的结合部,从而为各学科的交互发展提供契机。

虽然分形理论已经在许多领域中得到了较好的应用,但目前在水环境系统模拟预测这一方面还未见有较系统和深入的应用报道。而现在模拟预测方面所使用的分形方法大都是定性预测某一现象的发展趋势,虽然效果较好,但需要较多的资料数据且并不能给出定量值。对决策者而言则常常希望在对水环境系统进行模拟时得到比较确切的定量化预测结果,因此本节将从其他方面着手采用分形理论进行定量预测模拟。

二、分形理论概述

(一) 分形的概念

分形(fractal)一词最早由 Benoit B Mandelbrot 从拉丁文 fractus 创造出来,其核心是标度不变性,即在任何标度下物体的性质不变^[32]。在无标度区,子体数目 $N(r)$ 与线性尺度 (r) 间存在幂函数关系:

$$N(r) = Cr^{-D} \quad (6-34)$$

其中: D 为分形的特征量——分维数。

分形理论的自相似性最初指形态或结构的相似性,Benoit B Mandelbrot 把自然现象各组成部分以一定方式与自身整体相似的形态称为分形^[33]。随着协同论等新学科的出现,这种自相似概念得以充实与拓展,把信息、功能和时间上的具有自相似性的客体称为广义分形。从数学角度看,分形实际上是一种具有无穷嵌套结构的极限图形,突出特点是不存在特征尺度;而在现实中,分形只是在一定的标度范围内呈现出自相似或自仿射特性,这一标度

范围也就是现实分形的无标度区^[32]。

分形理论和混沌理论都是非线性科学的重要组成部分,混沌理论是从动力学观点研究不可积系统轨道的不稳定性,有助于消除确定论和随机论两套对立理论体系的鸿沟;而分形理论则是从几何角度出发,研究不可积系统几何图形的自相似性质,可以成为描述复杂无规则现象的有力工具,它承认世界的局部可能在一定条件下在某一方面(比如信息、结构、形态等)表现出与整体的相似,也承认空间维数的变化可以连续也可以分散,从而拓宽了研究问题的视野。

(二) 分形的性质

分形揭示了自然界中的复杂现象所隐藏的有组织、有结构的结构,以具有自相似性的无序结构为主要研究对象,其维数是可以变化的。分形因此具有以下一些基本性质^{[32][34]}:

1. 自相似性:一个系统的自相似性是指某种结构或过程的特征从不同的空间尺度或时间尺度来看都是相似的,或者某系统或结构的局域在性质、结构、形态、信息、功能等方面与整体类似。
2. 标度不变性:又被称为伸缩对称性,是指在分形上任选一局部区域,对它进行放大或缩小,其结构、形态、复杂程度、不规则性等各种特性均不会发生变化。
3. 分形的维数可以为整数或分数。
4. 自然现象仅在一定尺度范围一定层次中表现分形特征,也即不同尺度范围或不同层次上的分形特征不同。

(三) 分维数

维数是一定时空的数值特征,分维数^[32]是定量描述分形系统自相似性的参数,通过具体计算得出,可以是整数或分数,以 D 表示。根据研究的具体对象,分维数的具体形式和命名也不相同,常见的有相似维或容量维、信息维、关联维等。

1. 相似维(similarity dimension)或容量维(capacity dimension):假设某一研究时段的子段为 r (标度),在研究时段内现象出现的子段数为 $N(r)$,则分维数为:

$$D = \lim_{r \rightarrow 0} (\ln N(r) / \ln(1/r)) \quad (6-35)$$

可以证明此分维数与豪斯道夫维相等,在本章中分维数采用相似维的形式。

2. 信息维(information dimension) D_1 :是以概率形式表现出的分维数,当用边长为 r 的小盒子覆盖分形结构时, P_i 是分形结构中某些点落入小盒子的概率,也即通常意义上的覆盖概率,表达为:

$$D_1 = \lim_{r \rightarrow 0} \sum_i (P_i \ln P_i / \ln(r)) \quad (6-36)$$

3. 关联维(correlation dimension) D_2 :就是前一节中提到的关联维数,在此

$$D_2 = \lim_{r \rightarrow 0} (\ln C(r) / \ln(r)) \quad (6-37)$$

4. 广义维(generalized dimension) D_q : P_i 是覆盖概率,当 q 取值不同时分维数也不同。

$$D_q = \lim_{r \rightarrow 0} \lim_{q_i \rightarrow q} (1/(q_i - 1) \sum_i (p_i^{q_i} / \ln r)), q = -\infty, \dots, -1, 0, 1, \dots, \infty \quad (6-38)$$

三、分段变维分形方法

(一) 分段变维分形法

由前述可知,分形分布可通过幂指数分布描述,先对其中的各参数进一步说明。对 $N(r) = Cr^{-D}$, r 为特征线度,如时间,距离等; $N(r)$ 为与 r 相关的物理量,如价格、股票指数、测量值等; C 为不随 r 变化的待定常数; D 为分维数。在传统几何中,维数为整数,而在分形中维数可以不为整数,这极大地丰富了传统理论。在一般的分形方法中,分维数是不变的,这虽然有助于简化分析问题,但由于在自然界中并不存在严格满足这种分维关系的现象而使得有些复杂现象不能采用一般的分维方法进行处理。因此付昱华等^{[35][36]}在一般分形理论基础上提出了一种变维分形方法。

对常维分形的分维数 D 和待定常数 C 可由下面方法确定。设特征线度 r_A 和 r_B 所对应的物理量为 N_A 和 N_B ,由分形分布函数可得:

$$\ln N_A = \ln C - D \ln r_A \quad \ln N_B = \ln C - D \ln r_B$$

解得

$$D = \frac{\ln(N_A/N_B)}{\ln(r_B/r_A)} \quad C = N_A r_A^D = N_B r_B^D \quad (6-39)$$

当全部数据点不能与一条分形直线基本符合时,常维分形法就不能应用。而分段变维分形法则采用首尾相连的分段折线拟合全部数据点。对每一线段的 C 和 D 的值,均可采用该线段两端点应用上式确定,这样每一线段的分维数将可能不相同,因此构成了分段变维。

(二) 分段变维分形法的改进

对于分段变维法在求出各段的分维数后可以采用平均分维数进行预测,但往往效果可能不够理想,因此可通过对原始数据进行变换的方法构造更好的分形直线来处理^[36]。

首先构造原始序列和各阶累计和序列。令

$$\begin{aligned} \{N_i\} &= \{N_1, N_2, \dots, N_n\} (i = 1, 2, \dots, n) \\ \{N1_i\} &= \{N1_1, N1_2, \dots, N1_n\} (i = 1, 2, \dots, n) \\ \{N2_i\} &= \{N2_1, N2_2, \dots, N2_n\} (i = 1, 2, \dots, n) \\ \{N3_i\} &= \{N3_1, N3_2, \dots, N3_n\} (i = 1, 2, \dots, n) \\ \{N4_i\} &= \{N4_1, N4_2, \dots, N4_n\} (i = 1, 2, \dots, n) \end{aligned} \quad (6-40)$$

$$\text{其中: } N1_i = \sum_{j=1}^i N_j; N2_i = \sum_{j=1}^i N1_j; N3_i = \sum_{j=1}^i N2_j; N4_i = \sum_{j=1}^i N3_j.$$

构造好各序列后,将数据点绘制于双对数坐标系中,得到离散的分形模型,由 n 个数据点共可得到 $n-1$ 条线段组成的分段变维分形模型,各段的分维数 D 和常数 C 均可由(6-39)式计算得出。

根据求得的分维数选择变换效果最好的分形模型确定相应的分形参数,当分形参数确定之后就可以采用外插计算的方法进行预测了。

四、分形插值

在水质模拟中,如果采用图形显示方式往往更加直观,所以本节也将对采用分形插值思想模拟绘制监测值曲线做一初步探讨。

分形插值是由美国数学家 M. F. Barnsley 于 1986 年提出的,这种拟合数据的新思想,不仅为函数逼近理论开辟了崭新的研究领域,而且为计算机图形学提供了有效的工具,目前应用也较为广泛。

(一) 分形插值函数

分形插值函数的详细内容可以参考文献[37][38],现对其基本思想简述如下。给定 R^2 中的一组数据坐标 $\{(x_i, y_i)\}, i = 0, 1, 2, \dots, N, x_i \in [x_0, x_N], y_i \in [a, b]$ 。则找到的一个分形插值函数 $f(x)$ 应该满足: $f(x): [x_0, x_N] \rightarrow [a, b]$ 是连续函数,且 $f(x_i) = y_i, i = 0, 1, 2, \dots, N$ 。对 $i = (1, 2, \dots, N)$, 定义

$$\begin{cases} L_i(x) = x_{i-1} + (x_i - x_{i-1})(x - x_0)/(x_N - x_0) \\ F_i(x, y) = b_i x + Hy + k_i \end{cases} \quad (6-41)$$

其中 H 为 Hurst 系数,且有

$$\begin{cases} b_i = [y_i - y_{i-1} - H(y_N - y_0)]/(x_N - x_0) \\ k_i = y_{i-1} - Hy_0 - b_i x_0 \end{cases} \quad i = (1, 2, \dots, N) \quad (6-42)$$

令 $T_i(x, y) = (L_i(x), F_i(x, y)), i = (1, 2, \dots, N)$

则 $\{T_i(x, y)\}, i = (1, 2, \dots, N)$ 形成一迭代函数系,其吸引子就是分形插值函数 $f(x)$ 的图像。由上述定义,对 $i = (1, 2, \dots, N)$,显然应有

$$\begin{cases} L_i(x_0) = x_{i-1} \\ L_i(x_N) = x_i \\ F_i(x_0, y_0) = y_{i-1} \\ F_i(x_N, y_N) = y_i \end{cases} \quad (6-43)$$

由定义可以看出 $L_i(x), F_i(x)$ 均为线性,故称 $f(x)$ 为线性分形插值函数。

由于 $f(x)$ 是一个迭代函数吸引子的图像,则它就是一个由观察数据 $\{(x_i, y_i)\}, i = (0, 1, 2, \dots, N)$ 对应的分形集,且该迭代函数系是由仿射变换组成的。

(二) Hurst 系数

1. R/S 分析

R/S(rescaled range analysis) 分析是由自仿射分形衍生,通过改变时间尺度的大小研究时间序列统计规律的变化特征,近年来已经在多个学科中得到应用^{[39][40]}。

在 R/S 分析中, Hurst 指数(简称 H 指数)具有十分重要的意义。Hurst 指数首先由赫斯特引入,他通过研究发现自然现象是一个随机游走的有偏过程,根据统计特性,当 $H = 1/2$ 时观测序列是白噪声序列,变化没有规律;当 $H \neq 1/2$ 时观测序列不独立,具有一定的规律性,每个之中都包含以前的影响。当 $H < 0.5$ 时是反持续的时间序列,其反持续性行为的程

度依赖于 H 距离 0 的程度;当 $0.5 < H < 1.0$ 时是持续性序列,其持续性行为依赖于 H 与 1.0 的距离。

此外,Benoit B Mandelbrot 等人给出了分形布朗运动,定义了自相关函数 C_t 与 H 的关系: $C_t = 2^{2H-1} - 1$ 。这些工作都使 R/S 分析在分形中得到应用。

2. H 指数的计算

计算 H 指数需要与 R/S 分析相联系。R/S 分析的基本思路如下^[41]:将原序列 $\{x_t\}, t = 1, 2, \dots, n$, 分成若干段(子区间),设 $l = 2, 3, \dots, L$ 为子区间的长度, L 是子区间的最大长度, $n_j = [n/l]$ 。设子区间长度为 l ,定义第 j 个子区间的均值、累计偏差、极差、标准差分别为:

$$\begin{aligned}\bar{x}_{lj} &= \frac{1}{l} \sum_{i=1}^l x_{(j-1) \times l + i} \\ \bar{x}_{ljt} &= \sum_{i=1}^l (x_{(j-1) \times l + i} - \bar{x}_{lj}), t = 1, 2, \dots, l \\ R_{lj} &= \max_{1 \leq t \leq l} (x_{ljt}) - \min_{1 \leq t \leq l} (x_{ljt}) \\ S_{lj} &= \left(\frac{1}{l} \sum_{i=1}^l (x_{(j-1) \times l + i} - \bar{x}_{lj})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, j = 1, 2, \dots, n_l\end{aligned}\quad (6-44)$$

而当 $\{x_t\}, t = 1, 2, \dots, n$ 不相互独立时则有 $\frac{R_{lj}}{S_{lj}} \propto l^H$ 。显然上述结果与子区间长度 l 有关,考虑波动幅度在 n_j 个子区间上的平均值,记为 $y_l = \frac{1}{n_l} \sum_{j=1}^{n_l} \frac{R_{lj}}{S_{lj}}$,其中 $l = 2, 3, \dots, L$,则有

$$\ln y_l = \ln \alpha + h \ln l + \epsilon_l, l = 2, 3, \dots, L \quad (6-45)$$

取 $L = n$,计算所得的 $\hat{h}_n$ 即为 H 指数。

五、多维分形模型^[32]

(一) 多维分形模型

设多维分形模型:

$$Y \propto X^{F(D)} \quad (6-46)$$

其中: Y 为单变量, X 为多自变量,根据具体问题可以代表不同的意义; $F(D)$ 称为分维数函数,也可称为一般分维数, D 可谓多维参数, $F(D)$ 选取怎样的函数形式,根据具体研究问题而定。式(6-46)推出许多具体模型。

1. 取 $Y = N$ (覆盖的盒子数目), $X = b$ (盒子的大小或尺寸), $F(D) = -D$ 。得到盒子数目与盒子的大小或尺寸关系:

$$N \propto b^{-D}$$

2. 取 $Y = L(\tau)$ (轨迹的长度), $X = \tau$ (步长大小), $F(D) = 1 - D$ 。得到划分关系:

$$L(\tau) \propto \tau^{1-D}$$

3. 取 $Y = P(\omega)$ (功率), $X = \omega$ (频率), $F(D) = -(5 - 2D)$ 。得到功率谱与频率关系:

$$P(\omega) \propto \omega^{-(5-2D)}$$

4. 取 $Y = N(R)$ (功率), $X = R$ (频率), $F(D) = D$ 。得到扩散限制凝聚(DLA 模型):

$$N(R) \propto R^D$$

式(6-46)可改写为下面的模型:

$$Y = CX^{F(D)} \quad (6-47)$$

此模型就是非线性回归模型, C 为未知参数, $F(D)$ 可看作参数函数。对分维数 D 的研究可以转化为对分维数函数的研究, 其效果是一致的, 因为 $F(D)$ 是 D 的一个一一变换。

(二) 多维自仿射分布函数

以下是多维自仿射分布函数的定义。

1. n 维自仿射(I 型) 分布

如果 n 维随机变量 $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 的联合密度函数为

$$f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = \prod_{j=1}^n a_j k_j^{a_j} x_j^{-(a_j+1)}, a_j > 0; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-48)$$

则随机变量 $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 服从 n 维自仿射(I 型) 分布。其中 a_j ($j = 1, 2, \dots, n$) 称为形状参数, k_j ($j = 1, 2, \dots, n$) 称为尺度参数。

由式(6-48)可得 n 维自仿射(I 型) 分布函数与互补分布函数(超越率函数)

$$\begin{aligned} F_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) &= P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n) = \int_{-\infty}^{x_1} \dots \int_{-\infty}^{x_n} f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) dx_2 \dots dx_n \\ &= \prod_{j=1}^n [1 - (\frac{x_j}{k_j})^{-a_j}] \\ a_j &> 0; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (6-49)$$

$$\begin{aligned} P(X_1 \geq x_1, \dots, X_n \geq x_n) &= \int_{x_1}^{+\infty} \dots \int_{x_n}^{+\infty} f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = \prod_{j=1}^n (\frac{x_j}{k_j})^{-a_j} \\ a_j &> 0; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (6-50)$$

在低端截尾条件下, $(a_j > 0; x_j > k'_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n)$, 可推得下式:

$$\begin{aligned} P(X_1 \geq x_1, \dots, X_n \geq x_n | X_1 \geq k'_1, \dots, X_n \geq k'_n) &= \frac{\prod_{j=1}^n (\frac{x_j}{k_j})^{-a_j}}{\prod_{j=1}^n (\frac{k'_j}{k_j})^{-a_j}} = \prod_{j=1}^n (\frac{x_j}{k'_j})^{-a_j} \\ a_j &> 0; x_j > k'_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (6-51)$$

上式表明 n 维自仿射(Ⅰ型)分布在低端截尾条件下具有分形性质。

$$\begin{aligned} & P(X_1 \geq x_1, \dots, X_n \geq x_n \mid X_1 \geq k'_1, \dots, X_n \geq k'_n) \\ &= P(X_1 \geq cx_1, \dots, X_n \geq cx_n \mid X_1 \geq ck'_1, \dots, X_n \geq ck'_n) \quad (6-52) \\ & a_j > 0; x_j > k'_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

上式表明 n 维自仿射(Ⅰ型)分布具有尺度不变的特征。其中 $k'_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 为尺度参数, c 为任意正的常数。

由式(6-48)可求得边缘分布密度函数和边缘分布函数:

$$f_{X_j}(x_j) = a_j k_j^{a_j} x_j^{-(a_j+1)}, j = 1, 2, \dots, n \quad (6-53)$$

$$F_{X_j}(x_j) = 1 - \left(\frac{x_j}{k_j}\right)^{-a_j}, a_j > 0; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-54)$$

上式即为一维帕累托分布(Pareto distribution)的密度函数和分布函数。

它们的数学期望和方差为:

$$E(X_j) = a_j k_j (a_j - 1)^{-1}, a_j > 1; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-55)$$

$$D(X_j) = a_j k_j^2 (a_j - 2)^{-1} (a_j - 1)^{-2}, a_j > 2; x_j > k_j > 0; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-56)$$

因为

$$f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = f_{X_1}(x_1) \cdots f_{X_n}(x_n)$$

所以 n 维自仿射(Ⅰ型)随机变量 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 相互独立。

2. n 维自仿射(Ⅱ型)分布

如果 n 维随机变量 $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 的联合密度函数

$$f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = \prod_{j=1}^n a_j k_j^{a_j} x_j^{a_j-1}, a_j > 0; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-57)$$

则随机变量 $(X_1, X_2, \dots, X_n)$ 服从 n 维自仿射(Ⅱ型)分布。其中 $a_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 称为形状参数, $k_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 称为尺度参数。

由式(6-57)可得 n 维自仿射(Ⅱ型)分布函数与互补分布函数(超越率函数)

$$\begin{aligned} F_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) &= P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n) \\ &= \int_{-\infty}^{x_1} \cdots \int_{-\infty}^{x_n} f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n \\ &= \prod_{j=1}^n \left(\frac{x_j}{k_j}\right)^{a_j} \end{aligned}$$

$$a_j > 0; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n$$

$$P(X_1 \geq x_1, \dots, X_n \geq x_n) = \int_{x_1}^{+\infty} \cdots \int_{x_n}^{+\infty} f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) dx_1 \cdots dx_n = \prod_{j=1}^n [1 - (\frac{x_j}{k_j})^{a_j}]$$

$$a_j > 0; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n$$

(6-59)

在高端截尾条件下, $(a_j > 0; 0 < x_j < k'_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n)$, 可推得下式:

$$P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n \mid X_1 \leq k'_1, \dots, X_n \leq k'_n) = \frac{\sum_{j=1}^n (\frac{x_j}{k_j})^{a_j}}{\prod_{j=1}^n (\frac{k'_j}{k_j})^{a_j}} = \prod_{j=1}^n (\frac{x_j}{k'_j})^{a_j}$$

$$a_j > 0; 0 < x_j < k'_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n$$

(6-60)

上式表明 n 维自仿射(II 型)分布在高端截尾条件下具有分形性质。

$$\begin{aligned} & P(X_1 \leq x_1, \dots, X_n \leq x_n \mid X_1 \leq k'_1, \dots, X_n \leq k'_n) \\ &= P(X_1 \leq cx_1, \dots, X_n \leq cx_n \mid X_1 \leq ck'_1, \dots, X_n \leq ck'_n) \end{aligned} \quad (6-61)$$

$$a_j > 0; 0 < x_j < k'_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n$$

上式表明 n 维自仿射(II 型)分布具有尺度不变的特征。其中 $k'_j (j = 1, 2, \dots, n)$ 为尺度参数, c 为任意正的常数。

由式(6-57)可求得边缘分布密度函数和边缘分布函数:

$$f_{X_j}(x_j) = a_j k_j^{-a_j} x_j^{a_j-1}, j = 1, 2, \dots, n \quad (6-62)$$

$$F_{X_j}(x_j) = (\frac{x_j}{k_j})^{a_j}, a_j > 0; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-63)$$

上式即为一维幂函数分布(Power-function distribution)的密度函数和分布函数。

它们的数学期望和方差为:

$$E(X_j) = a_j k_j (a_j + 1)^{-1}, a_j > 0; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-64)$$

$$D(X_j) = a_j k_j^2 (a_j + 2)^{-1} (a_j + 1)^{-2}, a_j > 2; 0 < x_j < k_j; j = 1, 2, \dots, n \quad (6-65)$$

因为

$$f_{X_1, \dots, X_n}(x_1, \dots, x_n) = f_{X_1}(x_1) \cdots f_{X_n}(x_n)$$

所以 n 维自仿射(II 型)随机变量 $X_1, X_2, \dots, X_n$ 相互独立。

多维自仿射分布是自仿射分形的数学基础,它研究统计分形体各向异性的情况,即在不同方向具有不同标度因子,应用较为广泛。

以上介绍了分形理论的一些基础知识,为了更深入地了解和应用分形理论,可以参看相关的专业书籍。采用分形理论对水环境系统进行定量化的模拟预测,这本身就是一种尝试性的探讨,分形方法在定量化的模拟中还存在许多值得进一步研究的地方,比如可将 R/S 分析

与分段变维分形相结合进行预测,为使精度提高而对变维预测法的进一步改进,其他定量化方法的标准化等。但可预想,随着分形理论不断完善,其在水环境系统模拟中的应用将会不断深入。

参 考 文 献

- [1]陈良均,朱庆棠. 随机过程及应用[M]. 北京:高等教育出版社,2003
- [2]闵华玲. 随机过程[M]. 上海:同济大学出版社,1987
- [3]孙荣恒. 随机过程及其应用[M]. 重庆:重庆大学出版社,1991
- [4]孙才志,张戈,林学钰. 加权马尔可夫模型在降水丰枯状况预测中的应用[J]. 系统工程理论与实践, 2003,4:100—105
- [5]丛爽. 面向 MATLAB 工具箱的神经网络理论与应用[M]. 合肥:中国科学技术大学出版社,2003
- [6]党建武. 神经网络技术及应用[M]. 北京:中国铁道出版社,2000
- [7]姚重华. 环境工程仿真与控制[M]. 北京:高等教育出版社,2001
- [8]Kun Chang Lee, Ingoo Han, Youngsig Kwon. Hybrid neural network models for bankruptcy predictions [J]. Decision support systems, 1996, 18(1): 63—72
- [9]R. J. Kuo, K. C. Xue. An intelligent sales forecasting system through integration of artificial neural network and fuzzy neural network[J]. Computers in industry, 1998, 37(1): 1—15
- [10]Hussein A. Abbass. An evolutionary artificial neural networks approach for breast cancer diagnosis[J]. Artificial intelligence in medicine, 2002, 25(3): 265—281
- [11]姚云波,夏立. 基于神经网络的感应电机故障诊断分类决策方法研究[J]. 计算机测量与控制, 2004, 12(1): 24—26
- [12]魏文秋,孙春鹏. 神经网络水质模拟预测模型[J]. 中国农村水利水电(农村水利与小水电), 1996, 1—2: 26—29.
- [13]郭劲松,霍国友,龙腾锐. BOD—DO 耦合人工神经网络水质模拟的研究[J]. 环境科学学报, 2001, 21(2): 140—143
- [14]郭宗楼,申玮. 水质预测的因素状态网络模型研究[J]. 浙江大学学报(农业与生命科学版), 2000, 26(4): 361—364
- [15]李莹,邹经湘,张宇羽,等. 自适应神经网络在水质预测建模中的应用[J]. 系统工程, 2001, 19(1): 89—93
- [16]淮南市环境质量报告书[1996—2000][R]. 淮南:淮南市环境保护局, 2001
- [17]Gaudill M. neural Networks Primer[M]. San Francisco, CA: Miller Freeman Publications, 1989
- [18]吕金虎,陆君安,陈士华. 混沌时间序列分析及其应用[M]. 武汉:武汉大学出版社, 2002
- [19]王东生,曹磊. 混沌、分形及其应用[M]. 合肥:中国科学技术大学, 1995
- [20]Albert X. J. Luo, Ray P. S. Han. Analytical predictions of chaos in a non-linear rod[J]. Journal of sound and vibration, 1999, 227(3): 523—544
- [21]Michael Smithson. Judgement under chaos[J]. Organizational behavior and human decision processes, 1997, 69(1): 59—66
- [22]Hiroshi Shibata. Quantitative characterization of spatiotemporal chaos[J]. Physica A, 1998, 25(3—4): 428—449
- [23]Zheng—Ming Ge, Hong—Wen Wu. Chaos synchronization and chaos anticontrol of a suspended track with moving loads[J]. Journal of sound and vibration, 2004, 270(4—5): 685—712
- [24]黄润生. 混沌及其应用[M]. 武汉:武汉大学出版社, 2000

- [25]朱建林,刘志国,周应旺,等. 降水酸度时间序列的确定性混沌[J]. 湖南城市学院学报(自然科学), 2003,24(3):93—96
- [26]丁晶,王文圣,赵永龙. 长江日流量混沌变化特性研究— I 相空间嵌入滞时的确定[J]. 水科学进展, 2003,14(4):407—411
- [27]向小东,郭耀煌. 基于混沌吸引子的时间序列预测方法及其应用[J]. 西南交通大学学报,2001,36(5): 472—475
- [28]A. Scotti, C. Meneveau. A fractal model for large eddy simulation of turbulent flow[J]. Physica D, 1999, 127:198—232
- [29]R. Pitchumani, B. Ramakrishnan. A fractal geometry model evaluating permeabilities of porous performs used in liquid composite molding[J]. International journal of heat and mass transfer, 1999, 42:2219—2232
- [30]P. Podsiadlo, G. W. Stachowiak. Scale— invariant analysis of wear particle morphology— a preliminary study[J]. Tribology international, 2000, 33:289—295
- [31]Kazuyoshi Nanjo, Hiroyuki Nagahama. Fractal properties of spatial distributions of aftershocks and active faults[J]. Chaos, solitons and fractals, 2004, 19:387—397
- [32]申维. 分形混沌与矿产预测[M]. 北京:地质出版社, 2002
- [33]冯利华. 基于 R/S 分析的水资源预测[J]. 系统工程理论与实践, 2002, 4:115—118
- [34]张济忠. 分形[M]. 北京:清华大学出版社, 1995
- [35]付昱华. 平移分形分析和预测月平均海面水温[J]. 海洋预报, 1996, 13(2):63—68
- [36]付昱华, 付安捷. 用分形方法预测石油股票价格和指数[J]. 中国海洋平台, 2002, 17(6):41—45
- [37]Barnsley M F. Fractal functions and interpolation[J]. Const. Approx, 1986(2):303—329
- [38]申富饶, 王嘉松. 股票价格的一种线性分形预测方法[J]. 南京大学学报(自然科学), 1999, 35(4):396—401
- [39]黄勇, 周志芳, 王锦国, 等. R/S 分析法在地下水动态分析中的应用[J]. 河海大学学报, 2002, 30(1):83—87
- [40]高振会, 杨建强, 费立淑. 分形分析方法在海冰预测趋势中的应用[J]. 海洋通报, 2003, 22(4):66—69
- [41]王刚. 基于非线性分形理论的资本市场预测方法研究[D]. 天津:天津大学, 2002

第七章 MATLAB 在水环境系统模拟中的应用

Math Works 公司推出的 MATLAB 是一个为科学和工程计算而专门设计的高级交互式的数学软件包。MATLAB 环境集成了图示与精确的数值计算,是一个可以完成各种计算和数据可视化的有力工具。MATLAB 语言简洁紧凑,编程效率高,用户操作界面方便,图形图像处理功能强大,运算符丰富,工具箱全面且可以随时扩充,因此深受科学工作者和广大用户的喜爱。目前,MATLAB 已经在应用数学、物理、化学、工程技术、医药、金融、通信工程、系统仿真及其他涉及到复杂数值计算的应用领域发挥了重要作用。本章将对 MATLAB 进行简要地介绍,并通过举例说明其在水环境系统模拟中的应用。

第一节 概 述

在本节中,将对 MATLAB 的发展历史、主要特点、操作界面等作一介绍^{[1][2][3][4]}。

一、MATLAB 的历史背景及影响

MATLAB 名字由矩阵(MATrix)和实验室(LABoratory)两词的前三个字母组合而成。20 世纪 70 年代后期,时任美国新墨西哥大学计算机科学系主任的 Cleve Moler 教授和同事开发了 EISPACK 和 LINPACK 的 FORTRAN 子程序库,主要用于求解线性方程组。其后,Cleve Moler 教授出于减轻学生编程负担的动机,为学生设计了一组调用 EISPACK 和 LINPACK 库程序的“通俗易懂”的接口,此即用 FORTRAN 编写的萌芽状态的 MATLAB。

此后几年,MATLAB 主要作为一种免费软件在大学里使用,并在校际流传。1983 年的春天,一个偶然的机会,Cleve Moler 教授到 Stanford 大学讲学,他的 MATLAB 深深吸引了一位名叫 John Little 的工程师。在这次讲课过程中,John Little 敏锐地察觉到了 MATLAB 在工程领域的广阔前景。于是他与 Cleve Moler 一起,用 C 语言开发了 MATLAB 的第二代专业版本。

在 Little 的推动下,由 Little、Moler、Steve Bangert 合作,于 1984 年成立了 Math Works 公司,正式把 MATLAB 推向市场,并继续 MATLAB 的研发工作。从这时起,MATLAB 的内核采用 C 语言编写,而且除原有的数值计算能力外,还新增了数据图视功能。1993 年,Math Works 公司推出 MATLAB4.0;1995 年,Math Works 公司 MATLAB4.2C 版;1997 年推出了 MATLAB5.0 版;1999 年,推出了 MATLAB5.3 版本;2000 年 10 月,Math Works 公司推出了 MATLAB6.0 版;2002 年 8 月,新版本 MATLAB6.5 开始发布。Math Works 公司的每一次版本的推出都使 MATLAB 产生长足的进步,其界面越来越友好,内容越来越丰富,功能也越来越强大。

MATLAB 以商品形式出现后,仅短短几年,就以其良好的开放性和运行的可靠性,使原先控制领域里的封闭式软件包(如英国的 UMIST,瑞典的 LUND 和 SIMNON,德国的 KEDDC)纷纷被淘汰,而改以 MATLAB 为平台加以重建。进入 20 世纪 90 年代,MATLAB

已经成为国际控制界公认的标准计算软件。20 世纪 90 年代初期,在国际上 30 多个数学类科技应用软件中,MATLAB 在数值计算方面独占鳌头。

在欧美大学里,诸如应用代数、数理统计、自动控制、数字信号处理、模拟与数字通信、时间序列分析、动态系统仿真等课程的教科书,都把 MATLAB 作为内容。这几乎成了 20 世纪 90 年代教科书与旧版书籍的区别性标志。在那里,MATLAB 是攻读学位的大学生、硕士生、博士生必须掌握的基本工具。

在国际学术界,MATLAB 已经被确认为准确、可靠的科学计算标准软件。在许多国际一流学术刊物上(尤其是信息科学刊物),都可以看到 MATLAB 的应用。

在设计研究单位和工业部门,MATLAB 被认作进行高效研究、开发的首选软件工具,如美国 National Instruments 公司信号测量、分析软件 LabVIEW,Cadence 公司信号和通信分析设计软件 SPW 等,或者直接建筑在 MATLAB 之上,或者以 MATLAB 为主要支撑。

二、MATLAB 语言的特点

第三代计算机语言如 C 和 FORTRAN 语言等,使人们摆脱了对计算机硬件的操作。而第四代计算机语言 MATLAB 具有不同于其他高级语言的特点,它使人们从繁琐的程序代码中解放出来。其丰富的函数使开发者无需重复编程,只要简单地调用和使用既可。作为计算机计算的强有力工具,MATLAB 以矩阵作为数据操作的基本单位,因此是以矩阵运算为主要工作方式的数理统计、自动控制、数字信号处理、动态系统仿真等方面的重要工具。MATLAB 除具有强大数值计算和图形功能外,它还有其他语言难以比拟的功能,此外,它和其他语言的接口能够保证它可以和各种各样的强大计算机软件相结合,发挥更大的作用。MATLAB 的特点主要体现在以下几个方面:

(一) 用户使用方便

MATLAB 语言是一种解释执行的语言(在没有被专门的工具编译之前),它方便、灵活、操作简单,其调试程序的手段丰富,调试速度快,对用户而言,短时间内即可学会。

一般而言,人们使用任何一种语言编写和调试程序都要经过 5 个步骤:编辑、编译、连接、执行和调试。各个步骤之间是顺序关系,编程的过程就是在它们之间作瀑布型的循环。与其他语言相比 MATLAB 语言,把编辑、编译、连接和执行融为一体,较好地解决了上述问题。它能在同一画面上进行灵活操作,快速排除输入程序中的书写错误、语法错误以及语言错误,从而加快了用户编写、修改和调试程序的速度,从编程和调试过程来看,MATLAB 比面向对象的 VB 语言还要简单。

当 MATLAB 运行时,如直接在命令行输入 MATLAB 语句命令,包括调用 M 文件,每输入一条语句,就立即对其进行处理,完成编译、连接和运行的全过程。又比如,将 MATLAB 源程序编译为 M 文件,由于 MATLAB 磁盘文件也是 M 文件,所以编译后的源文件就可以直接运行,而不需要进行编译和连接。在运行 M 文件时,如果有错,计算机屏幕上会给出详细的出错信息,用户经过修改后再执行,直到正确为止。可以说,MATLAB 语言不仅是一种高级语言,广义上讲它还是一种语言开发系统,即语言调试系统。

(二) 编程效率高

MATLAB 语言是一种面向科学和工程计算的高级语言,允许用数学形式的语言编写程序,且比 BASIC、FORTRAN 和 C 语言等更加接近于人们书写计算公式的思维方式。用

MATLAB 编写程序就好像是在演算纸上排列出公式和求解问题,因此 MATLAB 语言也被通俗地称为演算纸式科学算法语言。由于 MATLAB 本身编写简单,所以编程效率高,无论对初学者还是专业人员都易学易懂。

(三) 扩充能力强

MATLAB 语言经过了很多版本,每一次的版本更新都对其功能有很大扩充。高版本的 MATLAB 语言有丰富的库函数,在进行复杂的数学运算时可以直接调用,而且 MATLAB 的库函数在形式上与用户文件一样,用户文件也可作为 MATLAB 的库函数来调用。因此,用户可以根据自己的需要方便地建立和扩充新的库函数,以便提高 MATLAB 使用效率和扩充 MATLAB 的功能。此外,其他高级语言由于各自具备不同的特点和优势,也都有广泛的应用,为了充分地利用已有的 FORTRAN、C 语言等资源,可以通过建立 Mex 调用文件格式,混合编程,这能够方便地调用有关 FORTRAN、C 语言的子程序。良好的交互性使得程序书写者可以使用以前编写过的程序,减少重复性工作,也使现在编写的程序具有重复利用的价值。

(四) 语句简单

MATLAB 语言中最基本、最重要的成分是函数,其一般形式为 $[a, b, c, \dots] = \text{fun}(h, i, j, \dots)$, 即一个函数有函数名、输入变量 $h, i, j, \dots$ 和输出变量 $a, b, c, \dots$ 组成。同一函数名 fun, 不同数目的输入变量(包括无输入变量)及不同数目的输出变量,代表着不同的含义。这不仅使 MATLAB 的库函数更加丰富,而且大大减少了所需的磁盘空间,使得 MATLAB 编写的 M 文件简单、短小而实用。

(五) 矩阵和数组运算高效方便

MATLAB 语言像 BASIC、FORTRAN、C 语言一样规定了矩阵的算术运算符、关系运算符、逻辑运算符、条件运算符及赋值运算符,而且这些运算符大部分可以毫无改变地照搬到数组建的运算,有些运算符(如算术运算符)只要适当改变形式就可用于数组间的运算。此外, MATLAB 不需定义数组的维数,并给出了矩阵函数、特殊矩阵专门的库函数,使在求解诸如信号处理、建模、系统识别、控制、优化等领域的问题时,显得极为简捷、高效、方便,这也是其他高级语言所不能够比拟的。

(六) 方便的绘图功能

MATLAB 的绘图功能是十分方便的,它有一系列绘图函数(命令),例如线性坐标、对数坐标、半对数坐标及极坐标等,可方便地绘制出二维图形和三维图形。只需调用相应的函数(命令),就可以在图上标出图题、XY 轴标注,格栅绘制也只需要调用相应的命令即可,简单易行。此外,在调用绘图函数时调整自变量可绘出不同颜色的点、线、复线或多重线等。这种为科学研究着想的设计是通用编程语言所不及的。

(七) 移植性好,源程序开放

MATLAB 是用 C 语言编写的,而 C 语言的可移植性很好。因此, MATLAB 可以很方便地移植到运行 C 语言的操作平台上。MATLAB 适合的工作平台有: Windows 系列、UNIX、Linux、VMS6.1、PowerMac。

开放性也许是 MATLAB 最受人们欢迎的特点。除了内部函数以外,所有 MATLAB 的核心文件和工具箱文件都是刻度可改的源文件,用户可通过对源文件的修改以及加入自己的文件来构成新的工具箱。

2002 年 Math Works 公司发布的 MATLAB 最新产品 6.5 版,其特点在于全新的桌面和各种不同领域的集成工具,使用户易于使用。多种新工具简化了一般的工作,如资料输入、快速分析,并可创造出高品质且具有实用性的图表分析等。MATLAB6.5 包含了 JIT 加速度计。JIT 加速度计极大地加快了 MATLAB 中的许多操作的计算速度。其他的新的特色包括以下几方面:

1. 外部接口

- (1) 改进了自动化客户接口:新的查看和修改属性用户接口,增强了事件和例外句柄。
- (2) 增强了网络集成:读 URL 的内容,在 MATLAB 中发送 E-mail 及解压缩文件。

2. 开发环境

- (1) 新的 M-文件接口,能更好地理解 M-代码。
- (2) 新的启动按钮,易于执行共同的命令。
- (3) 增强了数组编辑器:与 Excel 之间剪切、复制、删除和交换单元的新功能,支持更大的数组。

- (4) 改进了编辑和调试工具。

- (5) 支持新的图形用户接口,可以从 HDF 或 HDF-EOS 文件导入数据。

- (6) 改进了文件和目录管理工具。

- (7) JVM1.3.1 支持 Windows、Linux 和 Solaris 平台

- (8) 改进与 PC 平台的控制接口。

3. 编程和数据类型

- (1) 增加了变量名、函数名和文件名的最大长度:变量名、函数名、子函数名、结构域名、M 文件名、MEX 文件名和 MDL 文件名可以达到 63 个字节。

- (2) 支持 64 位的文件偏移量,能够为大于 2GB 的数据文件实现低层次的 I/O 函数。

- (3) 支持是用动态域名来访问和修改结构数组。

- (4) 简化了 AND 和 OR 逻辑运算。

- (5) 支持有符号和无符号的 64 位整数。

- (6) 改进了音频支持。

- (7) 支持新的 MATLAB 定时器,而不是定时执行 MATLAB 命令。

- (8) 加强了警告和错误提示功能,支持格式化的字符串和消息标识符。

4. 数学

- (1) 新的数学计算和算法改进。

- (2) 在 Pentium4 上更快地计算许多函数,比如矩阵乘法、矩阵转置和线性代数运算。

5. 图形

提高了图形性能:新的彩色图形编辑器,改进了图形特性编辑器。

当然须指出的是:许多新特色并不是适合于所有的平台。

三、MATLAB 的构成

MATLAB 是一种用于工程计算的高级语言,它集成了计算功能,可实现数据的可视化。MATLAB 一般主要包括 5 部分的内容:MATLAB 的工作环境、MATLAB 的数学函数库、MATLAB 语言、句柄图形和 MATLAB 的应用程序接口(API)。

(一) MATLAB 工作环境

MATLAB 的工作环境是一个集成了许多应用程序和工具的工作空间。在这个工作空间中,用户或程序开发者可以应用不同的功能完成他们的工作。

MATLAB 工作环境给用户提供了在工作空间内管理变量和输入、输出数据的功能,并给用户提供了不同的工具用以管理、调试 M 文件和 MATLAB 应用程序。

MATLAB 工作环境主要包括以下几部分:

1. 命令窗口

命令窗口是 MATLAB 提供给用户的操作界面,在命令窗口中,用户可实现 MATLAB 的各种功能。

2. M 文件编辑器(M 文件是 MATLAB 所特有的使用该语言编写的磁盘文件)

M 文件编辑器是 MATLAB 为用户提供的用于编辑 M 文件的程序。

3. M 文件调试器

同其他高级语言类似,MATLAB 为用户提供了用于调试 M 文件的程序。

4. MATLAB 工作空间

MATLAB 工作空间是显示用户在 MATLAB 中通过命令行进行操作的变量的集合的窗口。

5. 在线帮助文档

MATLAB 为用户提供了强大的在线帮助。通过使用 MATLAB 提供的帮助,用户不仅可以查询函数的用法,学习 MATLAB 的使用,还可以从一个 MATLAB 的初学者逐渐变为精通 MATLAB 的高手。

(二) MATLAB 数学函数库

MATLAB 数学函数库包含了大量的数学函数,该函数库既包含了如求和(sum)、正弦(sin)、余弦(cos)等基本函数,还包含了转置矩阵、快速傅立叶变换等复杂函数。

MATLAB 数学函数通过两种方式提供给用户:

1. 内部函数

MATLAB 内部数学函数是一些较简单的函数,因为这些函数是直接内置于 MATLAB 核心中的,所以其执行效率很高。

2. 以 M 文件的形式提供的函数

MATLAB 中以 M 文件的形式提供的函数极大地扩展了 MATLAB 的功能,使得 MATLAB 能够应用于越来越多的领域。

(三) MATLAB 语言

MATLAB 语言是一种高级矩阵语言。随着研究的不断深入,MATLAB 语言已成带有独特的数据结构、输入输出、流程控制语句和函数,并且面向对象的高级语言。

MATLAB 语言在工程计算方面具有无可比拟的优异性能。它集计算、数据可视化和程序设计于一体,并能将问题和解决方案以用户熟悉的数学符号表示出来。

(四) 句柄图形

句柄图形是 MATLAB 的图形系统,它包括对二维和三维数据的可视化、图像处理、动画制作等高层次的绘图命令,也包括可以完全修改局部和编制完整图形界面的较低层次的绘图命令。

(五) MATLAB 应用程序接口(API)

MATLAB 应用程序接口(API) 实际上是一个让 MATLAB 语言同 C、FORTRAN 等其他高级语言进行交互的函数库。该函数库的函数通过动态链接来读写 MATLAB 文件。

MATLAB 应用程序接口的主要功能如下:

1. 从 MATLAB 中调用 C 和 FORTRAN 程序;
2. 从 MATLAB 中输入输出数据;
3. 在 MATLAB 和其他应用程序之间建立客户机 / 服务器关系。

四、MATLAB 的桌面和桌面工具

MATLAB 既是一种语言, 又是一个编程环境。作为一个编程环境, MATLAB 为用户提供了很多方便管理的工具, 分别是命令窗口、命令历史窗口、开始菜单、帮助浏览器、当前目录浏览器、工作空间浏览器、数组编辑器、程序编辑器等。这里将结合 MATLAB6.5 简要介绍这些桌面工具。

(一) 命令窗口和命令历史窗口

命令窗口是 MATLAB 的重要组成部分, 是用户和 MATLAB 交互的工具, 也是 MATLAB 执行函数命令的窗口。

要打开命令窗口, 只要选取“View”的“Command Window”即可。在 MATLAB 的高版本中, 用户可通过菜单对命令窗口进行管理, 同时也可通过命令对命令窗口进行控制。

命令历史窗口是 MATLAB 命令的执行日志, 在命令窗口中每执行一条命令, 都会在命令历史窗口记录下来。反之, 在命令历史窗口中要查看曾经执行过的命令, 只需双击某条命令, 该命令就会在命令窗口重新执行一次。要打开命令历史窗口, 只需选取“View”的“Command History”即可。

(二) 开始菜单

MATLAB 的开始菜单为用户提供同 MATLAB 工具箱、演示界面和帮助系统的直接联系, 用户只需双击菜单项便可进入相应的工具箱、演示界面或帮助系统。

若要打开开始菜单, 只需选取“View”的“Launch Pad”即可。

(三) 帮助浏览器

MATLAB 新版本的帮助界面是以浏览器的形式给出的, 察看帮助信息是十分方便的。帮助浏览器由两部分组成: 帮助导航窗口面板位于窗口的左边, 用于搜索信息, 包括产品过滤器、目录框和搜索框; 信息显示面板位于窗口的右边, 用于查看文档内容。

(四) 当前目录浏览器

MATLAB 将许多内部函数分门别类地放在不同的子目录下, 因此它在工作时将依次搜索这些子目录。搜索时, MATLAB 首先查看当前目录, 然后查看搜索路径中的目录。任何需要执行的文件都须放在当前目录或搜索路径中, 文件才能顺利运行。

一种改变当前目录快速而又高效的方法是使用 MATLAB 桌面上的目录工具条。

若要搜索、查看、打开或改变 MATLAB 的目录或文件, 则要使用 MATLAB 当前目录浏览器。而在 MATLAB 中使用 path 命令则可以查看 MATLAB 默认搜索的路径。

(五) 工作空间浏览器

在 MATLAB 中, 工作空间是一个很重要的概念。工作空间是由运行 MATLAB 程序或

命令生成的所有变量和 MATLAB 提供的常量所构成的空间。每打开一次 MATLAB, MATLAB 将会自动建立一个工作空间, 工作空间在 MATLAB 运行期间一直存在, 关闭 MATLAB 后工作空间将自动消失。刚打开的工作空间只有 MATLAB 提供的几个常量。

要打开工作空间, 只需选取“View”的“Workspace”即可。

双击工作空间的变量, 将打开一个数组编辑器。

(六) 程序编辑器

MATLAB 提供了一个内置的具有编辑和调试功能的程序编辑器。使用程序编辑器能够编辑和调试 M 文件。

要打开程序编辑器, 只需选取“File”的“New”, 调用“M—File”命令即可。在程序编辑器中, 不同的文本内容分别用不同颜色的字体显示, 以便于调试程序。

五、MATLAB 语言入门^{[5][6]}

(一) 矩阵

MATLAB 中最重要也是最基本的功能就是矩阵的运算。

在 MATLAB 中, 一个矩阵既可以是普通数学意义上的矩阵, 也可以是标量或向量。对于标量(一个数)可以将之作为 1×1 的矩阵, 而向量则可认为是 $1 \times n$ 或 $n \times 1$ 的矩阵。此外, 一个 0×0 矩阵在 MATLAB 中被称为空矩阵。

在 MATLAB 语言中, 要表示一个矩阵是很容易的事。例如, 矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 9 & 8 & 7 \\ 6 & 5 & 4 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

可以由下面的 MATLAB 语句直接输入到工作空间中。

```
>> A = [9 8 7; 6 5 4; 3 2 1]
```

A =

```
9      8      7
6      5      4
3      2      1
```

矩阵的内容由方括号括起来的部分表示, 而在方括号中的分号表示矩阵的换行, 逗号或空格表示同一行矩阵元素间的分隔。给出了上面的命令, 就可以在 MATLAB 的工作空间中建立一个 A 变量了。

在 MATLAB 编程中有一个约定, 如果在一个赋值语句后面没有分号, 则所得出的结果将在 MATLAB 命令窗口中显示出来, 显示的格式如上面所示。如果不想显示中间结果, 则应该在语句后面加一个分号, 如:

```
>> A = [9 8 7; 6 5 4; 3 2 1];
```

当然, MATLAB 也可通过“Load”命令加载外部数据文件创建矩阵。

如, 对于一个全部由数据组成的文本文件

```
1.0  2.0  3.0  4.0  5.0
6.0  7.0  8.0  9.0  10.0
```

用户将上述文本另存为 B.mat, 然后在 MATLAB 的命令窗口中输入命令:

>> load B.mat

则 MATLAB 将自动创建一个变量名为 B 的矩阵。

而 MATLAB 语言为用户提供了产生基本矩阵和特殊矩阵的函数,其中包括

- zeros 函数(产生元素全为 0 的矩阵)
- ones 函数(产生元素全为 1 的矩阵)
- rand 函数(产生统一分布随机元素矩阵)
- randn 函数(产生正式分布随机元素矩阵)
- magic 函数(产生 N 阶方阵,其行、列和对角线元素之和相等)
- diag 函数(产生对角矩阵)
- triu 函数(产生上三角矩阵)
- tril 函数(产生下三角矩阵)
- eye 函数(产生指定行数和列数的单位矩阵)
- size 函数(返回指定矩阵的行数和列数)

(二) 运算符

1. MATLAB 的算术运算符

表 7-1 算术运算符

操作符	解释	操作符	解释
+	加	.*	数组乘方
-	减	\	矩阵左除
*	矩阵乘	.\	数组左除
.*	数组乘	/	矩阵右除
^	矩阵乘方	./	数组右除

2. MATLAB 的关系运算符

表 7-2 关系运算符

操作符	解释	操作符	解释
==	等于	<	小于
~=	不等于	>=	大于等于
>	大于	<=	小于等于

3. MATLAB 的逻辑运算符

表 7-3 逻辑运算符

操作符	解释
&	逻辑和
	逻辑或
~	逻辑非

4. MATLAB 中的其他操作符

表 7-4 其他操作符

操作符	解释	操作符	解释
:	冒号,在 MATLAB 中非常重要	.	小数点或域访问符
;	分号,用于分隔行	..	父目录
,	逗号,用于分隔列	...	用于语句行尾端表示该行未完
()	圆括号,指出在算术表达式中的先后次序	%	用于注释
[]	方括号,用于构成向量和矩阵	!	用于调用操作系统命令
{}	大括号,用于构成单元数组	=	用于赋值

下面对一些重要符号进行说明。

(1) 矩阵的左除

MATLAB 定义了除法运算,它涉及到矩阵的求逆运算。MATLAB 还定义了矩阵的左除及右除,在这里只给出一般的等效关系。

MATLAB 中用“\”运算符号表示两个矩阵的左除, $A \setminus B$ 即由 Gauss 消去法来获得线性方程 $AX = B$ 的解 X ,亦即 $X = A^{-1}B$ 。如果 A 矩阵不是方阵,也可以求出 $A \setminus B$,这时将使用最小二乘法来求取 $AX = B$ 的解 X 矩阵。用这种方法得出的解可能与使 $\text{pinv}()$ 函数得出伪逆后再求出的结果不一致,所以使用时应该注意。MATLAB 中矩阵的左除运算还可由函数 $\text{mldivide}(A, B)$ 得出。

(2) 矩阵的右除

MATLAB 中定义了“/”符号,用于表示两个矩阵的右除,相当于求方程 $XA = B$ 的解。 A 为非奇异矩阵时 B/A 为 BA^{-1} ,但在计算方法上存在差异,更精确地,有 $B/A = (A' \setminus B')'$ 。MATLAB 中矩阵的右除运算还可由函数 $\text{mrdivide}(A, B)$ 得出。

(3) 点运算

MATLAB 中定义了一种特殊的运算,即所谓的点运算。两个矩阵之间的点运算是它们相应元素的直接运算。例如 $C = A .* B$ 表示 A 和 B 矩阵的相应元素之间直接进行乘法运算,然后将结果赋给 C 矩阵,即 $c_{ij} = a_{ij}b_{ij}$ 。这种点乘积运算又称为 Hadamard 乘积。注意,点乘积运算要求 A 和 B 矩阵的维数相同。可以看出,这种运算和普通乘法运算是不同的。

(三) 变量

MATLAB 不要求用户在输入变量时进行声明,也不需要指定其阶数。当用户在 MATLAB 工作空间内输入一个新的变量时, MATLAB 会自动给该变量分配适当的内存,若用户输入的变量已经存在,则 MATLAB 将使用新输入的变量替换原有的变量。

1. 变量命名规则

MATLAB 的变量命名规则如下:

- 变量名应以字母开头
- 变量名可以由字母、数字和下划线混合组成
- 组成变量名的字符长度应不大于 31 个
- MATLAB 区分大小写

2. 固定变量

在 MATLAB 中,存在一些固定变量,如表 7-5 所示。

表 7-5 固定变量

变量名	说明	变量名	说明
i	虚数单位,定义为 $i = \sqrt{-1}$	realmin	最小的正浮点数
j	虚数单位,作用同 i	realmax	最大的正浮点数
pi	圆周率	inf	无穷大
eps	浮点相对精度	NaN	Not a Number,表示不定值

3. 全局变量

同其他编程语言一样,在使用 MATLAB 进行编程的过程中,有时会需要某个变量作用在多个函数上,这时只要将该变量声明为全局变量,即在该变量前添加关键字“global”即可。

全局变量必须在使用前声明,而且作为一个约定俗成的规则,MATLAB 程序员应尽量用大写字母书写全局变量,尽管这不是必须的。

例如:

```
global PI
PI = 3.1315;
```

(四) 数值

在 MATLAB 中数值的表示方法有很多。MATLAB 可以使用传统的十进制计数法来表示一个数,也可以使用科学计数法表示一个数。

MATLAB 可以对复数进行运算。在 MATLAB 中,复数单位 $i = \text{sqrt}(-1)$,在工作空间中显示其值为:

```
i =
0 + 1.0000i
```

复数的生成可利用下面语句:

```
z = a + bi
```

或

$z = r * \exp(\theta * i)$,其中 r 是复数的模,θ 是复数辐角的弧度数。

(五) 数组

在 MATLAB 中,数组也是一个比较重要的概念,因为在线性代数的范围内,矩阵实际上可以被看作二阶的数值型数组。但在 MATLAB 中,数组和矩阵的运算却有较大的区别。

1. 数组的加减运算

数组的加减运算和矩阵的加减运算是相同的,数组的加减运算也就是数组的相应元素的加减运算。

2. 数组的乘除运算

数组的乘法是用“.” * ”表示,即在乘号前加一个点来表示数组的乘法运算。数组的乘法运算必须在具有相同阶数的数组间进行,其结果是数组的相应元素间相乘的结果构成的新数组。

例如,对于数组

$A =$

9	8	7
6	5	4
3	2	1

$B =$

9	6	3
8	5	2
7	4	1

在 MATLAB 命令窗口中输入: $A.*B$,结果为:

ans =

81	48	21
48	25	8
21	8	1

可见,数组的乘法与矩阵的乘法遵循的运算规则是不同的,但在 MATLAB 中,可以对数组使用矩阵的运算符号,也可以对矩阵使用数组的运算符号。当对数组使用矩阵的运算符号时,实际上是将数组当作矩阵进行运算;同样,对矩阵使用数组的运算符号,实际是把矩阵当作数组进行运算。

数组的除法与矩阵的除法的运算法则也是不相同的。

对于上述数组 A 和 B ,在 MATLAB 命令窗口中输入: $A./B$,结果为:

ans =

1.000000000000000	0.750000000000000	0.42857142857143
1.33333333333333	1.000000000000000	0.500000000000000
2.33333333333333	2.000000000000000	1.000000000000000

可见,数组的除法也是对应元素间的相除。

除此之外,数组的除法没有左除和右除的区分,即符号“ $./$ ”和“ $./$ ”表示的作用是一致的,这一点不同于矩阵的除法。而数组与一个标量间的乘除运算就是指该数组的每个元素与这个标量分别进行乘除运算。

3. 数组的乘方

数组的乘方使用运算符“ $.^$ ”进行表示。数组的乘方运算实际上是以前一个数组为底,后一个数组为指数,其对应的元素分别进行指数运算得到的结果。显然,数组间的乘方运算只有在阶数相同的数组间才能进行。例如在 MATLAB 命令窗口输入:

```
>> X = [1;2;3]; Y = [2;3;4];
```

```
>> X.^Y
```

则结果为:

ans =

1
8
81

(六) 字符串

在 MATLAB 中,字符串是作为字符数组用单引号输入到程序中的。

例如,用户可以输入

```
T = 'I LOVE MATLAB'
```

则在窗口显示结果为:

```
T =
```

```
I LOVE MATLAB
```

需要注意的是,在 MATLAB 内部,字符是以数值的格式存储的,用户可以通过使用 char() 函数将 ASCII 码的相应数字转化为字符。

(七) M 文件

M 文件是 MATLAB 所特有的使用该语言编写的磁盘文件。所有的 M 文件都是以“.m”作为文件的扩展名。MATLAB 中的 M 文件可以分为两种类型,一种是脚本,一种是函数。

1. 脚本

在 MATLAB 中,既不接受输入参数,也不返回输出参数的 M 文件称为脚本。这种 M 文件是在 MATLAB 的工作空间内对数据进行操作的。

当用户在 MATLAB 中调用一个脚本文件,MATLAB 将执行在该脚本文件中所有可识别的命令。脚本文件不仅能够对工作空间内已经存在的变量进行操作,还能够使用这些变量创建新的数据。

尽管脚本不能返回输出参数,但其建立的新的变量却能够保存在 MATLAB 的工作空间中,并且能够在之后的计算中被使用。此外,脚本文件还能够使用 MATLAB 的绘图函数来产生图形输出结果。

2. 函数

MATLAB 中的函数是指那些能够接收并输出参数的 M 文件。在 MATLAB 中,函数名和 M 文件名可以是相同的,但函数对变量的操作是在其函数体内,这种操作与 MATLAB 在工作空间内对变量的操作性质是不同的。

可以调用“type”命令查看 MATLAB 中的函数。一般函数代码的最后一部分,就是 MATLAB 中实现该函数功能的执行语句。这部分代码实际上才是函数代码的主体。函数体中的所有参数都是函数内部变量,这些变量与 MATLAB 工作空间内的变量是分离的。

MATLAB 中为用户提供了功能各异的函数。按照函数类型将之分为:

(1) 基本数学函数

MATLAB 基本数学函数可以实现较为简单的数学计算,如求绝对值、平方根等。由于 MATLAB 中支持复数运算,所以对复数进行开方和作对数运算,在 MATLAB 中不会发生错误,而且将给出适当的复数结果。

MATLAB 的基础数学函数包括:三角函数、指数函数、复数函数和舍入函数。

(2) 专用数学函数

MATLAB 在为用户提供较为基本的数学函数的同时,也为用户提供了更多、功能更强大的专用数学函数。MATLAB 提供的专用数学函数有贝塞尔函数等。几乎全部的 MATLAB 数学函数都能进行复数运算。

专用数学函数包括了:特殊数学函数、数论函数和坐标变换函数。

(3) 矩阵函数

MATLAB 的矩阵函数主要包括以下几方面：

矩阵分析函数

线性方程函数

奇异值分解函数

特征值函数

(4) 绘图函数

MATLAB 的绘图功能非常强大。MATLAB 为用户提供了许多用于绘制二维图形、三维图形以及特殊图形的绘图函数。

用于绘制二维图形的函数包括以下几种类型：

绘制 X—Y 坐标图的函数

坐标控制函数

用于给图形添加注解的函数

复制和打印图形的函数

(5) 多项式函数

(6) 数据分析函数

(7) 各种功能的工具箱函数

以上这几种函数数量巨大、功能各异，不可能对其功能和特点进行详细介绍，如果需要更加详细地了解这些函数，可以参阅一些专门的 MATLAB 应用书籍或参阅 MATLAB 帮助。

(八) 流程控制语句

MATLAB 提供了简明的流程控制语句以便于用户使用。表 7-6 列出了流程控制语句的关键词。

表 7-6 流程控制语句关键词

关键词	解释	关键词	解释
if	条件执行语句	break	终止循环
elseif	if 语句条件	switch	开关语句
else	if 语句条件	case	列出不同情况
end	终止作用域	otherwise	否则语句
for	指定次数的循环	return	返回到调用函数
while	不指定次数的循环		

1. if—else 语句

if 语句将计算所跟逻辑表达式的值，若该逻辑表达式的值为真，将继续执行后面的语句。关键词 elseif 和 else 提供 if 语句条件，关键词 end 用来终止 if 语句的作用域。

if 语句的最简单的格式为：

if logical_expression
statements

end

如果该逻辑表达式为真, MATLAB 将执行“if”和“end”之间的所有语句;如果该逻辑表达式为假, MATLAB 将跳过“if”和“end”之间的所有语句,并且继续执行下面的语句。

2. switch — case 语句

switch 语句将根据关键字“switch”后的表达式的值来执行确定的语句。

switch — case 语句的一般格式为:

SWITCH switch_expr

CASE case_expr,

statement, ..., statement

CASE {case_expr1, case_expr2, case_expr3, ...}

statement, ..., statement

OTHERWISE

Statements

END

switch — case 语句与 if — else 语句类似,都属于决策控制语句。switch_expr 可以是任意合法的 MATLAB 表达式,当 switch_expr 与 case 语句后的任何一个分支相匹配,则相应执行该 case 语句后的程序代码;如果与所有的分支都不匹配,则执行 OTHERWISE 后的程序代码。

3. for 循环

for 循环语句的一般格式为:

FOR variable = expr

statements

END

for 循环可以执行制定次数的循环,该语句首先将一个表达式赋予一个变量,表达式的通常格式为 X:Y,然后按照表达式的列来执行 FOR 和 END 之间的语句。

4. while 循环

while 循环语句的一般格式为:

WHILE expression

statements

END

与 for 循环不同的是,while 循环不能指定循环的次数,当表达式中的所有元素为真时,就执行 while 和 end 之间的程序代码。

以上对 MATLAB 语言进行了简要地介绍,通过这些介绍,读者可以初步了解 MATLAB 的强大功能和简单易学的特性。当然,想要深入了解 MATLAB 的各种功能和工具箱,真正达到活学活用,还需要参考相关的应用专著,同时也可通过 MATLAB 的帮助信息来学习。

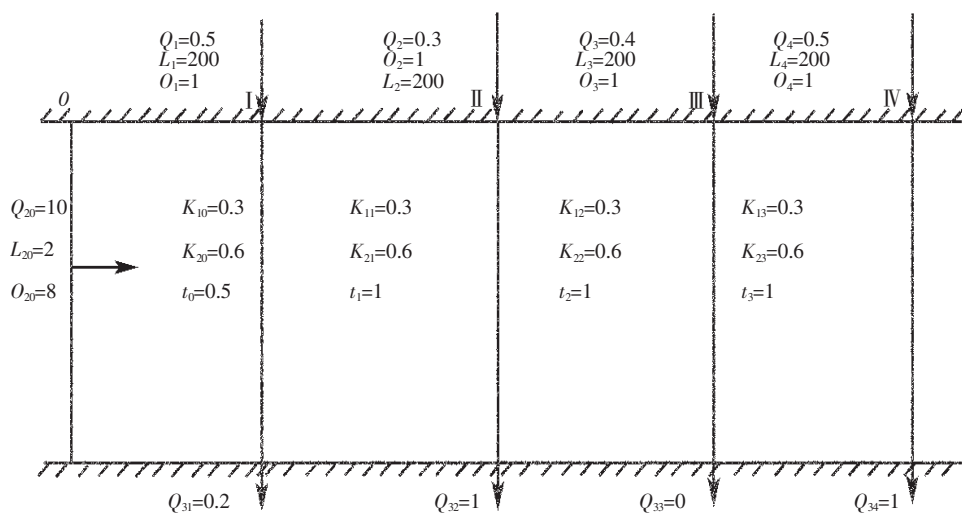
第二节 MATLAB 的应用举例

在本节中,将采用 MATLAB 编制的几个程序举例说明其在水环境系统模拟中的应用情况。当然,编程的形式、算法的选取因人而异,本书中的例子只是想起到一个抛砖引玉的作用,以启发读者进一步将 MATLAB 应用到水环境系统的模拟中。

一、多河段水质模拟

以文献^[7]中的例题为例,其理论部分的讲解详见本书第三章中的第二节地表水水质模拟。

已知某一维河流的输入、输出数据如图 7-1 所示。设河流的饱和溶解氧值为 $O_s = 10\text{mg/l}$ 。试用多河段矩阵模型模拟河流的 BOD 和 DO。



单位: $Q - \text{m}^3/\text{s}$, $L - \text{mg/L}$, $O - \text{mg/L}$, $K1 - \text{d}^{-1}$, $K2 - \text{d}^{-1}$, $t - \text{d}$

图 7-1 例题附图

为使编程更一般化,采用了流速和距离来替代直接使用时间,读者可根据具体情况修改使用。下面给出采用 MATLAB 语言编制的源程序代码。

```
clc;
clear;
% 这是一个 s-p 不带弥散项的水质模型

% 输入断面数
format short;
load dmsj.dat;
ndm = dmsj(1); Qu = dmsj(2); qx = dmsj(3);
Lu = dmsj(4); Lx = dmsj(5); Ou = dmsj(6); Ox = dmsj(7);
```

```

Q0 = Qu + qx;
% Lu, Lx, Qu, Qx 分别为上游来水及旁侧、入流浓度的 BOD, DO 值
% Qu, qx 分别为上游流入河段流量和旁侧入流流量

% 以下是计算初始 BOD, DO 浓度
L0 = (Qu * Lu + qx * Lx) / (Qu + qx);
O0 = (Qu * Ou + qx * Ox) / (Qu + qx);

% 以下对各流量赋值其中 Q(i) 为污水流量, Q1(i) 为上游流到断面 i 的径流量
% Q2(i) 为 i 断面向下游流出的径流量; Q3(i) 为断面 i 引走的径流量
% K1(i) 是耗氧系数; K2(i) 是复氧系数;
% T1(i) 是各断面河水水温; L1(i) 是河段长度; U1(i) 是河段平均流速
% T(i) 是时间, OS(i) 是饱和溶解氧
load liul.dat
Q1(1) = Q0;
for iii = 1:ndm
    Q(iii) = liul(1, iii);
    Q3(iii) = liul(2, iii);
    K1(iii) = liul(3, iii);
    K2(iii) = liul(4, iii);
    T1(iii) = liul(5, iii);
    L1(iii) = liul(6, iii);
    U1(iii) = liul(7, iii);
    O(iii) = liul(8, iii);
end
for ii = 1:ndm
    Q2(ii) = Q1(ii) + Q(ii) - Q3(ii);
    Q1(ii + 1) = Q2(ii);
    K1(ii) = K1(ii) * 1.047^(T1(ii) - 20);
    K2(ii) = K2(ii) * 1.047^(T1(ii) - 20);
    T(ii) = L1(ii) / U1(ii);
    OS(ii) = 10;
end

% 以下是计算 ABCD 矩阵及 fgh 向量
A = eye(ndm); B = zeros(ndm);
C = eye(ndm); D = zeros(ndm);
for ii = 1:ndm
    B(ii, ii) = Q(ii) / Q2(ii);

```

```

end
for ii = 1:ndm
    alf(ii) = exp(- K1(ii) * T(ii)); gama(ii) = exp(- K2(ii) * T(ii));
    beta(ii) = K1(ii) * (alf(ii) - gama(ii))/(K2(ii) - K1(ii));
    siga(ii) = OS(ii) * (1 - gama(ii));
end
g(1) = L0 * alf(1) * (Q1(1) - Q3(1))/Q2(1);
h(1) = O0 * gama(1) * (Q1(1) - Q3(1))/Q2(1) - L0 * beta(1) * (Q1(1) -
Q3(1))/Q2(1);

for ii = 1:ndm - 1
    a(ii) = alf(ii + 1) * (Q1(ii + 1) - Q3(ii + 1))/Q2(ii + 1);
    c(ii) = gama(ii + 1) * (Q1(ii + 1) - Q3(ii + 1))/Q2(ii + 1);
    d(ii) = beta(ii + 1) * (Q1(ii + 1) - Q3(ii + 1))/Q2(ii + 1);
    g(ii + 1) = 0; h(ii + 1) = 0;
end

for ii = 1:ndm
    f(ii) = (Q1(ii) - Q3(ii))/Q2(ii) * siga(ii);
end

for ii = 2:ndm
    A(ii, ii - 1) = -a(ii - 1); C(ii, ii - 1) = -c(ii - 1);
    D(ii, ii - 1) = d(ii - 1);
end

U = inv(A) * B; V = -inv(C) * D * inv(A) * B;
m = inv(A) * g;
n = inv(C) * B * O + inv(C) * (f + h) - inv(C) * D * inv(A) * g;

% 以下是计算 BOD 和 DO 的值
load bodv. dat
for ii = 1:ndm
    L(ii) = bodv(ii);
end
L2 = U * L + m;
O2 = V * L + n;
U; V;
m; n;

```

L2

O2

其中数据文件事先输入,存储于与源程序相同的目录下。通过调试,得到的结果如下:

L2 =

11.3466

14.3931

18.2362

23.3250

O2 =

7.9253

6.5052

5.1457

3.6853

其中中间运算的数据有:

U =

0.0485 0 0 0

0.0348 0.0312 0 0

0.0248 0.0222 0.0400 0

0.0174 0.0156 0.0281 0.0526

V =

0 0 0 0

-0.0090 0 0 0

-0.0112 -0.0058 0 0

-0.0103 -0.0070 -0.0073 0

m =

1.6379

1.1754

0.8360

0.5867

n =

7.9253

8.3110

8.5335

8.6118

二、二维水质模型数值计算

二维水质模拟的基本理论可参见第三章第二节“地表水水质模拟”中的“二维多河段河流水质模型”。在这里采用插值法对 BOD 进行了模拟^{[8][9]}。程序中的各变量的具体说明可参考文献^{[8][9]}。给出 MATLAB 程序如下:

```

clc;clear;
%Two dimension finite section program
format short;
%Input of data
%(1)number of row "m"
m = 23;
%ml(n+1) the real section
ml = [23 23 23 23 23 23 23 23 23 23 23];%11 个
s = 0;
n = 10;
for i = 1:n
    s = s + ml(i);
end

%(2)number of column"n" and horizontal distance"x(m)"

x0 = 100;

%(3) total volumn"Q"
Q = 191;% 最枯年水量

%(4) width of section "B(n+1)"
B = [480 480 480 480 480 480 480 480 480 480 480];%11 个

%(5)depth of units "h(n+1,m)"
h = [具体数据];

%(6)Dy(11,23)
Dy = 0.14 * ones(n+1,m);% 纵向弥散系数

%(7)Dx(10,24)
Dx = 0.14 * ones(n,m+1);% 横向弥散系数

%(8)Kd(i,j)
Kd = 0.22/(24 * 3600);% 衰减速度常数

%(9)W(1,m * n)
W = [具体数据];

```

```

%average h = "H"
H = zeros(1,n+1);
H1 = zeros(1,n+1);

%q(j)
q1 = Q/m;

for i = 1:n+1
    for j = 1:m
        H1(i) = H1(i) + h(i,j);
    end
    H(i) = H1(i)/m;
end
%q(i,j) of every unit

for i = 1:n+1
    for j = 1:m
        if B(i)/H(i) >= 0 & B(i)/H(i) < 70
            a = 1.0;b = 5/3;
        else
            a = 0.92;b = 7/4;
        end
        q(i,j) = a * (h(i,j)/H(i))^b * Q/B(i);
    end
end

% calculate dy(i,j) = "b(i,j)"

% langrange
y = zeros(n+1,m);
yy = zeros(n+1,m);
for i = 1:n+1
    for k = 1:m
        for j = 1:k
            y(i,k) = y(i,k) + q(i,j);
        end
    end
    % 累计流量
    for k = 1:m
        x(i,k) = k * B(i)/m;
    end
end

```

```

end    % 累积宽度,即为横坐标

for k = 1:m
    xx(i,k) = (k - 0.5) * B(i)/m;
end    % 中点坐标

for k = 1:m

    yy(i,k) = k * y(i,m)/m;
end
end

for i = 1:n + 1
    for k = 1:m
        xb(i,k) = interp1(x(i,1:m),y(i,1:m),xx(i,k),'spline');
    end
    for k = 1:m
        xa(i,k) = interp1(xb(i,1:m),xx(i,1:m),yy(i,k),'spline');
    end
end

for i = 1:n + 1
    for k = 1:m
        if k == 1
            dy(i,1) = xa(i,1);
        else
            dy(i,k) = xa(i,k) - xa(i,k - 1);
        end
    end
end
end    % 赋予 dy 值
dy;
% result of D,V

%y'
y1(1,1) = dy(1,1);
for i = 1:n + 1
    for j = 1:m
        if j == 1
            y1(i,1) = dy(i,1);

```

```

        else
             $y1(i,j) = (dy(i,j-1) + dy(i,j))/2;$ 
        end
    end
     $y1(i,m+1) = dy(i,m);$ 
end

% A(i,j)
for i = 1:n+1
    for j = 1:m
        if i == 1
             $Ay(1,j) = dy(1,j) * h(1,j);$ 
        else
             $Ay(i,j) = dy(i,j) * (h(i-1,j) + h(i,j))/2;$ 
        end
    end
end
end
for i = 1:n
    for j = 1:m
        if j == 1
             $Ax(i,1) = x0 * h(i,1);$ 
        else
             $Ax(i,j) = x0 * (h(i,j-1) + h(i,j))/2;$ 
        end
    end
end
 $Ax(i,m+1) = x0 * h(i,m);$ 
end

% D
for i = 1:n+1
    for j = 1:m
         $Dy1(i,j) = Dy(i,j) * Ay(i,j)/x0;$ 
    end
end
end
for i = 1:n
    for j = 1:m+1
         $Dx1(i,j) = Dx(i,j) * Ax(i,j)/y1(i,j);$ 
    end
end
end

```

```

%V
for i = 1:n
    for j = 1:m
        V(i,j) = dy(i,j) * h(i,j) * x0;
    end
end

% Input of G
m2 = 0;
g = zeros(s,s);
for i = 0:n-1
    if i > 0
        m2 = m1(i) + m2;
    end
    for j = 1:m1(i+1)
        g(m2+j,m2+j) = q1 + Dx1(i+1,j) + Dx1(i+1,j+1) + Dy1(i+1,j) +
Dy1(i+2,j) + V(i+1,j) * Kd;
        if m2+j+1 <= s
            g(m2+j,m2+j+1) = -Dx1(i+1,j+1);
        end
        if m2+j+m1(i+1) <= s
            g(m2+j,m2+j+m1(i+1)) = -Dy1(i+2,j);
        end
        if m2+j-1 > 0
            g(m2+j,m2+j-1) = -Dx1(i+1,j);
        end
        if m2+j-m1(i+1) > 0
            g(m2+j,m2+j-m1(i+1)) = -q1 - Dy1(i+1,j);
        end
    end
end

%Result of L'
L1 = inv(g) * (W');
L = L1';
L;
for i = 1:n
    for j = 1:m

```

```

LL(i,j) = L(j + m * i - m);
end
end
LL

```

输入具体数据后得到结果如下：

```

ans =
    1.0741    2.4634    3.1549    3.4934    3.6462    3.6982    3.6941    3.6588    3.6049    3.4826
    1.3123    1.6272    1.9750    2.2606    2.4723    2.6212    2.7216    2.7860    2.8227    2.7816
    1.3675    1.4540    1.6076    1.7777    1.9364    2.0726    2.1840    2.2720    2.3387    2.3373
    1.3836    1.4082    1.4754    1.5693    1.6734    1.7759    1.8703    1.9534    2.0234    2.0363
    1.3892    1.3934    1.4193    1.4655    1.5258    1.5931    1.6619    1.7282    1.7888    1.8028
    1.3906    1.3881    1.3953    1.4144    1.4445    1.4830    1.5266    1.5725    1.6176    1.6240
    1.3909    1.3864    1.3859    1.3914    1.4038    1.4228    1.4471    1.4752    1.5048    1.5011
    1.3915    1.3863    1.3826    1.3819    1.3851    1.3927    1.4044    1.4197    1.4373    1.4247
    1.3929    1.3870    1.3819    1.3783    1.3769    1.3781    1.3823    1.3893    1.3982    1.3796
    1.3935    1.3872    1.3815    1.3766    1.3729    1.3708    1.3704    1.3721    1.3752    1.3519
    1.3921    1.3862    1.3805    1.3751    1.3704    1.3666    1.3638    1.3624    1.3617    1.3336
    1.3898    1.3845    1.3792    1.3739    1.3688    1.3643    1.3604    1.3573    1.3546    1.3226
    1.3894    1.3842    1.3790    1.3738    1.3687    1.3640    1.3598    1.3562    1.3527    1.3196
    1.3907    1.3854    1.3802    1.3751    1.3702    1.3658    1.3619    1.3586    1.3554    1.3234
    1.3930    1.3875    1.3823    1.3775    1.3732    1.3695    1.3665    1.3643    1.3624    1.3331
    1.3950    1.3897    1.3850    1.3810    1.3779    1.3758    1.3747    1.3748    1.3752    1.3496
    1.3968    1.3921    1.3885    1.3864    1.3859    1.3870    1.3897    1.3937    1.3983    1.3773
    1.3978    1.3950    1.3948    1.3973    1.4026    1.4102    1.4198    1.4307    1.4421    1.4266
    1.3993    1.4024    1.4111    1.4247    1.4422    1.4622    1.4837    1.5056    1.5268    1.5169
    1.4094    1.4324    1.4662    1.5061    1.5486    1.5909    1.6313    1.6687    1.7018    1.6958
    1.4630    1.5576    1.6567    1.7496    1.8319    1.9022    1.9607    2.0084    2.0454    2.0265
    1.8072    2.0958    2.2943    2.4303    2.5219    2.5817    2.6186    2.6384    2.6442    2.5769
    6.5880    6.1434    5.7625    5.4327    5.1446    4.8910    4.6661    4.4654    4.2852    4.1161

```

三、矩法计算河流弥散系数

算法简介：

第一步，计算染料晕分布的零次矩、一次矩和二次矩如下：

$$\begin{aligned}
 m_0 &= \sum_{i=1}^n C_i \Delta TS_i \\
 m_1 &= \sum_{i=1}^n C_i TS_i \Delta TS_i / m_0 \\
 m_2 &= \sum_{i=1}^n C_i (TS_i - m_1)^2 \Delta TS_i / m_0
 \end{aligned}$$

第二步，计算方差

$$\sigma^2 = m_2 \cdot x^2 / m_1^2$$

$$\sigma_y^2 = m_2$$

第三步,计算弥散系数

$$D_x = \sigma_x^2 / 2m_1$$

$$D_y = \sigma_y^2 / 2(x/u)$$

其中:

C_i ——实测点的浓度数据; TS_i ——实测点至岸边的距离;

x ——试验段的纵向距离; u ——河流的平均流速。

以文献[7]附录中的例题进行说明:

在河流中心处投放示踪剂,在投放点下游 1500 米处测的示踪剂的横向分布如下表:

表 7-7 示踪剂横向浓度分布

y_i	30	80	130	160	180	190	200	210	220	230
C_i	0	1.0	2.2	9.8	16.2	22.1	29.3	32.0	35.3	36.1
y_i	240	250	260	270	280	300	330	380	430	
C_i	35.0	31.2	28.3	21.6	15.3	7.6	1.1	0.02	0	

已知河流的平均流速为 1.0m/s,求横向弥散系数。

在编制程序前,先将各数据整理成相应的数据文件。编制的源程序见下:

```
clc;
```

```
clear;
```

```
% 这是一个矩法计算河流弥散系数的程序
```

```
% 读入数据
```

```
format short;
```

```
load nvalue.dat;
```

```
n = nvalue(1);
```

```
load yvalue.dat;
```

```
for i1 = 1:n
```

```
    y(i1) = yvalue(i1);
```

```
end
```

```
load cvalue.dat;
```

```
for i2 = 1:n
```

```
    c(i2) = cvalue(i2);
```

```
end
```

```
load othervalue.dat;
```

```
x = othervalue(1);u = othervalue(2);
```

```
% 计算零次矩、一次矩和二次矩
```

```
deltay(1) = 0;
```

```

for i = 1:n-1
    deltay(i+1) = abs(y(i+1) - y(i));
end
m0 = 0;m1 = 0;m2 = 0;
for i = 1:n
    m0 = m0 + c(i) * deltay(i);
end
for i = 1:n
    m1 = m1 + c(i) * y(i) * deltay(i)/m0;
end
for i = 1:n
    m2 = m2 + c(i) * (y(i) - m1) * (y(i) - m1) * deltay(i)/m0;
end

% 计算方差
epcx = m2 * x * x / (m1^2);
epcy = m2;

% 计算弥散系数
Dx = epcx / (2 * m1);
Dy = epcy / (2 * x / u);
% 显示结果
Dy
计算得到的结果为:
Dy =
    0.6264(m^2/s)

```

四、线性规划问题的求解

在 MATLAB 中有专门的优化工具箱,可以处理各种优化问题,其中,用于求解线性规划的函数有 `linprog`,用法如下:

【语法】

```

x = linprog(f,A,b,Aeq,beq)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub,x0)
x = linprog(f,A,b,Aeq,beq,lb,ub,x0,options)
[x,fval] = linprog(...)
[x,fval,exitflag] = linprog(...)
[x,fval,exitflag,output] = linprog(...)
[x,fval,exitflag,output,lambda] = linprog(...)

```

【说明】

f: 是优化参数 x 的系数矩阵;

lb, ub: 设置优化参数 x 的上下界;

fval: 返回目标函数在最优解 x 点的函数值;

exitflag: 返回算法的终止标志;

output: 返回优化算法信息的一个数据结构。

以第二章第三节的例 2-1 进行说明。根据要求建立的模型如下:

$$\begin{aligned}\max f &= 5x - y \\ 3x - y &\leq 9 \\ 9x + 17y &\leq 45 \\ y - 3x &\leq 0 \\ x, y &\geq 0\end{aligned}$$

采用 MATLAB 语言编制的程序如下(需要注意的是: MATLAB 的标准形式是求最小值):

```
clc;
clear;
% 线性规划举例

C = [-5;1];
A = [3 -1; 9 17; -3 1];
b = [9;45;0];
lb = zeros(2,1);
[x,fval] = linprog(C,A,b,[],[],lb);
% 输出数据
x
f = -fval
在命令窗口运行该 M 文件,得到:
Optimization terminated successfully.
x =
    3.3000
    0.9000
f =
   15.6000
```

以上所举的几个例子,分别从不同的角度展示了 MATLAB 在水环境系统模拟中的应用。相信,随着读者对 MATLAB 的不断熟悉和练习,一定可以编制出更加有效的模拟程序,使得 MATLAB 与水环境系统模拟结合得更加紧密。

参 考 文 献

- [1] 何仁斌. MATLAB6 工程计算及应用[M]. 重庆:重庆大学出版社,2001
- [2] 飞思科技产品研发中心. MATLAB6.5 辅助图像处理[M]. 北京:电子工业出版社,2003
- [3] 飞思科技产品研发中心. MATLAB6.5 应用接口编程[M]. 北京:电子工业出版社,2003
- [4] 张志涌. 精通 MATLAB5.3 版[M]. 北京:北京航空航天大学出版社,2000
- [5] 程卫国,冯峰,姚东等. MATLAB5.3 应用指南[M]. 北京:人民邮电出版社,1999
- [6] 薛定宇. 科学运算语言 MATLAB5.3 程序设计与应用[M]. 北京:清华大学,2000
- [7] 程声通,陈毓玲. 环境系统分析[M]. 北京:高等教育出版社,1990
- [8] 谢更新. 插值法在二维水质模型数值计算中的应用[D]. 长沙:湖南大学,2001
- [9] 秦肖生. 考虑非线性特征的水环境规划理论与方法的初步研究[D]. 长沙:湖南大学,2001

第八章 地下水环境污染与修复技术

第一节 地下水环境污染概述

一、地下水污染的概念

地下水是水环境系统的一个重要组成部分,是人类赖以生存的物质基础条件之一。地下水污染是指地下水受到人类活动的影响,从而导致地下水水质变差,以至于不再适合使用。

国外文献对地下水污染的划分分为两种概念——污染和沾染(或传染)。其中污染一词是通用术语,包括作为一种污染类型的沾染在内,认为:水质在化学物质、热能或细菌影响下恶化到即使对人体健康不经常构成威胁,也对其在日常生活、市政公用、农业和工业利用方面有不利影响的程度者就是污染;而沾染(或传染)则是指水质由于化学物质或细菌污染而变坏,在居民中间造成中毒或疾病传播的情况^[1]。

判断地下水是否污染及其污染程度,往往比较复杂。首先需要有一个判断标准,这个标准最好是地区背景值(或本底值)。但现今人类活动的影响遍及全球,未受污染的区域环境难以找到,该值很难获得,因此,背景值只是一个相对概念。实践中常用历史水质数据或无明显污染来源的水质对照值来判断地下水是否受到污染^[2-3]。

地下水污染一方面受人类社会经济活动影响较大,另一方面,它的污染对生态环境,尤其是生态安全包括人类生命安全产生严重威胁。因此,加强地下水污染研究,意义重大。

二、地下水中污染物质与污染类型

(一) 地下水中的污染物质

引起地下水污染的物质称为污染物质。地下水受人类活动影响较大,其污染物质种类繁多,主要包括:合成有机化合物,碳氢化合物,无机阴阳离子,病原体,热量以及放射性物质等。这些物质中,大部分溶解于水,具有不同的溶解度;但是有些有机化合物溶解度较小,介于溶与不溶之间,随地下水流动而迁移。

地下水中的污染物含量多少可以通过取样分析检测出来,其价格十分昂贵。例如根据20世纪90年代初美国的水质分析价格:做一个水样分析,其总价格为1700美元,其中尚未包括水样收集的费用。见表8-1。

水质分析价格随着分析目标含量下限的降低而增加。目前地下水中污染物浓度的检测下限在十亿分之几的水平,如果仔细检测,有些污染物能够被量化到万亿分之几的水平。为了便于理解这一数量大小,我们可以借助合乎透视原理的例子:地球至月球距离的万亿分之一约为0.4mm。

表 8-1 单个地下水水样分析价格

检测项目	价 格 (美元)
137 种合成有机物	965
23 种金属元素	270
氰化物	40
放射性化合物	275
细菌分析	36
Cl ⁻	10
F ⁻	18
硝酸盐	15
亚硝酸盐	15
NH ₄ ⁺	15
TP	19
硫酸盐	16
pH	6
合 计	1700

(Wisconsin — certified lab, 1992)

(二) 地下水污染类型

一般根据物质成分及其对人体的影响将地下水污染类型划分为地下水细菌污染与地下水化学污染两大类。随着社会经济的发展以及人类对核能的开发利用程度加大,地下水的热污染和放射性污染日益严重,并成为地下水污染的另外两种不同类型。比较而言,细菌污染、热污染以及放射性污染的时间和范围均有限;而化学污染则常常具有区域性分布特点,时间上长期稳定,难以消除。

1. 地下水的细菌污染

地下水的细菌污染对人体健康构成严重威胁。世界上曾由于地下水细菌污染而多次爆发严重的传染病流行事件。这种污染是指水体中出现了病原体。判断水是否遭到细菌污染的主要方法是大肠杆菌总数或细菌指数方法。按现行的卫生部标准,1 升水中大肠杆菌的数量(菌度)不超过 3 个或者一个大肠杆菌所占有的毫升水量(菌值)大于 333 时即为净水。

鉴于病原体在地下水中的生存时间有限,可知细菌污染扩散面积不大,而且属于暂时性污染。在大多数情况下,受细菌污染的含水层部位很浅,常常只是潜水受污染。平原地下水埋藏浅,受到污染的可能性很大。

2. 地下水的化学污染

平原地下水的化学污染是指地下水中出现了新的污染组分或已有的活性组分含量增大而构成污染。一般采用化学分析手段测定水中化学组分含量来判断水体是否遭到化学污染。当这些污染物质在含水层内的运移过程中不能自净时,就会长期存在于地下水中。平原地下水的化学污染给人们带来的危害是很大的。

3. 地下水的热污染

平原地下水热污染是指平原地区工业企业或发电站的冷却循环热水进入地下水而引起的污染。一般认为热水进入含水层后会形成固定的增温带,破坏原有的水热动力平衡状态。

与地表水的热污染相比,地下水的污染却从未被看作是个大问题,然而,由于水资源的世界性危机,地下水的调节作用被越来越看中,因此,地下水的污染机理、污染后果等将会越来越受到人们的高度重视。

4. 地下水的放射性污染

地下含水层的放射性污染根据放射性核素来源不同分为两种不同的形式。一种是自然的形式,其放射性核素是天然来源的,如放射性矿床;另一种是人为的形式,其放射性核素是人为的,如核电厂、核武器试验的散落物以及实验室和医院等部门使用的放射性同位素。特别是近年来世界各国对核废料地质处置的关注,因此,放射性污染物进入地下含水层的几率日益增大。一般来说,放射性核废料的地质处置场地往往选在山区,但山区是平原区地下水的补给区,因此,地下水放射性污染将成为地下水污染的主要形式之一。

需要说明的是,上述四种污染类型有时会相伴发生。例如,由工业“三废”所造成的地下水化学污染,有时与城镇居民点、牲畜圈的生活污水导致的地下水细菌污染结合,成为两种类型污染并存的形式。此外,生活污水也可以造成持久的地下水化学污染。因为它们含有大量的在日常生活中广泛应用的表面活性物质。在工业企业地区,由于公开储存的废水废渣与大气降水渗滤溶解或存在水管泄流,固体废物以及某些原料和废水可以渗入含水层并直接污染含水层。

三、地下水污染源及污染途径

(一) 地下水污染源分析

按照污染源的成因,地下水污染源可以分为天然污染源和人为污染源。而根据美国国会技术评估办公室(OTA)和Fetter(1992)等分类,总共可分为下面六类。

1. 设计用以排放废物的源

这类污染源包括化粪池、注水深井以及土地利用。

化粪池是用来排放生活污水的。来自于盥洗室、洗澡、洗碗以及洗衣服的水等进入化粪池,经过沉淀和一些厌氧分解,通过排放系统排放到土壤中。这一过程不仅带来了大量的有机和无机污染物,同时含有如三氯乙烯、苯等合成有机化合物的化粪池清洁物也被排放到地下,从而构成地下水的污染来源。

注水深井用来将液体废物或其他液体注入到地下水面某个区域。被注入的液体一般包括:危险废物、源自油井的盐水、雨水、市政污水、矿山废水等等。如果被注入的废水进入饮用水含水层,就会形成地下水污染。

用处理的或未经处理的市政和工业污水灌溉土地,或用污泥肥田,这样会带来大量有机污染物,构成地下水污染来源。

2. 设计用以贮藏、处理与处置废物的源

这类污染源包括垃圾填埋场、露天垃圾堆、贮藏、住宅区的垃圾堆、地表污水坑、矿山开采废物、固体废物堆、坟场、动物埋藏场所、地表储藏箱、地下储藏箱、各种容器、露天火葬场、爆炸试验场以及放射性废物处理堆等。

3. 在运输过程中设计用以保留废物的源

这类污染源包括运输管道渗漏以及材料的运输和运移。

运输管道主要包括输油管道及输气管道,一般在断面和接头处发生渗漏;另外,钢管容

易产生锈蚀,由开始的锈蚀,可能逐渐发展成为管道渗漏。由于石油中含有多种有害的有机物,而且不易降解,所以常常成为地下水污染来源。

物质材料的运输和运移污染源常常由产品和废物的运输而产生。其污染场所通常是卡车和火车的运输通道以及载重设备的副场所。污染羽通常是由交通事故或者设备故障引起的。

4. 人类有计划活动所导致的污染源

这些污染源来自于人类有计划的活动,主要包括农业灌溉、杀虫剂的使用、肥料的使用、农家肥的使用、高速公路上盐的使用、生活用水软化剂、城市地表径流、大气污染物的渗透以及矿山排水等。这些污染源通过人类有计划的活动从而对地下水造成污染。他们是地下水体的间接污染源,当具有直接的补给通道,如钻孔、天然陷落柱等情况,他们可以通过包气带或地表水体,作用于地下水。

5. 为污染的水体进入含水层提供管道的源

这类污染源主要有生产井、监测井、开采孔以及工程开挖的基坑。

生产井主要指石油、天然气、地热能以及地下水的开采井。在开采期间,污染物质能够被引入地下,进入含水层。监测井和勘探孔是为探矿和设计开采而设置的。这些井和钻孔使含水层存在交叉污染的危险。而开挖基坑由于开挖出表层天然的隔水保护层,从而导致地下水污染。

6. 由人类活动产生或加剧的自然污染源

这类污染源有地表水与地下水的相互作用、自然溶滤、海水入侵等。

地表水与地下水相互作用是指地表水在一定条件下可以补给地下水,而地下水也可以在一定的条件下补给地表水。地表水与地下水的相互作用,使得天然污染物质相互扩散。自然溶滤是指地下水在天然条件下,将岩石或土壤中的矿物质溶解使之进入到水中,其中包含一些不为人们期望的阴阳离子。由于受人类活动影响,导致大气中发生酸沉降,而酸雨的形成加剧了地下水的溶滤作用。

(二) 地下水污染的通道

地下水污染通道根据成因不同可以分为自然通道、人为通道。根据水动力学特点,可分为四类,下面简要说明。

1. 间歇入渗型

间歇入渗型的特点是:污染物通过大气降水或灌溉水的淋滤,从污染源(固体废物或表土层)中周期性的通过包气带渗入含水层;其渗入形式多半是呈非饱和状态的淋雨状渗流,或者呈短时间的饱水状态连续渗流。这种途径的污染组分是固态的,来自固体废物或土壤,因此,研究时要分析固体废物或土壤的成分,最好能取得包气带的淋滤液,才能查明污染来源。

间歇入渗型的主要污染对象是潜水。

2. 连续入渗型

连续入渗型的特点是:污染物随污水或污染溶液连续不断地渗入含水层,其污染组分是液态的。常见的有污水积聚地(如污水池、污水渗坑、污水快速处理场和污水管道等)的渗漏。

连续入渗型的主要污染对象是潜水。

3. 越流型

越流型的特点是:被污染含水层的污染物通过层间越流形式转入其他含水层。转移途径可以是天然的或是人为的。人工开采下部承压水,引起水动力条件的变化而改变越流方向,使上部已受污染潜水含水层中的污染物通过弱透水层转移到下部承压含水层。该类的研究难点是查清越流地点及地质部位。

4. 侧向补给型

侧向补给型的特点是:污染物通过地下水径流的形式进入含水层。各种污水或被污染的地表水,通过废水处理井或巨大岩溶通道进入含水层,并随地下径流在各含水层中迁移而形成污染带。其污染物有人为的和天然来源,污染对象是潜水或承压水。污染范围可能不很大,但污染程度由于缺乏自然净化作用而十分严重。海水入侵是海岸区地下淡水超量开采而造成海水向陆地流动的径流型污染途径之一。

四、地下水污染调查

(一) 地下水污染的调查方法

在地下水污染调查研究方法与控制技术以及防治措施中,监测工作占有重要的位置。实践表明,地下水污染治理是一个复杂的难题,即使采取了耗资昂贵的措施,也只能起到预防污染物质继续进入含水层以及在其中蔓延的作用。一旦发生了污染再来采取限制与恢复措施,则远比预防措施复杂。因此加强地下水污染调查与监测工作应成为防患于未然的重要措施。

地下水污染调查内容一般包括:(1) 查明污染源与污染途径;(2) 研究地层地质结构和渗透特性及污染物质在包气带和含水层中的运移、降解与去除过程;(3) 检测地下水动态,预报地下水污染的发展趋势;(4) 提出防止与控制地下水污染的具体措施。在防治地下水水源污染的调查中尤应注意进行含水层中污染物质运移规律的理论研究,在此基础上明确水文地质调查的方向,以查明地下水污染的条件,并制定出预防和消除地下水污染的综合性防渗措施及其他工程措施。

有关地下水污染调查的具体工作方法,基本调查工作与所采取的手段与一般性水文地质调查是类似的,因此,有关测绘、勘探、试验、实验等详细内容可以参考相关书籍。这里仅就有关地下水污染源及其危害性问题略作补充阐述。

除自然环境因素外,当今人类活动已成为地下水污染的主导因素。因此,地下水污染调查重点是对人类生活、人类生产活动所产生的污染源进行调查。在调查地下水污染源时,要着重调查污染源的分布范围,规模、性质、类别及其危害程度,污染源所处的地理位置,及发展趋势等。

(二) 地下水污染的监测

地下水污染监测实质上是地下水污染的长期调查,是查明地下水污染组分与含量随时间变化、预测其发展趋势的重要工作内容,也是防治地下水污染的关键性措施之一。监测工作是在地下水污染调查或环境水文地质调查的基础上,根据区域水文地质条件与环境水文地球化学特征,结合已掌握的污染情况,通过定时定点采样分析并对资料进行综合分析研究。所布置的监测点网应能准确及时地反映出所监测地区地下水水质形成的水文地质条件与水文地球化学环境及其天然和人为影响因素,能进一步查明地下水的污染原因,污染源与

污染途径以及污染范围、污染程度,能掌握地下水中化学组分,特别是污染物质的时空变化规律与发展趋向,从而为地下水污染发展趋势预报,论证防治地下水污染的措施服务。

地下水污染监测点网布置的基本原则是:(1)在查明监测区水文地球化学环境与污染物质组分及主要污染源基础上布点;(2)点网应能控制城市居民区,工矿企业区及现有的和拟建的供水水源地;(3)在重点调查区,如严重污染区、水源地、主要污染源等地区加密布点,其他地区可以稀些;(4)对于地表水系应能控制主要支流的汇入,并能与水文观测配合,掌握河流水质变化特征;(5)在非污染区布置监测点作为对照点。

关于监测点的数量可以考虑下列建议:(1)在水文地质条件复杂、水源地已受污染、地表地质结构遭到严重破坏的地区,平均每平方公里布置 1 个点;在污染程度很重的地区,平均每平方公里布置 1~2 个点;(2)水文地质条件的复杂程度中等、地下水遭到中等程度污染、地表地质结构破坏较轻的地区,平均每平方公里布置 0.5~1 个点;(3)在水文地质条件简单、局部地区受到轻微污染,地表地质结构破坏程度轻的地区,平均每平方公里布置 0.25~0.5 个点;(4)在河渠系统沿岸地区,为了控制污染源,应在废污水流入河道地点的上、下游布点。在水面窄、流量小的河水中,可设单个监测点在河心取水样。反之则应设多点(通常设河床断面上的左、中、右三点)取水样。下游取水样地点应在废污水排放口下游 1~5 公里处布置。为了控制注入河流的支流,应在支流或渠道汇入主流进出口处布点。河流自上游向下游通常可每隔 5 公里布设一个取水断面或取水样点。对于上述取水样原则,不应机械掌握,而应因地制宜地增多或减少取样点数。

对于取水样时间,一般要注意在排污前后,枯水、丰水、平水与冰冻期或其他有特定意义的时间取样,可根据不同的调查目的确定。对监测数据要及时分析研究,以掌握污染动态变化趋势。其他有关监测井选样、采样的具体要求与方法等内容可参照一般的地下水动态观测规范。

(三) 地下水污染图件的编制

在地下水污染调查中,常编制防止地下水污染的专门水文地质图系或图件。这些图件的名称不一,有地下水污染图、地下水保护图、环境水文地质图等等。自 20 世纪 60 年代以来,世界上许多国家都在积极编制地下水保护图。这类图件尽管在名称上有些差异,但图件的实质大体上是一样的,都表示出地下水污染的现状及今后可能发生污染趋势的预报,图的比例尺为 1:100 万到 1:5 万。有关这类图件的编图原则、内容与方法可参阅有关参考书。

第二节 地下水环境污染修复技术

近年来,地下水污染修复技术研究已经成为世界各国所共同关心的课题。治理污染含水层是对固体介质和运动的地下水体同时进行处理的一项难度较大的技术,许多方法尚处于探索阶段,许多技术同时涉及多种方法。一般地下水环境污染修复技术分为:物理处理法、化学处理法以及生物修复技术等,而这三种方法在实际应用中往往是相互配合使用的。

一、物理处理法

物理处理法作为地下水环境修复的传统技术,包括水力学方法以及一些现代的物理处理技术。水力学方法包括抽注地下水、排出地下水、设置低水力传导系数的屏障。这些方法可

以单独使用或者联合使用来控制地下水污染。

抽出处理法是应用最广的一种物理处理方法。抽出处理法在应用初期取得了良好成效,后来随着地下水中有有机污染物种类的增多,这种方法的弱点日益显现出来。因为它能去除有机污染物中的轻非水液体(LNAPL),而对重非水相液体(DNAPL)的治理效果甚微。此外,地下水系统的复杂性和污染物在地下的复杂行为常常干扰此方法的有效性。例如,1994 年对美国 77 个抽出处理系统的运行情况的调查表明,只有 8 个是成功的,其余的 69 处均未达到净化目标。

二、化学处理法

(一) 氧化还原法处理技术

氧化还原法(Vyredox 法)处理技术是利用向抽水井周围的含水层注入氧气来形成高氧化还原和高的 pH 值,图 8-1 是利用该法经典的处理模式^[3]。

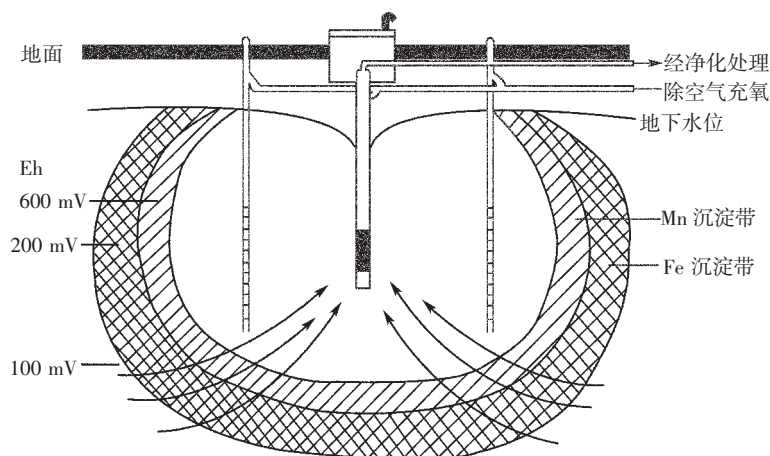


图 8-1 高氧化还原电位条件下去除 Fe、Mn 的原理示意图

(二) 反应性渗透墙技术

反应性渗透墙技术(Permeable reactive barriers technologies)是由加拿大学者 R. W. Gillham 提出的一种地下水污染治理的新技术:该技术是一种利用零价铁的渗透性反应屏障技术^[4],是一种原地处理技术。

反应性渗透墙是最近几年才兴起的新技术。该技术是在污染区域内垂直于地下水流方向建一道渗透墙。针对不同类型的污染物,渗透墙内部可以结合物理、化学或者生物处理方面的各种技术,例如吹脱、抽提、好氧降解、吸附、化学氧化、金属还原例如铁屑还原和沉淀等。加拿大学者 O'Hannesian 和 Gillham 对此进行了系统研究。他们在治理地下水中的挥发性有机污染物时,采用 $5.5\text{m} \times 1.6\text{m} \times 2.2\text{m}$ 反应墙(墙体由 22% 的铁粒和 78% 的粗砂组成)。其降解三氯乙烯和四氯乙烯的量分别为 90% 和 86%。世界上第一个也是最成功的地下水污染试验场——安大略省的 Borden 场址的持续数年现场试验证明这种方法是有效的。

(三) 电动力学修复技术

电动力学修复技术(Electrodynamics remediation)是通过电流的作用,提高土壤的 Eh 和阴阳两极附近的土壤溶液中聚集大量的 H^+ 和 OH^- ,调节土壤的 pH 值,这样有利于重金

属离子的去除。Li 等在 1997 年提出在阴性和土壤间保持一定溶液,从而使聚集作用在溶液中进行,保证在土壤内的酸性环境,有利于污染物的去除。实验结果表明,在沙土内 Pb^{2+} 、 Cr^{3+} 等重金属离子的去除率可达 90% 以上,而且所需操作也大为缩短。Haeru 在 1996 年研究了电修复技术处理土壤中的六价铬,以石墨为阴极、铁为阳极,在土壤基质两端加上直流电场。阳极的铁溶解成为 Fe^{2+} ,含六价铬的阳离子迁移到阳极附近氧化 Fe^{2+} 而六价铬被还原成三价铬。

(四) 臭氧处理技术

臭氧处理技术是:向含水层输入臭氧可以形成分解石油的微生物生长环境,减少溶解有机酸的含量,同时又可促使氰分解。德国曾用此法净化被石油污染的含水层,即用 4 眼深井抽水时,在井底安装臭氧混合装置,使抽到地表的水已与臭氧均匀混合,然后再把抽出的水灌入污染带周围的注水井,在注水井下部使地下水位抬高形成一道水墙,阻止了污染地下水的扩散,从而成功地清除了含水层中的石油和氰。

(五) 用高锰酸钾清除砷

As^{5+} 和 Ca^{2+} 和一些亚离子形式的化合物溶解性很差,因而在氧化条件下所产生的大量 As^{5+} 的化合物就会从地下水中沉淀出来。

三、生物修复技术

生物修复(Bioremediation,又称 Biorecalculation)是指采用工程方法,利用微生物,将土壤、地下水和海洋中有毒有害污染物“就地”(In-site 或 on-site)降解成 CO_2 和水,或转化为无害物质的方法。该法费用低、环境影响小、降低污染物能力强,是今后环境修复技术发展的主要方向。

生物恢复技术分为自然生物恢复和强化生物恢复。自然生物恢复是处理场地的微生物利用周围环境中的营养物质和电子受体对污染物降解的过程,其降解速度受到营养物质种类、数量及电子受体接受电子能力大小和其他物理条件的限制。强化生物恢复技术是通过提供适宜的营养物质、电子受体及改善其他限制生物恢复速度的因素,达到提高生物恢复速度、加速污染物降解的目的。用于治理土壤和地下水污染的现场强化生物恢复技术主要有生物吹脱法、土地处理法、空气鼓泡法和液体输送法等^[5]。各种技术的实施过程及适用范围不同。

(一) 生物吹脱技术

生物吹脱是通过空气压缩机等设备向土壤中注入空气,将原有的空气赶走并为微生物提供氧气,利用细菌等微生物的降解作用来减少土壤污染。土壤中的许多好氧细菌能利用各种有机物作为食物及能源,其他微生物则产生一些酶,将污染物部分分解,最终达到降解污染物的目的。生物吹脱系统设计时有时采用单独的空气注入井;有时和空气回收井共同使用;若要加快生物降解速度,可以将回收井放在污染最严重的地区,并且采用较低的空气流速。

生物吹脱法是将污染物分解而不是将其转移到其他介质中,因此它的突出特点是不需要尾气处理装置。在大多数现场处理中,每口井费用为 2000 ~ 5000 美元。若包括空压机、控制器、电器、设备室、保障设备等,每口井费用则为 20000 ~ 50000 美元。若采取尾气处理工艺,处理费用将由 13 美元 / m^3 升高到 52 ~ 78 美元 / m^3 。

（二）土地处理技术

土地处理是将废物、污泥或污染土壤置于未污染土壤的表面,通过种植作物或翻耕将这些物质混入土壤,污染物在土壤中经过水解、光解、化学降解、生物降解等作用最终得以去除。现场土地处理能降解有机废物,固定无机废物,并能避免废物的生物累积,以免威胁人类健康及环境。

土地处理适用于处理以下废物:焦炭汽化及液化产生的废物;食品加工、鞣革、造纸、石油提炼、木材防腐产生的废物;城市污水及污泥;超基质污泥及污染土壤。此方法在美国、欧洲及加拿大的许多水力和气候条件变化较大的地区都已得到应用。

土地处理的优点如下:

- (1) 有机及无机污染物集中处理,而不是简单的处置;
- (2) 投资及运行费用低,人工费及维护费低或中等,非常规处置没有长期的不利条件;

土地处理的缺点如下:

- (1) 超负荷运转时效果不好,有机及无机污染物会渗漏到土地处理单元下面;
- (2) 需要大量土地,必须严格控制挥发性有机物挥发到大气中。

在土地处理设计及操作过程中,有许多参数是非常重要的,只有在充分考虑这些参数的基础上设计和运行的处理系统才是稳定可靠的。这些参数包括:

- (1) 废水特性参数:物理组成、pH 值、有机物、金属、盐类、营养物质的含量;
- (2) 场地因素:土壤性质(孔隙率、水分、pH 等)、气候条件(温度、沉积情况等)、水力条件(季节性最高水位等);
- (3) 操作因素:废物的应用(有机负荷、水力负荷、应用频率、应用方法等)、暴雨时系统管理、土壤恢复、监测项目(废物特征、土壤、泄漏等)。

通常土壤中微生物及其酶只有在水溶液中才能发挥作用,而有机物的水溶性小,所以给微生物降解带来困难,因此一些化学结构允许生物降解的有机化合物由于水的限制而降解速度降低。金属和其他无机化合物能被土壤固定,并不是降解或转移出处理场地。因此,含有重金属元素的废物(如电镀污泥),对土地处理来说并不是最好的处理物。对于被烃类污染的废物和土壤,石油烃类总的去除率为 90% ~ 99%,萘、蒽、芴等聚合芳香烃类去除率为 80% ~ 95%,多环聚合芳香烃类去除率为 30% ~ 70%。

（三）液体输送技术

液体输送处理技术与传统的污水处理有类似之处,电子受体通常是氧气,并加入营养物质以强化生物反应器中污染物降解过程,但不像污水处理那样是在有限的、容易管理的生物反应器中进行,而是在无限的、无法预测的生物反应器中进行处理。

液体输送技术原理是:在污染地区注入压缩空气和营养盐,微生物在含有营养盐的富氧地下水中通过新陈代谢作用将污染物降解,在地下水流向的下游地区用泵将地下水抽出地面,可以用其溶解营养盐后再回灌到地下水中,若需要时也可对其进一步进行处理。

液体输送技术的优点如下:

- (1) 避免挖掘土方工程;
- (2) 可以处理沉积物吸附和夹带的污染物;
- (3) 避免污染沉积物的迁移。

液体输送技术的缺点如下:

(1) 对场地有特殊要求(只有在 K 值大于 10^{-4} cm/s 的场地才能使用),且土壤中孔隙极易堵住,需要更长的时间处理污染物;

(2) 污染物浓度高时,会阻碍生物恢复的进行;

(3) 产生的地下水不能循环利用,很难得到排放许可。

液体输送技术可处理溶解态污染物和沉积物中夹带的污染物。污染物的类型、数量、范围是决定费用的主要因素。系统设计时应提供足够的氧气和营养物给可降解污染物的微生物,因此氧气的来源将影响处理费用。使用 H_2O_2 作氧源比氧气贵得多,但需要在很短时间内处理污染物时,利用 H_2O_2 作氧化剂则总费用可能降低。

地下水中原有微生物有利于污染物的降解。微生物的相对数量取决于沉淀特性、污染物的类型和浓度、营养盐。使污染物降解速度最大的无机营养物种类和浓度的研究正在进行,但在营养物添加方案正式提出前,要考虑地面下存在的天然营养物,如氮、磷和微量元素镁和锰。例如某地汽油泄漏,以 H_2O_2 作氧源,采用液体输送技术进行处理。15 周后注入井周围的石油烃类浓度下降很快,由原来的 31mg/L 降至 5mg/L;35 周后周围地区石油烃类浓度均降至 2mg/L 以下,表明生物恢复措施已经成功。

(四) 空气鼓泡技术

空气鼓泡是将空气引入饱和地区,以便将挥发性物质转移到非饱和地区进行生物降解。当空气在许多通道中向上向外流动时,挥发性物质转移到非饱和地区,被土壤吸附并被微生物降解。空气注入井通常位于含水层的底部。

饱和地区空气鼓泡处理化合物的机理取决于生物降解的相对容易程度及其从含水层中去除的相对容易程度。生物降解的程度取决于污染物性质、场地特征及系统的设计。由于含水层土壤条件的差异,进行场地实验并借鉴其他场地的数据来设计安全可靠的生物恢复系统是非常必要的。由于向饱和地区注入空气可以赶走水,因此可以利用地下水回收系统阻止溶解性污染物的转移,一部分回收的水可以用于溶解营养盐并回注入水中。地下水回收与再利用的另一个好处是有助于水在空气通道之间运动,以增加溶解氧在水中的运动。

总之,现场强化生物修复技术是一种很有潜力的污染治理技术。随着研究的深入和技术的发展,必将在未来的水和土壤污染治理中发挥更大的作用。

参 考 文 献

- [1] 王秉忱,杨天行,王保金等. 地下水污染地下水水质模拟方法. 北京:北京师范大学出版社,1985
- [2] 林年丰等. 环境水文地质学. 北京:地质出版社,1990
- [3] 沈继方,高云福. 地下水与环境. 武汉:中国地质大学出版社,1995
- [4] Sharon L S Wadley and Robert W. Gillham. Remediation of DNAPL source zones using granular Iron: A field demonstration. Proceedings of the International Symposium on Water Resources and the Urban Environment. Beijing: China Environmental Science Press, 2003. 11:30 — 35
- [5] 苑文颖,丁庭华. 地下水及土壤污染现场强化生物恢复技术. 中国给水排水,16 (7): 46 — 49