

# 不确定性河流水质模型的应用及进展

许 劲, 龙腾锐

(重庆大学 三峡库区生态环境教育部重点实验室, 重庆 400045)

**摘 要:** 明确了河流水质模型由确定性向不确定性发展的趋势, 指出现有河流水质模型大多建立在菲克扩散定律基础上。分析了河流水质模型中不确定性的来源, 重点论述了随机水质模型的研究现状, 并将其分为随机游动型、随机变量型和随机过程型三类, 明确了随机微分方程水质模型与简化型的区别在于是否给出随机扰动强度的表达式, 强调随机微分方程类水质模型是其发展方向, 建议综合考虑不确定性和非线性, 并从风险评价的高度来研究新的不确定性水质模型。

**关键词:** 不确定性河流水质模型; 随机变量; 随机过程; 随机微分方程; 随机扰动强度

中图分类号: X502 文献标识码: B 文章编号: 1000 - 4602(2007)16 - 0004 - 05

## Application and Progress of Uncertainty River Water Quality Model

XU Jin, LONG Teng-rui

(Key Laboratory of Three Gorges Reservoir Region's Eco-Environment <Ministry of Education>, Chongqing University, Chongqing 400045, China)

**Abstract:** The trend of river water quality models (RWQMs) developed from certainty to uncertainty was defined, and it was pointed out that the most of existing RWQMs are based on the Fick's law of diffusion. The uncertainty sources of RWQMs were analyzed. The present research status of stochastic RWQMs was discussed emphatically, and they were classified into three types: random walk, random variable and stochastic process. It was defined that the difference between stochastic differential equation model and its simplify-type was whether the express of stochastic disturbance intensity was given, and emphasis was laid on that the stochastic differential equation model for river water quality is a way of its development. It was suggested that uncertainty and nonlinearity should be considered synthetically, and new uncertainty RWQMs should be studied from the view point of risk assessment.

**Key words:** uncertainty river water quality model; random variable; stochastic process; stochastic differential equation; stochastic disturbance intensity

河流水质模型是描述污染物在水体中随时间和空间的迁移转化规律及其影响因素相互关系的数学方程, 在一定的定解条件下求解这些方程, 可实现对某个水动力学理论问题或工程实际问题的模拟研究。水质模型研究工作在国外起步较早, 特别是 20 世纪 80 年代后许多研究、设计部门集中力量加强了水质数学模型的研究开发。对于工程问题, 主要的

研究、设计工作均由数学模型完成。河流水质模型总体上可分为确定性模型和不确定性模型两大类, 目前大多数水质模型属于确定性模型, 即对于一组输入值, 模型只能输出一组对应值, 而不确定性模型则可输出一组具有随机或模糊特征的值。对河流水质数学模型的研究, 经历了从确定性模型占主导向不确定性分析逐步受到重视的转变, 不确定性分析

已经成为河流水质模型应用中不可缺少的一部分。

目前,几乎所有水质模型都是依据质量守恒和能量守恒原理,在菲克扩散定律基础上通过流体力学中的连续方程、运动方程和能量方程推导得出。当今国外较先进成熟的河流水质模型都能与 GIS紧密结合,因此具有很强的数据采集、存储、管理、查询和检索功能。我国近 20年来引进了不少国外的研究成果,并加以改进和发展。在各类水质模型中应用最多的是有机污染模型,其中大量应用的是比较简单的 Streeter - Phelps模型和 Thomas模型, Camp - Dobbins模型和 O'Connor模型也有少量应用。目前,较成熟的是适合于中、小河流的一维稳态水质模型。随着研究领域的扩展和深入,二维模型、动态模型和河网模型也开始得到研究和应用,也有少数研究者对三维水质模型进行了探索。可以说,现阶段以扩散理论为基础的确定性河流水质模型及其数值解已经趋于成熟,而不确定性河流水质模型正处于不断研究与发展中。

### 1 不确定性的来源及分类

从数学的角度来看,随机性、模糊性、粗糙性是不确定性理论研究的三种最基本、最简单的单重不确定性。通常来讲,确定性方法被看作是从点上看问题,随机方法是从线上看问题,模糊分析方法则是从面上看问题。目前我国在不确定性方面的研究工作已相当普遍,各领域着重分析的不确定性主要是随机性、模糊性和灰色。

河流水质模型的不确定性来源主要有以下几个方面:与自然过程本身不确定性有关的自然不确定性;由于所选择的为了准确反映系统真实物理行为的模拟模型只是原型中的一个,造成了模型的不确定性;不能精确量化模型输入参数而导致的参数不确定性;数据的不确定性,包括测量误差、数据的不一致性和不均匀性、数据处理和转换误差,以及由于时间和空间等限制而使数据样本缺乏足够的代表性等。

影响河流中污染物浓度分布的因素主要有河流水域的物理性质、污染源强度、废水排放流量和方式、水文气象条件、水域的地形条件和水工建筑物的布置和结构等。这些因素相互作用使得流动相当复杂,主要表现在:一个过程由多个变量控制,往往同时伴有传质、流体流动、密度变化等有关过程;存在强烈的非线性效应,各参数间存在着强烈的耦

合;物理性参数随温度变化;受纳水域往往有复杂的几何形状和非线性边界。由于污染事故还存在信息的不完整性与不可比性,虽然水污染事故频繁发生,但至今还不可能通过某种河流水质模型来获得一场典型污染事故的全程信息。

当前河流水质模型考虑的不确定性主要有随机性与模糊性,并且现阶段不确定性河流水质模型的类型主要是随机模型,而模糊理论、灰色理论等则多用于水质评价。

### 2 随机水质模型

在确定性水质模型中,常将变化复杂的降解速率、沉降速率及扩散系数等模型参数按常量处理,故只模拟了浓度变化的确定性趋势,而忽略了不确定性。为了全面反映浓度变化的这两个特点,可用随机水质模型模拟其变化过程,将模型系数处理成随机变量或随机过程,研究计算结果的统计特性,以便于探索污染过程的动态特征,也是预测未来污染变化趋势的有效方法。利用随机微分方程的理论来探讨水质的不确定性变化是国内外随机水质模型研究的一个重要方向,但迄今为止这方面的研究基本上局限于一维随机水质模型,目前尚处于发展初期的二维随机水质模型主要是由确定性水质模型的解析解加上一项随机扰动项或将其中几个参数处理为随机变量而得到。

随机变量类水质模型认为随机现象是在时间静止的情况下发生的,它建立在概率论与数理统计的基础上;随机过程水质模型认为随机变量依赖于时间的变化,它建立在随机过程理论上。对一个固定时刻来说,随机过程表现为随机变量。正如随机变量的统计特征可由其分布函数确定一样,随机过程的统计特征由有穷维分布函数族确定。

随机过程可分为离散参数过程(又称随机序列)和连续参数过程(又称随机函数),在大多数情况下,只要合理采集数据,随机序列可以近似描述随机过程。根据概率特征,随机过程可分为独立增量过程、马尔可夫过程、平稳过程及二阶矩过程等。常见的泊松过程和维纳过程就是两个最简单也是最重要的独立平稳增量过程。由于污染物在河流中的传递是一个扩散过程,因此可以利用维纳泛函或扩散过程泛函来表达。目前,国内外所提出的随机水质模型大体可分为随机游动型(random walk)、随机变量型(random variable)和随机过程型(stochastic pro-

cess)三大类。

### 2.1 随机游动模拟

随机游动属于离散时间的马尔可夫过程。由随机游动原理可知,经过  $t$  时间后在给定位处质点出现的概率服从高斯分布,数学期望值为零,方差  $\sigma^2 = 2 D t$  ( $D$  为扩散系数)。1969年,在 Custer和 Krutchkoff的随机模型中,把单位 BOD 和 DO 浓度在水流中的流动扩散看作是一个随机游动过程。1972年, Schofield和 Krutchkoff对该随机游动模型进行了改进,考虑了若干参数的时空变化以及连续排污时污染物浓度概率分布将变成泊松分布的情形。1985年陈鸣钊利用随机游动模型模拟了河流污染带,并用稳定随机过程求解了方差。1991年黄克中用随机游动模型模拟了明渠污染带,采用一阶马尔可夫链模型可以合理解决时间步长的选择问题,证明了模型的有效性。Jacques G. Ganoulis<sup>[1]</sup>则具体给出了海岸污染物输移扩散的一维与二维随机游动模拟的理论推导与实例。M. J. Whelan等<sup>[2]</sup>假设河流所有排污口以及污染负荷已知,用随机模拟方法分析了河流中溶解性点源污染物的迁移规律及其概率密度函数,与实测数据的比较表明,该方法的预测效果良好。

该方法也称随机模拟 (random simulation),本质上属于 Monte Carlo 仿真,是一种基于计算机模拟的统计试验方法,它假定随机变量的概率分布函数以及随机变量之间的相关结构都是已知的,利用伪随机数生成足够的多组服从给定分布规律的随机变量,然后对每组输入变量分别进行数值模拟,再评价这些足够的多组随机变量所对应的模拟结果即可获得模拟结果的不确定性。其计算工作量较大,需要研究大量的质点 (至少 1 000 个);此外,由于该方法基于统计学原理,模拟浓度场会出现震荡,只有通过取时间平均值才能得到平滑曲线的结果。

### 2.2 随机变量类水质模型

随机变量类水质模型包括直接将确定性水质模型中的水质参数作为随机变量,以及将确定性水质模型解析解中的水质参数视为随机变量两种。

前者根据实际情况和需要,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,然后将随机模拟有关影响因素的变化过程同步输入确定性模型,从而模拟出一个长序列的水质浓度过程,对此进行统计分析可绘出浓度概率分布曲线。1984

年, Deway 提出了一个 BOD - NOD - DO 随机模型,并将其应用于泰晤士河的水污染控制规划中。在模型中 Deway 把众参数及输入条件均视为随机变量,并用实测资料来估计它们的均值与方差,最后用 Monte Carlo 法来产生上述系数及参数以求出 BOD<sub>5</sub>、NOD 和 DO 的密度函数。1989年叶守泽等将确定性 BOD - DO 模型中的参数取为概率分布函数、灰色参数和模糊化后,建立了河流水质不确定性数学模型。1991年金明提出了一维稳态河流水质的随机微分方程模型,可将水质参数、水力参数、初始条件等均视为随机变量,并给出计算解过程统计矩的公式。1993年黄平根据 Liouville 定理,推导了一维河流随机微分动态 DO 模型,提出了相应的数值算法,并应用于江门的河水质模拟。1995年雒文生等建立了确定与随机相耦合的水质随机预测方法,并成功应用于贵州红枫湖的水质模拟。R. Revelli和 L. Ridolfi<sup>[3]</sup>通过假设随机变量 (初始 BOD 浓度)的概率密度函数分别为正态分布和  $\chi^2$  分布,建立了一维随机水质模型,求得 BOD 的概率密度函数。Axel Lehmann 等<sup>[4]</sup>利用自回归分析模型和 ARMA 模型对德国 ELBE 河的长期数据进行了相关分析。Robert Portielje 等<sup>[5]</sup>利用随机可靠性方法对确定性水质模型进行了风险分析,主要考虑了确定性模型中参数的不确定性以及输入变量本身的随机变化。Shamshad Ahmad 等<sup>[6]</sup>讨论了河流随机水质模型的三种逼近方法,其中以傅立叶级数的随机逼近效果最好。

王祥三等<sup>[7]</sup>将确定性一维水质降解模型与二维迁移扩散模型进行耦合,在其解析解的表达式中引入随机变量,建立了二维随机水质模型。徐敏等<sup>[8]</sup>和郭琳等<sup>[9]</sup>在二维确定性水质模型解析解的基础上,分别利用有限元法和 Monte Carlo 方法对二维随机水质模型进行了求解,许其功等<sup>[10]</sup>则对两人的研究方法进行了综合应用并取得了良好效果。

相对而言,随机变量类水质模型的结构形式简单,计算结果信息量较大,在国外应用广泛。只要有足够多的参数,并根据系统的复杂性和结构特点对模型进行改进,这类模型就可以将所有不确定性降至最低。但是其模拟的准确程度取决于模型本身所采用参数的个数,当随机参数太多时则很难求解;而参数识别采用的是先验分布,往往假定参数为正态分布、对数正态分布及指数分布等,因缺乏分布检验

而存在一定的不足。

### 2.3 随机过程类水质模型

#### 2.3.1 确定性水质模型加随机项

何理等<sup>[11]</sup>在一维确定性水质模型的基础上增加一项随机扰动项来模拟河流中 BOD<sub>5</sub> 与 DO 的随机变化过程,表明随机项是引发水环境风险的重要不确定因素。徐敏等<sup>[12]</sup>给出了含两个水质指标的非线性水环境风险模型及其有限差分格式,求解了一维河流的随机水质模型,结果表明,随机扰动项可以反映诸多不确定因素对水环境风险影响总的结果。

为简化计算,目前这类随机水质模型的参数均取为常数,所有的随机因素都通过一个均值为零的随机项来反映,随机过程强度( $\sigma^2$ )被人为简化。由于没有具体分析随机扰动的影响因素及其作用方式,类似于“黑箱”模拟,因此它是对随机微分方程类水质模型的一种简化应用。

#### 2.3.2 Itô随机微分方程类水质模型

Itô随机微分方程(以下简称 Itô方程),是表达相当广泛的一类连续时间、连续状态的 Markov过程的一个重要而方便的工具。在 Itô方程中,随机过程表达为一个确定性函数与一个随机函数之和。Itô方程类水质模型与简化模型最大的区别在于是否给出随机过程强度( $\sigma^2$ )的表达式,其参数的处理方法取决于建模的方式和途径。一般污染物浓度或污染带的特征值均为随机过程。

分析污染物在河流水体中的扩散过程有两条基本途径:一是应用 Kolmogorov方程研究其转移概率密度,这是经典的方法;二是用 Itô方程研究其随机轨道,相对前者而言,这是一种新的方法,并且从 Itô方程到 Fokker - Planck - Kolmogorov (FPK)方程的转换是唯一的<sup>[13]</sup>。

Itô方程的解析解只在一些较简单的情形下才能得到,如 O - U方程。实用中较复杂的方程常需用数值解法。Itô方程的数值解法与普通常微分方程数值解法的主要区别在于,前者必须考虑与维纳过程及 Itô随机积分有关的特殊性。近 20年来,Itô方程的数值解法虽已有很快发展,但仍处于发展初期。求解 Itô方程最有效、使用最广泛的数值方法,是在计算机上模拟样本轨迹的时间离散近似<sup>[13]</sup>。

1982年,Finney等采用 Itô方程研究随机水质模型时,对方程中的系数按随机过程处理,认为此随

机过程可分解为稳定部分和随机紊动部分,随机部分可以用维纳过程模拟。1995年于清来用白噪声表示随机扰动,并将其处理为具有演变谱密度的非平稳随机过程,通过讨论该一维随机模型的统计特性,指出用水质指标(BOD<sub>5</sub>、DO)随机变化的均值函数和方差函数代替其均值,能更有效地反映其波动。1996年王超为避免求解随机微分方程,将较复杂的 O'Connor CBOD - NBOD - DO 一维水质方程分解为均值方程和随机脉动量方程,通过求状态变量的积分解和分布矩,并利用 Fokker - Planck方程求得概率密度函数。

Itô方程类水质模型要求给出随机扰动过程强度的表达式,以便进行量化,但是由于随机因素众多及其影响关系错综复杂而往往难以实现。另外,由于对随机过程缺乏彻底了解,以及求解时数学上的复杂性,也影响了此类水质模型的研究、发展与应用。但是,由 Itô方程可以直接构造出过程的轨道而不是过程的某个特征,这是有重要意义的;另外,在从一维过程推广到多维过程时,用这一方法研究轨道的性质不会产生本质上的困难,正好可以适应二维及三维水质模型构建的要求;并且实际应用时往往只需得到其解的数字特征就可满足预测水质的目的。因此,Itô随机微分方程类水质模型具有很好的发展前景。

### 3 模糊水质模型及灰色水质模型

模糊数学利用隶属函数作桥梁,将不确定性在形式上转化为确定性,即将模糊性加以数量化,从而可利用传统的数学方法进行分析处理。当数据不足时,可以利用模糊回归方法来建立变量间的函数关系,这一技术已经在水文学及其他一些工程领域中得到应用<sup>[11]</sup>。

模糊算法和外延原则在与确定性偏微分方程数值积分相关的模糊模型中得到应用,虽然在水资源和水质方面模糊模型的应用实例还很少,但近年来的理论研究取得了相当进展(如对于可以取模糊值的真实变量函数的积分和微分已经有了定义<sup>[11]</sup>),这对于应用模糊模型分析河流水污染系统的动力特性具有重要意义。

灰色水质模型的建立有两种途径:一种是把确定性水质模型中的全部或部分变量或参数处理为灰色变量以获得灰色解;另一种是在实测的时间序列数据基础上,根据灰色系统建模原理建立水质的灰

色模拟模型,如 GM(1,1)等。

由于河流水体污染事故往往具有突发性和并发性,需要根据事故的具体情况做出快速、合适的环境风险评价和应急处理对策等综合决策,所以很有必要发展突发性河流水体污染事故的应急决策支持系统。2005年发生在松花江的硝基苯污染事故和广东北江的镉污染事故也证实了这一点。目前,国内环境科学领域常把水质模型与环境风险评价分离,并对此进行了深入研究,但是建立在风险评价基础上的不确定性河流水质模型还很少见,而风险就是不利事件发生的可能性,具有不确定性<sup>[14]</sup>,如果能用风险评价、风险管理的观点来研究、处理水体环境污染问题,将可能使环境污染的研究上升到一个新的台阶。

另外,由于河流水质受水文过程和污染物排放等不确定性的影响,随机性、模糊性、灰性等往往共存,故可采用耦合方法进行研究。包括人工神经网络、遗传算法、模拟退火算法等在内的人工智能算法多用于水质模型的改进,在模型求解方法以及参数识别等方面使水质模型有了很大进展<sup>[15,16]</sup>,但它们一般不参与建模。

#### 4 结论与建议

实际水污染事故往往具有不确定性,有些不确定性又和非线性交叉在一起,使得非线性问题和不确定问题解决起来非常困难,这就需要发展新的理论和方法。这种新的理论和方法应该能综合考虑各种主要因素的影响,并能同时进行非线性和不确定性的分析。

近年来国际风险学界大量涉足环境污染问题,认为只有用风险评价、风险管理的观点来研究、处理环境污染问题,才能使对环境污染的研究上升到一个新的台阶。而风险主要针对不确定性,因此建立在风险评估基础上的不确定性河流水质模型是其主要发展方向。

目前应着力加强对新计算方法与技术的研究应用,同时继续深入研究污染物扩散迁移机理,不断改进和完善已有模型,并根据国内需要开发和引进新的河流水质模型。

#### 参考文献:

[1] Ganoulis J G 水污染的工程风险分析[M]. 彭静等译. 北京:清华大学出版社,2005.

- [2] Whelan M J, Gandolfi C, Bischetti G B. A simple stochastic model of point source solute transport in rivers based on gauging station data with implications for sampling requirements[J]. *Water Res*, 1999, 33(14): 3171 - 3181.
- [3] Revelli R, Ridolfi L. Stochastic dynamics of BOD in a stream with random inputs[J]. *Adv Water Res*, 2004, 27(9): 943 - 952.
- [4] Axel Lehmann, Michael Rode. Long-term behavior and cross-correlation water quality analysis of the River ELBE, Germany[J]. *Water Res*, 2001, 35(9): 2153 - 2160.
- [5] Robert Portielje, Hvitved-Jacobsen T, Schaarup-Jensen K. Risk analysis using stochastic reliability methods applied to two cases of deterministic water quality models[J]. *Water Res*, 2000, 34(1): 153 - 170.
- [6] Shamshad Ahmad, Iqbal H Khan, Parida B P. Performance of stochastic approaches for forecasting river water quality[J]. *Water Res*, 2001, 35(18): 4261 - 4266.
- [7] 王祥三,陈小江. 二维随机水质预测模型及其应用[J]. *武汉大学学报(工学版)*, 2001, 34(5): 16 - 20.
- [8] 徐敏,曾光明,刘鸿亮,等. 三峡库区二维随机水质模型研究[A]. 水问题的复杂性与不确定性研究与进展[C]. 北京:中国水利水电出版社,2004.
- [9] 郭琳,蔡固平,曾光明. 二维随机水质模型在模拟污染带中的应用[J]. *中南大学学报(自然科学版)*, 2004, 35(4): 573 - 576.
- [10] 许其功,刘鸿亮,曾光明. 三峡库区二维随机水质模拟预测研究[J]. *环境科学研究*, 2004, 17(5): 23 - 26.
- [11] 何理,曾光明. 河流水环境中的非突发性水质风险模型研究[J]. *环境污染与防治*, 2003, 25(1): 52 - 53.
- [12] 徐敏,曾光明,黄国和. 非线性随机水环境风险模型[J]. *水利学报*, 2005, 36(1): 56 - 61.
- [13] 朱位秋. 非线性随机动力学与控制——Hamilton理论体系框架[M]. 北京:科学出版社,2003.
- [14] 黄崇福. 自然灾害风险评估理论与实践[M]. 北京:科学出版社,2005.
- [15] 王建平,程声通,贾海峰. 基于MCMC法的水质模型参数不确定性研究[J]. *环境科学*, 2006, 27(1): 24 - 30.
- [16] 王建平,程声通,贾海峰. 水质模型参数优化的遗传算法实现及控制参数分析[J]. *环境科学*, 2005, 26(3): 61 - 65.

电话:(023) 65121412

E-mail: xujinglily@163.com

收稿日期:2007-02-05