

蒙特卡罗方法在水污染控制理论中的应用前景

姚 宏^{1,2}, 李圭白¹, 张景成¹, 田 盛¹

(1. 哈尔滨工业大学 市政环境工程学院, 黑龙江 哈尔滨 150090, E-mail: yaohongts@163.com;

2. 北京交通大学 市政环境工程系, 北京 100044)

摘 要: 在介绍蒙特卡罗计算机模拟方法的基本原理的基础上, 概述了蒙特卡罗方法在流体力学、石油开采、载体吸附等领域里的应用现状及存在的问题, 对其在水污染控制理论研究中的应用现状和前景进行了详细论述, 为水污染控制理论的深入研究开辟了一条崭新的途径。

关键词: 蒙特卡罗; 水污染控制; 数学模型; 准确性

中图分类号: TU991.56

文献标识码: A

文章编号: 0367-6234(2004)01-0129-03

Application of Monte-Carlo method in water pollution control theory

YAO Hong^{1,2}, LI Gui-bai¹, ZHANG Jing-cheng¹, TIAN Sheng¹

(1. School of Municipal and Environmental Engineering, Harbin Institute of Technology, Harbin 150090, China, E-mail: yaohongts@163.com; 2. Dept. of Municipal and Environmental Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

Abstract: The fundamentals of Monte-Carlo method are described. Its application status and existing problems in fluid mechanics, oil exploiting, carrier adsorption fields are discussed together with the application status and foreground in the theoretical research of water pollution control.

Key words: Monte-Carlo; water pollution control; mathematics model; accuracy

随着科学技术的发展,许多工程系统与动态过程变得越来越复杂,其共同特点是多变量、非线性、时变性与随机性。这样的过程变化使系统具有高度的不稳定性和模糊性,以致于难以建立基本的数学模型,除极少数方法外,要想给出其严格解是根本不可能的,用确定性方法给出其近似解也很困难,甚至不可能。蒙特卡罗方法以对随机性问题进行仿真为其基本特征,是解决这类问题能力很强的一种特殊的数值方法^[1]。

1 蒙特卡罗方法基本原理

蒙特卡罗方法以随机模拟和统计试验为手段,是一种从随机变量的概率分布中,通过随机选择数字的方法产生一种符合该随机变量概率分布特性的随机数值序列,作为输入变量序列进行特定的模拟试验、求解的方法^[2]。在应用蒙特卡罗

方法时,要求产生的随机数序列应符合该随机变量特定的概率分布。而产生各种特定的、不均匀的概率分布的随机数序列,可行的方法是先产生一种均匀分布的随机数序列,再设法转换成特定要求的概率分布的随机数序列,以此作为数字模拟试验的输入变量序列进行模拟求解。步骤如下:

1) 建立概率模型,即对所研究的问题构造一个符合其特点的概率模型(随机事件、随机变量等)。包括对确定性问题,需把具体问题变为概率问题,建立概率模型。

2) 产生随机数序列,作为系统的抽样输入进行数字模拟试验,得到大量的模拟试验值。

3) 对模拟试验结果进行统计处理(计算频率、均值等特征值),给出所求问题的解和解的准确度估计。

蒙特卡罗法可以用来求解某些确定性问题,特别是工程技术中的数学模型问题(如计算高维积分、求解代数方程组和计算逆矩阵等),在一般的解析法或数值法求解困难时尤其有效。

收稿日期: 2003-01-18.

作者简介: 姚 宏(1975-),女,博士;

李圭白(1931-),男,教授,博士生导师,中国工程院院士。

2 蒙特卡罗模拟结果的统计和处理

对于一个具体问题,通过建立概率模型,产生随机数以及对概率模型所进行的随机抽样试验,即得到所需要的模拟结果.蒙特卡罗方法最终以算术平均值作为所求解的近似平均数,并对其准确度及方差或标准差进行计算.

3 蒙特卡罗模拟方法在实际工程中的应用

3.1 蒙特卡罗法在流体理论研究中的应用

自20世纪60年代以来,许多学者利用电解质的原始模型,用蒙特卡罗法研究了许多低浓度电解质溶液和熔盐结构,并对各种近似理论进行了验证.直到1989年,Chan^[3]首次将Ewald求和技术用于等直径的离子-偶极混合物模型流体的蒙特卡罗模拟,计算了离子-离子、离子-偶极和偶极-偶极能及其径向分布函数,并对MSA与微扰理论相结合的理论公式及超网链近似进行了验证.李以圭^[4]等人进一步用蒙特卡罗方法模拟了等直径离子-偶极混合物,研究了不同离子浓度、密度和不同价态对各种作用能和径向分布函数的影响,进一步补充了原始模型和非原始模型理论公式的不足之处.1984年,Michler和Jacucci等^[5]在液态铝结构分析与离子势能关系模拟中采用了蒙特卡罗方法,其结果和实验结果一致.

3.2 蒙特卡罗法在石油气勘探开发中的应用

蒙特卡罗计算机模拟方法在石油气勘探开发方面用于解决以下问题^[6-8]:对估计油藏储量、产量、成本、经济效益的模型进行测试和优选;模拟钻井总成本,预测钻孔、完井、测井等阶段的时间进度;模拟空隙度、渗透率、毛管压力等物性参数的空间变化;计算油气储量、提高计算准确度;研究储量、产量、最终采收率以及勘探开发方案的不确定性,进一步研究勘探开发的经济风险.

3.3 蒙特卡罗法在活性炭吸附理论中的应用

随着计算机应用的日益普及及功能的日益强大,运用计算机采用分子模拟的方法来研究吸附质分子与活性炭孔表面的相互作用、吸附行为、吸附平衡等成为目前活性炭吸附乃至整个吸附学科研究的一个前沿课题.蒙特卡罗法被公认为是研究吸附比较好的方法之一,简单地说,该方法是以分子间的相互作用即分子力为基础,以统计方法(或称统计实验)为手段,采用现代计算机对流体与固定间的相互作用过程进行模拟计算,给出在这种相互作用下流体系统达到平衡状态时的有关

性质.由于其基础是分子间的相互作用,也是从分子尺度的层次上来讨论流体和固定的相互作用,因而,此方法特别适于讨论微孔材质的吸附特性^[9].

近年来,蒙特卡罗计算机模拟在活性炭的吸附特性以及炭材料结构表征和新材料设计方面得到应用,1996年,T J Mays和Jensen C R C^[10]等人在活性炭孔壁壁厚及孔壁上存在的缺陷而可能对其吸附特性产生的影响和对已有用于试验分析得到的吸附等温线方面进行了验证尝试.1998年,Gusev和O'Brien^[11]运用巨正则蒙特卡罗方法模拟了活性炭上的混合吸附,将计算机模拟结果与实验数据及IAST预测值进行了比较,发现与实际数据吻合得相当好,与IAST的理论结果也比较一致.印友法^[12]等人用此方法模拟活性炭吸附氮和甲烷的基本特征也取得了较好的结果.Salem^[13]等人测量了压力范围为0.1~20 MPa的5个温度下氩、氮气和甲烷在AS活性炭上的吸附,运用巨正则系蒙特卡罗模拟对等温线的特征进行了了解.Matrange^[14]等人运用蒙特卡罗法模拟了天然气在活性炭上的吸附,由模拟结果计算了吸附等温线、存储容量和吸附热,并与实验结果进行了对比.

3.4 在其他领域中的应用

目前,蒙特卡罗模拟方法在流体理论研究、相变、运输性质以及石油勘探、风险估测、供水管网、随机误差干扰、风险估算、最大弯矩的求解、植物育种的理论与实践、高分子科学理论研究、电磁场对流体的结构及热力学性质的影响等领域取得一定的成果^[15].同时,应用蒙特卡罗方法研究磁性液体的磁性能、磁致双折射、高温金属原子的蒸发等^[16-18]方面的工作日趋活跃.

4 蒙特卡罗模拟方法在水污染控制理论上的应用与展望

水污染控制是以微生物处理为主体的动态过程,它具有变量多与随机影响因素多而造成的高度非线性与模糊性、进水水质水量变化引起的过程不稳定、不确定的动力学模型、缺乏可靠的实时监测仪器、复杂的任务要求的特性,而且,水处理单元多样性和工艺参数相关信息的不完全性,对采取什么处理系统且每个系统的处理效果是不确定的,这必然造成选取处理单元时的盲目性.蒙特卡罗方法可用于预测不同水质在各处理单元的处理效果、出水水质等.其模拟方法如下:1)建立研究体系的数学方程以及方程中各个参数的相关

性;2)把各个参数作为随机变量,建立其概率分布模型;3)把各个参数进行一次随机赋值并按一定的概率法则进行计算,存储有关变量和计算结果;4)通过对数万次蒙特卡罗计算结果的统计分析得到模型体系待求量的最佳值以及概率分布;5)进行风险分析和方案论证。

目前,蒙特卡罗计算机模拟方法在水污染控制领域的应用在国内还未见报道,在国外已经用于解决以下问题:1991~1993年间,S. J. Goodbody等人用蒙特卡罗方法研究了活性炭、沸石、黏土等吸附材料对水中某种污染物的吸附特性,得出在一定条件下,吸附材质的除污染效能及其在不同条件下不同材质的吸附等温线的特性^[19~21];1999年,A. Olivieri^[22]等人在水深度处理中用此方法预测微滤-超滤-反渗透-离子交换-臭氧消毒等处理单元去除病原微生物(大肠杆菌)的情况,根据预测结果选出最优设计方案,预测结果与试验结果一致,通过实际试验验证了蒙特卡罗方法在模拟水处理除污染过程中是一种较有效的预测方法。

蒙特卡罗计算机模拟方法在水处理理论研究上还处于初期阶段,采用蒙特卡罗模拟方法对水处理中载体吸附理论、膜分离、滤料过滤理论、生物膜反应器除污染效能理论的研究是一个崭新的课题,在水污染控制理论研究上具有广泛的应用前景。

参考文献:

- [1] 梨锁平. 运用蒙特卡罗法求解随机性问题[J]. 甘肃工业大学学报, 2001, 127(2): 95~97.
- [2] KALOS M H, WHITLOCK P A. Monte Carlo Method [M]. New York: Wiley, 1986.
- [3] CHAN K Y. Monte Carlo and simple theoretical calculations for ion-dipole mixture[J]. Molecular Phys, 1989, 66(2): 299~316.
- [4] 李以圭, 李春喜. 电解质溶液的分子热力学模型研究进展[J]. 化学进展, 1996, 8(2): 155~161.
- [5] BINDER K. Applications of Monte Carlo in Statistical Physics [M]. Berlin: Springer Verlag, 1984.
- [6] MURTHA J A. Monte Carlo Simulation: Its Status and Future [M]. [s.l.]: [s.n.], 1997.
- [7] KITCHEL B. Probabilistic Drilling Cost Estimation [M]. [s.l.]: [s.n.], 1996.
- [8] PETERSON S K. Risk Analysis and Monte Carlo Simulation Applied to the Generation of Drilling AFEE Estimates [M]. [s.l.]: [s.n.], 1993.
- [9] 曹达鹏, 高广图, 汪文川. 巨正则系综蒙特卡罗方法模拟甲烷在活性炭孔中的吸附存储[J]. 化工学报, 2000, 151(1): 23~30.
- [10] MAYS T J, LECANED M D. Fundamentals of Adsorption [M]. Boston: Kluwer Academic Publishers, 1996.
- [11] GUSEV V Y, O'BRIEN J A. Prediction of gas mixture adsorption on activated carbon using molecular simulation[J]. Langmuir, 1998, 14(21): 6328~6331.
- [12] 印友法, 朱卫华. 巨正则系综蒙特卡罗法研究活性炭吸附[J]. 碳素技术, 1998(2): 1~5.
- [13] SALEM M M K, BRAEUER P, SZOMBATHELY V M, et al. Thermodynamics of high-pressure adsorption of argon, nitrogen, and methane on microporous adsorbents [J]. Langmuir, 1998, 14(12): 3376~3389.
- [14] MATRANGA K R, STELLO A, MYERS A L, et al. Molecular simulation of adsorbed natural gas[J]. Separation Science and Technology, 1992, 27(14): 1825~1836.
- [15] HEERMANN K D W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics [M]. New York: [s.n.], 1992.
- [16] 谢学全. 磁性液体磁性能的计算机随机模拟方法研究[J]. 计算物理, 1997, 14(1): 13~18.
- [17] 孔羽飞. 高温金属原子蒸发的蒙特卡罗计算机模拟[J]. 清华大学学报, 1996, 36(6): 50~54.
- [18] PAN Y T. Monte Carlo simulation of magnetobirefringence in magnetic fields [J]. Appl Phys, 1993, 73(10): 6142~6144.
- [19] GOODBODY S J, WATANABE K, MACGOWAN D, et al. Molecular simulations of methane and butane in silicalite[J]. Journal of Chem Soc Faraday Trans, 1991, 87: 1951~1958.
- [20] SNURR R Q, JUNE R L, BELL A T, et al. Molecular simulations of methane adsorption in silicalite[J]. Mol Sim, 1991, 8: 73~92.
- [21] MADDOX M W, ROWLINSON J S. Computer simulation of the adsorption of a fluid mixture in zeolite [J]. Journal of Chem Phys, 1993, 98: 8919~8929.
- [22] OLIVIERI A, EISENBERG D. Estimation of pathogen removal in an advanced water treatment facility using Monte Carlo simulation [J]. Wat Sci Tech, 1999, 40(4~5): 223~233.

(编辑 刘 彤)