

人工神经网络 及其在水质信息检测中的应用

陈丽华 岐荣鑫 王宏伟 ◎著

ANN Networks
and Applications
in Information Detection
of Water Quality



国防工业出版社
National Defense Industry Press



人工神经网络 及其在水质信息检测中的应用

陈丽华 咸荣鑫 王宏伟 著

国防工业出版社

·北京·

前　言

人工神经网络是一门发展十分迅速的交叉学科。虽然对神经网络、神经单元的研究很早就已经开始,也取得了不少成果,如描述神经元的著名的 H. H 方程、Hebb 的学习规则等,但是这些成果还只限于在生物或控制领域中应用。人工神经网络是在生物学中神经网络理论的基础上,简化了伏在结构的偏微分 H. H 方程模型,构成了多个神经元互联结构的网络,研究这个复杂的多维非线性大系统中的信息的分布、传递以及处理的理论和方法,并用于解决实际工程问题。由于这些神经单元在形式上比较一致,十分便于 VLSI 的实现。这门学科的研究使诸如生物学、认识科学、非线性科学等基础学科与计算机、电子学、人工智能、微电子、信息处理、模式识别学科有机地结合起来,并更具广泛的应用前景。

近年来人工神经网络不仅在理论上、模型上有所发展,而且在应用上也有较快的发展,特别是这一两年芯片的发展十分迅速,已有不少商品化的芯片问世,使得科技人员、在校学生在自己的研究领域中有可能接触到人工神经网络,有可能应用人工神经网络这一最新高技术成果来解决自己的问题。为此,不少高等学校已为本科高年级学生和研究生开设了神经网络课程以及针对神经网络工具箱函数开设的基于 MATLAB 的系统分析与设计,教材也着重于数学原理和程序设计,为初学者认识人工神经网络,掌握其特征,并学会如何用工具箱函数进行分析、计算和设计提供了强大的帮助。但目前将神经网络应用于具体领域的著作寥寥无几,环境科学作为一门交叉学科也将这一技术用于各个方面,获得许多研究成果。为满足读者了解神经网络在水环境信息检测中如何应用,并能够解决哪些问题,作者结合多年的研究成果简要介绍了这一领域的最新成果,并以当前几种主要模型为线索,详细介绍了人工神经网络基础知识、在水质信息检测中常用的算法,最后以大量的应用示例说明人工神经网络在水质信息检测中的应用及方法。

本书是作者从事“人工神经网络在水质信息检测中的应用”研究多年，结合近几年科学研究成果，并参考国内外有关文献资料编著而成。本书作为人工神经元网络在水质信息检测中应用方面的入门书，由浅入深详细地介绍了人工神经网络的原理与特点，对于每一种常用的网络都给出了详细的计算方法。

本书共分五章。第一章介绍了人工神经元网络的发展史，并简单介绍了人工神经网络在水质信息检测中应用的意义与背景；第二章介绍了生物神经元网络的基本原理，可使读者对于真实的神经元网络在水质信息检测中的应用有一些基本的概念，这对于理解和研究人工神经元网络在水质信息检测中的应用是必不可少的；第三章叙述了人工神经元网络的结构和分类；第四章讲述了几种主要的人工神经元网络的原理、具体计算方法、在水质信息检测中应用实例，这也是作者研究领域的部分内容；第五章介绍了其他的一些方法在水质信息检测中的应用。本书第一章由臧荣鑫编写，其余各章由陈丽华编写，王宏伟对全书进行统稿校正。

限于作者水平，书中错误和欠缺之处在所难免，恳请读者指正。

作 者

2011 年 3 月

目 录

| | |
|-----------------------------------|-----------|
| 第一章 人工神经网络概论 | 1 |
| 1.1 人工神经网络发展概况及其特点 | 1 |
| 1.2 人工神经网络在水质信息检测中的应用背景及其意义 | 3 |
| 1.3 河流水流模型研究进展及存在问题 | 7 |
| 1.3.1 国内外水质模型发展阶段 | 7 |
| 1.3.2 现有水质模型存在的问题 | 8 |
| 1.3.3 水环境模拟中的不确定性 | 9 |
| 1.4 神经网络在水质评价中的应用研究 | 10 |
| 1.4.1 水质评价基本方法 | 11 |
| 1.4.2 人工神经网络用于地表水环境质量评价 | 13 |
| 1.4.3 神经网络在水质模拟中的应用研究 | 14 |
| 1.5 神经网络与水质模拟及水质评价结合的优势 | 15 |
| 1.6 人工神经网络在水质信息检测处理中的应用前景 | 18 |
| 第二章 人工神经网络基础知识 | 20 |
| 2.1 人工神经网络概述 | 21 |
| 2.1.1 生物神经元网络的基本原理 | 23 |
| 2.1.2 人工神经网络的基本原理 | 26 |
| 2.1.3 人工神经网络模型 | 31 |
| 2.2 神经元网络的学习过程 | 40 |
| 2.3 神经元网络的学习规则 | 42 |
| 2.3.1 Hebb 学习规则 | 44 |
| 2.3.2 感知机(Perceptron)学习规则 | 48 |
| 2.3.3 Delta 学习规则 | 50 |

| | | |
|------------|-------------------------------|-----------|
| 2.4 | 神经元网络的工作过程 | 52 |
| 第三章 | 在水质信息检测中常用的算法 | 55 |
| 3.1 | 人工神经网络的训练(学习) | 55 |
| 3.2 | 几种常用的人工神经网络算法 | 60 |
| 3.2.1 | 误差反传训练算法(Back Propagation,BP) | 60 |
| 3.2.2 | RBF 径向基函数神经网络 | 67 |
| 3.3 | RBF 和 BP 神经网络的比较 | 73 |
| 第四章 | 人工神经网络在水质信息检测中的应用 | 75 |
| 4.1 | 不同学习算法对 BP 网络性能影响的研究 | 75 |
| 4.1.1 | BP 网络的学习算法 | 75 |
| 4.1.2 | 水质预测 BP 网络的建立 | 77 |
| 4.2 | 用最佳学习算法预测黄河水 DO 浓度 | 80 |
| 4.2.1 | 时间序列建模方法 | 80 |
| 4.2.2 | 样本选取及数据预处理 | 81 |
| 4.2.3 | 交互检验训练法 | 82 |
| 4.2.4 | 优化与预测 | 82 |
| 4.2.5 | 结果与讨论 | 85 |
| 4.2.6 | 结论 | 87 |
| 4.3 | BP 网络用于黄河水质的预测研究 | 88 |
| 4.3.1 | 时间序列建模方法及算法 | 88 |
| 4.3.2 | 样本选取及网络训练方法 | 88 |
| 4.3.3 | 结果与讨论 | 90 |
| 4.3.4 | 结论 | 90 |
| 4.4 | 用于黄河水质综合评价的人工神经网络模型的研究 | 92 |
| 4.4.1 | 建立计算模型及训练样本 | 92 |
| 4.4.2 | 网络参数的确立 | 95 |
| 4.4.3 | 应用实例 | 95 |
| 4.4.4 | 结论 | 96 |
| 4.5 | 应用人工神经网络对黄河甘肃段水质进行分类评价 | 96 |

| | | |
|------------|------------------------------|-----|
| 4.5.1 | 建模的数据 | 96 |
| 4.5.2 | 网络训练的水质标准数据 | 96 |
| 4.5.3 | RBF 的结果 | 98 |
| 4.5.4 | BP 的结果 | 100 |
| 4.5.5 | 结论 | 101 |
| 4.6 | 运用 BP 网络优化 DO 的影响因素及预测 DO 含量 | 101 |
| 4.6.1 | 实验前原始数据准备 | 101 |
| 4.6.2 | 训练集和检测集的生成 | 102 |
| 4.6.3 | 网络试验的内容 | 104 |
| 4.6.4 | 小结 | 108 |
| 4.6.5 | 实例 | 110 |
| 4.6.6 | 结论 | 111 |
| 4.7 | 不同的学习样本优化法对网络精确度的对比研究 | 112 |
| 4.7.1 | 样本选取 | 112 |
| 4.7.2 | 学习样本归一化选择 | 113 |
| 4.7.3 | 隐含层节点数的优化 | 119 |
| 4.7.4 | 线性插值 | 122 |
| 4.7.5 | 结果与讨论 | 123 |
| 4.7.6 | 应用实例 | 123 |
| 4.8 | 主成分分析法研究黄河甘肃段水质影响因素 | 124 |
| 4.8.1 | 主成分分析方法简述 | 124 |
| 4.8.2 | 实例分析 | 125 |
| 4.8.3 | 黄河甘肃段水质变化状况 | 126 |
| 4.8.4 | 结论 | 127 |
| 第五章 | 其他方法在水质检测中的应用 | 128 |
| 5.1 | 水质评价模糊数学法 | 128 |
| 5.1.1 | 水环境质量模糊综合评价模型 | 128 |
| 5.1.2 | 水质评价模糊综合指数法的算法 | 130 |
| 5.1.3 | 水质评价模糊综合指数法程序框图 | 132 |

| | | |
|-------|----------------|-----|
| 5.1.4 | 模糊综合指数法计算结果 | 132 |
| 5.2 | 水质评价灰色聚类法 | 134 |
| 5.2.1 | 水质灰色聚类评判模型 | 135 |
| 5.2.2 | 水质评价灰色聚类法的算法 | 136 |
| 5.2.3 | 水质评价灰色聚类法的程序框图 | 137 |
| 5.2.4 | 灰色聚类法计算结果 | 137 |
| 参考文献 | | 139 |

第一章 人工神经网络概论

1.1 人工神经网络发展概况及其特点

人工神经网络(Artifical Neural Networks)的研究起始于19世纪40年代,但发展一直比较缓慢。80年代之后,由于Hopfield的工作,大大推动了人工神经网络的研究及应用。人工神经网络方法是建立在现代神经科学研究成果基础上的一种抽象的数学模型,它反映了大脑功能的若干基本特征,但并非逼真地描写,只是某种简化、抽象和模拟。人工神经网络的基本思想就是从仿生学角度模拟人脑神经系统的运作方式,使机器具有人脑那样的感知、学习和推理能力。它将控制系统看成是由输入到输出的一个映射特性,从而完成对系统的建模和控制,它使模型和控制的概念更加一般化。理论上讲,基于神经网络的控制系统具有一定的学习能力,能够更好地适应环境和系统特性的变化,非常适合于复杂系统的建模和控制。特别是当系统存在不确定性因素时,更体现了神经网络方法的优越性。它高度综合了计算机科学、信息科学、生物科学、电子学、物理学、医学、数学等众多学科,具有独特的非线性、非凸性、非局域性、非定常性、自适应性和容错性。它强大的计算能力和各种信息处理能力,既标志着人工智能、认知科学、计算机等学科的发展位于一个崭新的转折点,也为包括水环境体系在内的各专业领域的应用研究带来了新的契机。

随着社会的发展,水环境系统日益恶化,面临许多亟待解决的问题,单纯使用确定性和不确定性方法(包括模糊理论、灰色关联系统)已无法满足研究水环境系统的复杂性和动态性要求。而且由于水环境系统具有极强的非线性动力特性,使得基于显函数和线性假设的分析手段与数学模型很难如实模拟水环境的变化过程及系统特征。因此,将人工神经网络引入水环

境体系并建立合适的人工神经网络模型，在继承原有方法优点的基础上，有望解决原有方法难以解决的一些复杂问题。本书主要介绍人工神经网络及其在水质信息检测的应用，有关专家系统的内容，读者可以参考有关人工智能的教材和书籍，在此只作简单介绍。

(1) 专家系统是人工智能技术中发展最早、应用最广泛的一种技术，它主要解决非结构化的问题，即尚未建立或无法建立精确数学模型的问题。它是通过问题的形式化，求解过程的自动化实现三个环节所对应的人工智能的三大技术：知识表示技术，机械化、自动化推理技术和系统构成技术所构成。目前专家系统已广泛应用于各个行业，在国民经济中起着重要作用，专家系统存在的问题有：①由于在专家系统中主要使用二值逻辑（命题逻辑和谓词逻辑），因而知识表达和推理结果都过于粗糙；②由于行业专家的局限性，使专家系统的应用范围也有局限性，加上至今尚无较好的方法使已建立的专家系统能自动获取知识，以扩充专家的知识库和使用范围，这个问题已成为应用专家系统的一个“瓶颈”，急需研究解决。

(2) 模糊理论是 1965 年 L. A. Zadeh 提出模糊(Fuzzy)数学(或集合论)后发展起来的模糊推理理论和模糊聚类方法。用它可以解决专家系统中因二值逻辑产生的知识表达过于粗糙的问题，并用 Fuzzy 推理规则产生了非精确性推理方法。Fuzzy 技术是近年来迅速发展的新技术，部分解决了专家系统中存在的一些问题，并已用于生产实际。

(3) 人工神经网络是近几年来迅速发展的人工智能新技术，它比专家系统、模糊理论等人工智能技术具有更高的水平，因而引起了各国学者的浓厚兴趣。人工神经网络除了具有与专家系统、模糊推论所具有的推理功能外，它还具有专家系统、模糊理论所不具备的很多智能功能，可以说它具有更接近于人的大脑的识别及思维能力，它的主要特点是：

① 由于神经网络模仿人的大脑，采用自适应算法，使它较专家系统的固定的推理方式及传统计算机的指令程序方式更能够适应环境的变化，总结规律，完成某种运算、推理、识别及控制任务。因而它具有更高的智能水平、更接近人的大脑。

② 较强的容错能力使神经网络能够和人工视觉系统——光电扫描读入

器一起,像人一样根据对象的主要特征去识别对象。

③ 自学习、自组织功能及归纳能力。

以上三个特点使得人工神经网络能够将不确定的、非结构化的信息以及图像进行识别、处理。水质中的大量信息就具有这种性质,因而人工神经网络非常适合水质信息处理。所以水质信息检测信息处理将是人工神经网络最有前景、最可能取得突破性进展的领域之一。

④ 分布存储、联想记忆和并行处理。

人的大脑细胞的数目在 $10^{10} \sim 10^{11}$ 数量级,这么多的脑细胞之间的联系和处理信息的方式就是分布存储、联想记忆和并行与串行组合处理的。它既可对客观事物在几毫秒内做出判断、决策和处理,还可在部分脑细胞失效或死亡时不影响头脑的功能。当大脑局部损伤时也只会引起功能衰退,但不会使大脑突然丧失功能。

1.2 人工神经网络在水质信息 检测中的应用背景及其意义

20世纪以来,世界经济突飞猛进,人口剧增,对水的需求量日益增加。全球淡水需求量在1900年~1995年间增加了5倍,是人口增长率的2倍。1997年联合国水资源大会上,又传出一个震惊世界的预言:到2010年全球缺水人口预计将达10亿,到2030年世界将有 $1/3$ 以上人口遭受中高度缺水的压力。我国水资源形势也不容乐观,人均占有水量只有世界人均占有水量的 $1/4$,居世界109位,被列为世界人均水资源贫水国家之一。我国一方面严重缺水,另一方面由于生产工艺落后,水环境管理不善,盲目追求经济效益,只讲发展,使有限的水资源又遭到严重污染,犹如雪上加霜。

特别是21世纪以来,江河湖海的各种水体受污染的程度不断加重,据统计,2006年全国地表水总体水质属中度污染,在国家环境监测网(简称国控网)实际监测的745个地表水监测断面中(其中,河流断面593个,湖库点位152个),I~III类、IV类、V类和劣V类水质的断面比例分别为40%、10%、22%和25%,主要污染指标为高锰酸盐指数、氨氮和石油类等。

我国的水质监测工作始于 20 世纪 50 年代末 60 年代初。自 1956 年起，水利部相继在全国 500 多条大、中河流上建立了 900 多个水化学监测站，对河水的主要物理性质、主要离子和营养元素组分等进行了监测（70 年代又增加了常见污染物的监测）。1979 年环保部门在全国六大水系上设立了 300 多个监测断面，对反映水质污染变化趋势的 17 个水质指标进行了监测。与国外相比，我国对河湖水质的研究起步较晚，不同学者对河流研究的侧重点也不同，总体来说，70 年代以前，研究较多的是河流的天然水质，70 年代以后，人们研究更多的是河流的水质污染状况。80 年代初期，我国的研究学者开始关注人类活动通过点源、非点源途径对水环境的影响。近几年来，人们对河流水质进行了大量研究，真正系统的水质变化研究工作也正在慢慢发展起来。

国控网七大水系的 197 条河流 408 个监测断面中，I ~ III 类、IV 类、V 类和劣 V 类水质的断面比例分别为 46%、23%、5% 和 26%，其中，珠江、长江水质良好，松花江、黄河、淮河为中度污染，辽河、海河为重度污染，主要污染指标为高锰酸盐指数、石油类和氨氮；27 个国控重点湖（库）中，满足 II 类水质的湖（库）2 个（占 7%），III 类水质的湖（库）6 个（占 22%），IV 类水质的湖（库）1 个（占 4%），V 类水质的湖（库）5 个（占 19%），劣 V 类水质的湖（库）13 个（占 48%），主要污染指标为总氮和总磷。

虽然我国近年来实施强化河流水资源环境综合治理，使得河流水资源环境恶化趋势开始得到控制，但是根据上面所给数据，可以看出劣于 IV 水质的断面在所有断面当中所占的比例已经超过了一半，达到 54% 之多，其监测结果表明环保形势不容乐观，各项污染物排放量很大，污染程度仍处于相当高的水平。所以评价河流的污染程度，划分污染等级，确定污染类型，准确指出河流污染程度，可以为进一步强化河流水资源环境的综合治理，逐步改善河流水资源污染程度，保护河流水资源提供方向性、原则性的方案和依据。

人工神经网络是人工智能科学的一个重要分支，是由大量神经元互连组成的超大规模的非线性动态系统，是集神经生理学、认知科学、数理科学、生物物理学、信息科学、管理科学和计算机科学等学科成就而形成的交叉边

缘学科和新兴高技术。人工神经网络的研究热潮自 20 世纪 80 年代末兴起以来一直持续至今。在美国、日本、欧共体国家等工业发达国家,近几年更是启动了一些重大计划,以探索人工神经网络的机理、模型、算法、应用和开发基于神经网络原理的新一代计算机(Neurocomputer),以期在新的信息处理技术的竞争中占领制高点。人工智能神经网络(Artifical Neural Networks, ANNs)作为一种模仿生物神经网络的资讯处理与计算系统,具有高速计算能力、大容量记忆能力、学习能力、联想能力、自适应能力、容错与模糊推理等突出优点,其在传感技术、知识与信号处理、自动控制、航空与航天、运输、通信、市场分析、医疗诊断等众多技术与工业领域的应用正在取得日新月异的进展和成就。

随着 ANNs 理论和应用技术的日益完善,它的应用范围越来越广。神经网络以其具有的大规模并行处理、连续时间非线性动力学、自学习及实时处理等许多优良特性正成为诸学科发展中最吸引人的学科生长点。神经网络是否适应于水质建模是值得研究的课题。

然而,ANNS 毕竟是门新兴的高难科技,在各个领域还远未得到广泛而又成熟的应用,在水环境领域更是如此。20 世纪 70 年代,Back 等人就曾尝试将模糊控制理论应用于挪威的 U. K. 污水厂;神经网络在描述活性污泥中的微生物上已有应用实例,并建立了给水和废水处理控制的人工智能工作站及泵站的专家系统;神经网络在以色列 shafdan 污水厂中的运用也已取得了一定成功。在其他国家和地区还有用神经网络预测未污染河流中生物种族数目、进行污水厂水质管理、预测排放水的水质等实例。近几年来,人工神经网络在水质模型方面的应用取得了飞速的发展。T. R. Neelakantan 等用人工神经网络建立了水库运行的模拟—优化模型。Vchanramouli 等。用动态规划和 ANNs 来模拟多水库水系的运行方案。Bin zhang 等结合贝叶斯概念(Bayesian Concepts)组合的 ANNs 来预测集水区的径流量。Marina campolo 等。用 ANNs 来预测河流枯水期的流量并得出结论:当它与水质模型相结合时对河流的水质管理非常有用。SharadkumarJain 用 ANNs 开发了综合的沉淀速率曲线。ANNs 被用作胡克和吉维斯非线性规划(Hooke and Jeeves Nonlinear Programming)模型的子模型,来寻求水库运行近似最优方

案。结果表明,该模型比常规的模拟—优化模型结果更精确。此外,ANNs 还可应用于水系模型的误差更新。随着 ANNs 的不断发展和完善,在环境科学工作者们的努力之下,相信 ANNs 在水质模型方面的应用将会更深入、更全面、更系统,ANNs 在水环境科学中的应用仍将是今后相当长时间内的热点之一。

根据水质综合评价的特点及 Hopfield 网络优良的模式识别性能,通过对 Liapunov 能量函数构造的合理设计,提出了水质综合评价 Hopfield 网络模型,并从数学上严格推证了水质评价 Hopfield 网络的样本分类性能。通过实例研究结果表明:Hopfield 模型在相当多评价指标的情况下,仍可很快地给出评价结果,且可达到相当高的精度,同时模型可表述定量和定性的评价指标,增强了评价方法的通用性和适用性。

针对水质信息的模糊性特征,将模糊数学与神经网络相结合,首次提出了水质评价隶属度 BP(Back Propagation)模型。通过对隶属度 BP 模型、模糊综合指数法和灰色聚类法实例评价结果的比较,提出的隶属度 BP 模型融合了 ANNs 方法和模糊评价方法的优点,有效地克服了模糊综合指数法评价结果偏重和灰色聚类法评价结果偏轻的缺陷,提高了评价结果的准确性和可靠性;该模型可方便地对模糊规则进行增加或删减,比传统的综合指数类评价方法更具灵活性,程序的通用性好,应用方便;隶属度 BP 模型考虑了环境水质类别变化的连续性,使评价方法更接近客观实际。

总之,将 ANNs 方法引入水污染控制规划领域,主要是在水质评价和水质模拟的人工神经网络建模方法以及模型算法方面进行了一些创新性的工作,为提高水质评价和水质模拟的智能化水平做出了努力。

水质综合评价是水环境质量评价的重要内容,它以定量特征直观地表示了水环境质量的总体状况,是现代环境科学基础理论研究的重要课题。环境管理部门以单指数评价方法运用于环境影响评价有利于水环境的保护,但如果运用于水环境质量评价,将会大大降低水域功能,不能发挥水环境的综合作用。除此之外,国内外用于水质综合评价的方法很多,如早期采用的综合指数法、灰色聚类法、灰色模式识别法、模糊综合评价法、模糊模式识别法。但这些方法都要事先假定模式或主观规定一些参数,多

数需要设计各评价指标对各级标准的隶属函数及各指标的权重,评价结果具有很强的主观性,因此它们还不能在实际中得到真正应用,在环境评价中只是作为一种参考方法,仍要求采用单指数评价法确定水质类别。所以,需要研究更具客观性的水质综合评价方法。本书探讨了应用人工神经网络中的 BP 模型给出客观的水质评价方法。

1.3 河流水流模型研究进展及存在问题

1.3.1 国内外水质模型发展阶段

早在 100 多年前,Navier, Poisson, Saint – Venant 和 Stokes 等人卓有成就的研究,确定了揭示流体运动的一般规律的理论,即 N – S 方程。纵观其发展历史,有许多著名科学家为此做出了杰出的贡献,如 Euler, Boussinesq, Karman 等。正是由于他们丰富的研究成果,水质数学模型才得到了长足发展,其发展过程大致可以分为以下几个阶段:

第一阶段(1925 年—1960 年),基本的经典水质模型是由 Streeter 和 Phelps(1925)提出来的,后来由 Phelps 在 1944 年总结和公布出来,这是第一个水质模型。后来科学家在此基础上成功地总结出 BOD – DO 模型并将其运用到水质预测等方面。这一阶段的模型比较简单,只考虑了 BOD 及 DO 的双线性系统模型,应用主要是 S – P 模型及其修正式。

第二阶段(1960 年—1965 年),在 S – P 模型的基础上有了新的发展,并将其运用于比较复杂的系统,引进了空间变量和物理的、生物化学的、动力学系数。温度作为状态变量也引入到一维河流和水库模型,水库(湖泊)模型同时考虑了空气和水表面的热交换。

第三阶段(1965 年—1970 年),在这个阶段,不连续的一维模型扩展到包括其他来源和丢失源。其他来源和丢失源包括氮化物耗氧(NOD)、光合作用、藻类的呼吸以及沉降、再悬浮等。计算机的成功应用使水质数学模型的研究有了突破性的进展。

第四阶段(1970 年—1975 年),数学模型已发展到许多模型相互作用的线性化体系。有限元模型用于两维体系,有限差分技术也应用于水质模型

的计算,更高维数的模型不断地被发展。

第五阶段(1975年—1995年),在这20年里,科学家的注意力逐渐转移到改善模型的可靠性和评价能力的研究。随着改进的二维、三维河流、河口和湖泊(水库)模型的发展,水力学和水质间的耦合越来越引起科学工作者的重视。水质模型的研究由单一组分的模型向较综合的模型发展,在该阶段中,水库、湖泊的富营养化模型研究已取得了可喜进步。美国环保局(U. S. EPA)开发的QUAL-II模型便是一个成功范例。

第六阶段(1995年至今),由于计算机软硬件、在线仪表监测系统、卫星遥感技术、GPS技术、GIS技术和信息技术的高速发展及在水环境中的应用,使水环境数学模型有了飞速发展,许多以前不能解的数学模型,现在能得到很满意的结果。模型的可靠性、预见性、综合性和科学性得到进一步的提高,维数更高的模型(例如四维的水质模型)在水质规划中得到应用。

1.3.2 现有水质模型存在的问题

自从1925年第一个水质数学模型诞生以来,国内外在确定性水质数学模型研究方面由最初的只能对水体中BOD-DO进行模拟的streeter-Phelps水质模型发展到今天功能全面的MIKE SHE、BASINS等水质模型系统,并获得了非常辉煌的成就以及丰富的经验。但其发展和应用过程中还存在不少问题,本书对这些问题进行了概括归纳,如表1-1所列。

表1-1 现有水质模型存在的问题

| 水质模型存在的问题 | 主要表现 | 原因 |
|--|--|---|
| 空间维数有待提高、模拟范围不全面;前后处理能力以及通用性不强;水质与水动力模型的耦合不够 | ①未开发出在国内外广泛使用的模型软件;②能够模拟的水质变量有限,通常局限于BOD,DO等常规指标;③海量数据的分析、计算、查询与显示能力欠缺,模拟结果缺乏交互性;④不能真实地反映水体对污染物的物理迁移过程影响 | ①经济原因使开发单位常依据实际问题或者某一研究对象特点开发模型;②对多种水质变量的迁移转化规律认识不足;③各学科之间交叉互动不够;④水体的流场常被作为已知值或忽略水体流速空间分布差异 |
| 缺乏必要的监测数据与实验支持 | 实际应用中常需大量简化,许多模型参数被看作是常数或者被忽略 | ①经济实力不强,基础条件薄弱;②环境保护工作投入不足 |

(续)

| 水质模型存在的问题 | 主要表现 | 原因 |
|-----------------|---|--|
| 模拟结果不十分精确 | 模型参数需反复率定,模型的模拟结果只是对实际情况的近似体现而非精确预报 | ①对污染物在水中的迁移转化机理还有许多不明之处;②水质模型本身及求解过程中存在的不确定性 |
| 事故预警与风险分析能力有待加强 | 由一级确定的输入只能给出一组确定的输出,并没有关于某一点浓度变化的概率曲线,提供的水质信息不够丰富 | 由确定性模型的本质决定 |

由表 1-1 可以看出:模型不确定性研究不足,确定性与多种不确定性研究方法在水质模型中的耦合还有待完善,是目前国内外水质模型研究领域共同存在的问题。

1.3.3 水环境模拟中的不确定性

20 世纪 80 年代以来,模型的可靠性、预见性、综合性和科学性得到进一步的提高,维数更高的模型(例如四维的水质模型)在水质规划中得到应用。模型的微观化、动态化、智能化在目前和今后仍是关注的焦点。

另一方面,由于环境的水文及排污条件具有的随机性,导致了水环境数学模型输出的不确定性。为了提高模型的预测精度和结果的可靠性,对模型不确定性进行分析研究,近十几年来取得了明显的进展。水环境是一个充满不确定性因素的复杂系统。Andrews K. Takyi、Beek 对各种关于水环境中不确定性的来源做了系统的总结(图 1-1),他认为,水环境中的不确定性主要来源于以下几个方面:①水环境初始状态的不确定性;②确定水质模型参数的过程中存在的不确定性;③模型输入与输出过程中存在的不确定性;④没有观察到的模型输入过程中的各种扰动所造成的不确定性。

水环境系统复杂多变,目前许多生物、化学过程的反应机理还不十分清楚,还不能或难以用数学方程来表达。传统的确定性水质数学模型在应用过程中通常需要大量的水文、水质参数,而这些参数既多又难于测量,这些都限制了确定性水质数学模型的适用性和准确性。因此,寻求简捷、可靠而