



工业和信息化部“十二五”规划教材

环境模拟与评价

Huanjing Moni Yu Pingjia

黄中华 孙秀云 韩卫清 编著



北京航空航天大学出版社
BEIHANG UNIVERSITY PRESS



工业和信息化部“十二五”规划教材

环境模拟与评价

黄中华 孙秀云 韩卫清 编著

北京航空航天大学出版社

内 容 简 介

如何分析、预测和评价各种环境因素和环境系统的变化发展趋势,是环境科学研究工作者常常面临的问题。本书主要介绍了环境数学模型、河流水质模型及参数估算、湖库水质模型、大气污染控制模型、水处理单元操作及单元过程数学模型、环境影响评价技术导则和案例分析等。书中列入较多的案例分析,具有较强的实践性。

本书可作为环境工程、环境科学专业的研究生教材,亦可供环境科学与工程专业的工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

环境模拟与评价 / 黄中华,孙秀云,韩卫清编著

. -- 北京:北京航空航天大学出版社,2015.7

ISBN 978-7-5124-1845-5

I. ①环… II. ①黄… ②孙… ③韩… III. ①环境模
拟②环境质量评价 IV. ①TB24②X82

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第159577号

版权所有,侵权必究。



环境模拟与评价

黄中华 孙秀云 韩卫清 编著

责任编辑 张冀青

*

北京航空航天大学出版社出版发行

北京市海淀区学院路37号(邮编100191) <http://www.buaapress.com.cn>

发行部电话:(010)82317024 传真:(010)82328026

读者信箱:goodtextbook@126.com 邮购电话:(010)82316936

北京兴华昌盛印刷有限公司印装 各地书店经销

*

开本:787×1 092 1/16 印张:20.25 字数:518千字

2015年8月第1版 2015年8月第1次印刷 印数:2 000册

ISBN 978-7-5124-1845-5 定价:45.00元

前 言

针对环境科学与工程专业研究生教学的特点,本书力求贴近工程实践,注重前沿性和互动性,将环境过程数学模型与环境影响评价进行统整,有利于学生全面深入地学习本专业内各分支学科的理论,满足环境科学与工程专业研究生工程素质培养的需要,帮助学生积累工作场所的知识,培养学生的批判性思维。

全书分为两篇。第一篇环境系统与模拟,包括4章,汇集了环境数学模型、大气污染控制模型、天然水体水质数学模型、水处理单元操作和单元过程数学模型等内容。第二篇环境影响评价,包括3章,分别介绍了环境影响评价制度、环境标准及环境影响评价技术导则,提供了不同类别的环境影响评价案例分析。

本书由黄中华、孙秀云、韩卫清共同编写,其中黄中华承担了第一篇的编写工作,孙秀云承担了第二篇中的第5章、6.1~6.6节的编写工作,韩卫清承担了第二篇中的6.7~6.11节和第7章的编写工作。在本书的编写过程中,得到了江苏省环境科学研究院田爱军和南京源恒环境研究有限公司徐林、段传玲、许志良的斧正,研究生刘郑丽、刘聪聪、李桥等帮助查找、整理了大量文献资料,在此表示感谢。

如果读者发现本书的不足和失误之处,请不吝指教,可发送邮件至 hzh1qfox@njust.edu.cn 和 sunxyun@njust.edu.cn,我们将不断完善。

编 者

2015年1月于南京



目 录

第一篇 环境系统与模拟

第1章 绪 论	1
1.1 环境模拟	1
1.1.1 环境模拟的对象	1
1.1.2 环境模拟的目的和任务	2
1.1.3 环境系统模拟模型的发展趋势	3
1.2 环境数学模型	4
1.2.1 环境数学模型的定义	4
1.2.2 环境数学模型分类	4
1.2.3 环境数学模型建立的要求与步骤	4
1.3 模型参数的估算方法	6
1.3.1 回归分析	7
1.3.2 非线性模型的参数估计	8
1.3.3 数值微分近似法	9
1.4 模型的验证与误差分析	10
1.4.1 图形表示法	10
1.4.2 相关系数及其显著性检验	10
1.4.3 相对误差法	13
1.5 灵敏度分析	14
1.5.1 灵敏度分析的意义	14
1.5.2 状态与目标对参数的灵敏度	14
1.5.3 目标对约束的灵敏度	15
思考题	16
第2章 大气污染控制模型	18
2.1 影响大气污染物扩散的因素	18
2.1.1 气象因子影响	18
2.1.2 地理环境状况的影响	20
2.1.3 污染物特征的影响	22
2.2 大气湍流流动过程基本描述	22
2.2.1 湍 流	22
2.2.2 湍流扩散与正态分布的基本理论	23
2.3 烟流模型	24
2.3.1 无边界点源模型	25
2.3.2 高架连续排放点源模型	26



2.3.3	沉降颗粒的扩散模型	28
2.3.4	高架多点源连续排放模型	29
2.3.5	连续线源扩散模型	29
2.3.6	连续面源扩散模型	30
2.4	大气污染扩散模型参数确定	30
2.4.1	扩散参数 σ_y 和 σ_z 的估算	31
2.4.2	烟气抬升公式	34
2.4.3	大气稳定度	37
2.5	箱式大气质量模型	38
2.5.1	单箱模型	39
2.5.2	多箱模型	39
2.6	大气质量模拟模型简介	41
2.6.1	AERMOD 模型	41
2.6.2	ADMS 模型	44
2.6.3	CALPUFF 模式	46
2.6.4	SCREEN3 模型	49
2.6.5	大气环评专业辅助系统 EIAProA	51
2.6.6	大气扩散烟团轨迹模型	53
	思考题	56
第3章	天然水体水质数学模型	57
3.1	水体中物质迁移现象的基本描述	58
3.1.1	物理迁移过程	58
3.1.2	污染物的衰减和转化	59
3.1.3	天然水体中影响 BOD-DO 变化的过程	60
3.2	水质数学模型基础	65
3.2.1	零维模型	65
3.2.2	一维模型	66
3.2.3	二维模型	71
3.2.4	三维模型	73
3.3	河流水质模型	74
3.3.1	河流的混合稀释模型	74
3.3.2	守恒污染物在均匀流场中的扩散模型	76
3.3.3	非守恒污染物在均匀河流中的水质模型	78
3.3.4	单一河段水质模型	79
3.3.5	多河段水质模型	82
3.3.6	河流水质模型参数的估算	88
3.4	湖泊和水库的水质模型	94
3.4.1	湖泊环境概述	94
3.4.2	混合箱式模型	96
3.4.3	非完全混合水质模型	100



3.5 水质模型的发展趋势	103
3.5.1 以 GIS 为平台	103
3.5.2 模拟结果的动态化、可视化	103
3.5.3 河流综合水质模型的完善	104
3.6 水质模型的软件及应用	104
3.6.1 QUAL-II 模型系列	104
3.6.2 WASP 水质模型	110
3.6.3 WASP 软件应用	111
3.6.4 地面水环评助手 EIAW	114
3.6.5 其他水质模型简介	120
思考题	124
第 4 章 水处理单元操作和单元过程数学模型	126
4.1 连续流动釜式反应器的基本设计方程	126
4.1.1 全混流假定	126
4.1.2 连续流动釜式反应器中的反应速率	126
4.1.3 连续流动釜式反应器的基本方程	127
4.2 沉淀和过滤	128
4.2.1 沉 淀	128
4.2.2 过滤基本方程	130
4.3 活性污泥法数学模型	132
4.3.1 活性污泥法中的细胞生长动力学模型	132
4.3.2 劳伦斯-麦卡蒂模型	135
4.3.3 活性污泥 ASMs 数学模型	137
4.4 生物膜反应器数学模型	144
4.4.1 生物膜动力学模型	144
4.4.2 厌氧流化床反应器模型	146
4.4.3 膜生物反应器膜污染数学模型	149
4.5 纳滤膜分离数学模型	150
4.6 模型软件介绍——BioWin	152
思考题	158

第二篇 环境影响评价

第 5 章 环境影响评价概述	159
5.1 环境影响评价的基本概念	159
5.2 环境影响评价制度的应用	160
5.2.1 国外环境影响评价制度	160
5.2.2 我国环境影响评价制度	164
5.3 环境影响评价程序	167
5.3.1 环境影响分类筛选	167



5.3.2	环境影响评价的工作程序	167
5.3.3	环境影响报告书的章节设置	168
5.3.4	环境影响评价文件的审批	175
5.4	环境保护法律法规	176
5.4.1	环境保护法律法规体系	176
5.4.2	环境保护法律法规体系中各层次间的关系	182
5.4.3	环境标准	182
5.4.4	环境影响评价常用标准	184
5.5	环评中常用的工具	190
5.5.1	文本编辑类	190
5.5.2	数据处理类	191
5.5.3	绘图类	192
5.5.4	图像浏览与处理类	194
5.5.5	电子地图类	194
5.5.6	标准参考及辅助类	194
	思考题	195
第 6 章	环境影响评价技术导则	196
6.1	环境影响评价技术导则 总纲	196
6.1.1	总 则	196
6.1.2	工程分析	198
6.1.3	环境现状调查与评价	200
6.1.4	环境影响预测与评价	201
6.1.5	社会环境影响评价	201
6.1.6	公众参与	201
6.1.7	环境保护措施及其经济、技术论证	202
6.1.8	环境管理与监测	202
6.1.9	清洁生产分析和循环经济	202
6.1.10	污染物总量控制	202
6.1.11	环境影响经济损益分析	203
6.1.12	方案比选	203
6.1.13	环境影响评价文件编制总体要求	203
6.2	大气环境影响评价技术导则	204
6.2.1	评价工作等级、评价范围及环境空气敏感区的确定	204
6.2.2	污染源调查与分析	205
6.2.3	环境空气质量现状调查与评价	206
6.2.4	气象观测资料调查	207
6.2.5	大气环境影响预测与评价	208
6.2.6	大气环境防护距离	211
6.2.7	大气环境影响评价结论与建议	211
6.2.8	环境影响报告书附图、附表、附件的要求	212



6.3 地面水环境影响评价技术导则	212
6.3.1 评价等级划分	212
6.3.2 地面水环境现状调查	214
6.3.3 地面水环境影响预测	218
6.3.4 评价建设项目的地面水环境影响	223
6.4 地下水环境影响评价技术导则	223
6.4.1 建设项目分类和评价基本任务	223
6.4.2 地下水环境影响识别和评价工作程序	223
6.4.3 地下水环境影响评价工作分级和技术要求	226
6.4.4 地下水环境现状调查与评价	228
6.4.5 环境现状评价	230
6.4.6 地下水环境影响预测	231
6.4.7 地下水环境影响评价	232
6.4.8 建设项目污染防治对策	232
6.4.9 地下水环境影响评价专题文件的编写要求	233
6.5 声环境影响评价技术导则	234
6.5.1 概 述	234
6.5.2 评价工作等级	234
6.5.3 评价范围和基本要求	235
6.5.4 声环境现状调查和评价	236
6.5.5 声环境影响预测	237
6.5.6 声环境影响评价	238
6.5.7 噪声防治对策	239
6.6 生态影响评价技术导则	239
6.6.1 总 则	239
6.6.2 工程分析	240
6.6.3 生态现状调查与评价	241
6.6.4 生态影响预测与评价	242
6.6.5 生态影响的防护、恢复、补偿及替代方案	244
6.6.6 生态影响评价图件的规范与要求	244
6.7 开发区区域环境影响评价技术导则	246
6.7.1 总 则	246
6.7.2 环境影响评价的实施方案	246
6.7.3 环境影响报告书的编制要求	247
6.8 规划环境影响评价技术导则	250
6.8.1 适用范围与评价原则	250
6.8.2 规划环境影响评价的内容与范围	250
6.8.3 规划分析	251
6.8.4 现状调查与评价	252
6.8.5 环境影响识别与评价指标体系的构建	254
6.8.6 环境影响预测与评价	255



6.8.7	规划方案综合论证和优化调整建议	257
6.8.8	环境影响减缓措施	259
6.8.9	环境影响跟踪评价	259
6.8.10	评价结论	259
6.9	建设项目环境风险评价技术导则	260
6.9.1	环境风险评价概述	260
6.9.2	评价工作等级	260
6.9.3	评价的基本内容	261
6.9.4	环境风险评价	262
6.10	建设项目竣工环境保护验收技术规范——生态影响类	263
6.10.1	总 则	263
6.10.2	验收调查准备阶段的技术要求	265
6.10.3	验收调查的技术要求	267
6.11	建设项目环境影响技术评估导则	272
6.11.1	一般规定	272
6.11.2	环境影响技术评估的基本内容与方法	272
6.11.3	环境影响技术评估的要点和要求	272
	思考题	281
第 7 章	案例分析	286
7.1	污染型建设项目	286
案例 1	新建林纸一体化项目	286
案例 2	化学原料药生产项目	287
案例 3	钢铁公司扩建改造项目	290
案例 4	火电项目	292
案例 5	城市商贸中心项目	294
7.2	生态影响型建设项目	296
案例 1	输变电工程	296
案例 2	煤矿开采项目	298
案例 3	新建高速公路项目	301
案例 4	水电站扩建项目	303
7.3	环境影响评价计算例题	305
	思考题	310
	参考文献	313

第一篇 环境系统与模拟

第1章 绪论

1.1 环境模拟

环境系统是环境各要素及其相互关系的总和,环境模拟是环境系统过程的再现。环境模拟应用系统分析原理,建立环境系统的理论或实体模型,在人为控制条件下通过改变特定的参数来观察模型的响应,预测实际系统的行为和特点。环境模拟可以指环境系统自身变化的模拟,包括系统各组成部分变化的模拟,也可以指环境介质中污染物质的运移、转化等的模拟,本书注重后者。环境介质和其中的污染物质都始终处于不断的运动、变化过程中,环境介质是污染物质的载体,明确环境介质运动变化情况是环境过程模拟的基础。

对于环境系统而言,模拟占有很重要的地位。就一个环境系统的污染控制和规划管理而言,为了研究污染物在该环境系统中的变化,采用模型模拟的方法获取相关参数,进而研究环境系统的变化规律。环境模拟包括数学模拟、物理模拟、化学模拟、生物模拟及计算机仿真模拟等,是环境预测的重要手段。

环境模拟的步骤:①确定模拟对象;②确定系统结构;③建立系统模型;④检验模型的有效性;⑤分析系统的灵敏度;⑥实际应用。

1.1.1 环境模拟的对象

环境污染问题中的各种污染物都可以是环境模拟的对象,且环境模拟的对象不仅可以是物质形式的污染物,也可以是其他形式的污染物,如能量形式的余热等。环境模拟的主要对象可以按污染物的载体——环境介质,同时结合污染物的特性分类。

1. 水环境模拟

水环境中污染物包括以下几类:

悬移质及无机盐:颗粒悬浮于水中随水流而搬运,其悬移物被称为悬移质。悬移质及无机盐是无毒性物质,主要影响水的浑浊度和含盐量。

重金属物质:环境中的重金属污染物质主要是指铅、铜、锌、镉、铬、汞等,水体中的重金属主要以溶解态、悬浮态存在。

有机污染物:水体中的有机污染物按降解性可分为可降解有机物和难降解有机物。可降解有机物主要是酚类、溶解性和颗粒性碳水化合物、蛋白质、油脂、氨基酸等;难降解有机物主要是多环芳烃、DDT、氯化化合物等化学性质稳定和难被微生物降解的有机化合物。

富营养化物质:造成水体富营养化的主要因素是氮和磷。水体中氮和磷主要来源于生活



污水、工业废水、家畜排泄物和农业径流等。

浮游植物：在水中浮游生活的微小植物，通常指浮游藻类，主要包括蓝藻、硅藻、甲藻等。

放射性物质：分低中水平放射性物质和高水平放射性物质。低中水平放射性物质，如核电站排放的放射性污染物，主要是氚、锶-90、铯-134等。

水温：可产生热污染一种能量。水温是影响水质过程的重要因素，过高的水温或过快的水温变化都会影响水生生物正常生长和水体的功能，形成热污染。

2. 大气环境模拟

大气污染物的种类有很多，根据其存在的状态，可以概括为两大类：气态污染物和气溶胶状态污染物。气态污染物主要有：以二氧化硫为主的含硫化合物，以一氧化氮和二氧化氮为主的含氮化合物，碳的氧化物，碳氢化合物及卤素化合物。气溶胶状态污染物主要有：尘，指能悬浮于大气中的小固体粒子，其直径一般为 $1\sim 200\ \mu\text{m}$ ；液滴，指大气中悬浮的液体粒子，一般是由于水汽凝结及随后的碰撞增长而形成的；有机盐和无机盐粒子等化学粒子，指在大气中由化学过程产生的固态或液态粒子。

3. 土壤环境模拟

土壤环境污染物的种类很多，有些与水环境中的污染物是一致的，包括重金属物质、无机盐、有机污染物、放射性物质等。

1.1.2 环境模拟的目的和任务

1. 环境模拟的目的

① 掌握环境内部因子变化规律。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环境变化的机理和规律。在实际的环境管理和控制中，可以根据目前的环境状况、污染物的迁移转化规律以及可能的污染物发生情况来预测环境质量的变化情况，以便采取必要的措施。

② 对环境的变化进行定性和定量描述。环境保护工作是建立在规划基础上的，建立合理的模型，运用其对环境中污染物的变化做出定量和定性的分析，并据此衡量污染物浓度等是否达到所要求的标准。

③ 提高规划管理工作的效率。通过环境模拟，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依据。

2. 环境模拟的任务

环境模拟研究的核心任务是对污染物在环境中的变化过程及其规律，即污染物在物理、化学、生物和气候等因素的作用下随时间和空间的迁移转化过程及其规律准确地描述。它是开展环境评价、预测和预警，制定环境规划和污染控制方案的主要技术手段。

① 量化。通过对环境的模拟，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进行优化配置、污染控制和分配，使其组成资源的量和质处于最佳状态。

③ 决策。对环境各种资源进行调度、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。使环境的各资源在管理者的监控之下,发挥其最大的社会效益。

1.1.3 环境系统模拟模型的发展趋势

自20世纪初S-P模型诞生以来,随着人类对环境系统的认识水平不断提高,计算机与计算技术飞速发展,环境系统模拟模型也发生了突飞猛进的变化。

1. 环境系统模拟模型机理越来越复杂,模拟状态变量越来越多

在水环境模拟方面,从简单的S-P模型,发展到氮磷模型、富营养化模型、有毒物质模型和生态系统模型,从点源模型、面源模型到点源与面源耦合的流域综合模拟仿真模型;从环境空气质量模型来看,已从最早的箱式模型与高斯模型,发展到熏烟模型、复杂地形扩散模型及干湿沉积模型,考虑的因素与参数越来越多,模型的机理越来越复杂;其他环境要素的模拟模型也有同样的趋势,特别是考虑不同环境要素(水、气、土壤等)界面间污染物迁移转化机理的跨环境介质环境系统模拟模型已成为研究热点。

2. 环境系统模拟的时空尺度不断增加

① 时间尺度:最早的环境系统模型都是稳态模型,20世纪60年代以后,开始出现动态环境系统模拟模型。动态模型既可以模拟长期过程,也可以模拟瞬时过程。

② 空间尺度:现实世界都是三维的,然而水质模型却经历了从零维、一维、二维到三维逐渐发展的过程。20世纪60年代以前,水环境质量模型以零维和一维为主;60年代以后,研究逐渐扩展的河口地区,二维模型随之出现;70年代,由于富营养化研究的需要,三维模型开始出现;到了90年代,人类对应用需求更加广泛和深入,三维模型的研究得到了越来越多的重视。近年来,全球气候变化与酸雨等大尺度环境空气问题严重,相关的研究得到不断深入,环境空气质量模型也从区域、城市向国家和全球尺度发展。

3. 环境系统模拟模型的集成化程度不断提高

早期的环境系统模型大多立足于解决单一的环境问题,随着环境科学研究的深入以及环境集成管理的需求,模型的集成化正逐步成为一个新的研究热点。例如,从污水收集、排水管网到城市污水处理厂和接纳水体的城市排水系统集成模拟仿真,点源污染与非点源污染模型的流域水环境系统集成模拟,以及充分综合社会经济模型与环境系统模型的城市环境复杂大系统的集成模拟仿真等。

4. 环境系统模拟软件系统发展迅速

随着环境系统模拟模型的技术手段越来越先进,先进的信息技术,特别是3S技术与软计算技术的应用,极大地推动了环境系统模拟模型的发展和完善,涌现出大量的环境模拟软件系统。其中,具有代表性的水环境模型系统包括WASP、QUAL2E-UNCAS、EFDC及MIKE-SWMM等,可实现河流、湖泊、水库、河口和沿海水域,以及城市排水系统等一系列水环境系统模拟;具有代表性的环境空气模拟系统模型包括ADMS、AERMOD及CALPUFF等。

5. 环境系统仿真向智能与虚拟发展

随着人工智能技术与三维可视化技术的发展及其在环境科学研究中的广泛应用,环境系统仿真正向智能仿真与虚拟现实方向发展,基于Agent的环境系统智能的系统仿真方法以及



基于虚拟现实技术的数字城市与数字流域的建立标志着环境系统模拟仿真已进入新的阶段。

1.2 环境数学模型

数学模型是近些年发展起来的新学科,是数学理论与实际问题相结合的一门科学。它将现实问题归结为相应的数学问题,并在此基础上利用数学的概念、方法和理论进行深入的分析 and 研究,从定性或定量的角度来刻画实际问题,并为解决现实问题提供精确的数据和可靠的指导。

1.2.1 环境数学模型的定义

数学模型,就是针对或参照某种系统的运动规律、特征和数量相依关系,采用形式化的数学语言,对该系统概括或近似地表达出来的一种数学结构,描述系统(或事物)的这种数学语言和结构常常以一套反映数量关系的数学公式和具体算法体现出来。我们常把这套公式和算法称为数学模型;把与环境系统有关的变量之间的关系,归纳为反映环境系统的性能和机理的数学模型称为环境数学模型。

1.2.2 环境数学模型的分类

① 根据对环境系统信息的掌握程度建立的模型称为白箱模型、灰箱模型和黑箱模型。

白箱模型又称机理模型,是根据对系统的结构和性质的了解,以客观事物变化遵循的物理、化学定律为基础,经逻辑演绎而建立起的模型。这种建立模型的方法叫演绎法。机理模型具有唯一性。

灰箱模型介于白箱模型和黑箱模型之间,是一个半经验、半机理模型。在建立环境数学模型的过程中,几乎每个模型都包含一个或多个待定参数,这些待定参数一般无法由过程机理来确定,通常要借助于观测数据或实验结果。

黑箱模型又称输入/输出模型、统计模型或经验模型,指一些其内部规律还很少为人们所知的现象。它们可在日常例行观察中积累,也可由专门实验获得。根据对系统输入/输出数据的观测,在数理统计基础上建立起经验模型的方法又叫归纳法。经验模型不具有唯一性。

② 根据环境要素不同,可分为大气环境数学模型、水环境数学模型及声环境数学模型等;

③ 根据对环境变量的预测情况,可分为连续型环境数学模型和离散型环境数学模型,以及确定型和随机型环境数学模型;

④ 根据时间和空间变量在模型中的划分情况,可分为时间序列模型和空间序列模型;根据变量在空间变化的特性,可分为一维模型、二维模型及空间三维模型等;

⑤ 根据环境变量的变化情况,可分为线性模型和非线性模型等;

⑥ 根据模型建立时使用的推理方法,可分为统计模型、推理模型及半推理模型等;

⑦ 根据环境数学模型的用途,可分为环境容量模型、环境规划模型、环境评价模型、环境预测模型、环境决策模型、环境经济模型及环境生态模型等。

1.2.3 环境数学模型建立的要求与步骤

众所周知,各种数学应用中,成功的范例大多遵循如下过程:提出问题→分析变量→建立



模型→解释问题→修正模型→解决问题(应用)。这一过程中,最关键的一步(也是最困难的一步)就是数学模型的建立。

把数学方法运用到任一实际问题,都需要把该问题的内在规律用数字、图表或公式、符号表示出来,经过数学的处理,得出供人们分析、预报、决策或控制的定量结果。这个过程就是建立数学模型的过程。这一过程是一个对研究对象进行具体分析和科学抽象的过程,目的在于找到一个能反映问题本质特征的,又是理想化、简单化了的数学模型。

1. 环境系统数学模型的要求

建立数学模型所需的信息通常来自两个方面:一是对系统的结构和性质的认识和理解;二是系统的输入和输出的观测数据。利用前一类信息建立模型的方法称为演绎法;用后一类信息建立模型的方法称为归纳法。用演绎法建立的模型称为机理模型,这类模型一般只有唯一解;用归纳法建立的模型称为经验模型,经验模型一般有多组解。不论用什么方法,建立什么样的模型,都必须满足下述基本要求。

(1) 模型要有足够的精确度

精确度是指模型的计算结果和实际测量数值的吻合程度,精确度不仅与研究对象有关,而且与它所处的时间、状态及其他条件有关。对于模型精确度的具体规定,要视模型应用的主客观条件而定。通常,在人工控制条件下各种模拟试验及由此建立的模型可以达到较高的精确度;而对于自然系统和复合系统的模拟及由此建立的模型,不能期望具有较高的精确度。精确度通常用误差表示。

(2) 模型的形式要简单实用

一个模型既要具备一定的精确度,又要力求简单实用。精确度和模型的复杂程度往往是成正比的。但随着模型的复杂程度的增高,模型的求解趋于困难,要求的代价亦增大。有时为了简化模型以便于求解,只能降低对模型精确度的要求。

(3) 模型的依据要充分

依据充分是指模型在理论推导上要严谨,并且要由可靠的实测数据来检验。

(4) 模型中应该有可控变量

可控变量又称操纵变量,是指模型中能够控制其大小和变化方向的变量。一个模型中应该有一个或多个可控变量,否则这个模型将不能付诸实用。

2. 环境数学模型建立的步骤

第一步,定义问题(环境系统确立)。包括对所研究的环境系统的边界、主要功能、系统的结构,建立模型的前提假设,所建模型的精度和要达到的目的。

第二步,收集相关资料,并对资料进行初步分析(环境系统辨识)。根据研究问题的需要,要尽可能多地收集有关资料和数据,比如有关的环境监测资料、统计资料、文献研究资料等,并对这些数据进行初步的整理。例如可以按照时间或空间变化绘制相应的时空关系曲线,从中可以观察事物变化的大致规律。

第三步,建立概念模型(确定模型结构)。对环境系统进行观察,想象其运动变化情况,包括明确环境系统的结构、输入/输出关系,用自然语言进行描述,初步选择描述问题的变量,确定变量之间的相互影响和变化规律,写出描述这些关系的数学方程,并在满足问题求解要求的前提下,尽可能采用简单的模型形式。



第四步,确定模型中的参数。模型中一些参数的取值需要用某种方式加以确定,如经验公式、实验室实验或数学方法(最小二乘法、优化方法和蒙特卡罗法等)。

第五步,模型的修正和检验。模型的结构形式和参数确定后,模型已经具备求解和计算机优化的条件。但是模型能否付诸应用,只有经过一定的实际检验或试验验证才可投入使用。在实际验证过程中,可能会根据实践和检验对模型的参数作一定的修改,直到模型模拟结果和实际测定结果相符,这时模型投入使用后的模拟结果才是可靠的。如果修改参数不能达到预期的精度,则要考虑对模型结构进行模拟,将得到的模拟结果和实际测定结果对比,如果二者相差在容许限度内,则模型参数可行,否则需要对其进行修正。

第六步,模型的应用。应用所建立的模型去解决原先提出的问题,如果模型达不到解决问题的精度,则需要重复上述步骤。应用模型时,一定要注意建立和推导模型时所假定的一些前提条件,不要在应用模型时超出其适用范围,否则得出的结论可能是错误的。

如果要估计模型计算结果的偏差,则还需要做灵敏度分析。

环境数学模型建立的一般程序框图如图 1-1 所示。

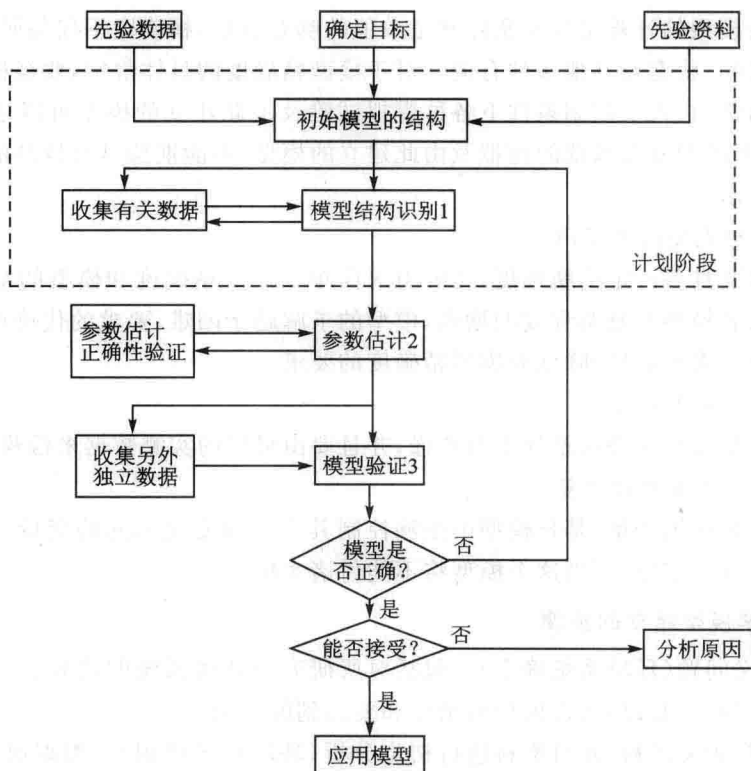


图 1-1 环境数学模型建立的一般程序

1.3 模型参数的估算方法

建立环境数学模型的重要一步是参数估算(parameter estimation)。参数估算是根据从总体中抽取的样本估计总体分布中包含的未知参数的方法,模型的精确性和可靠性直接与参数



估算的正确性相关。参数估算法是数理统计中由样本观测值估计总体参数的常用方法,环境数学模型的参数估算法主要有经验公式法、最小二乘法、极大似然法、最优化方法、直接寻优法等,其中最基本的方法是最小二乘法和极大似然法。

1.3.1 回归分析

线性回归分析有两个假定:第一,所有自变量的值均不存在误差,因变量的值则含有测量误差;第二,与各测量值拟合最好的曲线为能使各点到曲线的竖向偏差(因变量偏差)的平方和最小的曲线。

根据上述假定,线性回归参数估计就是在观测值和估计值之差的平方和最小的情况下,来估计线性关系中相应参数的值。当自变量和因变量之间呈线性关系,并且自变量个数为1时,是一元线性回归;当自变量个数大于1时,就是多元线性回归。

1. 一元线性回归分析

一元线性回归是较简单的模型之一,它仅处理两个变量之间的关系,如:

$$y = a + bx$$

这是一条直线,其中 y 为因变量, x 为自变量, a 和 b 为待估参数。

根据最小二乘法的假定,可得:

$$\min Z = \min \sum (y_i - \hat{y}_i)^2 = \min \sum [y_i - (a + bx_i)]^2 \quad (1-1)$$

按照多元函数求极值的方法,令

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial Z}{\partial a} &= -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (a + bx_i)] = 0 \\ \frac{\partial Z}{\partial b} &= -2 \sum_{i=1}^n [y_i - (a + bx_i)] \cdot x_i = 0 \end{aligned} \right\} \quad (1-2)$$

整理上述方程组可得

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n y_i &= na + b \sum_{i=1}^n x_i \\ \sum_{i=1}^n y_i x_i &= a \sum_{i=1}^n x_i + b \sum_{i=1}^n x_i^2 \end{aligned} \right\} \quad (1-3)$$

求解上述方程组可得到参数 a 和 b 的估计值:

$$\hat{a} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i y_i \sum_{i=1}^n x_i - \sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n x_i^2}{(\sum_{i=1}^n x_i)^2 - n \sum_{i=1}^n x_i^2}, \quad \hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i \sum_{i=1}^n y_i - \sum_{i=1}^n y_i x_i}{(\sum_{i=1}^n x_i)^2 - n \sum_{i=1}^n x_i^2} \quad (1-4)$$

对式(1-4)进一步化简可得到

$$\left. \begin{aligned} \hat{b} &= \frac{\sum x_i y_i - (\sum x_i \sum y_i)/n}{\sum x_i^2 - n \left(\frac{1}{n} \sum x_i\right)^2} = \frac{\sum x_i y_i - n \bar{x} \bar{y}}{\sum x_i^2 - n \bar{x}^2} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sum (x_i - \bar{x})^2} \\ \hat{a} &= \bar{y} - \hat{b} \bar{x} \end{aligned} \right\} \quad (1-5)$$

于是可以得到线性回归方程为