

The MATLAB logo is rendered in a large, bold, blue font with a white outline and a slight 3D effect. It is positioned at the top of the cover, below a decorative border of small blue squares.

MATLAB

在环境科学中的应用

宋新山 邓伟 张琳 编著



化学工业出版社

MATLAB

在环境科学中的应用

宋新山 邓伟 张琳 编著



化学工业出版社

· 北京 ·

作为一种简单、高效、功能强大的计算和绘图语言, MATLAB 在科学与工程计算领域具有非常广泛的用途, 深受理工科大学学生、研究生和许多工程技术人员的喜爱。

本书根据 MATLAB 的主要计算功能, 将环境科学中的相关科学计算问题进行分类, 结合理论介绍和实例分析, 讲述了这些科学计算问题的 MATLAB 实现。本书分析了环境科学中计算和数学模拟的重要性, 并对环境科学与工程中的主要计算问题进行了分类概述; 概括了 MATLAB 计算和绘图的主要功能; 讲述了基于 MATLAB 的几种环境数学模拟模型的参数估计方法; 介绍了均一环境介质、多孔介质和多介质环境数学模型的解析解、数值解的 MATLAB 求解和图形表达; 利用 MATLAB 的规划求解函数, 讲述了环境规划数学模型的各种求解方法; 介绍了基于 MATLAB 的环境计量分析方法的求解; 还介绍了一些环境数学问题的非传统解法的 MATLAB 实现。

本书可供从事环境评价、环境规划实践工作的环保科技工作者以及从事定量模拟和数据分析的环境科学研究工作者参考, 也可供高等院校环境科学与环境工程专业的研究生、高年级本科生学习使用。

图书在版编目 (CIP) 数据

MATLAB 在环境科学中的应用/宋新山, 邓伟, 张琳编著. —北京: 化学工业出版社, 2008. 1
ISBN 978-7-122-01580-8

I. M… II. ①宋…②邓…③张… III. 环境科学-计算机辅助计算-软件包, MATLAB IV. X-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2007) 第 181298 号

责任编辑: 刘兴春
责任校对: 宋 玮

文字编辑: 咎景岩
装帧设计: 韩 飞

出版发行: 化学工业出版社 (北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 装: 北京云浩印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张 15 字数 370 千字 2008 年 2 月北京第 1 版第 1 次印刷

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686) 售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

定 价: 38.00 元

版权所有 违者必究

前 言

随着计算技术水平的提高,环境科学研究和环境技术管理中定量计算的要求增高,计算难度增大,数据量增多。作为一般的环境科技工作者,不但对一般高级计算机编程语言熟练掌握有一定难度,而且对一些数学原理和复杂的数值计算方法完全掌握也有难度。而 MATLAB 作为一种简单、高效、功能强大的计算和绘图语言,不但易学易用,而且能够满足科学计算和绘图的需要。根据调研,目前国内尚没有系统介绍 MATLAB 应用于环境科学计算方面的书籍,仅有一些期刊文章上的零星研究。随着环保工作的逐渐深入开展,各种复杂计算问题越来越多,这给环保科技工作者提出了更高的要求,本书可以帮助环保科技工作者快速适应这一形势变化,有利于提高环境保护科研工作水平和促进我国环境保护的技术水平。

本书写作的出发点是基于在工作实践、科研和教学实践中的一些体会:①环境科学方面的一些书籍在介绍相关的数学模型时,由于篇幅、内容等限制,往往缺乏相关求解方法的介绍;②有些专门的环境数学模型方面的书籍在介绍模型的同时,也给出了模型求解的数值方法和解析方法,但一般的环境科技工作者或环境科学专业的学生缺乏完全理解这些方法的数学基础;③当读者试图在传统的数学类教科书上寻求这些环境数学模型求解的答案时,却发现它们一般都侧重于介绍典型的、成型的算法,侧重于介绍原始的、能显示问题来龙去脉的算法,很多环境数学模型问题的求解很难在这里找到直接的答案。而实际上,作为环境科技工作者或者环境科学专业的同学,更为关心的是如何以最省力的方法得到结果,以便从结果中发现某种环境规律。MATLAB 的出现及其计算分析功能的完善为我们提供了这种可能。

本书在内容编排和章节布局上,遵循下述几条宗旨:

(1) 紧扣主题,以环境科学中不同类型的科学计算为主线安排章节。对环境科学中的一些数学计算问题进行归类,并以此作为划分章节的依据,而不是像许多 MATLAB 参考书一样,按照纯数学问题的方式划分章节,这样易于被环境科学学习者和环境科技工作者接受。

(2) 由浅入深,以提高读者应用 MATLAB 解决科学计算能力为主要目的。在具体问题的论述过程中,一般是首先给出模型的数学表达,并对模型的环境意义进行解释,然后简要介绍该问题求解的数学方法,最后给出实现该问题求解的 MATLAB 语句或语句组。

(3) 丰富实例,以范例印证和加深理解。无论是出于对相关环境数学模型理解的角度,还是出于对相关 MATLAB 命令和函数掌握的角度,丰富的实例是实现上述目的的最快捷手段。因此本书坚持以实例讲解为原则,具有易学、易懂、易操作、易推广的特色。

(4) 规范编程,以函数文件形式提供扩展空间。对于一些需要经过编程计算的环境数学模拟问题,本书试图编制规范的 MATLAB 程序,并以函数文件的形式提供源代码,以飨读

者。在理解的基础上，读者在解决同类问题时，对本书提供的源程序适当修改后可直接调用，并可形成自己的功能函数库，突出本书实用性的特点。

本书得到上海市重点学科建设项目（B604）、国家科技支撑计划重大项目（2006BAB04A08）、上海市优秀青年教师后备入选项目及东华大学教改基金的联合资助，特此致谢！

本书在内容编排设计阶段，和东华大学刘振鸿副教授进行了多次磋商，得到了许多有益的意见和建议，特此表示感谢！东华大学环境学院的柳建设教授、东华大学人事处袁孟红处长对青年教师的成长十分关心，给予了很多鼓励，特此表示感谢！

限于水平与时间，书中不足之处在所难免，敬请读者提出修改建议。

编著者

2007年9月

目 录

第1章 绪论	1
1.1 环境科学中科学计算的重要性	1
1.1.1 科学计算在环境科学研究和工作中占有重要地位	1
1.1.2 环境科技工作者掌握专门的计算机数学语言的必要性	2
1.2 环境科学中主要的科学计算问题	4
1.2.1 解析解和数值解	4
1.2.2 环境质量模拟预测及计算机求解	5
1.2.3 系统最优化和环境规划模型及计算机求解	7
1.2.4 环境统计数学模型及计算机求解	7
1.2.5 一些非传统数学范畴的环境数学问题及计算机求解	8
1.2.6 环境科学中的图形表达及其计算机实现	9
1.3 MATLAB语言特点及相关资源	9
1.3.1 MATLAB语言特点	9
1.3.2 相关资源	10
第2章 MATLAB基础	11
2.1 MATLAB入门	11
2.1.1 工作窗口系统	11
2.1.2 查询帮助系统	11
2.1.3 演示帮助系统	12
2.1.4 常用操作命令	12
2.2 MATLAB的数学运算功能	12
2.2.1 变量和语句基本结构	12
2.2.2 基本数学运算	14
2.2.3 插值与拟合	16
2.2.4 优化运算问题	20
2.2.5 概率论与数理统计问题	23
2.2.6 代数方程(组)求解	32
2.2.7 微积分问题的解析解和数值解	35
2.2.8 常微分方程(组)的解析解和数值解	39
2.2.9 偏微分方程(组)的数值解入门	41
2.3 MATLAB的绘图功能	45
2.3.1 二维图形的绘制	46
2.3.2 三维图形的绘制	47
2.3.3 图形编辑	48
2.4 MATLAB程序设计基础	49
2.4.1 M文件	49
2.4.2 程序设计结构流程	51

2.4.3 MATLAB 程序设计的几点经验	52
第3章 基于 MATLAB 的环境数学模拟模型参数估计	54
3.1 基于 MATLAB 回归分析的参数估计	54
3.1.1 一元线性回归	54
3.1.2 多元线性回归	56
3.1.3 多项式回归	57
3.1.4 非线性回归	59
3.2 基于 MATLAB 最优化运算的参数估计	62
3.2.1 基于非线性最小二乘优化的参数估计	62
3.2.2 基于无约束极值问题的参数估计	64
3.3 参数估计梯度最优化算法的 MATLAB 实现	66
3.3.1 梯度最优化算法的数学原理	66
3.3.2 梯度最优化算法的应用	67
3.4 网格搜索参数估计算法的 MATLAB 实现	69
3.4.1 网格搜索参数估计算法的数学原理	69
3.4.2 网格搜索参数估计算法的应用实例	70
第4章 基于 MATLAB 的环境系统数学模拟及图形表达	72
4.1 环境系统及环境系统模拟	72
4.1.1 环境系统的概念	72
4.1.2 环境系统模拟概述	72
4.1.3 环境系统基本单位过程	74
4.1.4 环境系统模拟模型的分类	80
4.2 均一环境介质数学模拟模型	80
4.2.1 大气环境系统模拟模型	80
4.2.2 地表水环境系统模拟模型	94
4.3 多孔介质环境质量数学模拟模型	116
4.3.1 一维模拟模型解析解的 MATLAB 实现	116
4.3.2 二维模拟模型解析解的 MATLAB 实现	118
4.3.3 多孔介质中一维偏微分方程组的 MATLAB 实现	119
4.4 多介质环境质量数学模拟模型	122
4.4.1 基于物质迁移速率的多介质环境系统模拟模型	122
4.4.2 基于逸度容量的多介质环境系统模拟模型	125
4.5 种间作用下种群动态数学模拟模型	129
4.5.1 捕食作用下的种群动态模拟模型	129
4.5.2 捕食作用下的种群动态模拟模型的 MATLAB 实现	130
第5章 基于 MATLAB 的环境规划管理数学模型求解	132
5.1 大气环境污染控制规划模型的 MATLAB 实现	132
5.1.1 比例下降规划模型求解	132
5.1.2 污染迁移规划模型求解	136
5.1.3 离散型决策变量的规划模型求解	140
5.2 水污染控制规划模型的 MATLAB 实现	143
5.2.1 排污口最优化处理规划模型	143

5.2.2	排污口最优化处理规划模型的 MATLAB 实现	144
5.3	环境-经济投入-产出规划数学模型的 MATLAB 实现	147
5.3.1	环境-经济投入-产出原理	147
5.3.2	环境-经济投入-产出规划模型	150
5.3.3	环境-经济投入-产出规划模型的 MATLAB 实现	150
5.4	可再生资源开发管理模型的 MATLAB 实现	153
5.4.1	可再生资源开发数学模型	153
5.4.2	可再生资源开发模型的 MATLAB 实现	154
5.5	数据包络分析模型的 MATLAB 实现	159
5.5.1	数据包络分析模型	159
5.5.2	清洁生产评价的数据包络分析模型	161
5.5.3	数据包络分析模型的 MATLAB 实现	162
第 6 章	基于 MATLAB 的环境统计模型的实现	169
6.1	基于 MATLAB 的主成分分析计算	169
6.1.1	主成分分析介绍	169
6.1.2	主成分分析的 MATLAB 实现	170
6.2	基于 MATLAB 的因子分析计算	174
6.2.1	因子分析介绍	174
6.2.2	因子分析计算过程	175
6.2.3	因子分析的 MATLAB 实现	176
6.3	基于 MATLAB 的聚类分析计算	180
6.3.1	聚类分析基本数学原理	180
6.3.2	MATLAB 中聚类分析的主要函数	181
6.3.3	聚类分析计算实例	182
6.4	基于 MATLAB 的判别分析计算	184
6.4.1	判别分析基本数学原理	184
6.4.2	判别分析计算的 MATLAB 实现	184
6.5	基于 MATLAB 的地统计学分析计算	186
6.5.1	空间变异的区域化特征计算及其 MATLAB 实现	186
6.5.2	空间变异的数学拟合及其 MATLAB 实现	191
6.6	基于 MATLAB 的趋势面分析计算	196
6.6.1	趋势面分析基本数学原理	196
6.6.2	趋势面分析的 MATLAB 实现	197
第 7 章	一些非传统环境数学问题的 MATLAB 实现	201
7.1	灰色系统模型的 MATLAB 实现	201
7.1.1	灰色关联评价及其 MATLAB 实现	201
7.1.2	灰色预测及其 MATLAB 实现	202
7.2	蒙特卡罗算法的 MATLAB 实现	208
7.2.1	蒙特卡罗模拟原理	208
7.2.2	蒙特卡罗模拟的 MATLAB 实现	208
7.3	模糊推理系统在环境科学中的应用	210
7.3.1	模糊推理系统理论基础	210

7.3.2 模糊推理的 MATLAB 实现	213
7.3.3 MATLAB 模糊推理工具箱在模糊评价中的应用	215
7.4 神经网络在环境科学中的应用	219
7.4.1 神经网络基本原理	219
7.4.2 神经网络的 MATLAB 实现	220
7.4.3 神经网络在环境模拟和预测中的应用	223
7.4.4 神经网络在环境系统分类中的应用	229
参考文献	231

第1章 绪 论

1.1 环境科学中科学计算的重要性

1.1.1 科学计算在环境科学研究和工作实践中占有重要地位

在环境科学研究、工程实践、环境规划、环境评价以及环境管理等工作中，数据处理和模拟计算发挥着越来越重要的作用。这既包括对大量实验数据、观测数据、调查数据、工程数据的统计、拟合、回归等数学处理分析，以从大量看似杂乱无章的数据中发现科学规律，又包括更高级别的环境系统模拟，通过模拟达到对环境系统的量化认识、优化规划、准确调控以及科学决策的目的。定量化、模型化逐步成为环境科学发展的一种趋势，并成为环境科学研究、环境规划、环境管理等实践工作中的重要工具。模拟计算的重要性主要体现在以下几方面。

① 环境科学与其所依托的传统学科之间进一步交叉互动发展的需要 出于认识、研究、控制和解决环境问题的需要，一门新兴的综合性交叉边缘学科——环境科学于20世纪70年代初期在原有依托的相关传统学科的基础上产生并逐步形成比较系统的学科体系。其所依托的传统学科如化学、水文学、地学、流体力学、生态学、经济学等的定量化、模型化发展促进了模拟计算在环境科学中的大发展，很多环境科学中应用的模型就是依托这些传统学科发展起来的。如流体运动基本方程是模拟水、大气环境介质中污染物迁移的重要基础；物理化学中的吸附方程、挥发方程和流体力学基本方程结合后可用于模拟一些易于吸附或者挥发的污染物在环境介质中的迁移扩散；经济学中的投入产出模型是环境经济投入产出模型建立的基础。这种相互借鉴、交叉综合的学科发展模式是环境科学创新性发展的重要方式之一。

② 量化认识、准确调控复杂环境系统的需要 环境科学的研究对象——环境系统本身就是一个复杂的具有时间和空间、数量和质量、目标和层次变化的动态系统和开放系统。对这样的系统的量化认识和准确调控必须借助以计算机为求解工具的环境系统数学模型。当系统论的思想深入人心之后，人们逐渐认识到原来一些对复杂环境系统分割研究，然后简单加和的形而上学研究方法的不足。但是反映系统整体功能的模拟模型比某一子系统模型要复杂得多，往往以常微分方程组或偏微分方程组的形式出现，这就需要借助计算机进行模拟分析和计算。比如对环境系统发展过程的定量化预测研究中，传统的方法是通过长时间序列数据的统计分析，发现规律，依照这种规律进行预测。对简单系统而言，这种方法往往十分有效，但对于复杂环境系统，得到的统计模型在进行定量化预测时往往精度较差，参考价值不大。而算法技术不断改进的人工神经网络模型进行复杂系统模拟具有明显的优势，预测精度明显提高。

③ 环境科学研究的重要工具 无论是相对简单的对数据的统计、拟合、回归等数学处理分析，还是操纵比较复杂的数学模型，都是从事环境科学研究的重要能力之一，尤其数学

模型是科学研究中广泛使用的一种工具。模拟模型在检验科学假设、揭示环境系统的性质和特征、加快研究进度、缩短研究周期等方面具有无可比拟的优点。实际上,环境科学研究中定量化、模型化的发展趋势也是环境科学逐步发展,走向成熟的重要标志。传统的自然科学、技术科学和一些社会科学的发展都遵循从现象到本质,从经验到理论,从定性到定量的学科发展模式,而环境科学的发展也不例外。一个典型的例子就是对有机污染物在湖泊生态系统中的迁移、转化过程的定量研究,需要考虑污染物在湖泊水体、底泥、水生植物、水生动物、周围环境空气中的含量和浓度的动态变化,并评价其归趋和危害。在系统动力学模型或多介质环境数学模型出现以前,人们对这样的过程进行定量模拟还显得一筹莫展,20 世纪 80 年代中期出现的多介质环境数学模型成为科学研究中解决这类问题的重要工具之一。

④ 环境规划、环境评价的核心技术之一 实际的环境规划工作中,有时需要求解几十甚至上百个变量的规划模型,环境评价中的环境影响定量预测,经常需要对一些预测模型进行大量的运算,有时甚至需要求解复杂的偏微分方程,这都需要利用计算机作为工具完成对模型的求解,因此,相关的规划模型和评价模型的建立、求解,甚至模型运算结果的计算机直观图形表达成为环境规划、环境评价的核心技术之一,也是难点之一。

1.1.2 环境科技工作者掌握专门的计算机数学语言的必要性

毋庸置疑,数据处理和模拟计算无论对于环境科学研究,还是实际工作,甚至对于学科发展都十分重要,因此,从事环境科学理论研究以及从事环境评价、环境规划等实际工作的环境科技工作者需要具备这样的能力。

复杂环境系统数学模型、大型规划模型等能够引起人们的关注并迅速在科学研究和实践中应用,主要得益于两个方面的原因:其一是在系统论基础上人们对环境系统认识的逐步深化,这使得建立比较准确的描述环境系统的功能、特征以及其中污染物迁移、转化的数学模型成为可能。但这只是一个必要条件,因为复杂的模拟过程是没有办法仅通过手工运算就能实现的。其二是计算机软硬件技术的发展为此提供了可行性,使得能够比较方便地处理许多复杂的数学问题。例如运算速度的加快使得依靠手工或比较古老的计算设备需要几个月或几天的计算量,现在可能几分钟就完成了,计算机软件的发展也为人们提供了很大的便利,过去需要专门程序员编程才能得到解决的模型模拟问题,现在一个非专业编程的环境科技工作者利用专门的计算机数学软件也能解决这样的问题。

环境科技工作者用于模拟计算和数据分析的计算机语言或软件可分为四类。

第一类是一般的高级计算机语言,如 Visual C++、Visual Basic、Pascal、Visual Fortran。其特点是没有很强的针对性,可用于编程解决各类问题,不仅能够应用于数值计算和数据分析,而且能够针对一些计算机硬件等进行深入编程。但是,要能够将其熟练应用于环境科学研究和工作实践中的数据分析和模拟计算,不仅要对这些计算机语言的语法熟练掌握,而且要掌握这些计算的数学原理和复杂的数值计算方法(如有限元法、有限差分法等),这样才能写出算法,进而编写计算机程序。对于一般的环境科技工作者,在环境模拟计算要求高、计算难度大、数据量多的情况下,不仅一般计算机编程语言熟练掌握有一定难度,而且一些数学原理和复杂的数值计算方法完全掌握也不容易。具有 Fortran 或者 C 等高级计算机语言知识的读者会注意到,如果用它们进行程序设计,当涉及复杂的数值计算或者绘图时,编程变成了一件不轻松的事情。例如,若想用 Fortran 语言求解一个线性代数方程组,用户须先编写一个主程序,然后编写一个子程序去读入各个矩阵的元素,之后再编写一个子程序,求解相应的方程(如使用高斯消去法),最后输出计算结果。这样一个简单的问题需

要编写包含 100 多条语句的源程序, 其中任何一个语句的语法或者标点符号出现了问题, 都会导致错误的结果, 甚至程序根本不能运行, 而且需要编程者掌握高斯消去法的计算过程。对于一些复杂的计算, 编程花费的精力甚至超过了某一个研究本身。20 世纪 90 年代初期以前, 专门的计算机数学语言没有得到普遍推广时, 相信当时的很多环境科技工作者有过这种体会。

第二类是专门为解决某类数学问题发展起来的计算机数学软件包。在数值计算技术的早期发展中, 出现了一些专门致力于解决某类数学问题的计算机数学软件包。例如基于求解线性代数问题的软件包 LINPACK 和基于特征值计算的软件包 EISPACK; 近年来很流行的用于求解线性规划的软件 LINDO 和求解非线性规划的软件 LINGO; 用于绘图的 Surfer 软件; 专门用于数据拟合分析和绘图的 Origin 软件; 用于动态模拟的 Modelmaker 和 Stella 软件包; 以及专门用于解决数理统计问题的 Spss 和 SAS 软件包等。其中的一些软件包, 如 Surfer 和 Origin、Spss 和 SAS、Modelmaker 和 Stella 等因其设计界面友好, 易学易用, 得到很多科研人员 and 大学生、研究生的青睐。和一般的高级计算机语言相比, 这对于非专业编程的环境科技工作者是一个福音。但由于受这些软件包开发时计算机发展状况的限制, 其中的一些软件包是用 Fortran 语言编写的 (如 LINPACK 和 EISPACK), 调用时仍需要编写主程序, 经过编译连接, 形成可执行文件并运行后才能得到需要的结果。另外, 这些软件包一般也仅能解决某一个方面的问题, 而实际上在环境科学研究和实践中可能会碰到多方面的模拟计算问题, 例如求解常微分方程 (组)、求解偏微分方程 (组)、线性规划或非线性规划、数理统计问题、计算结果的图形表示等等, 这就要求环境科技工作者掌握多个软件的操作, 而且不同软件包之间的数据交换并非完全兼容的, 这会导致花费很多的精力。

第三类是专门为解决某一类环境模拟计算或数值分析问题发展起来的专业计算或绘图软件。目前针对河流、湖泊、环境空气、地下水等环境介质已经有一些模拟模型软件系统, 这类软件是为解决某一类环境系统数学模拟问题而专门编制的, 使用时只要按照要求以手工方式或者通过读取一定格式的数据文件方式输入相应的参数、已知条件、观测数据等, 就可以输出符合要求的计算数据或图形。如 QUAL2.E 就是针对 QUAL-II 稳态水质模型发展起来的专业软件; WASP (Water Quality Analysis Simulation Program) 是美国环保局开发的一种水质分析模拟软件包; WQRRS (Water Quality for River and Reservoir System) 是一种水质动态和水流动力学分析计算软件包; CALPUFF 是由美国加州空气资源局开发的多种类、非稳态高斯烟团扩散模式软件包; ISC3 是一个用于计算污染源排放的大气污染物对环境空气质量影响的软件包。这些专业软件包一般在环境技术管理中应用较多, 而且也主要用于解决某一个方面的问题, 是已经设定好的程序, 不能完全满足环境科学专业人士学习和研究工作的需要。

第四类是计算机数学语言。这类计算机语言的特点是和数学运算紧密结合, 数学中的一些典型的、算法比较成熟的数值计算或者符号运算问题可以直接通过调用命令的方式得到结果 (例如求矩阵特征值、逆矩阵), 比较复杂一些的问题则需要编写程序, 但程序的编写相对于一般的高级计算机语言要简单得多。因为利用这种语言编程时, 人们不必关心一些典型的、算法比较成熟的数学问题的具体算法, 它们是通过命令直接调用的。教学实践中也发现, 虽然教科书上列出了一些数学模型, 但缺乏讲述求解的方法, 很多学生对之望而却步。专门数学教科书上介绍的一些方法要么是针对一些比较简单的数学问题, 要么是重在求解过程的理论推导, 从应用角度看, 缺乏普遍性, 而环境科学研究和工程实践中更多地关心模

型求解的结果。利用计算机数学语言,则可能避开一些比较专业的数学问题或计算机专业编程问题,快速获得所需结果。目前国际上有4个著名的计算机数学语言: The MathWorks公司的MATLAB语言、Wolfram Research公司的Mathematica语言、Waterloo Maple公司的Maple语言和Math Soft公司的Mathcad语言。这几种语言各有特色,其中MATLAB出现最早,其优势在于强大的数值计算功能,而且其程序结构类似于C语言,多数命令采用数学名称的英文单词(例如regress命令用于回归分析、contour命令用于绘制等值线),因此不仅编程方便,而且容易记忆。Mathematica和Maple有强大的解析运算和数学公式推导、定理证明的功能,数值计算功能比MATLAB要弱一些。Mathcad的优势在于可以在窗口中直接书写数学公式,像在草稿纸上演算一样,书写完毕,推导结果立即显示出来,并且可以进行编程和绘图操作,同样,其数值计算功能比MATLAB稍弱。相对而言,MATLAB的数值计算功能最强大,软件扩充性好,很多研究领域都有领域专家编写的专门运算工具箱,工具箱提供的计算功能比较齐全,各种资源也比较多,非常适合非数学、非计算机编程专业而又需要大量数学运算的环境科技工作者。Mathematica、Maple和Mathcad则比较适合于纯数学研究的人员使用。这也是本书为什么选用MATLAB作为计算机数学语言,并系统介绍其在环境科学模拟计算中的应用的的原因。

由上述可见,计算机数学语言相对于一般高级计算机语言、一些专门的数学软件包以及专业的软件包而言,具有编程方便快捷、数值计算功能强大、功能全面、可扩展性强等优点。其中的MATLAB语言又属于目前世界著名的计算机数学语言中的佼佼者,这也就回答了环境科技工作者为什么需要掌握MATLAB这门计算机数学语言。

1.2 环境科学中主要的科学计算问题

1.2.1 解析解和数值解

数学在现代科学与工程技术的快速发展过程中扮演着重要的角色,可以说,所有的理工类学科、大部分社会科学的发展都离不开数学。数学家和其他应用到数学的相关领域的科学家,都可能会对某一类或某一方面的数学问题感兴趣,但他们的兴趣点却是不一样的,这种差别可以用解析解和数值解来解释。解析解一般要通过数学符号进行严格意义上的数学推导和证明,这是数学家的关注点。而相关学科的工程技术工作者则更关心如何能够获得结果,不管这种结果是解析形式的还是列表或图形表示的数值形式的。

复杂的数学问题的解析解推导起来比较困难,推导过程往往需要多方面的数学知识,甚至一些问题不存在解析解,例如大气污染物浓度预测的小风和静风点源扩散模式中包含了一个积分函数

$\psi(s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^t e^{-t^2/2} dt$, 该函数没有解析解,根据 t 的不同,这个函数的具体

数值可以查表获得,或者根据MATLAB中提供的相应函数,通过数值计算的方法获得。所以如果仅仅从解析解的角度去研究问题,一些工程技术问题可能就无法解决。幸运的是,现代计算速度的提升和一些新的数值计算方法的发展为复杂工程技术模拟计算问题提供了良好的平台。环境系统模拟中(如多介质环境系统模型),一些复杂的微分方程(组)的求解都是通过数值计算获得的。MATLAB的符号工具箱可以求解一些问题的解析解,但MATLAB更强大的功能在于数值解的实现。

1.2.2 环境质量模拟预测及计算机求解

环境质量的模拟计算是环境科学研究、环境评价和环境技术管理实践中经常遇到的一类问题。它既包括对单一环境介质（如大气、水体、土壤、地下水）中污染物浓度的模拟计算，也包括对多介质环境中污染物浓度的模拟计算，例如一些有机污染物在由污染源释放后的迁移过程中，会通过溶解、挥发、吸附、沉降等多个物理化学过程迁移到多个环境介质中，这时可以用多介质环境数学模型进行预测、模拟。上述计算要求对污染物的时空变化进行模拟，模拟的结果一般是污染物浓度在三维空间和时间上的表示。这类模型比较经典的如地表水水质模拟中的 S-P 模型、QUAL-II 模型、地表水中污染物迁移的流体力学模型；环境空气质量模拟中的 Gauss 点源模式；土壤和地下水中污染物迁移的多孔介质模型；描述污染物在水、空气、沉积物、生物体等环境介质内迁移的多介质环境数学模型等。

另外，环境生态学研究中对种群动态过程的模拟、环境生物地球化学研究中对元素生物地球化学循环过程的模拟等实际上是模拟种群或元素在生态系统或各个循环分室的时空变化，这类模型的建模机理和前述的环境介质中污染物浓度模拟机理基本一致。

环境质量模拟的数学模型可以从不同角度进行分类：

① 根据污染源的排放是否随时间变化，可以分为稳态源和非稳态源。

② 根据模拟计算的空间要求，可以分为一维模型、二维模型和三维模型。

③ 根据模拟计算的环境介质的不同，可以分为地表水水质模型、地下水水质模型、大气环境质量模型、多介质环境质量数学模型等。

④ 根据污染源的排放形式，可以分为点源模式、线源模式、面源模式等。

⑤ 根据模型建立时依据的环境信息的完备程度，可以分为白箱模型（机理模型、确定性模型）、灰箱模型（分室模型、随机模型）、黑箱模型（统计模型、神经网络模型）。

由于环境质量数学模型模拟的是污染物、种群或者元素在环境介质、生态系统或各个循环分室的时空变化，因此用于描述变量之间变化的数量相依关系的微分方程或微分方程组成为这类模型最基本的数学构成形式。其中的自变量一般是时间变量或者空间变量，因变量则是污染物浓度、种群或者元素含量等。根据模拟计算的因变量、自变量个数，该类模型经常以常微分方程（组）或者偏微分方程（组）的形式反映出来。

① 常微分方程 模拟计算的因变量和自变量均为 1 个。例如完全混合湖泊水质模型，假定其污染物浓度不随空间变化，只随时间变化，即整个湖泊完全混合均匀：

$$\begin{cases} V \frac{dC}{dt} = qC_w + I_c - QC - VCk_1 \\ C = C_0, (t=0) \end{cases} \quad (1-1)$$

式中， V 为湖泊容积， m^3 ； q 为排入湖中的污水量， m^3/d ； C_w 为污水浓度， g/m^3 ； I_c 为通过非点源途径输入的污染负荷， g/d ； Q 为湖泊输出水量， m^3/d ； k_1 为污染物净化系数（或沉降速率）， d^{-1} ； C 为湖水污染物浓度， g/m^3 。

② 常微分方程组 模拟计算的因变量 2 个及以上，自变量为 1 个，如简化型 S-P 模型：

$$\begin{cases} u \frac{dC_{BOD}}{dx} = -k_1 C_{BOD} \\ u \frac{dC_D}{dx} = k_1 C_{BOD} - k_2 C_D \\ C_{BOD} = C_{BOD0}, (x=0); C_D = C_{D0}, (x=0) \end{cases} \quad (1-2)$$

式中, C_{BOD} 为 BOD 浓度, mg/L ; C_D 为氧亏值, mg/L ; k_1 为耗氧常数, d^{-1} ; k_2 为复氧常数, d^{-1} ; u 为河流平均流速, m/d ; x 为迁移距离, m 。

③ 偏微分方程 模拟计算的因变量为 1 个, 但自变量为 2 个及以上, 如多孔介质一维保守性污染物迁移模型:

$$\begin{cases} D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t}, (0 < x < +\infty, t > 0) \\ \text{初始条件 } C = C(x), (x \geq 0, t = 0) \\ \text{边界条件 } C = C_0, (x = 0, t > 0) \\ \lim_{x \rightarrow +\infty} C = 0, (x \rightarrow +\infty, t > 0) \end{cases} \quad (1-3)$$

式中, D 为多孔介质弥散系数, m^2/d ; v 为多孔介质实际渗透流速 (达西流速/空隙度), m/d ; x 为迁移距离, m ; t 为迁移时间, d ; C 为多孔介质中污染物浓度, mg/L 。

④ 偏微分方程组 模拟计算的因变量为 2 个及以上, 自变量为 2 个及以上, 如饱和土壤溶液中无机氮 (仅考虑氨态氮和硝态氮) 一维迁移转化模型:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_1}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_1}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_1}{\partial x} + k_n C_2 - k_{\text{bio}} - k_{\text{den}} C_1 \\ R \frac{\partial C_2}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_2}{\partial x} + k_m - k_n C_2 - k_v \\ \text{初始条件 } C_1 = C_1(x), (0 \leq x \leq +\infty, t = 0); C_2 = C_2(x), (0 \leq x \leq +\infty, t = 0) \\ \text{边界条件 } D \frac{\partial C_1}{\partial x} + EC_1 = 0, (x = 0, t > 0); C_1 = C_1(t), (x \rightarrow +\infty, t > 0) \\ D \frac{\partial C_2}{\partial x} + EC_2 = 0, (x = 0, t > 0); C_2 = C_2(t), (x \rightarrow +\infty, t > 0) \\ \text{滞留系数 } R = 1 + \frac{\rho}{\theta} \times \frac{KS_m}{(1 + KC_2)^2} \end{cases} \quad (1-4)$$

式中, t 为时间, d ; x 为一维方向上氮迁移距离, m ; ρ 为土壤容重, $\text{g 土}/\text{m}^3 \text{ 土}$; θ 为土壤空隙率, $\text{m}^3 \text{ 水}/\text{m}^3 \text{ 土}$; R 为根据 Langmuir 等温吸附方程推导出的溶质迁移延迟因子; S_m 为氨氮最大吸附量, $\text{gN}/\text{g 土}$; K 为吸附平衡常数, $\text{m}^3 \text{ 水}/\text{gN}$; C_1 、 C_2 分别表示土壤溶液中硝酸盐氮和氨态氮的浓度, $\text{g}/\text{m}^3 \text{ 水}$; k_n 、 k_{den} 分别表示用一级动力学方程描述的硝化、反硝化速率常数, d^{-1} ; k_{bio} 、 k_m 、 k_v 分别为用零级动力学表示的生物固持作用、矿化作用、氨挥发作用速率常数, $\text{g}/(\text{d} \cdot \text{m}^3 \text{ 水})$; E 为蒸发速率, m/d ; 其余符号意义同前。

在一些特定条件和假设下, 环境质量数学模拟模型的微分方程 (组) 可以通过求解解析解的方法求得, 求解过程一般要通过 Laplace 变换、傅里叶变换等方法实现, 一般的环境科技工作者会感觉到比较困难, 不过对于一些特定条件下模型的解析解, 目前很多文献上都有介绍, 实际工作中, 只要求解的条件一致, 可以直接应用。即便如此, 由于这些解析解形式比较复杂, 甚至其中还含有余误差函数、汉图什 (Hantush) 函数之类的积分函数, 因此最终的数值结果也要通过计算机数值运算才能获得。更多情况下, 环境质量数学模拟模型的微分方程 (组) 是通过数值求解的方法实现的, 如果利用一般的计算机高级语言, 需要选定合适的时空步长, 并采用合适的数值方法 (有限差分法、有限元法) 进行数值迭代才能获得结果。而在 MATLAB 中只要确定合适的时空步长和求解的时空边界, 就可以直接利用相关命令函数或者编制程序进行求解, 并可以利用 MATLAB 的绘图功能, 实现求解结果在时空上

的直观表示。

1.2.3 系统最优化和环境规划模型及计算机求解

基于最优化的计算方法在环境科学研究和工作实践中也会经常遇到。从数学角度分类,这类问题分为无约束极值和有约束极值两大类。

无约束极值实际上是函数求极值的问题,函数中的变量可以是单变量,也可包括多个变量,函数可以是线性的,也可以是非线性的。该方法主要用于基于最优化原理的环境系统数学模型参数估计,例如用梯度最优化算法估计非线性水质模型参数。另外无约束极值方法也可以用于系统的优化,例如环境资源最优化开发模型的求解。

有约束极值主要是指数学规划模型,包括线性规划、非线性规划、数据包络分析。该类模型一般包括一个线性或非线性的目标函数和一系列的约束等式或不等式。例如用于求解几十个,甚至上百个规划变量的环境污染控制规划模型、环境经济投入-产出规划模型、数据包络分析模型等。在这些规划模型中,一般目标函数经济效益最大,或者成本最小,或者效率最高,约束条件一般是环境标准约束、资源条件约束、生产能力约束等。

无论无约束极值,还是有约束极值,如果依靠一般的计算机高级语言(C、Fortran、Basic)求解,则需要了解最优化算法的相关数学原理,如用于无约束极值求解的黄金分割法、用于求解线性规划的单纯型法等,并且需要编制复杂的计算机程序。而如果应用 MATLAB,则可以直接通过调用相关命令实现,例如求解无约束极值的 `fminunc()`、`fminbnd()`、`fminsearch()`,用于求解线性规划的 `linprog()`、求解非线性规划的 `fmincon()` 等。

1.2.4 环境统计数学模型及计算机求解

在对实验数据和调查数据进行处理时,经常需要了解数据的一些特征值,比如最大值、最小值、中值、平均值、方差、标准差、变异系数等一些统计指标,这些指标可以通过一些非专业统计软件(如 Excel)或者专业统计软件(Spss、SAS)等便捷地获得。但是更经常地,我们需要通过对实验或调查数据的处理,发现事物变化的规律。在环境科学研究中,这种处理一般包括线性回归、非线性回归、主成分分析、聚类分析、判别分析、方差分析、地统计学模型、趋势面分析等。

线性回归和非线性回归主要用于试图发现实验或调查数据中自变量和因变量之间的数值相依关系,这种关系可能是线性或者是非线性的。客观世界普遍存在着变量之间的相关关系,这种关系可以分为确定性和非确定性两种。确定性关系可以用函数关系表示,其实 1.2.2 和 1.2.3 部分中的数学模型主要就是用于表示这种确定性关系的。非确定性关系一般通过大量数据统计方法得到,实际上表示的是变量之间的相关关系。例如某一化学反应速率和反应温度之间的关系;人体体重和身高之间的关系;河流输沙量与年平均降水量、年径流量、汛期降雨量之间的关系;面源污染排放量与降水量、施肥量、灌溉量之间的关系等。

聚类分析是一种多元统计分类方法,主要用于对不知类别的研究对象之间的彼此相似程度进行分类,达到“物以类聚”的目的。例如根据环境化学污染物的正辛醇-水分配系数、半致死剂量、生物富集系数、滞留因子等污染行为参数对污染物进行分类;根据地区的混合层厚度、平均风速、气温垂直递减率等污染气象条件对地区进行分类;根据湖泊的面积、平均水深、降水量、蒸发量等对湖泊进行分类。

判别分析也属于多元统计分析中的数值分类法,但与聚类分析有明显差别。聚类分析的数据类别事先是未知的,而在判别分析中,是利用事先已知所属类别的数据建立判别函数,

然后再利用判别函数确定一些未知类别数据的所属类别。例如根据某种污染物的化学性质参数可以判别其性质类别；根据湖泊水环境监测数据进行富营养化类别的划分等。

主成分分析是将多个指标进行线性组合化为少数几个综合指标的一种统计分析模型。例如由指标 x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 可以线性组合为两个新的指标 y_1 、 y_2 ，并且 y_1 和 y_2 的方差量之和占总方差量的 85% 以上，就可以近似用 y_1 、 y_2 表示原来的 x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 ，并可以按照 y_1 、 y_2 对原来指标 x_1 、 x_2 、 x_3 、 x_4 表示的事物进行分类。如某区域有多个监测点，每个监测点又有多个污染物浓度监测指标，通过主成分分析，找出由若干个指标线性组合而成的环境质量综合指标，这几个指标最显著地反映出各监测点的环境质量状况的差异，且彼此又互不相关。这样通过对少数综合指标的分析，可以更便捷地对区域环境质量进行评价，并可以根据这些综合指标对监测点进行分类，确定有代表性的监测点。

方差分析是用于分析一个或多个因素（条件）对某一变量（事物）的影响是否显著的一种统计方法。任何事物总是受到多个因素的影响，如果假定试验时仅有一个因素变化，其余因素不变，这称为单因子方差分析；如果有多个因素发生变化，则称为多因子方差分析。例如通过实验数据，可以分析反应温度、反应时间对反应速率的影响是否显著；通过调查数据，可以分析地区呼吸道疾病发病率是否受环境空气质量的显著影响。

地统计学是通过变异函数，研究一些在空间分布上具有随机性和结构性，或空间相关和依赖性的环境现象。例如研究森林土壤养分的空间异质性和格局，环境污染的空间异质性，景观空间异质性，生态系统中某种群的空间分布格局等。

趋势面分析实际上是一种多元回归分析的方法，主要用于环境地学研究中一些具有空间分布规律的现象。例如某区域某矿床的品位可能和其坐标位置有关；较大湖泊中由于受排河口、径流入河口、出河口位置的影响，其中的污染物浓度在空间上分布不均，和其坐标位置有关。建立区域矿床品位或者湖泊中污染物浓度和其空间坐标位置之间数量方程关系的过程，就是趋势面分析，这种趋势面方程可以是二元的，也可以是多元的。通过趋势面方程，可以由 MATLAB 绘制等值线图，或者进行预测评估。

环境统计模型的数学原理和计算过程一般比较简单，比较容易通过一般计算机高级语言编程的方法求解，但专门的计算机软件为此提供了更便捷的求解途径。上述环境统计模型的求解早期通过曾经风行一时的 MiniTab 软件实现，现在可以通过 MATLAB 提供的更强大的统计工具箱实现。

1.2.5 一些非传统数学范畴的环境数学问题及计算机求解

近几十年来，随着应用数学和计算技术的不断发展，科学家们仿照人类思维方式和其他自然科学的研究成果，发展了很多新的模拟计算方法。这些算法中，仿照人类思维和语言规则提出的模糊推理模型，仿照生物神经网络提出的人工神经网络模型，以及基于信息不完备情况下的灰色模型等都在环境科学研究中有用武之地。

人工神经网络模型是将输入信息在人工神经元内通过传递函数并按照一定的学习规则（如误差修正学习规则、竞争性学习规则、最小均方差学习规则等）进行不断训练，直到最终输出符合要求的信息。然后，可以将这样的系统用于对一个新输入的输出生进行预测。对于包含大量作用因素（高维）的环境非线性系统，要建立如 1.2.2 中所述的动力学方程（组）预测其变化是非常困难的，因为在动力学系统中要考虑环境因子之间的定量关系，而实际系统中很多环境因子之间的定量关系往往是未知的。但利用神经网络模型进行预测时，不需要考虑多个环境因子之间的非线性定量关系，只是通过神经元网络的自我学习，充分提取观测