

不确定性非线性系统 “模拟—优化”耦合模型研究

周 丰 郭怀成 著

A Coupled Simulation-Optimization
Model for Nonlinear Systems under Uncertainty



科学出版社

www.sciencep.com

不确定性非线性系统“模拟－优化” 耦合模型研究

**A Coupled Simulation-Optimization Model for
Nonlinear Systems under Uncertainty**

周 丰 郭怀成 著

国家水体污染控制与治理科技重大专项项目 (2008ZX07102 - 001)

国家重点基础研究发展计划项目 (2005CB724205)

上海同济高廷耀环保科技发展基金会资助项目 (2007)

研究成果

科 学 出 版 社

北 京

内 容 简 介

本书开发了一套不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型及其源代码,可以用于水体、大气容量总量控制和基于机理过程模拟的过程最优控制(如地下水、石油、化工等)。全书共5章,第1、2章阐述了研究背景、目的、技术路线,以及容量总量控制(TMDL)、不确定性非线性系统模拟和不确定性优化模型的历程和科学问题;第3章阐述了基于受体模式的分布式源解析统计模型、贝叶斯递归回归树和强化区间线性规划的数学理论及其算法和先进性;第4章建立了基于上述耦合模型的Swift Creek 水库流域营养盐TMDL最优分配与风险决策方案;第5章讨论了主要结论、创新点以及该研究领域的发展方向。

本书可供环境科学、生态学、湖沼学、运筹学等学科的科研人员、高校师生以及政府部门有关人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型研究/周丰,郭怀成著.
—北京:科学出版社,2010

ISBN 978-7-03-027024-5

I. ①不… II. ①周… ②郭… III. ①非线性系统(自动化)-耦合-模型-研究 IV. ①TP271

中国版本图书馆CIP数据核字(2010)第044922号

责任编辑:张震/责任校对:包志虹

责任印制:钱玉芬/封面设计:耕者设计工作室

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

源海印刷有限责任公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2010年3月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2010年3月第一次印刷 印张:14 插页:4

印数:1—1 000 字数:283 000

定价:59.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

容量总量控制（或 TMDL）的主要难点是回答如何在不确定性条件下预测和减轻复杂系统的人类活动和自然变化（含气候变化）对水生态系统健康的影响，其抽象成一般性数学问题，包括两个方面，即非线性系统的不确定性“质-量”响应模拟和不确定性优化模型。因此，不确定性“质-量”响应模拟模型是否能准确表征不确定性非线性系统的复杂机理过程和具有全局、高效的搜索算法，将决定其预测的准确度和与后续系统优化耦合的可能性；而不确定性优化模型是否具有严格的数学理论基础和全局寻优算法，也将决定 TMDL 分配等非线性系统过程控制的风险决策方案的全局最优性和绝对可行性。然而，在过去 30 多年中，除了复杂系统机理的高度非线性与水生态系统恢复的长期性、法律上尚无明确的实施主体责任、管理上缺乏流域系统规划、工程上缺少技术综合集成、监控上缺乏大量监测数据之外，“TMDL 失效”在技术层面的根本原因就是缺乏一个适宜的不确定性“模拟-优化”耦合模型。也正因如此，我国水体污染物容量总量控制技术在回答上述核心难点时不尽如人意，难以实现基于机理过程模拟的 TMDL 最优分配与风险决策。即使北美洲和欧洲国家及其机构，尽管其拥有成熟的分布式水文、非点源和二/三维水质水动力机理模拟模型，但其最大的症结就在于无法与后续不确定性优化模型直接耦合从而得到 TMDL 最优分配与风险决策方案。

于是，全球主要国家不惜成本地投入资金开展此领域的前沿研究。2007 年 12 月 26 日，国务院常务会议审议并原则通过了作为我国 16 个国家科技重大专项之一的“水体污染控制与治理科技重大专项”（简称“国家水专项”）。该专项以“三湖、三河、一库、一江”为主要研究对象，强调突破以容量总量控制为核心的流域水体污染物总量控制技术体系。此外，美国国家研究委员会（NRC）自 2002 年以来启动了国家尺度的五大湖、河口与近海岸水域三大类研究项目，旨在模拟与减轻经济社会发展、水土资源利用和自然变化（含气候变化）所造成的水体富营养化、低氧和影响，并为决策者针对经济社会发展与水土资源利用提供“可嫁接”的生态调控战略与 TMDL 方案；欧盟 2006 年启动了最大规模的波罗的海研究项目——波罗的海 2020，强调通过削减营养盐排放、调控波罗的海水动力条件和减轻海面活动等解决低氧和 HAB 问题。

当务之急,亟须为流域水体污染物容量总量控制技术体系开发相应的科学工具,实现不确定性“质-量”响应模拟和TMDL分配的科学性、准确性、最优性,为当前国家水专项制订科学有效、技术可行的流域尺度战略规划、过程控制方案和工程示范提供计算平台。因此,本书依托国家水专项“滇池流域水污染与富营养化综合控制技术及示范项目”(2008ZX07102)和国家重点基础研究发展计划(973计划)“现代城市‘病’的系统识别理论与生态调控机理”(2005CB724205),开发了一套具有自主知识产权的普适性的不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型及其源代码,并形成了相对完整且严格的数学理论与算法,为相关科研工作者在水体、大气容量总量控制和基于机理过程模拟的过程最优控制(如地下水、石油、化工等)等方面提供基础知识与数学工具,为相关领域的研究生教学提供基础教材。

全书共5章,第1、2章阐述了研究背景、目的、技术路线,以及TMDL、不确定性非线性系统模拟和不确定性优化模型的历程和科学问题;第3章阐述了基于受体模式的分布式源解析统计模型、贝叶斯递归回归树和强化区间线性规划的数学理论、算法和先进性;第4章建立了基于上述耦合模型的Swift Creek水库流域营养盐TMDL最优分配与风险决策方案;第5章讨论了主要结论、创新点以及该研究领域的发展方向。

为了开发不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型,本书作者自2005年以来阅读了大量水文与水质水动力模拟、多元统计、贝叶斯统计和不确定性优化理论书籍。在本书的模型开发中,主要参考了美国塔夫斯(Tufts)大学Steven C. Chapra教授的*Surface Water Quality Modeling*、美国哥伦比亚大学Andrew Gelman教授的*Bayesian Data Analysis*、美国斯坦福大学James M. Lattin的*Analyzing Multivariate Data*和清华大学刘宝碇教授的《不确定性规划与应用》,以及国内外容量总量控制、水文与水质水动力模拟、源解析和不确定性优化方面的著作,特向这些前辈表示衷心的感谢。在过去近5年里,本书作者也得到了很多学术大师、领导、朋友和同学的关怀与帮助。感谢加拿大里贾纳(Regina)大学的Gordon H. Huang教授(国际环境信息学学会主席),指导本书作者在加拿大系统学习了不确定性优化理论、“模拟-优化”算法和地下水污染过程控制,并在几次面谈中如闪电般碰撞出强化区间理论的数学思想;感谢加拿大阿卡迪亚(Acadia)大学的数学家Hugh A. Chimpan教授,在过去一年内不厌其烦、反反复复地解答和讨论Bayesian决策树模型;感谢美国康奈尔大学的Daniel P. Loucks教授(美国工程院院士)和杜克大学的Kenneth H. Reckhow教授,指导水质模型和不确定性分析理论;感谢美国Tetra Tech公司的Rui Zou博士和马里兰大学的Jing Wu博士,指导水文、水质水动力模拟模型应用;感谢北京大学数学科学学院的

陈国贤博士，在 2007 年整个夏天传授了更专业的数学基础和 Fortran 编程，共同完成了大部分强化区间线性规划的理论证明；感谢清华大学的杨宝华博士，热情指导 VC++ 并协助完成 BRRT 源代码编写；感谢加拿大达尔豪西（Dalhousie）大学 Lei Liu 教授、清华大学黄跃飞副教授、北京大学刘永研究员和果实群英（郭怀成环境规划与管理研究组）们的鼓励与支持；感谢北京大学唐孝炎院士、徐云麟教授、冯长春教授、王永华教授、李永平研究员、黄艺副教授、吴为中副教授、温东辉副教授，中国环境科学研究院院长孟伟院士、郑丙辉副院长和张远研究员，环境保护部环境规划院吴舜泽研究员，清华大学张天柱教授，中国科学院地理科学与资源研究所李丽娟研究员，云南省环境科学研究院贺彬院长的指导与支持。感谢国家水体污染控制与治理科技重大专项项目（2008ZX07102 - 001）、973 计划项目（2005CB724205）和上海同济高廷耀环保科技发展基金会的资助。另外，感谢爱妻高艳无私的支持与奉献，也正因为此，才成就了本书的完成与出版。

不确定性非线性系统“模拟 - 优化”耦合模型研究才刚刚起步，本书涉及学科面广，在国家水专项中也是首次尝试应用，加上作者的水平有限、经验不足，文中不妥之处在所难免，欢迎读者不吝批评指正。可通过 jardon.zhou@gmail.com 与周丰交流。

作者

2010 年 1 月于燕园

目 录

前言

1 绪论	1
1.1 研究背景与目的	1
1.2 研究内容与技术路线	6
2 国内外研究进展	9
2.1 TMDL 技术	9
2.1.1 TMDL 及我国容量总量控制的发展历程	9
2.1.2 对比分析	17
2.1.3 三点不足之处	18
2.2 不确定性“质-量”模拟模型	22
2.2.1 研究热点与发展历程	22
2.2.2 模型特点与对比分析	29
2.2.3 重要的科学问题	33
2.3 不确定性优化模型	34
2.3.1 研究热点与发展历程	34
2.3.2 模型特点与对比分析	40
2.3.3 重要的科学问题	42
3 不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型开发	44
3.1 DRSS 模型	44
3.1.1 DRSS 模型的数学理论	44
3.1.2 DRSS 模型的算法	50
3.1.3 模型对比分析与讨论	51
3.2 BRRT 模型	58
3.2.1 BRRT 模型的数学理论	58
3.2.2 BRRT 模型的算法	64
3.2.3 模型对比分析与讨论	66
3.3 EILP 模型	73
3.3.1 EILP 模型的数学理论	73

3.3.2	EILP 模型的算法	84
3.3.3	EILP 模型的衍生模型	86
3.3.4	模型对比分析与讨论	89
4	应用研究: Swift Creek 水库流域营养盐 TMDL 最优分配与风险决策方案	94
4.1	研究区域与数据	94
4.2	水体污染物分布式源解析	97
4.3	半分布式水文、非点源和二维水质水动力机理模型校准	105
4.4	基于机理过程的不确定性“质-量”响应模拟	114
4.5	营养盐 TMDL 最优分配与风险决策方案	137
5	结论、创新点与展望	144
5.1	主要结论	144
5.2	创新点与贡献	147
5.3	研究展望	148
	参考文献	151
	附录	171
附录 A	SCR 流域的其他子流域水文模拟结果	171
附录 B	SCR 流域的其他子流域非点源模拟结果	173
附录 C	BRRT v1.0 的 C 程序	177
附录 D	SCR 流域营养盐 TMDL 的不确定性“模拟-优化”耦合模型的 Lingo 程序	207

彩图

表 目 录

表 2-1	我国水体污染物容量总量控制发展历程	14
表 2-2	面向系统优化的主流不确定性“质-量”响应模拟模型的对比分析	31
表 2-3	主流的不确定性优化模型对比分析	41
表 3-1	EI 不确定性下风险水平与目标函数值、决策变量的对应关系	82
表 3-2	BWC 模型、ILP 模型、MILP 模型和 EILP 模型的计算过程	91
表 4-1	SCR 流域各子流域土地利用分布	95
表 4-2	SCR 流域各子流域土壤分布	96
表 4-3	不同时空尺度下的 SCR 流域水体污染物潜在污染源识别及其特征	101
表 4-4	不同时间尺度下的 SCR 流域水体污染物潜在污染源贡献率估计	104
表 4-5	不同空间尺度下的 SCR 流域水体污染物潜在污染源贡献率估计	104
表 4-6	SCR 流域浮游植物 TMDL 最优分配模型参数与情景设计	138
表 4-7	不同情景下 SCR 流域浮游植物 TMDL 最优分配方案(1998 年)	139
表 4-8	不同情景下 SCR 流域营养盐排放负荷最小削减方案(1998 年)	140

图 目 录

图 1-1	TMDL 计划的制订与反馈过程	3
图 1-2	不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型开发的技术路线	8
图 2-1	TMDL 研究热点分析	10
图 2-2	TMDL 研究热点趋势分析	11
图 2-3	水环境容量情景分析	19
图 2-4	总量分配技术的 5 种模式	20
图 2-5	TMDL 中不确定性的来源分析	21
图 2-6	不确定性“质-量”响应模拟模型研究热点分析	23
图 2-7	不确定性“质-量”响应模拟模型研究趋势分析	24
图 2-8	直接式“模拟-优化”耦合模型原理	30
图 2-9	贝叶斯网络模型原理	30
图 2-10	基于 SCA 的“模拟-优化”模型原理	32
图 2-11	不确定性优化模型研究热点分析	35
图 2-12	不确定性优化研究趋势分析	36
图 3-1	时空分异性分析子模型原理	45
图 3-2	AFS-MLR 子模型原理	47
图 3-3	DRSS 模型的算法	50
图 3-4	DRSS 模型算例：香港东部近海海域	52
图 3-5	基于 Euclid 空间距离平方和离差平方的 EHK 近海海域空间分类	53
图 3-6	EHK 近海海域最优空间分类分析	54
图 3-7	空间分异性影响 (I)：影响因素载荷	55
图 3-8	空间分异性影响 (II)：影响因素的因子得分 Ξ	56
图 3-9	空间分异性影响 (III)：影响因素贡献率	57
图 3-10	反标准化对影响因素贡献率估计的影响	57
图 3-11	BRRT 模型的算法流程	65
图 3-12	随机样本中独立变量和因变量之间的响应关系	67

图 3-13	BRRT 及主流模型 (CART、CHAID、BCART 和 BTREED) 的回归树结果	68
图 3-14	BRRT 模型与以往回归决策树模型的准确度比较	69
图 3-15	BRRT 模型与以往贝叶斯模型的计算效率和稳定性比较	71
图 3-16	四类不确定性比较分析	75
图 3-17	EILP 模型的定理 1 图解	76
图 3-18	EILP 模型主要思想的图解	85
图 3-19	EI 不确定性的极端与非极端风险决策分析	92
图 4-1	Swift Creek 水库流域的部分气象数据 (1998.01.01 ~ 2000.12.31)	96
图 4-2	Swift Creek 水库流域最优时间和空间分类分析	98
图 4-3	Swift Creek 水库空间尺度显著性指标的 IDW 模拟	98
图 4-4	Swift Creek 水库时间尺度显著性指标的 IDW 模拟	99
图 4-5	Swift Creek 水库采样点受潜在污染源影响程度分析	102
图 4-6	Horsepen-Otterdale-Blackman Creek 子流域 HSPF 模型的水文校准	106
图 4-7	Swift Creek 子流域 HSPF 模型的水文校准	107
图 4-8	Horsepen-Otterdale-Blackman Creek 子流域 HSPF 模型的水质校准	108
图 4-9	Swift Creek 子流域 HSPF 模型的水质校准	109
图 4-10	Swift Creek 水库二维水质水动力模拟的计算网格划分	111
图 4-11	Swift Creek 水库水位在 1998 ~ 2000 年的模拟值与监测值	111
图 4-12	Swift Creek 水库温度在 1998 ~ 2000 年的模拟值与监测值	112
图 4-13	Swift Creek 水库第 16 个断面的温度模拟值与监测值的垂直分布	112
图 4-14	Swift Creek 水库 NH_4^+ 、 NO_3^- 和 Chl-a 在 1998 ~ 2000 年的模拟值与监测值	113
图 4-15	Swift Creek 水库第 16 个断面的 DO 模拟值与监测值的垂直分布	114
图 4-16	BRRT 模型先验分布的参数与 $\ln p(Y X, T^i)$ 和叶节点数的关系	116
图 4-17	SCR 流域 BRRT 模型校准与验证准确度分析 (I): Multi-restart 全局随机搜索过程	117
图 4-18	SCR 流域 BRRT 模型校准与验证准确度分析 (II): 基于 Wilks 似然比的局部贪婪搜索过程 (全局随机搜索之后)	118
图 4-19	SCR 流域 BRRT 模型最终回归树 T^{Final}	119
图 4-20	SCR 流域 BRRT 模型校准与验证准确度分析 (III): 建立不确定性回归方程	122
图 4-21	与传统 TMDL 分配方法对比分析 (II): 最小削减负荷	122

图 A-1	Tomahawk Creek 子流域 HSPF 模型的水文校准	171
图 A-2	Dry-Ashbrook Creek 子流域 HSPF 模型的水文校准	172
图 A-3	West Branch 子流域 HSPF 模型的水文校准	172
图 B-1	Tomahawk Creek 子流域 HSPF 模型的水质校准	173
图 B-2	Dry-Ashbrook Creek 子流域 HSPF 模型的水质校准	174
图 B-3	West Creek 子流域 HSPF 模型的水质校准	175

1 绪 论

1.1 研究背景与目的

河流、湖库、河口及近海岸水域的富营养化、低氧和有毒藻类水华（HAB）依旧是全球极为突出且亟待攻克三个水环境问题（McIsaac et al., 2001; Boesch, 2004; Diaz and Rosenberg, 2008; Heisler et al., 2008; Anderson, 2009; Conley et al., 2009b）。例如，2007 年，我国七大水系的 408 个地表水监测断面中 IV~V 类和劣 V 类水质水仍然占 59%，调查的 200 多个湖泊中 75% 发生富营养化，28 个国控重点湖库中 IV~V 类和劣 V 类水质水占 72%，东部河口与近海岸中 IV~V 类和劣 V 类水质海水占 50%~80%（中国环境科学研究院，2007）；2004 年，美国 114 个河口（包括切萨皮克湾、墨西哥湾）中有 61% 处于中等富营养化以上状态（Bricker et al., 2007）；2006 年，欧洲波罗的海（世界最大的半咸水水域）深水区域有近 60% 区域处于严重低氧状态（ $DO \leq 2\text{mg/L}$ ；Conley et al., 2009a, 2009b）。为了应对这三个棘手的问题，首要的难点就是回答如何在不确定性条件下预测（forecast）和减轻（mitigation）人类活动和自然变化（含气候变化）对水生态系统健康的影响，而基于“水生态系统管理”的流域尺度水体污染物容量总量控制技术是回答这个难点的关键性管理技术之一（Pelley, 2003）。

作为全球水体污染物容量总量控制技术的先进典范，美国的最大日负荷量（total maximum daily load, TMDL）计划是在满足水质或水生态标准的前提下量化水体能容纳的污染物的最大负荷，并在一定风险水平下将此负荷分配到该污染物所有点源和非点源的过程（USEPA, 1999）；其关键性内容是建立“污染物排放-水体容纳负荷-水质水动力-水生态系统状态”（简称“质-量”）响应模拟模型与 TMDL 最优分配和风险决策算法（NRC, 2001；图 1-1）。当考虑不确定性时，前者至少涉及高度非线性系统的降雨-径流、非点源迁移转化和水质水动力过程，抽象成一般性数学问题，即不确定性“质-量”响应模拟模型 $\tilde{Y} = f(X, \tilde{\theta}) + \varepsilon$ ，其中 f 、 $\tilde{\theta}$ 和 ε 分别为非线性模型结构、参数和不确定性水平，如二维水

质控制方程为 $\frac{\partial B\Phi}{\partial t} + \frac{\partial BU\Phi}{\partial x} + \frac{\partial BW\Phi}{\partial z} - \frac{\partial \left(BD_x \frac{\partial \Phi}{\partial x} \right)}{\partial x} - \frac{\partial \left(BD_z \frac{\partial \Phi}{\partial z} \right)}{\partial z} = q_\phi B + S_\phi B$ (Cole and Wells, 2003); 后者抽象成一般性数学问题, 则为不确定性优化, 即 $\text{Min } g(\bar{X}, \bar{C}) \text{ s. t } h(\bar{X}, \bar{A}) \leq \bar{B}$, 其中参数 $\bar{A}$ 、 $\bar{B}$ 和 $\bar{C}$ 为不确定性参数。为了回答上述核心问题, 不确定性“质-量”响应模拟和不确定性优化相互依存且需要相互耦合, 即 $\text{Min } g(\bar{X}, \bar{C}) \text{ s. t } \bar{Y} = f(\bar{X}, \bar{\Theta}) + \varepsilon \leq \bar{Y}^*, h(\bar{X}, \bar{A}) \leq \bar{B}$ 。尽管国内外在这两个关键性内容的模型研究与实践中取得一系列辉煌成就, 但仍没有达到控制污染源、改善水质和水生态系统状态的显著效果。归纳国内外的研究与实践, 除了复杂系统本身存在机理上的高度非线性与水生态系统恢复的长期性 (Jakeman and Hornberger, 1993)、法律上尚无明确的实施主体责任、管理上缺乏流域系统规划 (孟伟等, 2008b)、工程上缺少技术综合集成 (孟伟等, 2004)、监控上缺乏适宜的水质基准与大量监测数据之外, “TMDL 失效”在一定程度上还归结于 TMDL 的关键性内容仍存在三点不足之处: ①过分强调水环境容量的量化, 忽视面向系统优化的不确定性“质-量”响应模拟模型的开发; ②追求容量总量控制目标, 淡化基于机理模拟的 TMDL 最优分配与风险决策模型的开发; ③忽视流域系统的全过程不确定性分析, 缺乏科学的风险决策分析。也正因为此, 我国多年的水体污染物容量总量控制在回答上述核心难点时不尽如人意, 难以保证不确定性“质-量”响应模拟和 TMDL 分配的科学性、准确性、最优性。即使北美洲和欧洲国家及其机构, 它们拥有成熟的分布式水文、非点源和二/三维水质水动力机理模拟模型, 但其最大的症结在于无法与后续不确定性优化模型直接耦合得到 TMDL 最优分配与风险决策方案。因此, 非线性系统的不确定性“模拟-优化”耦合模型研究在近 10 年来逐渐成为容量总量控制以及其他非线性系统控制领域 (地下水或大气污染控制、化工等过程控制) 的研究前沿 (NRC, 2001)。

于是, 全球主要国家不惜成本地投入资金开展此科学前沿研究, 以此攻克富营养化、低氧和 HAB 的管理技术难点 (刘鸿亮和李小平, 2007; Howarth et al., 2003)。例如, 2007 年 12 月 26 日, 国务院常务会议审议并原则通过了作为我国 16 个国家科技重大专项之一的“水体污染控制与治理科技重大专项” (简称国家水专项) (国务院办公厅, 2007), 该专项以“三湖、三河、一库、一江”为主要研究对象, 强调突破以容量总量控制为核心的流域水体污染物总量控制技术体系 (孟伟等, 2008a); 美国国家研究委员会 (NRC) 自 2002 年以来启动了国家尺度的五大湖、河口与近海岸水域三大类研究项目——生态预测、区域生态系统和系统压力研究, 旨在模拟与减轻经济社会发展、水土资源利用和自然变化 (含气候变化) 所造成的水体富营养化、低氧和 HAB 影响, 并为决策者针对经济社会发展与水土

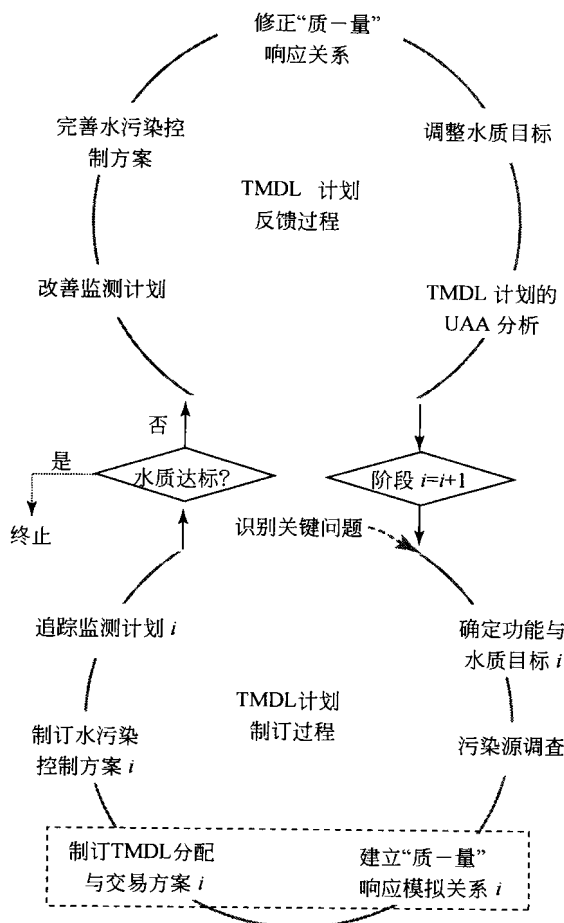


图 1-1 TMDL 计划的制订与反馈过程

Figure 1-1 Components of TMDL process

资源利用提供“可嫁接”的生态调控战略与 TMDL 方案 (Clark et al., 2001); 欧盟 2006 年启动了最大规模的波罗的海研究项目——波罗的海 2020 ([www. balticsea 2020. org](http://www.balticsea2020.org)), 研究内容包括富营养化、低氧、HAB、生态渔业等, 强调通过削减营养盐、调控波罗的海水动力条件和减轻海面活动等解决低氧和 HAB 问题 (Conley et al., 2009a, 2009b)。

具体来说, 在非线性系统的不确定性“模拟-优化”耦合模型研究方面, 国内外的主要研究机构与研究者 (团队) 多关注不确定性“质-量”响应模拟模型 (含不确定性分析)、不确定性优化模型及其耦合模型的数学理论与应用研究 (第 2 章)。代表性的模型或应用有: ①不确定性“质-量”响应模拟模型。

兰卡斯特 (Lancaster) 大学的 K. J. Beven 教授, 致力于开发以变源产流为基础的分布式水文模型 (TOPMODEL) 和普适性似然不确定性估计 (GLUE) 理论与算法 (Beven and Binley, 1992; Beven, 1993; Freer et al., 1996; Beven and Freer, 2001; Beven, 2002a, 2006, 2007); 美国农业部农业研究服务中心 (USDA ARS) 的 J. G. Arnold 教授和美国国家环境保护局环境研究实验室的 A. S. Donigan 分别创造性地开发了最为广泛应用的流域非点源污染模拟模型 SWAT 和 HSPF (Bicknell et al., 1997; Arnold et al., 1998), 并在不同类型流域的 TMDL 计划开展可行性研究 (Di Luzio et al., 2002; Bosch et al., 2004; Nasr et al., 2007); 在 LARM 水库模型的基础上 (Edinger and Buchak, 1975), 美国陆军工程兵团的 T. Cole 教授和波特兰 (Portland) 州立大学的 S. A. Wells 教授开发了二维水质水动力模拟模型 CE-QUAL-W2 (Cole and Wells, 2003); 从统计学经验模型角度, 滑铁卢 (Waterloo) 大学的统计学家 H. A. Chipman 等则建立贝叶斯 CART (BCART)、贝叶斯 TREED 和 BART 等复杂的统计模型与算法, 为不确定性“质-量”响应模拟模型提供新的途径 (Chipman et al., 1998, 2002, 2008); 与之类似, 杜克大学的 K. H. Reckhow 教授开发了机理与经验模型相结合的贝叶斯网络统计模型 (Reckhow, 1999; Borsuk et al., 2004) 和贝叶斯 SPAROW 计算平台等 (Qian et al., 2005), 并重点开展不确定性条件下的营养盐 TMDL 计划研究 (Arhonditsis et al., 2007; Chen et al., 2007; Stow et al., 2007); 在模拟模型的不确定性分析方面, 伦敦帝国理工医学院的 M. B. Beck 教授是最早开展水质模型不确定性的领导者之一, 提出了一系列前瞻性建议, 包括参数识别性、不确定性源识别、营养盐负荷的不确定性估计等 (Beck, 1982, 1987, 1991; Osidele et al., 2003; Lin and Beck, 2007); 澳大利亚纽卡斯尔 (Newcastle) 大学的 G. Kuczera 教授应用 markov chain monte carlo (MCMC)、SCE-UA、模拟退火算法 (SA) 开展水文模型的输入变量与参数不确定性分析 (Kuczera and Parent, 1998; Thyer and Kuczera, 2003a, 2003b; Kavetski et al., 2006a, 2006b; Kuczera et al., 2006)。

②不确定性优化与算法。斯坦福大学的数学家 G. B. Dantzig 教授最早创立了不确定性规划, 并证明了随机规划的理论模型; 得克萨斯大学的数学家 A. Charnes 教授和清华大学的数学家 B. D. Liu 教授分别提出了机会约束随机规划和相关机会规划, 为 TMDL 分配提供了不同风险水平的最优决策算法 (Charnes and Cooper, 1959; Liu, 1996, 1997, 2000); 普林斯顿大学的数学家 R. E. Bellman 教授和里贾纳 (Regina) 大学的 G. H. Huang 教授分别致力于模糊规划和区间规划, 在数据有限条件下为 TMDL 最优分配提供简易算法。

③不确定性“模拟-优化”耦合模型。伯明翰大学系统工程学家 N. A. Dudley 教授和俄罗斯科学院数学家 Y. G. Evtushenko 教授最早提出不确定性“模拟-优化”耦合模型思想 (Dudley and Waugh, 1980; Ev-

tushenko, 1980); 里贾纳大学的 G. H. Huang 教授开发了逐步回归分析 (SCA), 通过复杂机理模拟模型生成的样本训练之后, 实现 SCA 与不确定性优化模型直接耦合 (Huang et al., 2006; He et al., 2008)。^④在低氧、富营养化及 HAB 方面的应用。弗吉尼亚州海洋科学研究所的 R. J. Diaz 教授致力于全球低氧及 HAB 模拟与生态调控研究 (Diaz, 2001); 马里兰大学的 D. F. Boesch 教授和 W. M. Kemp 教授长期致力于美国切萨皮克 (Chesapeake) 湾和墨西哥湾的营养盐驱动下的低氧和 HAB 的机理模拟与生态调控研究 (Kemp et al., 1992; Boesch et al., 2001; Kemp et al., 2005; Boesch, 2006); 威斯康星大学 S. R. Carpenter 教授针对浅水湖泊的富营养化和 HAB, 长期开展了经济社会发展和土地利用方式与水生态系统状态的过程模拟与调控研究 (Carpenter, 2005; Foley, 2005; Carpenter and Lathrop, 2008)。

此外, 以 TMDL 及其非线性系统的不确定性“模拟-优化”耦合模型为主题, 在 ISI web of science 搜索得到 11 024 篇 SCI 论文 (1950 ~ 2007 年)。通过文献计量学分析 (Ho, 2004) 表明, 不管是该类模型的数学理论、算法设计以及应用研究, 依旧存在 4 个科学问题 (第 2 章), 具体为: ①如何在有限数据下快速实现高分辨率的不同时空尺度潜在污染源类型识别及其贡献率估计; ②如何构建面向系统优化的不确定性、非线性“质-量”响应模拟模型及其全局、高效的搜索算法; ③如何证明区间不确定性下强化区间 (enhanced-interval, EI) 目标函数上下限、参数与决策变量的关系以及解空间绝对可行性; ④如何在 EI 不确定性下进行风险决策分析。

鉴于此, 本书依托国家水专项“滇池流域水污染与富营养化综合控制技术示范项目” (2008 ~ 2010, 2008ZX07102; 环境保护部, 2008) 和 973 计划项目“现代城市‘病’的系统识别理论与生态调控机理” (2005 ~ 2010, 2005CB724205), 旨在开发普适性方法论——不确定性非线性系统“模拟-优化”模型, 即 $\min g(\tilde{X}, \tilde{C})$ s. t. $\tilde{Y} = f(\tilde{X}, \tilde{\Theta}) + \varepsilon \leq \tilde{Y}^*, h(\tilde{X}, \tilde{A}) \leq \tilde{B}$, 其包括基于受体模式的分布式源解析统计 (distributed receptorbased sourceappointment statistical, DRSS) 模型、贝叶斯递归回归树 (Bayesian recursive regression tree, BRRT) 模型、强化区间线性规划 (enhanced-interval linear programming, EILP) 模型三个核心的数学模型 (第 3 章)。前两者 (DRSS 和 BRRT 模型) 解决前两个关键科学问题, 可用于模拟高度非线性、非连续、非参数、不确定性的“质-量”响应关系, 且能和不确定性优化模型直接耦合, 相比以往主流数学模型, 能够得到更高的预测准确度和计算效率; EILP 模型则解决后两个关键科学问题, 确保数学理论正确、解空间全局最优性和绝对可行性。从应用价值来看, DRSS 模型、BRRT 模型和 EILP 模型构成的不确定性非线性系统“模拟-优化”耦合模型, 将真正实现具有复杂机理模拟基础 (分布式水