

组合单元水质模型中的边界条件及污染源项反问题

韩龙喜¹ 蒋莉华¹ 朱党生²

(1.河海大学水文水资源及环境学院 南京 210098 2.水利部水利水电规划设计总院 北京 100011)

摘要 :从反问题的角度出发 ,提出组合单元法求解水网地区水质特性的稀疏矩阵解法 ,在此基础上给出无约束污染物边界浓度及污染源项一类反问题的提法及相应的最优控制求解方法 .该方法避免了常规方法的试错求解过程及不确定性 ,可显著提高计算精度 .
关键词 水网地区 组合单元法 水质边界条件 污染源项 反问题
中图分类号 :X143 文献标识码 :A 文章编号 :1000-198X(2001)05-0023-04

数学物理反问题是近年来发展起来的、与许多科技领域密切相关的一门新的交叉边缘学科 .与正问题相反 ,其主要特征是研究各种物理现象的逆过程 .随着科学技术的不断发展 ,各学科(如地球物理、生物医学、材料科学、工程水力学)提出了大量的亟待解决的反问题 ,在国内外已引起众多学者的广泛兴趣 .与正问题相比 ,反问题一般不是物理可实现的 ,解常是不适定的 ,很难求出解析式 .用数值方法解反问题时 ,其解也会出现不稳定问题 ,且工作量较大 ,因此相对正问题来说 ,求解更为困难 .但生产实践提出了许多亟待解决的反问题 ,从而引起各学科科研工作者的重视 .近年来在流体力学领域 ,反问题的研究取得了较快的发展 ,文献 [1 , 2]对单一河道的源项进行过成功反演 ,但迄今未见水网地区水质反问题方面的研究报道 .

1 水网地区水质边界条件(污染源项)反问题的提法

在水网地区 ,环境管理部门对不同地域的河道制定了不同的水质指标 .为使水质达标 ,必须限制污染源排放或入流边界的水质浓度 .因此 ,如何根据特定河道的水质指标限制条件 ,确定入流边界水质浓度及河段污染物排放量 ,具有重要的理论及实际意义 .从物理角度出发 ,边界条件及污染源项是两个不同的概念 ,但在组合单元水质模型中 ,它们则统一计入离散方程右端项中(从数学角度 ,两者处理方法一致 ,故以下统称为源项) .目前常用试错法确定源项 ,即以水质限制条件为目标 ,反复调试未知源项至满足精度 .此方法工作量大、经验性强且缺少统一的标准 .本文从反问题角度出发 ,给出稳态条件下源项控制反问题的提法及求解方法 .

1.1 稳态组合单元水质模型

在进行水质模拟或规划时 ,往往先由统计分析得出边界水位或流量 ,进行水量计算得到稳态流场 ,以此作为水质模拟的输入条件 ,再进行稳态水质计算 .对水质模拟 ,由控制方程经差分运算得到差分形式的代数方程^[3]

AC = B (1)

式中 :C——N 个单元的水质浓度组成的列向量 ;B——由源项产生的列向量 ;A——N 阶稀疏方阵 ,该矩阵任一元素可表示为

α(i,j) = { 0 i,j 两单元不相连
ξi i = j
ηi,j i,j 两单元相连
bi = Si (2)

ξi = - ∑j (αi,j Qi,jn+1/2) + ∑j (Kxi,j Ai,j/Di,j) + KVi (3)

$$\eta_{i,j} = -(1 - \alpha_{i,j})Q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - K_{xi,j}A_{i,j}/D_{i,j} \quad (4)$$

式中:对流项取迎风差分格式; S_i ——第 i 个单元的源强; $Q_{i,j}$ ——从单元 i 流向单元 j 的流量; $A_{i,j}$ ——单元 i 及单元 j 的连接河道断面面积; $K_{xi,j}$ ——连接河道的流量系数;若 $Q_{i,j} > 0$,则取 $\alpha_{i,j} = 1$,反之 $\alpha_{i,j} = 0$.若 $C_k^{(B)}$ 代表第 k 个边界河道入口断面浓度,它对被流入单元浓度的影响,计入在源项列向量 B 的相应元素 b_i 中,可令

$$b_i = S_i + Q_k^{(B)} \cdot C_k^{(B)} \quad (5)$$

式中 $Q_k^{(B)}$ 为第 k 个边界河道入口断面流量.

1.2 反问题的提法

在给定水力条件、水质模型参数不变的情况下,任一单元污染物浓度取决于边界条件及污染源项的不同组合.对正问题,若给定源项(边界条件或污染源强),求解方程(1),可得各单元浓度 C . 现在的问题是,已知某些单元内污染物浓度的观测值,即

$$\alpha_{ij} \approx C^*(i_j) \quad j = 1, 2, \dots, S \quad (6)$$

式中: S ——已知观测浓度的单元个数; i_j ——单元的编号.使上式中各单元浓度得到最大满足所对应源项即为反问题待求的未知量.与正问题相比,不同之处在于:正问题中应属已知的源项在反问题中成为未知的求解目标;正问题中应属求解目标的某些单元的未知浓度 $\alpha_{ij} (j = 1, 2, \dots, S)$ 在反问题中则成为可测的 S 个已知分量.

2 反问题的构造

显然,待求的边界条件应使此 S 个单元的计算值充分接近给定值,因而,反问题转化成下列优化问题:

$$\text{目标泛函} \quad J = \min \sum_{j=1}^S (\alpha_{ij} - C^*(i_j))^2 \quad (7)$$

$$\text{约束条件} \quad AC = B \quad (8)$$

$$\text{源强} \quad b_k = S_k \quad k = 1, 2, \dots, m \quad (9)$$

式中 m 为未知源项的个数(通过适当调整总可使未知源项的单元编号为 $1 \sim m$).反问题的求解转化为求最优的 $S_k, k = 1, 2, \dots, m$,使得 J 最小.

3 反问题的求解

3.1 局部基本解展开算法

设 $B = (b_1, b_2, \dots, b_m, b_{m+1}^0, b_{m+2}^0, \dots, b_n^0)$, 其中,记 $B^{(U)} = (b_1, b_2, \dots, b_m)$ 为待反演的源项, $b_{m+1}^0, b_{m+2}^0, \dots, b_n^0$ 为已知源项.方程(1)为线性方程,由于线性方程的解满足叠加原理,故可在正问题的基础上将解构造造成各基本解的线性组合.首先,根据已知及未知的污染源定义 $m+1$ 个 n 维列向量,令

$$B^{(0)} = (0, 0, \dots, b_{m+1}^0, \dots, b_n^0)^T$$

$$B^{(1)} = (1, 0, \dots, 0)^T$$

$$B^{(2)} = (0, 1, 0, \dots, 0)^T$$

$$B^{(m)} = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$$

其中 $B^{(k)} (k = 1, 2, \dots, m)$ 的第 k 个元素为 1,其余元素均为 0.将上述 $m+1$ 个向量分别代入正问题控制方程(1),可得到解的向量集,依次记为 $C^{(0)}, C^{(1)}, C^{(2)}, \dots, C^{(m)}$,称其为局部基本解.其中 $C^{(0)}$ 是与已知源项组成的列向量 $B^{(0)}$ 相对应的基本解.这组解反映了正问题控制方程的基本特性,与外部施加的作用无关,即与待求的 $B^{(U)}$ 无关.由于线性系统满足倍乘关系,对于任意的 $B^{(U)}$,将其代入方程(1)后,其解与基本解的关系为

$$C = C^{(0)} + \sum_{i=1}^m b_i C^{(i)} \quad (10)$$

将其第 $i (j = 1, 2, \dots, m)$ 个分量依次代入目标函数,得到

$$J = \min \sum_{j=1}^S (C^0(i_j) + \sum_{k=1}^m (b_k C^k(i_j)) - C^*(i_j))^2 \tag{11}$$

优化问题转化为上述二次函数 J 对 $b_1, b_2, \dots, b_m$ 求极小的问题,将泛函 J 分别对 $b_1, b_2, \dots, b_m$ 求偏导数,并令其等于 0,得

$$\frac{\partial J}{\partial b_l} = 2 \sum_{j=1}^S [C^0(i_j) + \sum_{k=1}^m (b_k C^k(i_j)) - C^*(i_j)] C^l(i_j) = 0 \quad l = 1, 2, \dots, m \tag{12}$$

即得到 b_1, b_2, b_m 满足方程

$$DB^{(U)} = q \tag{13}$$

其中,

$$D = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^S (C^1(i_j) C^1(i_j)) & \dots & \sum_{j=1}^S (C^1(i_j) C^m(i_j)) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{j=1}^S (C^m(i_j) C^1(i_j)) & \dots & \sum_{j=1}^S (C^m(i_j) C^m(i_j)) \end{bmatrix}$$
$$q = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^S [(C^*(i_j) - C^0(i_j)) C^1(i_j)] \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^S [(C^*(i_j) - C^0(i_j)) C^m(i_j)] \end{bmatrix}$$

注意, D 为非负对称矩阵,因为 J 非负,故只要 D 可逆,则必有使 J 达到极小的解,由

$$B^{(U)} = D^{-1}q \tag{14}$$

求出,此即为所求的最优解.

3.2 算例

为了验证上述计算方法的可靠性,通常借用正问题的解来构造反问题.构造图 1 所示河网,单元划分情况见图 2. 先进行正问题计算.

整个河网划分为 38 个单元,其中第 1,4,7 三单元接流量边界条件,合计入流流量为 $12.0 \text{ m}^3/\text{s}$,第 38 单元接水位边界条件,假设水位为 1.43 m ,经水力模拟得流出第 38 单元的流量为 $12.013 \text{ m}^3/\text{s}$,整个河网进出流量基本保持平衡.经检验其他所有单元均能保持水量进出平衡.由于河网构造的“特殊性”,笔者还进行了“对称性”检验.以此求得的单元水位及单元间流量等水力特性作为水质模型的水力条件进行水质模拟.

构造各单元非齐次项列向量,不妨设第 1,4,7,14,21,25 等 6 单元有污染物输入,相应的列向量为 $B = (22, 18, 20, 12, 16, 14)^T$,代表相应单元单位时间污染物的输入量 (g/s),其他单元污染源输入假设为 0,将 B 代入正问题(1)中计算,可得各单元浓度,任取第 8,20,29,31 等 4 单元浓度为待验证浓度,求得与污染物输入量 B 相应的 4 单元浓度列向量 $C^* = (5.49886, 5.01614, 10.9779, 13.4058)^T$. 求解反问题时,需由可测浓度 C^* 反求右端源项,不妨设第 1,4,21 等 3 单元污染源(或边界条件)输入为待求的未知量,则

$$B^{(U)} = (S_1, S_4, S_{21})^T \tag{15}$$

令 $B^{(0)} = (0, 0, \dots, 0, 20, 0, \dots, 12, 0, \dots, 14, 0, \dots, 0)^T$, $B^{(1)} = (1, 0, 0, \dots, 0)^T$, $B^{(2)} = (0, 0, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$, $B^{(3)} = (0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)^T$

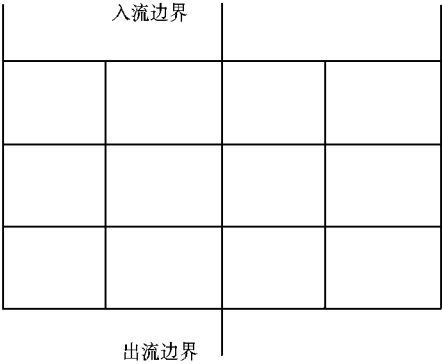


图 1 虚拟河网示意图

Fig.1 Sketch of virtual river network

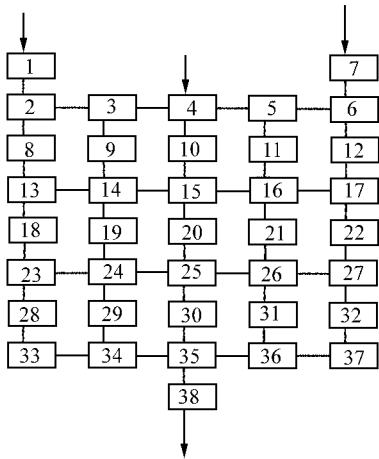


图 2 单元划分示意图

Fig.2 Sketch of element partition

... 0)^T. 式 $B^{(0)}$ 中 3 个非零元素分别位于第 7,14,25 位;式 $B^{(3)}$ 中,非零元素 1 位于第 21 位.对应于式 $B^{(0)}$, $B^{(1)}$, $B^{(2)}$ 及 $B^{(3)}$ 的基本解为

$$C^{(0)} = (0.11685 \times 10^{-2} \ 0.62551 \ 5.73736 \ 3.84690)^T$$
$$C^{(1)} = (0.24910 \ 0.98057 \times 10^{-2} \ 0.18922 \ 0.75565 \times 10^{-3})^T$$
$$C^{(2)} = (0.96798 \times 10^{-3} \ 0.23007 \ 0.05716 \ 0.05716)^T$$
$$C^{(3)} = (0.23262 \times 10^{-8} \ 0.19385 \times 10^{-2} \ 0.62746 \times 10^{-3} \ 0.53041)^T$$

由上述基本解形成矩阵 D 及向量 q ,利用式(21)求得 $B^{(U)}$,见表 1.

表 1 参数理论值与最优控制解

Table 1 Theoretical value and optimum solution of parameters

参数	b_1	b_4	b_{21}
理论值	22.0	18.0	16.0
最优控制解	22.0709	18.0329	16.0470

4 结 论

a. 本文给出组合单元水质模型,根据水质模型差分方程组的特征,提出在正问题中,用基本解的线性组合构造正问题的解,首次给出无约束的水质边界浓度(或污染源源强)反问题的提法.

b. 用局部基本解展开算法进行反演,可充分利用正问题的程序,避免了其他优化方法中常用的迭代逼近寻优过程,可直接得到最优解.本文给出的最优控制解法,对环境规划及环境管理具有重要理论意义.

参考文献:

[1] 金忠青,陈夕庆.用脉冲谱-优化法求解对流扩散方程源项控制反问题[J].河海大学学报,1992,20(2):1~8.
[2] 韩龙喜.一维河道污染源控制反问题及遗传算法解法[J].水科学进展,2001,12(1):39~44.
[3] 金忠青,韩龙喜.平原河网组合单元水质模型[J].水科学进展,1998,9(1):35~40.

Inverse Problem on Boundary Condition and Pollutant Source in Water Quality Model of River Network

HAN Long-xi¹, JIANG Li-hua¹, ZHU Dang-sheng²

(1. College of Water Resources and Environment, Hohai Univ., Nanjing 210098, China;

2. Water Power Planning and Design Institute, Ministry of Water Resources, Nanjing 100011, China)

Abstract From the view point of inverse problems, the integrated element method is introduced to solve the sparse matrixes of water quality characteristics for river network regions. The inverse problem without any constraint condition on the boundary concentration of pollutants and pollutant source is proposed and a related solving method of optimal control is presented. The method can help avoid the trial and error process and indeterminacy of the conventional method, and the accuracy can be improved.

Key words river network region; integrated element method; water quality boundary condition; pollutant source; inverse problem