

近似拟合法确定离散系数的适用性和选点策略

李骏 黄平 李毅能 周翠娟 李泉

(中山大学环境科学与工程学院 广东 广州 510275)

摘要 通过随机数学试验的设计和运行,对近似拟合法的适用范围和选点策略进行探讨。试验结果表明:取 C^* (质量浓度与时间的乘积)最大的点作为 t_2 ,并取两边最接近的 2 点(最好等距)为 t_1 和 t_3 是一种较好的取点策略;计算出 $D_L, t_{\max}, u$ 后,利用 S 值(顶端曲率相反数的自然对数), d (t_1, t_2, t_3 时差)和 t_2' (t_2 与 $t_{\max}$ 时差)进行检验,可以判断计算结果的可靠性。

关键词 纵向离散系数;近似拟合法;数学试验;水质参数;示踪试验

中图分类号:TV13 文献标识码:A 文章编号:1006-7647(2008)05-0010-03

Applicability of approximate fitting method in estimation of longitudinal diffusivity coefficient//LI Jun-min, HUANG Ping, LI Yi-neng, ZHOU Cui-juan, LI Quan (School of Environmental Science and Engineering, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract : The approximate fitting method is an effective and simple approach to estimating the longitudinal diffusivity coefficient of rivers. However, its application is restricted due to complicated natural river environments. A stochastic mathematical experiment is performed to discuss the application range of the approximate fitting method and its point-selection strategy. The experiment results show that the point-selection strategy that selects the point possessing the maximum value of C^* (the product of mass concentration and time) t_2 and selects the two nearest points t_1 and t_3 (keeping equidistance) is quite good. After calculating the values of $D_L, t_{\max}$ and u , the calculation results can be verified with S (natural logarithm of opposite number of peak curvature), d (interval between t_1, t_2, t_3) and t_2' (interval between t_2 and $t_{\max}$).

Key words : longitudinal dispersion coefficient; approximate fitting method; mathematical experiment; water quality parameter; tracer test

河流纵向离散系数是反映河流纵向混合特性的重要参数,其值的确定是建立水质模型的基础,其准确性直接影响到模型预测的精度。目前计算纵向离散系数的方法主要有理论公式法^[1-2]、经验公式法^[3-4]和示踪试验法^[5-8]。示踪试验法是这 3 类方法中最直接、可靠的方法,其结果能更真实地反映河流扩散过程的综合特性^[9]。郭建青等^[8]从 Singh^[10]的研究中得到启示,提出了抛物方程近似拟合法。该方法对试验数据组数要求不高,计算简便,但由于天然河流的环境条件复杂多变,该方法无可避免地受到限制。因此,进一步的研究应是确定这种方法的适用范围和选点策略。笔者利用随机数学试验,探讨了近似拟合法的适用性及其在应用中应该注意的问题。

1 随机数学试验

1.1 近似拟合法基本原理

近似拟合法确定纵向离散系数的基础是保守物质瞬时排放的一维动态模型:

$$C = \frac{W}{A \sqrt{4\pi D_L t}} \exp \left[-\frac{(x - ut)^2}{4D_L t} \right] \quad (1)$$

式中: C 为测量点的示踪剂质量浓度,mg/L; W 为瞬时投入示踪剂质量,g; A 为河道横断面面积,m²; D_L 为河流纵向扩散系数,m²/s; t 为测量时间,s; x 为测量点到示踪剂投放点的距离,m; u 为河流平均流速,m/s。

将式(1)左右两边乘以 $t^{0.5}$,令 $C^* = Ct^{0.5}$,则

$$C^* = \frac{W}{A \sqrt{4\pi D_L}} \exp \left[-\frac{(x - ut)^2}{4D_L t} \right] \quad (2)$$

当 $t = t_{\max} = \frac{x}{u}$ 时,式(2)有最大值:

$$C_{\max}^* = \frac{W}{A\sqrt{4\pi D_L}} \quad (3)$$

式(3)可转化为

$$D_L = \frac{W^2}{4\pi A^2} C_{\max}^{*-2} \quad (4)$$

$$\text{令 } C^* = at^2 + bt + c \quad (a < 0, b^2 - 4ac > 0) \quad (5)$$

则

$$\begin{cases} a = \frac{\frac{C_1^* - C_2^*}{t_1 - t_2} - \frac{C_1^* - C_3^*}{t_1 - t_3}}{t_2 - t_3} \\ b = \frac{C_1^* - C_2^* - (t_1^2 - t_2^2)a}{t_1 - t_2} \\ c = C_1^* - at_1^2 - bt_1 \end{cases} \quad (6)$$

$$C_{\max}^* = c - \frac{b^2}{4a} \quad (7)$$

$$t_{\max} = -\frac{b}{2a} \quad (8)$$

将式(2)曲线峰部用式(5)(抛物线)峰部代替,利用3组(t_i, C_i^*)和式(6)拟合抛物线峰部,则据式(7)(式(8))可得到 $C_{\max}^*$ 和 $t_{\max}$,从而求得 u 和 D_L 。

1.2 试验基本思路

本数学试验的目的在于解答2个问题:①在怎样的天然条件下,如何选取(t_1, C_1^*)(t_2, C_2^*)(t_3, C_3^*),使得抛物线峰部能较好地拟合 $C^* \sim t$ 曲线峰部;②在①的基础上如何判断计算结果的可信性。对问题①,笔者采用抛物线和 $C^* \sim t$ 曲线在峰部的相关系数 r 进行评判;对问题②,采用 $D_L, t_{\max}, u$ 的相对误差 E_D, E_t, E_u 进行评判。理论上,将计算 r, E_D, E_t, E_u 等方程联立即可得出 r, E_D 和 $W, A, x, D_L, u, t_1, t_2, t_3$ 的关系,但实际求得关系式非常复杂。为此,笔者将上述参数分为天然参数(W, A, x, D_L, u)和人工参数(t_1, t_2, t_3),在一定范围内随机产生大量(W, A, x, D_L, u)组合,并用不同的(t_1, t_2, t_3)求解相关系数和相对误差。初步试验结果显示, r, E_D, E_t, E_u 和 $C^* \sim t$ 曲线的曲率有显著关系,据此,用 $C^* \sim t$ 曲线顶端曲率相反数的自然对数作为综合指标 S 综合描述随机产生的天然参数(W, A, x, D_L, u)。

$C^* \sim t$ 顶端曲率为

$$q = \left. \frac{d^2 C^*}{dt^2} \right|_{t=\frac{x}{u}} = -\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{Wu^3}{AD_L x} \quad (9)$$

$$\text{则 } S = \ln(-q) = \ln\left(\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \frac{Wu^3}{AD_L x}\right) \quad (10)$$

1.3 试验步骤

a. 确定参数范围。根据相关研究^[2, 11-15]确定

$W/A, x, D_L, u$ 的范围分别为 $0.01 \sim 1000 \text{ kg/m}^2, 100 \sim 10000 \text{ m}, 0.1 \sim 1000 \text{ m}^2/\text{s}, 0.05 \sim 2 \text{ m/s}$ 。

b. 中心定点等距试验。首先,在参数范围内随机产生 10^4 组 $W/A, x, D_L$ 和 u (计算 S 值),生成 $C^* \sim t$ 曲线;其次,将 t_2 设定在 $C^* \sim t$ 曲线最高点,令 $t_1 = t_2 - d_t, t_3 = t_2 + d_t$,连续选取 $d_t = 1, 2, \dots, 60 \text{ min}$,利用(t_1, C_1^*)(t_2, C_2^*)(t_3, C_3^*)和式(6)拟合抛物线方程,最后,计算各组相关系数 r 。

c. 中心定点不等距试验。首先,在参数范围内随机产生 10^4 组 $W/A, x, D_L$ 和 u ;其次,将 t_2 定在最高点,随机产生 50 组 t_1 和 t_3 ,设 $\Delta d_t = (t_3 - t_2) - (t_2 - t_1)$,用(t_1, C_1^*)(t_2, C_2^*)(t_3, C_3^*)拟合抛物线方程,最后,计算所有组别的 r, E_D, E_t 和 E_u 。

d. 中心偏移试验。首先,确定 $d_t = 5 \text{ min}$;其次,在参数范围内随机产生 10^4 组 $W/A, x, D_L$ 和 u ;再次,连续选取 t_2 与中心点偏差 $t_2' = -30, -29, \dots, 0, \dots, 29, 30 \text{ min}$,用(t_1, C_1^*)(t_2, C_2^*)(t_3, C_3^*)拟合抛物线方程,最后,计算各组 r, E_D, E_t 和 E_u 。分别取 $d_t = 10 \text{ min}, 15 \text{ min}, 20 \text{ min}, 25 \text{ min}, 30 \text{ min}$ 重复上述操作。

1.4 图像处理

a. 中心定点等距试验。首先,取 S 为纵坐标, d_t 为横坐标, r 为函数值,将 10^4 组试验结果分别投影到坐标上;其次,过滤重复(S, d_t 和 r 均相等)的数据,利用克里金法^[16]对整个 $S \sim d_t$ 平面的 r 值进行插值,得到 r 的等值线图,最后,描出保证 $r > 0.9$ 的包络线。

b. 中心定点不等距试验。用上述方法生成 $S \sim \Delta d_t$ 平面的 r, E_D, E_t, E_u 等值线,并描出保证 $r > 0.9$ 、相对误差大于 10% 的包络线。

c. 中心偏移试验。首先,对 $d_t = 5, 10, 15, 20, 25, 30 \text{ min}$ 的结果,分别利用上述方法得到 $S \sim t_2'$ 平面的 r 等值线图;其次,将 6 幅 r 等值线图覆盖在一起,描出保证 $r > 0.9$ 的包络线;最后,对 E_D, E_t, E_u 的结果重复上述操作,得到相应等值线图,并描出保证相对误差大于 10% 的包络线。

2 试验结果

2.1 现象描述

a. 中心定点等距试验。如图 1 所示,随着 S 值或 d_t 的增加, r 在总体上呈递减趋势,图中粗实线为 $r > 0.9$ 包络线,包络线以下的区域理论上必有 $r > 0.9$ 。由图 1 可见:当 $S < -10$ 时,拟合效果较好;当 $S > -10$ 时,为保证近似效果, d_t 应选取较小的值。

b. 中心定点不等距试验。如图 2 所示,总体上

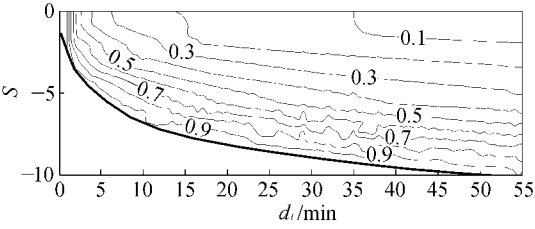


图1 中心等距取点 r 等值线

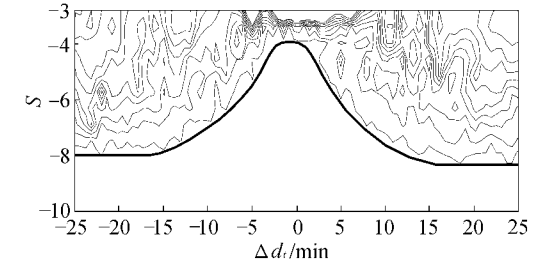


图2 中心不等距取点 E_D 等值线 (粗实线为 $E_D < 10\%$ 包络线) 说, 等距选取 t_1, t_2, t_3 ($\Delta d_t = 0$) 时误差较小; 当 $S < -8$ 时取点距离对计算结果的误差影响不大, 但当 $S > -8$ 时这种影响变得明显。可见, 等距取点至少是一种不差的做法。

c. 中心偏移试验。 r, E_D, E_t, E_u 等值线图未列出, 其特点为: 随着 $|t_2'|$ 和 S 值的递增, 拟合度总体上呈下降趋势。各等值线图叠加后, 包络范围如图3所示。总体上, 当 t_2 的取值接近中心点时拟合效果较好, 计算结果的相对误差也较小。当 $S < -19$ 时, 即使 t_2 偏离中心点较远, 依然能取得较好的拟合效果; 当 $S > -19$ 时, t_2 偏离中心不宜超过15 min; 当 $S > -10$ 时, t_2 偏离中心不宜超过5 min。

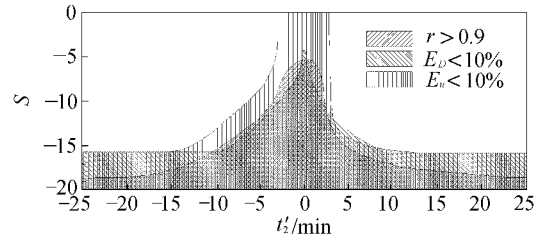


图3 保证 $r > 0.9, E_D < 10\%, E_u < 10\%$ 的区域

2.2 主要结论

a. 应用近似拟合法求解纵向离散系数, 应选取 C^* 最大的点作为 t_2 , 并取两边最接近的2点(最好等距)为 t_1 和 t_3 。

b. 将计算得到的 D_L 和 u 代入式(10), 如点 (d_t, S) 位于图1包络线以下, 则认为抛物线对 $C^* \sim t$ 曲线在峰部的近似拟合是有效的。

c. 计算 $t_2' = t_{\max} - t_2$, 如 (t_2', S) 位于图3阴影面积以内, 则认为结果是较理想的。

3 讨论

本文的结论与实际案例是相符的。利用近似拟

合法处理嘉陵江支流东河^[16]、闽江干流富屯溪洋口段^[17-18]和岷江^[19]的数据, 得到的结果与原文相比, 差异为1.5%、2.1%和6.4%; 用计算的 S 值检验图1和图3, 结果表明嘉陵江和岷江案例的 S 值均小于-17, 闽江案例虽然 S 值为-14, 但由于 d_t 只有5 min, 因此3个案例的 (d_t, S) (t_2', S) 分别都能满足图1和图3。

本文的结论对判断拟合效果的好坏是有效的。举数字算例说明如下: 已知1号、2号2条长直河道的 D_L 真值分别为 $29.6 \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $56.7 \text{ m}^2/\text{s}$, 在 $x = 0$ 处瞬时投加保守示踪剂, W/A 分别为 $115 \text{ kg}/\text{m}^2$ 和 $29 \text{ kg}/\text{m}^2$, 在 x 分别为2043 m和1774 m处测得示踪剂质量浓度如表1所示。利用近似拟合法求得 D_L 分别为 $33.01 \text{ m}^2/\text{s}$ 和 $67.39 \text{ m}^2/\text{s}$, S 分别为-7.16和-9.89, $t_{\max}$ 分别为23 min和26 min, t_2' 分别为4 min和3 min。1号河道的 (d_t, S) 位于图1的包络线以上, 拟合效果较差; 2号河道的 (d_t, S) 虽然位于图1的包络线以下, 但 (t_2', S) 位于图3的阴影范围以外, 不满足图3。可见, 两例 D_L 相对误差均较大的现象与2.2节中 (d_t, S) (t_2', S) 检验的结论是相吻合的。

表1 算例监测数据

1号河道		2号河道	
t/min	$\rho(C)$ ($\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$)	t/min	$\rho(C)$ ($\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$)
12	0.00	10	0.01
17	15.03	16	4.76
22	151.46	22	24.48
27	85.45	29	22.11
32	10.46	35	9.26
37	0.52	41	2.64
42	0.01	47	0.60

数学试验方法可有效评估近似拟合法的适用范围并制定选择数据的策略。利用简单方程对复杂方程进行近似拟合是一种化繁为简的重要思路, 但有必要利用数学试验评估其适用性并制定选点策略。笔者尝试将该方法推广到其他圆锥曲线方程(圆、椭圆、双曲线), 在某些情况下, 如上述嘉陵江^[16]和岷江^[19], 用椭圆拟合的效果甚至比抛物线更好, 但总的来说, 初步数学试验的结果表明其他圆锥曲线的适用范围均不如抛物线广泛, 主要缘于抛物线峰部曲率具有较好的可变性。

4 结语

a. 利用抛物线近似拟合 $C^* \sim t$ 曲线峰部是确定河流纵向离散系数的有效方法, 但其适用范围是受到限制的。

b. 一般来说, 将 C^* 最大的一点作为 t_2 , 并取两边最接近的2点(最好等距)为 t_1 和 t_3 是一种不差的取点策略。

(下转第20页)

经典热力学理论可知,孤立系统的演变遵循最大熵原理。而根据非平衡态热力学理论可知,开放系统的演变服从最小能耗率原理或最小熵产生原理。流体运动过程中与外界既交换物质又交换能量,为开放系统。所以,流体在运动过程中遵循最小能耗率原理或最小熵产生原理,而不是最大熵原理。

参考文献:

[1] 钱宁,张仁,周志德.河床演变学[M].北京:科学出版社,1987:314-316.

[2] 徐国宾,练继建.河流调整中的熵、熵产生和能耗率的变化[J].水科学进展,2004,15(1):1-5.

[3] 徐国宾.河流动力学中的最小能耗率原理[C]//黄河水利科学研究院.第6届全国泥沙基本理论研究学术讨论会论文集.郑州:黄河水利出版社,2005:476-484.

[4] 侯晖昌.河流动力学基本问题[M].北京:水利出版社,1982:186-228.

[5] YANG C T, SONG C C S. Theory of minimum rate of energy dissipation[J]. Journal of the Hydraulics Division, 1979, 105 (HY7):769-784.

[6] CHANG H H. Minimum stream power and river channel

pattern[J]. Journal of Hydrology, 1979, 41(3/4):303-327.

[7] 王竹溪.热力学[M].2版.北京:高等教育出版社,1960:81-150.

[8] 马本,高尚惠,孙煜.热力学与统计物理学[M].北京:人民教育出版社,1980:1-147.

[9] 龚茂枝.热力学[M].武汉:武汉大学出版社,1998:276-296.

[10] 尼科利斯 G,普里戈京 I.非平衡系统的自组织[M].徐锡申,陈式刚,译.北京:科学出版社,1986:18-50.

[11] 威斯尼夫斯基 S,斯坦尼斯捷夫斯基 B,西马尼克 R.不平衡过程热力学[M].陈军健,殷开泰,李鹤立,译.北京:高等教育出版社,1988:28-33.

[12] 徐国宾,练继建.流体最小熵产生原理与最小能耗率原理(I)[J].水利学报,2003,34(5):35-40.

[13] 徐国宾,练继建.流体最小熵产生原理与最小能耗率原理(II)[J].水利学报,2003,34(6):43-47.

[14] 吴望一.流体力学(上)[M].北京:北京大学出版社,1982:81-199.

[15] 徐文熙,徐文灿.黏性流体力学[M].北京:北京理工大学出版社,1989:21-51.

(收稿日期:2007-09-01 编辑:高建群)

(上接第12页)

c. 计算出 $D_L, t_{\max}, u$ 后,应用 $(d_i, S)(t_2', S)$ 代入图1和图3进行检验,若 (d_i, S) 位于包络线以上且 (t_2', S) 位于阴影范围内,则结果可信。

参考文献:

[1] FISCHER H B, LIST E J, KOHR C Y, et al. Mixing in inland and coastal waters[M]. New York: Academic Press, 1979: 81-147.

[2] 陈永灿,朱德军.梯形断面明渠中纵向离散系数研究[J].水科学进展,2005,16(4):511-517.

[3] MCQUIVEY R S, KEEFER T N. Simple method for predicting dispersion in stream[J]. J Envir Engrg Div, ASCE, 1974, 100(4):997-1011.

[4] 李锦秀,黄真理,吕平毓.三峡库区江段纵向离散系数研究[J].水利学报,2000(8):84-87.

[5] CHATWIN P C. On the interpretation of some longitudinal dispersion experiments[J]. J Fluid Mech, 1971, 48:689-702.

[6] 张娟娟,万伟锋.确定河流纵向离散系数的快速SA法[J].地下水,2005,27(5):396-398.

[7] 郭建青,李彦,王洪胜,等.突然排污时计算河流水质参数的直线解析法[J].水力发电学报,2007,26(4):61-65.

[8] 郭建青,李彦,王洪胜,等.确定河流水质参数的抛物方程近似拟和法[J].水利水电科技进展,2005,25(2):11-13.

[9] 顾莉,华祖林.天然河流纵向离散系数确定方法的研究进展[J].水利水电科技进展,2007,27(2):85-89.

[10] SINGH S K. Estimating dispersion coefficient and porosity from soil-column tests[J]. Journal of Environmental Engineering, 2002, 128(11):1095-1099.

[11] 黄平.水环境数学模型及其应用[M].广州:广州出版社,1996:180-190.

[12] 富国,张永良,李彦武,等.感潮河网水域(广州河段)纵向离散系数的研究[J].环境科学研究,1992,5(2):16-22.

[13] 闵涛,周孝德.河流水质纵向弥散系数反问题的迭代算法[J].水动力学研究与进展,2003,18(5):547-552.

[14] 张文静,梁秀娟.确定河流纵向弥散系数的正态分布图解法[J].吉林大学学报:地球科学版,2004,34(S1):83-86.

[15] ZHANG Ren-duo. Applied geostatistics in environmental science[M]. Beijing: science Press, USA inc, 2004: 27-29.

[16] 屠显章.东河的示踪试验[J].环境科学,1985,6(6):9-16.

[17] 张江山.瞬时源示踪实验确定河流纵向离散系数和横向混合系数的线性回归法[J].环境科学,1991,12(6):40-43,63.

[18] 张江山.示踪实验确定河流纵向离散系数的单纯形加速法[J].环境科学,1994,15(4):66-68.

[19] 龙炳清,赵仕林,罗娅君,等.天然河流纵向离散系数的最优化计算方法及其应用[J].重庆环境科学,2001,32(1):27-28.

(收稿日期:2007-10-11 编辑:高建群)