

• 研究报告 •

MATLAB 在 QUAL - II 水质模型计算中的应用

梁 辉¹, 赵新泉², 田 平³

(1. 中南民族大学计算机学院, 湖北 武汉 430074; 2. 中南财经政法大学信息学院, 湖北 武汉 430064; 3. 湖北省环境监测中心站, 湖北 武汉 430072)

摘 要: 通过实例介绍了 MATLAB 计算机软件具有的运用计算机工具处理综合水质模型各离散数据、绘出采样点位置, 以及处理模型各变量关系图和检验采样数据精确性及计算准确性等功能。对 QUAL - II 水质模型和计算机图形用户界面的设计及计算结果可视化做了介绍。指出运用 MATLAB 计算机软件既可以解决计算复杂且太过专业化的问题, 又可以利用图像表达各量之间的关系。

关键词: MATLAB; QUAL - II 水质模型; 迁移方程; 水量平衡; 水质参数; 可视化

中图分类号: X830.3 文献标识码: A 文章编号: 1006 - 2009(2004)02 - 0010 - 04

Application of MATLAB in QUAL - II Water Quality Model Calculation

LIANG Hui¹, ZHAO Xin-quan², TIAN Yi-ping³

(1. Computer School of Center and South China Nationality University, Wuhan, Hubei 430074, China; 2. Information School of Center and South China Fianciance and Law University, Wuhan, Hubei 430064, China; 3. Hubei Environmental Monitoring Center, Wuhan, Hubei 430072, China)

Abstract: The MATLAB software can treat the dissociation data and draw the sampling sites in comprehensive water quality model. The QUAL - II water quality model and the design of user's interface and calculation result's visualization were introduced. The MATLAB software can resolve the too complicated and professional calculation and to express the relationship among each value with figure.

Key words: MATLAB; QUAL - II water quality model; Transfer formula; Water amount balance; Water quality index; Visualization

目前, 对 QUAL - II 综合水质模型的建立和计算已作了大量工作, 但由于采集到的数据经常是离散的, 不能反映整个或某一段河流的总体情况。另外, 计算过程复杂, 参数很多, 也让大多数专业人员不易看懂。数学软件运算速度极快, 具有很强的计算功能和图像处理功能, 其中 MATLAB 计算机软件甚至可以完成 QUAL - II 综合水质模型中 13 个水质参数模型的软件模拟, 并用图像表达各量之间的关系。

1 QUAL - II 综合水质模型

QUAL - II 综合水质模型的基本方程是平移和弥散质量迁移方程, 它能描述任意水质变量的时间和空间变化情况。在方程中除平移和弥散外, 还

包括由化学、物理和生物作用引起的源和漏。对于任意水质变量 C , 该方程可以写成:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(A_x D_l \frac{\partial C}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial(A_x U_x C)}{A_x \partial x} + \frac{dc}{dt} + \frac{S}{V} \quad [1]$$

式中: C —— 污染物浓度, mg/L;

x —— 河流纵向坐标, m;

A_x —— 河流过水断面面积, m²;

t —— 时间, s;

D_l —— 河流纵向离散系数, m²/s;

收稿日期: 2003 - 08 - 01; 修订日期: 2003 - 12 - 23

基金项目: 湖北省自然科学基金项目(91J96)。

作者简介: 梁 辉(1979 -), 女, 山东临清人, 硕士, 从事信息系统和计算科学的研究。

U_x ——纵向流速, m/s;

S ——外部源与汇, g/s;

V ——计算单位体积, m^3 ;

$\frac{dc}{dt}$ ——组分反应项。

对于水质参数, QUAL -II 模型分别用 11 个不同的偏微分方程表示, 如非降解无机矿物的表达式为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial(A_x D_l \frac{\partial C}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial(A_x U_x C)}{A_x \partial x} + \frac{S_c}{A_x dx}$$

藻类(A)的表达式为:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial(A_x D_l \frac{\partial A}{\partial x})}{A_x \partial x} - \frac{\partial(A_x U_x A)}{A_x \partial x} + \frac{S_A}{A_x dx} + (\mu - \rho - \frac{\sigma}{d})A$$

式中: μ ——局部的藻类生长率;

ρ ——藻类呼吸速率常数;

σ ——藻类沉淀速率常数;

d ——平均水深。

2 计算机实现思想

2.1 图形用户界面的设计^[2]

现代的主流应用程序已经从命令行的交互方式转变为以图形界面为主的交互方式, 因为它能给用户带来操作和控制的方便与灵活性。

2.1.1 图形对象句柄

每个图形对象都有一个数字标示, 称为句柄, 只有获取了图形对象的句柄, 才可以通过函数控制该图形对象, 设置或修改对象的有关属性。图形对象的定义是由一组紧密相关, 形成惟一整体的数据结构或函数的集合表示。由图形命令产生的每一个对象都是图形对象, 计算机屏幕是根对象, 它是所有其他对象的父对象, 而图形窗口是计算机屏幕的子对象。

2.1.2 GUI 设计工具

图形用户界面 (Graph User Interface, GUI) 是由图形对象创建的, 在该界面内用户可以根据界面提示完成整个工程, 而不必去了解工程内部如何工作。在设计图形用户界面的过程中用到的工具有: 属性设置器、控件布置编辑器、网格标尺设置编辑器、菜单编辑器、对象浏览器和 GUI 应用属性设置编辑器等。

2.2 数据处理

2.2.1 多项式曲线拟合^[3]

拟合方法选用了最小二乘法。由于观测数据往往不够准确, 故只要求在给定点 x_i 上的误差 $\delta = f(x_i) - y_i$ 按照某种标准达到最小, 通常采用欧氏范数作为误差量度的标准。

对一组数据进行定阶数的多项式拟合, 如该软件中用的最小二乘法的部分程序。首先识别列表框中被选中的项并取出, 即为用户需要寻找的相互关系的两个变量, 用 5 次多项式对它们进行拟合, 做出图像, 并在图上标注出采集的点^[4]。

```
list_entries= get(handles.listbox1, 'string');
index_selected= get(handles.listbox1, 'value');
if length(index_selected) ~ = 2
    errordlg('you must select two variables', 'Incorrect Selection', 'modal');
else
    x0= list_entries{index_selected(1)};
    [x3, x30]= strtok(x0, ' ');
    y0= list_entries{index_selected(2)};
    [y3, y30]= strtok(y0, ' ');
    a= polyfit(eval(x3), eval(y3), 5);
    y1= 'a(6) + a(5) * x + a(4) * x.^2 + a(3) * x.^3 + a(2) * x.^4 + a(1) * x.^5';
    x= 0:1:10;
    handle1= plot(x, eval(y1), 'b');
    hold on;
    plot(eval(x3), eval(y3), 'r*');
```

2.2.2 数值插值

对给定的 n 个插值节点 x_1, x_2, \dots, x_n 及对应函数值 y_1, y_2, \dots, y_n , 可利用 n 次 Lagrange 插值多项式公式。插值区间内任意 x 的函数值 y 可通过下式求得: 11

$$y(x) = \sum_{k=1}^n y_k \left(\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq k}}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \right)$$

但并非所有满足 Lagrange 插值条件的函数都能收敛, 当使用分段线性插值, 即通过插值点用折线段连结逼近原函数时, 也与计算机绘制图形的基本原理一致。其中自变量要求单调, 但并非连续等距, 该文使用了分段线性插值法。

2.2.3 追赶法^[5]

在二阶常微分方程编边值问题以及 3 次样条插值等问题的求解中, 经常遇到形如 $A_x = f$ 的方

程, 如果 A 为对角占优的三对角矩阵, 可以用追赶法求。将 $Ax = f$ 改写为 $Lux = f$, 与方程组等价:

$$\begin{cases} Ly = f \\ Ux = y \end{cases}$$

追赶法实际上就是将高斯消去法用到求解三对角线方程组上的结果。由于 A 的特殊形式, 使求解的计算公式非常简单, 计算量仅为 $5n - 4$ 次乘除法, 追赶法的数值是稳定的。

2.3 计算结果可视化

图形可视化技术一直是工程计算人员所追求的, 图形的处理和显示也是该软件的一个重要部分。因此, 该文用了二维图形、三维图形和图形处理等方法。

2.3.1 二维图形

在模型方程中, 用户可能需要找到两个变量之间的对应关系, 并用二维图形表示出来。使用 plot 函数绘制基本二维曲线图, 即可通过设置属性值, 改变线条的粗细, 制定或填充标记的颜色或边缘色, 以及标记表面的颜色等。如:

```
x = -pi: pi/10: pi;
y = tan(sin(x)) - sin(tan(x));
plot(x, y, 'rs', 'LineWidth', 2, 'MarkerEdgeColor', 'k', ...
'MarkerFaceColor', 'g', 'MarkerSize', 10);
```

2.3.2 三维图形

可以使用 plot3 函数绘制三维曲线, 如:

```
t = 0: pi/50: 10*pi;
plot3(sin(t), cos(t), t);
若要绘制三维曲面图形, 则:
z = peaks;
surf(z)
```

该文使用了函数 scatter 绘制三维散点图, 用于标注采集的离散数据点。

2.3.3 图形标注^[6]

2.3.3.1 坐标轴标注

要在图形上标注 x 轴和 y 轴表示的含义, 如在水量平衡图形中, 是以时间为 x 轴。标注坐标轴的函数主要有 title, xlabel 和 ylabel 等。title 函数用于为图形添加标题, 而 xlabel 和 ylabel 则是为 x 轴和 y 轴添加标注。

2.3.3.2 文本标注

对图形进行文本注释需使用函数 text, 调用格式为: text(x , y , 标注文本及控制字符串), 其中

(x , y) 需给出标注文本在图中添加的位置。

3 软件介绍

3.1 运行环境

软件环境: Windows 9X/2000; MATLAB 6.0。

硬件环境: 开发出的应用程序要在 MATLAB 6.0 环境下运行, 故运行应用程序需要硬件环境与 MATLAB 6.0 相同。

3.2 软件功能

3.2.1 运用计算机工具处理综合水质模型的各离散数据

用户把采集到的某一时刻的河流各点污染物的浓度值输入表中, 程序将记录下这些数据, 并在每一组数据之后计算摩阻流速和离散系数, 同时将“下一时刻浓度”的计算柄显示在页面上。输完数据后, 用户可点击“下一时刻各点浓度”按钮, 对这些数据进行拟合计算, 找出它们之间的关系后再用已知的方程计算。另一方面, 在利用已知数据拟合找到关系后, 还可将难以测量的其他数据代入这些方程找出对应量而计算。

3.2.2 绘出采样点位置和模型各变量关系图

在界面上点击“浓度随坐标变化图”, 便可看到在河流中随着测量坐标的变化浓度而变化的一维图, 用图形显示各个函数以及一些变量之间的关系^[7]。用户点击“图像显示”找出相互关系的各变量, 将会看到用户输入的所有数据点, 以及由这些数据点拟合的变量之间的关系图。列表框中显示该模型用的变量, 用户按住 Ctrl 键选择两个变量, 点击“二维图形”即可在界面右方的坐标平面上绘出两个变量的关系图, 并在图上标出用户输入的离散数据点。若要找出 3 个变量之间的关系, 选中 3 个变量, 点击“三维图形”即可得到 3 个变量散点图。

3.2.3 检验采样数据精确性和计算准确性

在图中可以同时绘出变量之间关系曲线, 以及测量到的各离散点和计算出的各离散点值, 从而直观看到测量和计算的精确性。

4 实证

运用 MATLAB 软件对堵河各水文站实测数据中的非降解无机矿物浓度值模型进行计算, 结果见图 1、图 2。



1 MATLAB 软件对污染物浓度值模型的计算

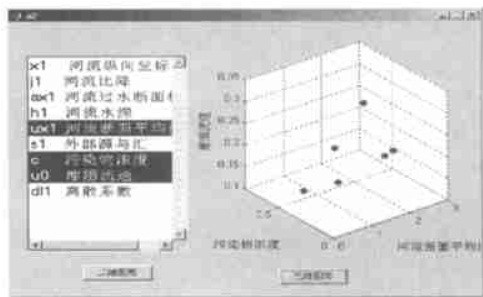


图 4 三维散点

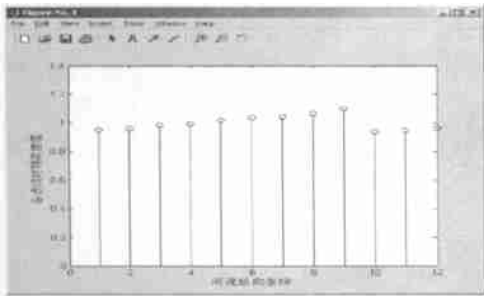
5 结论

QUAL - II 综合水质模型方程以及水环境方面的各种问题都可以用 MATLAB 计算机软件模拟计算。利用计算机运算的高速度和计算机软件的计算功能, 可以解决需要人工计算几天甚至几年的难题。可视化的界面和面向对象性解决了长期以来水环境问题太专业化的局限。

[参考文献]

[1] W. 金士博. 水环境数学模型[M]. 北京: 中国建筑工业出版社, 1986. 70-126.
 [2] 姚 东, 王爱民, 冯 峰, 等. MATLAB 命令大全[M]. 北京: 人民邮电出版社, 2000. 187-252.
 [3] 刘 琼, 宾鸿赞. 用最小二乘法拟合径向剃齿刀齿面[J]. 机械设计与制造工程, 1999, (1).
 [4] 王沫然. MATLAB 6.0 与科学计算[M]. 北京: 电子工业出版社, 2001. 166-191.
 [5] 宫 野. 块三对角矩阵方程的追赶法及其应用[J]. 大连理工大学学报, 1997, (4).
 [6] 许 波, 刘 征. MATLAB 工程数学应用[M]. 北京: 清华大学出版社, 2000. 106-330.
 [7] 郭汉伟. 通信系统的可视化仿真[J]. 数字通信, 1999, (3).

本栏目责任编辑 张启萍



2 各点某时刻浓度值与测量位置之间的关系

图 1 显示了软件记录下各组输入值和计算出的各点摩阻流速、离散系数和下一时刻各点浓度值。

图 2 显示了河流各点处的非降解无机矿物浓度值与测量位置之间的关系。

另外, 用二维曲线图和三维散点图也可以直观表示各变量之间的关系。见图 3、图 4。

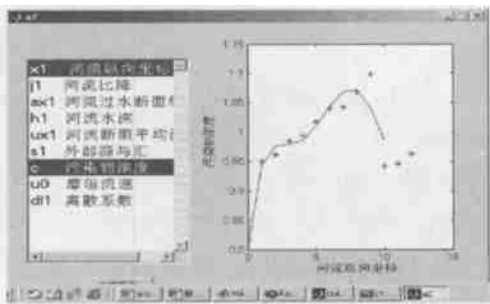


图 3 二维曲线

• 简讯 •

大连市环境监测中心站首台水质恒温采样车投入使用

2003 年底, 大连市环境监测中心站将 15 座的全顺牌汽车改装成一台专业水质恒温采样车。改装后的采样车拥有一个 2 层高、1.3 m³ 大的样品储藏空间, 可在运输途中恒温保存水质样品, 同时还可乘坐 9 名采样人员。该车使用 2 个多月来, 已完成多项水质采样工作, 达到了预期的目标。

摘自中国环境监测总站《环境监测信息简报》2004 年第 2 期