

流域水环境过程综合模拟研究进展

赖锡军

(中国科学院流域地理学重点实验室,中国科学院南京地理与湖泊研究所,南京 210008)

摘要:以流域为单元开展水环境多要素、多尺度过程的综合模拟已成为了自然地理学重要研究方向。水环境过程综合模拟模型可定量解析流域系统水环境变化,是流域水环境研究与管理的重要工具。论文围绕流域水环境过程模拟的发展历程和最新进展,梳理总结了流域非点源污染过程和河湖等受纳水体水环境过程模拟的理论方法和模型软件;面向模拟不确定性问题讨论了模型选择、开发与集成、率定验证等流域水环境过程综合模拟建模的关键环节;结合最新的研究进展及相关学科新方法新技术的发展,建议后续研究关注流域自然和人文多过程综合集成模拟(包括流域系统人与水环境耦合模拟、多过程综合集成模拟)以及新方法新技术应用(包括数据同化理论方法创新与应用、高性能计算技术和人工智能技术)。

关键词:流域模拟;数值模型;非点源污染;水质

流域是以水循环为基础的地表过程相对独立的自然地理单元。随着涉水问题研究和认识的深入,以流域为单元开展地表多要素、多尺度过程的综合集成研究已成为当前自然地理学的一个重要发展方向(程国栋等, 2014; 傅伯杰, 2018)。当前,在人类活动和气候变化的影响下,中国河湖水环境问题突出,这些水问题的根源多来自流域综合作用结果。因此,从流域整体着手,应对水环境问题有着现实需求,且在国内外大量的水环境管理实践中被证明是最为合理有效的途径(Whittemore et al, 2000)。

流域水环境过程综合了水循环及生物地球化学循环等自然过程,包括物理、化学和生物各要素的相互作用,极为复杂。对其的准确认知是流域水环境管理的基础(Rode et al, 2010)。模型是诊断和预测水环境问题的重要手段。流域水环境模型类型众多。可分为数据驱动模型和机理过程模型。关于这些类型模型原理、功能及其应用范围等介绍有大量的综述性中英文文献(夏军等, 2012),本论文不再赘述。基于流域水环境过程机理构建的流域

水环境综合数学模型可用于揭示流域水环境关键过程机理、预测水环境过程演变、诊断水环境安全问题、评估治理或管理措施的影响和效益,以及辅助水环境管理决策等(Arhonditsis et al, 2006)。当前,其已被广泛应用于面向流域水环境系统的科学研究、工程规划和管理决策等方面。美国清洁水计划和欧盟水框架指令的实施实践表明(Chapra, 2003; Volk et al, 2009),流域水环境综合数学模型已成为流域水环境管理不可或缺的手段,健全模型是成功实现流域水环境管理的重要保障。

本文围绕流域水环境综合数学模型的发展历程和最新研究进展,综述流域水环境过程模拟采用的理论方法及主流模型,讨论流域水环境综合模型建模过程,并结合最新进展提出流域水环境过程综合模拟研究值得关注的方向。

1 理论方法与模型

流域作为一个复杂的自然地理系统,包含坡面

收稿日期:2019-03-26;修订日期:2019-06-28。

基金项目:国家水体污染控制与治理科技重大专项(2017ZX07603);中国科学院“一三五”部署项目(NIGLAS2018GH02)。

[Foundation: Major Science and Technology Program for Water Pollution Control and Treatment, No. 2017ZX07603; Project of "135" Program of Chinese Academy of Sciences, No. NIGLAS2018GH02.]

作者简介:赖锡军(1977—),男,浙江遂昌人,研究员,博士,从事环境水力学研究。E-mail: xjlai@niglas.ac.cn

引用格式:赖锡军. 2019. 流域水环境过程综合模拟研究进展 [J]. 地理科学进展, 38(8): 1123-1135. [Lai X J. 2019. A review of integrated water quality modeling for a watershed. Progress in Geography, 38(8): 1123-1135.] DOI: 10.18306/dlkxjz.2019.08.002

林草地、农田、城镇、河流、湖泊水库等多样化的景观类型,其内的水循环和营养物质迁移过程复杂多变。水循环是流域水环境过程的基础过程,其演变从根本上制约着水环境过程的变化(王浩等, 2010)。水分运动特征决定着流域内营养物质的迁移和转化过程,流域不同地理单元上的水分运动过程机理机制大相径庭。为此,根据流域各地理要素内水分运动特点,将流域过程模拟划分为坡面的非点源污染过程与河流和湖泊等接纳水体的水环境过程模拟来分别论述其采用的理论与方法。对于工业及城镇生活污水等集中排放产生的点源污染,因其排放较为稳定,入河过程较为清晰,可直接根据污染负荷监测成果纳入到水环境过程模拟。

1.1 非点源污染模拟

非点源污染模拟主要指流域坡面水环境过程的模拟。这里限定于流域陆面污染物质随着降雨径流产生、迁移及转化过程。通过模拟坡面的水环境过程可提供流域非点源污染负荷各个阶段的定量成果。该模拟主要涉及流域水循环过程及水分运动影响下的土壤侵蚀和污染物质迁移转化过程。

非点源污染模拟最重要也是最基础的方程为质量守恒方程(Blöschl, 2006)。对水和污染物质而言,利用物质平衡原理,某一时段内流域系统内的水量或污染物的变化可以简单地表达为输入该系统的水量或污染物的收入项减去输出系统的水量或污染物的支出项。系统水量或污染物质 S 变化速率 dS/dt 可写成:

$$\frac{dS}{dt} = I - O \quad (1)$$

式中: I 为输入水量或污染物质; O 为输出水量或污染物质。对一个封闭的流域系统内的水循环,水量的收入项 I 一般为降水 P 。水量的支出项则主要由地表径流、地表入渗、水土蒸发和植物蒸腾等方面组成。

流域水文模型是非点源污染模拟的关键基础平台(Singh et al, 2002; 芮孝芳, 2013)。它是以水量平衡原理为基础建立的数学模型,描述包括降水、植被冠层截留、地表洼地滞留、地表径流、蒸发蒸腾、土壤入渗、壤中流和地下径流等流域系统内水分运动过程。以水文模型为基础,耦合泥沙和营养盐等物质迁移转化过程的数学描述,则形成更为综合的流域水文水质模型,也即非点源污染模型。流域水文模拟兴起于20世纪50年代中后期。自60年

代开始,随着对产流过程与机制的深入认识以及电子计算机技术的发展进步,流域水文模型进入了蓬勃发展的黄金期(Singh et al, 2002; Todini, 2007)。诸多具有物理机制的概念性模型率先得以研制,形成了不同过程与机理的流域水文模型。早期的代表性概念性模型有Stanford模型(Crawford et al, 1966)以及中国的新安江模型(赵人俊, 1984)等。80年代中后期开始,具有物理基础的分布式水文模型得到关注,得益于空间信息科学和计算机技术的快速发展,流域分布式水文模型得以快速发展并在实践中应用(吴险峰等, 2002; Martin et al, 2005)。

由于水环境问题的日益凸显,为了控制流域污染,改善水体环境,对流域面上污染物质产生、迁移转化与输出过程的科学定量分析成为了现实的需求。流域泥沙、氮磷营养和其他水质组分的模拟的研究和应用紧跟着流域水文模型的研究步伐,在20世纪70年代后期开始也逐步走上快速发展期(Borah et al, 2003)。以美国为例,美国环境保护署(EPA)资助了农业径流管理(ARM)和非点源污染(NPS)模型的开发,用于农业、城市和其它用地类型的污染负荷计算(Donigian et al, 1976; Imhoff et al, 2005)。由于流域集成模拟对解决复杂水资源问题的需求,20世纪70年代后期,美国EPA选择Stanford模型作为流域水文模型,耦合水质各组分的产生、迁移和转化过程,实现并扩展了ARM、NPS非点源污染负荷计算功能,形成了可连续模拟流域水循环及其关联水质组分在透水面、城镇不透水面和小型河湖水体的迁移转化过程的流域水文水质模型——HSPF,第一个公开发布版本(5.0)于1980年正式推出,至今仍在持续发展应用(Bicknell et al, 2001)。

早期非点源模型多为集总式的流域模型。这些模型难以反映流域空间异质性对水环境过程的巨大影响。然而,随着社会的发展,流域水环境管理决策对流域模拟分析能力提出了更高的要求,既要有高时间分辨率的连续模拟,也要有高空间分辨率的流域细节刻画,还需对过程有足够准确的认识。这些要求,驱使模型由集总式模型逐步向半分布式和分布式模型演化;除流域空间离散方式的细化之外,对水环境各关键过程的模拟也更为细致。在现代计算机和信息技术的支撑下,诸多新的更为精细的模型不断推出。具有指标意义的是20世纪90年代前后研发形成的连续分布式水文系统模型

MIKE SHE模型,它可综合模拟对流-弥散运移、吸附、生物降解、地球化学过程和大孔隙流问题以及大多数水文、水资源和污染物运移的一般应用(Graham et al, 2005)。

根据最新的文献调研,在流域非点源污染模拟计算应用广泛且较为代表性的模型有SWAT、HSPF、INCA、AnnAGNPS、HYPER、SWMM、MIKE SHE等,关于各个模型的原理、结构功能、模拟指标和适用范围等的比较可参加相关的综述研究(Borah et al, 2003; Borah et al, 2004; Yang et al, 2010; 夏军等, 2012; Fu et al, 2019)。其中,诞生于20世纪90年代初SWAT模型(Arnold et al, 1998)因其开源、功能相对完善且更新快等特点,成为了当前农业面源污染应用和再开发的热点模型(Fu et al, 2019)。美国EPA推出的暴雨洪水管理模型(Storm Water Management Model, SWMM)适合城市降雨径流模拟,可相对精细量化城市化小区和流域内的非点源污染输移过程,被广泛应用于城市雨洪管理和海绵城市设计(Zhu et al, 2019)。

1.2 河湖水环境过程模拟

污染物质从坡面汇集进入河道或湖泊等水体后,随着水流运动迁移和降解,最终流出流域系统。该过程主要包含了水质组分的水动力输运过程、水质组分间的动力反应过程(如氮、磷营养物质的生物地球化学循环过程)以及与水系统外部的交换过程。其模拟主要基于由物质平衡原理导出的溶质对流-扩散方程,描述该过程的微分方程可表达式为:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial C_i}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(E_{ij} \frac{\partial C_i}{\partial x_j} \right) = S_{Ci} + S_{Oi} \quad (2)$$

式中: C_i 为某水质组分*i*的浓度(mg/L); t 为时间(s); u_j 为*j*方向的流速(m/s), $j=1, 2, 3$ 分别对应笛卡尔坐标系的*x, y, z*方向坐标; E_{ij} 为水质组分*i*在水体中扩散系数(m²/s); S_{Ci} 为水质组分*i*的衰减项; S_{Oi} 为水质组分*i*的外部源汇项[g/(m³·s)]。该方程等式左边为水力输运过程,第一项表示水质随时间的变化速率,第二项表示对流输运引起的水质变化率,第三项为扩散输运引起的水质变化。等式右边第一项为水体水质组分动力反应引起的变化,第二项为其他如水汽、水土界面交换等引起的外部输入或系统输出。

对河流、湖泊和水库等接纳水体水环境过程模拟的理论方法和模型构建,主要是围绕着水动力输运、动力反应(转化降解)两方面展开的。

1.2.1 水动力输运过程

水动力输运过程包括对流、扩散(离散)过程,是河湖水环境过程模拟的基本过程。因河湖水动力特征的差异,可采用一、二、三维来建模(汪德燿, 2011)。一般地,因河道的宽度远小于长度尺度,可将河道内的水质过程看成是沿着河道长度方向的一维水动力输运过程。对于湖泊和水库等横向和垂向环境要素变化与纵向相比处于同一量级的水体,或者要研究河道近区水环境质量的变化的案例,则需要采用空间为二维或三维的模型。

水动力输运过程模拟重点和难点是水动力参数的计算。对于静态的恒定水流条件,河道内的流速、水深和过水断面面积等参数可通过采用简化的水力学公式计算。但是,对于处于流域中下游的平原地区河流,其水动力条件在河流的相互顶托作用及潮汐等影响下变幻不定。这就需要采用非恒定水流运动方程组(圣维南方程组)建立河网一维水动力计算的数值模型来模拟。对于湖泊水库等水体,则可以采用平面二维、立面二维和三维模型模拟。水动力学模型自20世纪60年代起至90年代,得到了快速的发展,高精度的数值离散方法和高效计算技术得到飞速发展,为水质的高精度高效模拟奠定了基础(Toro et al, 2007; Simões, 2011)。

1.2.2 水质组分动力反应关系

水质组分动力反应过程为不同水质状态变量之间的相互作用。不同水质模型因其面向的目标不同,所考虑水质组分间的动力反应关系复杂程度也不同。对不发生降解反应的保守型水质组分,溶质输运方程[式(2)]动力反应项为0。对于仅和自身含量变化相关的非保守型水质组分,也可基于前述方程,并增加动力反应项的源项即可做出预测。对于近似满足一阶反应的水质组成,其反应源项可表示成:

$$S_{Ci} = \frac{dC_i}{dt} = -K_i C_i \quad (3)$$

式中: K_i 为水质组分*i*的一阶降解系数。

自然环境水体的水环境过程涉及物理、化学和生物过程。仅采用上述简化的自身的一阶衰减反应不能描述各个水质组分之间的相互作用过程。需要综合不同的环境要素,动态反应水质组分的变化过程。

溶解氧(DO)是水环境质量的的核心指标之一。它的动态平衡是气象要素、水体动力条件、化

学组分和生物要素综合作用的结果。模拟其变化需要综合考虑水体不同的物理、化学和生物要素与之相互作用的过程。早在1925年,Streeter和Phelps就提出了经典的河流溶解氧平衡模型(Cox, 2003),它也被称为BOD-DO模型或SP模型。该模型通过两个一阶反应方程,描述了水体中有机物耗氧过程和大气复氧过程,成功预测了稳态水体的溶解氧变化。SP模型仅考虑第一阶段的生物化学耗氧,而忽略了硝化耗氧等过程。之后,随着研究的深入,光合作用、泥沙沉积、流速时空变化等对溶解氧影响被逐步纳入到DO平衡模型(O'Connor, 1967)。不断完善的DO平衡模型成为了后来各主流水质模型模拟溶解氧变化过程的基础模块。如在美国EPA开发的通用水质模型WASP的富营养化模块(Ambrose et al, 2009)中,溶解氧平衡考虑了大气复氧、碳的氧化、硝化作用、沉积物耗氧、和浮游植物的生长与光合作用。

氮、磷是河湖水质模拟常见指标。河湖水体中的氮磷循环受生物和非生物要素共同影响,过程复杂。模型通过概化氮、磷生物地球化学循环的主要过程来近似模拟水体中的氮、磷浓度变化。不同的水质模型有不同的概化方式,考虑的过程繁简不同,有关其比较文章可见综述性文献(Ambrose et al, 2009; Sharma et al, 2013)。对于面向河湖水体的主流水质模型,如面向河流稳态计算的QUAL系列模型、通用水质模型WASP等,其考虑的形态和过程基本一致。考虑的形态主要包括氨态氮、硝态(亚硝态)氮、不同类型的有机氮(如浮游植物态氮、浮游动物态氮等)和碎屑类氮。以WASP为例,其富营养化模块中氮循环考虑的状态变量为氨氮、硝酸氮和有机氮。其转化过程包括浮游植物生长吸收氨态氮和硝态氮、浮游植物死亡水解、氨态氮硝化作用、硝态氮的反硝化作用等。磷循环模拟的状态变量为无机磷、有机磷和浮游植物磷。在模拟过程中,无机磷和有机磷都被分解为颗粒态和溶解态。其转化过程包括浮游植物生长吸收可利用磷、浮游植物死亡分解、有机磷的矿化作用(Ambrose et al, 2009)。

为了研究河湖生态系统结构变化对水体环境质量的影响,模型需要进一步精细化,使其能够模拟生物与生物、生物与水质组分间相互作用关系的能力。这类具有详细生物作用过程的模型,常被归类为生态模型(Jorgensen et al, 2011)。

2 流域水环境模型构建

随着对模型机理过程认识的深入、模拟方法的日趋成熟,如何更好地构建科学合理的数学模型,减少流域水环境过程综合模拟的不确定性成为了研究的重要内容(Jakeman et al, 2006; Wellen et al, 2015; Fu et al, 2019)。科学的模型构建方法是沟通科学原理和实践应用的重要桥梁。基于不同的应用目标,诸多学者提出了各自的思考(Arhonditsis et al, 2006; Alexandrov et al, 2011; Blocken et al, 2012)。为了更好地使模型服务于流域水环境管理,美国EPA等机构甚至组织学者专门研究并制定指导流域水环境过程模拟的导则(EPA, 2009),提出建模方法和步骤。下文就模型选择、开发与集成以及率定与验证3个重要环节进行讨论。

2.1 模型选择

2.1.1 模拟目标

根据拟解决的水环境问题确定模拟目标是建模开始的第一步。不同的模拟目标,对应着不同的建模需求。确定模拟目标之后,即可确定研究的对象和范围、环境过程变量、模拟时空尺度及达到的精度水平(Harmel et al, 2018)。

针对不同群体,模拟目标是多样的(Fu et al, 2019)。对从事流域科学研究的群体,主要着眼于揭示流域水环境关键过程、水环境问题的成因和机制分析。对于工程规划人员而言,则重在通过水环境模拟诊断流域的水环境安全问题和评估治理或管理措施的影响及效益,提出水环境改善的流域规划和最佳管理(包括治理工程)措施。对管理决策人员,则着眼于在水环境模拟支撑下流域水环境管理决策和应对预案的部署实施。这些模拟目标可分为2个大类(EPA, 2009):① 诊断和模拟已发生的问题,即评估发生了什么和为什么发生;② 预测预报未来事件,即会发生什么。

2.1.2 状态变量与过程概化

根据拟解决的问题与目标,优先确定模拟的直接变量,并进而确定与之关联且需要联合模拟的状态变量。以前文中所述的河流中DO浓度变化研究为例,模拟的直接变量为DO,生化需氧量(BOD)等与之相互作用的变量需要考虑联合模拟。若所在河流水动力条件受潮汐影响,变化快速,则需要集成水动力模型,模拟水深和流速(流量)等水动力要素的动态变化。

初步选定模拟的状态变量后,即可开始概化实际的水环境过程。对实际过程概化的步骤,也常成为设计概念性模型的步骤。概念模型描述的是系统中最重要行为特征和感兴趣问题的相关过程或对象。它可用框图的形式来表达。在该阶段,根据专家知识,优先纳入对状态变量影响的关键过程;综合对问题的分析,逐步完善影响待分析状态变量的各环境过程。然后通过绘制框图等方式,逐次分析各个过程,确定关键过程及其相联系的过程,清晰地描述模型各个要素及其科学内涵,并尽可能用数学形式来表达。提供有关假定、尺度、反馈机制和动态或静态行为等有关信息。在此过程中,模型研究人员可以综合文献报道、实地调查、相关的模拟项目等来构建概念模型(EPA, 2009)。一般可通过多次迭代(Jakeman et al, 2006)来确定流域水环境模拟的状态变量及相应的过程,完成概念模型(Jorgensen et al, 2011)。

2.1.3 模拟范围与时空尺度

针对模拟目标要求,结合完成的概念模型和所要研究流域系统的自然地理特征,确定选择模型的模拟范围与模拟的时间和空间尺度。研究范围有时候不仅只是关注的目标对象,很多时候可能需要从系统整体的角度去思考。例如,为研究某湖泊的水环境问题,常要将其整个集水域纳入到模拟范围。对于同一模拟对象和范围,目标的不同,模拟的时空尺度可以有不同的选择。例如,当我们想研究某一流域的非点源污染负荷时,时间分辨率可以选择小时、日、月、季或年的尺度。从空间分辨率来看,则可能选取流域总体、子流域、景观甚至网格尺度的污染负荷输出。

2.1.4 概念模型修正

有了概念模型,即可分析模型所需的数据,确定数据采集的方案。这对于研究项目而言,是可行的。但是现实中,往往需要在既有数据基础上建模分析,这就需要有个再权衡的过程。如何权衡模型的复杂性和数据的可获得性。数据数量多寡、质量好坏直接影响到建模的可靠性。一般地,越复杂的模型变量越多,所需要的数据也就越多。因此,在实际建模过程中,还需根据可能获取的数据资料情况,再进一步修正概念模型。

2.2 模型开发与集成

确定了概念模型后,就进入了模型的开发与集成,建立面向具体应用的模型。对于常见的水环境

模拟,可直接选用已有的通用水环境模型软件来建模。可选的模型众多,商业模型有如MIKE系列等成套的流域水环境模型;公用开源模型则广布于各研究机构 and 高效。尤其是美国EPA,提供了不同复杂度的系列模型,且在持续更新完善,得到普遍应用。如用于非点源污染计算的SWAT模型、水体水质计算的WASP和EFDC等。然而,并不是所有水环境问题都可依赖于现有模型。对特定应用,常需要改进模型的过程描述、集成不同类型的模型,或者甚至开发全新的模型来满足模拟需求。

模型开发与集成的重点在于选择好的模型方法。模型的选择,不同的学者有不同的见解,甚至有针锋相对的观点。一些学者(Flynn, 2005; Allen et al, 2011)呼吁建模人员不应该忽略生物过程的行为描述,除非有足够的理由证明这样做是合适的。但是模型敏感性会随着复杂度提高而提高(Snowling et al, 2001; Robson et al, 2008; Paudel et al, 2012)。尽管如此,我们认为一个好的模型要有科学的原理为基础、适中的复杂性、充足的模型支持数据和清晰的模型结构,以保证建立的模型能够准确模拟所要研究或理清的水环境过程。

一般地,具有复杂动力反应过程的模型(如WASP富营养化模块有8个变量)较仅考虑状态变量自身转化的水质模型更为精细,考虑要素更加全面。但是,模拟结果并不意味着具有复杂动力反应过程的模型精度会更高。模型复杂性和不确定性具有经典的马鞍形特征(EPA, 2009)。模型引起的不确定性随着模型复杂度的增加而减少。类似SP模型的发展历程,随着新过程的纳入,DO平衡模型的不确定性逐渐下降。但是,数据导致的不确定性则是随着模型复杂度上升而上升。模型越复杂,考虑的过程越多,涉及的输入数据就越多,因数据缺少导致的不确定性就随之上扬。过程中存在误差最小的一个鞍点,该位置就是模型复杂度和支持数据配合最理想的点。

因此,在模型开发时,要权衡好模型复杂度和可靠性。敏感性分析等方法可帮助修正模型的复杂度。值得注意的是,模型敏感参数不是一成不变的,对于特定的过程,在某一应用中可能是敏感参数,但在其他应用中可能会成为不敏感参数。如对于底泥内源释放强度大的水体而言,水土界面的交换参数对水质模拟结果非常重要,但是对于底泥对水体环境影响很小的水体,这些参数则在该应用中

成为不敏感参数。除了复杂度和数据支持,模型运行花费也是重要的方面,需对采用的模型的效率进行评估。水动力水质同步耦合模拟对三维大尺度的模拟而言,花费巨大,分裂算法可以让水质模型解耦以减少计算量的同时保证模型保证计算精度(Park et al, 1996)。解耦既可以是水动力和输运过程的模拟分解,也可以把输运过程和水质的动力响应过程模拟进行分解。Butsenshon等(2012)综合分析了采用不同分裂方法进行分解模拟的计算误差,发现分裂算法会引入相应的数值计算误差,得加以重视。为了更进一步减少计算量,水动力模块可以和水质模块分离计算,水动力事先算好,作为水质模型的输入(Cerco et al, 2013)。WASP模型采用的就是这种架构(Ambrose et al, 2009),它利用不同的水动力学模型的计算结果作为水动力计算条件,实现非稳态水质的计算。

模型完成开发后,需要对模型进行理论检验。特别是对于新开发的模型,需要采用理论解析解或标准算例(Benchmark)来检验模型代码的准确性。对于已有的经过理论检验的通用模型,则可忽略理论检验这一步骤。对于不同子模块的集成,既要对于子模块做独立检验,也需要对集成后的大模型进行集成检验。

2.3 模型率定与验证

2.3.1 模型可验证性

模型的率定和验证是保证模拟可靠性必不可少的步骤(ASABE, 2017)。关于模型的可验证性一直有争论。最典型的一个反面观点是模型不可能被验证(Verification/Validation),只能被评估(Evaluation)或实证(Confirmation或Corroboration)(Reckhow et al, 1983; Oreskes et al, 1994)。虽然这样的观点并不完全被接受。但在相关生态模型的文献中,也常用模型“评估”或“实证”的用词来代替验证的过程(Jorgensen et al, 2011)。Mitro(2001)认为,在英文文献中不准确地使用Verification、Validation和Calibration 3个术语,导致了这些混淆。清晰界定这些术语内涵,便于我们规范这3个术语的使用。Rykiel(1996)给出的界定较为明确:Verification对应于检验模型数学描述的准确性,可给定解析解或基准算例等来检验模型代码开发的可靠性;Validation对应于验证给定模型应用于实际研究区域时的准确性,即采用率定好的参数模拟得到的状态变量是否与实测过程吻合;Calibration则是通过对模型参

数的估计和调整,以提高模型在实际研究区域模拟精度的过程。本文模型开发一节中的“理论检验”即指Verification;本节“率定”指的是Calibration;“验证”指的是Validation或Confirmation及Corroboration。

2.3.2 参数率定

率定过程也被看作模型参数的估值问题。部分模型参数可直接通过测量得到。但是,多数是难以准确测量的。对于不能直接预先准确测量或估值的参数,则要进行率定。模型率定涉及选用的数据、模拟性能指标、率定方法以及率定流程等。

率定使用数据越完备越好。数据精度的保证是第一位的。此外,数据的时间和空间分辨率也至关重要,需要尽可能与模拟需要相匹配。对于溶解氧等日内变化快速的环境要素,率定采用的监测数据最好能反映这种日内的变化过程。用一个值来代替日平均值作为率定数据,可能会出现谬误。对于大型流域系统的分布式过程模拟,需要有针对性地选择率定数据的空间点位布局,尽可能在各关键断面或点位都有相关的数据,保证模型率定的参数可如实反映系统的空间变化特征。

率定采用的数据通常为实际环境状态变量的观测值,这类观测数据被称为硬约束数据(Hard data)(Arnold et al, 2015)。近年来,为了使过程模拟更可靠,学者提出了软性约束数据(Soft data)(Seibert et al, 2002)的概念,并建议纳入标准的率定环节。Arnold等(2015)将软性约束数据定义为与模拟的各独立过程和平衡有关的信息,如流域非点源污染模拟中径流系数、营养年输出量,氮的反硝化比例等信息。这些信息可能来自论文、研究报告或者现场的调查。尽管它可能会含有很大的不确定性,但是这种软性约束数据的使用可使过程模拟的结果更符合实际的过程。Yen等(2014)利用流域中氮反硝化率、硝氮来源贡献率等文献报道数据作为软性约束数据来率定SWAT模型,发现利用软性约束数据后,虽然模型性能指标(基于硬约束数据)有所下降,但是原来不合理的氮循环过程模拟预测得到了校正。软性约束数据可以看成为关于流域水环境过程的专家知识。如何将这知识性的内容纳入到自动率定环节改善对水环境过程的预测,值得进一步研究。

测度模拟成果与实测间差异的性能指标根据需要进行合理选用。Bennett等(2013)总结了评估模型

性能的各种方法,并给出了模型评估的工作流程。在进行评估时,可选择一种或多种来评估模拟成果与实际的一致性。由于各种测度方法的目标不同,建议选择多个指标来评估模型性能。

对于复杂的过程模型,非线性的动力反应过程参数对状态变量的影响难以直接评估。对这类复杂的模型,可通过敏感性分析方法来识别出影响状态变量的关键过程参数。当然,也可根据专家经验或先验知识来选定敏感参数。然后基于给定的输入和结果数据对选定敏感参数进行重点率定。敏感性分析有许多成熟的技术方法可用,可参见相关研究(Song et al, 2015; Pianosi et al, 2016)。

一旦备好了率定数据,确定了性能指标和拟率定的敏感参数,即可通过人工不断试错方法或者机器自动识别方法进行模型参数的估值。目前,有多种自动率定的工具可帮助模型开发人员加快模型的率定工作。需加以注意的是自动率定过程,最好加入软性约束数据,以避免自动率定工具可能会给出看似拟合得很好,却与实际偏离的情况。

根据需要,模型可利用不同情景条件下的过程经过反复多轮次的率定,校准模型估值。对于一个集成的流域模型,可以从流域降水产流产污、河湖水动力及河道物质运输的顺序依次率定。对不同的过程,可先率定水文、水动力参数,而后再率定水质过程。如果模型模拟湖泊水库的分层流,即模型考虑了水温、盐度等要素和水动力的相互作用,则水动力、水温和盐度等要一起率定。

2.3.3 模型验证

模型率定完成后,准备一组独立于率定的输入数据集,采用率定好的参数模拟不同情景条件下的水环境过程,并采用各指标评估模拟的性能,若满足要求,则通过验证。模型率定和验证的过程可以认为是交互进行的。一般地,先基于1组或多组数据,率定模型的参数,然后采用独立的数据集验证模型。若未通过验证,则调整参数继续率定,直至通过。

2.4 不确定性分析

不确定性分析目的是回答预测有多大不确定性的问题(Saltelli et al, 2019)。流域系统水环境过程复杂,模型作为对该过程的近似数学描述,并不能完全复演系统过程,因而流域水环境过程模拟天生有着很大的不确定性。当模型应用于实际水环境过程模拟,需要对结果进行不确定性分析,以便帮助相关方评估模拟预测结果的可信度,更好地支

持流域水环境管理与决策(Zheng et al, 2014; Rode et al, 2010)。

流域水环境模拟的不确定性主要来源于模型和数据2个方面(EPA, 2009)。模型不确定性包括模型结构和模型参数的不确定性。模型结构主要由于对水环境变化的物理、化学和生物过程认识不完整和数学表达的不完备引起的。流域水环境过程的模型参数多数是不确知的,而且难以直接测量。对于众多的模型参数,通过率定获取。参数估值过程中,由于受到参数间的相关性、参数敏感性、模拟残差独立性等影响,率定获得的优选参数值存在着不确定性。数据可归类为建模所需的输入数据(如降雨数据、DEM数据、土壤类型数据等)和校准模型所需的响应数据(如流量、污染物浓度等观测数据)。

不确定分析方法多样。贝叶斯推断(Jin et al, 2010)是现阶段应用于流域水质模型的一种常用不确定性分析方法,主要由于该方法理论基础较为完善且易与高效的采样方法结合。贝叶斯推断可基于参数的先验信息,结合观测数据作为条件信息,并严格定义反映模型残差的似然函数,即可反演推断参数的后验分布和模拟结果的不确定性区间(Ajami et al, 2007)。作为贝叶斯方法的分支,普适似然不确定估计方法(GLUE)自1992提出(Beven et al, 1992)以来,在流域水质模拟中广为应用(Gong et al, 2011; Hollaway et al, 2018; Xie et al, 2019)。

不确定分析越来越被模拟研究所重视,特别是对于参数数量多、过程复杂的模型,不确定分析显得尤为重要(Wellen et al, 2015)。不确定性因素之间关系错综复杂。减少流域水环境模拟的不确定性需从建模的各个环节入手。对于数据的不确定性,应注意优质数据的选用,并通过数据同化方法等来充分利用遥感、地面定点观测等不同来源数据改善模型的预测精度(Liu et al, 2007)。对模型参数,需探寻高效的寻优算法,并考虑参数时空尺度变异(Jin et al, 2010)。对模型结构,可通过加强机理过程研究完善过程描述来优化或者采用多模型集合的方法来减少模拟误差(Lindenschmidt et al, 2007)。

3 研究发展动向

流域水环境模拟自20世纪七八十年代走入兴盛开始,其理论方法体系和应用逐步完善,模拟预

测能力得到了跨越式的发展。纵观流域水环境模拟发展的历程,可以发现水环境过程模拟越来越注重流域的整体性和系统性。模型逐步从单一过程走向多过程的综合,从单一学科扩展到多学科的交叉,从局部小尺度过渡到流域系统尺度的研究。研究的侧重点也由理论转向实践,解决如何更好地服务流域水环境管理的问题。瞄准未来,流域水环境模拟研究仍应理论和实践并重。一方面,要充分注重过程机理研究,通过多学科交叉从水、土、气、生各要素相互关系的深入研究中完善理论;另一方面,从模型方法和应用角度来看,既要充分吸纳先进的数值计算方法提高模拟数值精度,也要通过模拟实践发现新的问题、完善模型结构、规范化建模过程来减少模拟预测的不确定性(Rode et al, 2010; Harmel et al, 2014)。此外,综合新近水环境模拟的研究文献及相关学科理论方法和技术的发展,笔者认为当前流域水环境模拟研究值得关注以下发展动向。

(1) 流域系统人与水环境耦合模拟研究。流域系统是一个自然和人类复合作用的系统。水循环及其伴生水沙、水环境和水生态过程呈现出显著的自然和人工的二元驱动特征(王浩等, 2010),如何深化自然要素和人文要素作用机理,建立模型预测未来变化是当前面临的挑战(傅伯杰等, 2018)。针对人类引起的水循环变化所带来的挑战,为更好地揭示复合系统内的人-水互馈关系和协同演化过程机制,水文学界将人类活动视为内生变量,提出了新的社会水文学学科,并成为热点研究方向(Sivapalan et al, 2012; Seidl et al, 2017; 田富强等, 2018)。当前社会水文学模拟研究主要聚焦于社会过程和水文过程的动态耦合(Elshafei et al, 2015; Lu et al, 2018),尚没有研究明确地将社会过程与水环境过程进行集成模拟分析。但是,由于人类对水环境过程的影响更甚于水循环过程,开展人与水环境协同演化研究可更好地服务流域水环境综合管理。当前,可借鉴在发展的社会水文学学科的理论方法体系,发展社会过程和水环境过程的耦合模拟框架体系,更好地揭示流域系统内自然和人工耦合过程。

(2) 流域系统多过程综合集成模拟研究。流域河湖水环境问题是综合作用的结果,从整体考虑实施综合治理成为了共识。流域整体的水环境过程综合模拟成为发展的趋势(Thomann, 1998; Parker et al, 2002)。模型综合集成包括多过程的综合和系

统整体的集成模拟。流域水环境过程包括了复杂的物理、化学和生物过程的耦合与互馈。多过程的综合模拟目标旨在使模拟能反映系统内部的复杂动力过程,提高多种胁迫压力作用下模型预测水环境变化的能力,更好地服务流域水环境管理(Mohamoud et al, 2019)。系统整体集成则是针对流域陆面、河流、湖泊等不同水文单元内部水环境过程机制差异大、但又相互作用的特点,寻求科学方法建立整体模拟框架(Rode et al, 2010)。其目标旨在解决流域空间上从源头产生-汇流入河湖-随流迁移转化-系统输出的高精度联动模拟问题,虽然有不同的研究成果,但是流域不同水文单元子模块的耦合研究仍有待深入。

(3) 流域水环境模拟的数据同化理论方法创新与应用。数据同化是指将观测资料有机融合到数学模型动态运行过程中的方法。利用该方法,实现最大限度地利用不同来源的观测资料信息,改进模型预测预报精度的目的(李新, 2013)。其基本概念、基础理论和方法是在大气和海洋科学领域中逐步发展建立起来的,随后在水文学、水力学等学科领域的研究也日趋活跃(Reichle et al, 2008; Lai et al, 2014; Javaheri et al, 2019)。流域水环境模拟参数多,过程复杂,不确定性大。如何减少模型预测预报的不确定性也成为了当前一个主要的挑战。尽管数据同化已在天气预报等领域发挥核心作用,但是对流域水环境过程模拟预测的数据同化研究起步较晚,已有的研究成果(Margvelashvili et al, 2010; Kim et al, 2014)表明,数据同化方法可明显改善水环境过程的模拟精度。可以预期,随着当前水环境管理中对水质实时预警预报要求的逐步提高,特别是未来大数据时代的信息接入,数据同化的方法将会展示出其巨大的应用潜力。结合流域水环境模拟特点,研究高效的数据同化方法是值得关注的一个方向。

(4) 大尺度精细化模拟的高性能计算技术应用。高效模拟计算是水环境管理的基本要求。依赖传统的串行模拟大型流域系统水环境变化,效率低,已远远满足不了精细化管理要求。随着大型流域系统综合管理需求的日益突出,采用并行计算技术提高模型效率成了必然选择(Ambrose et al, 2009)。当前,并行计算技术已从早期的多核多线程并行(OpenMP)和集群并行(MPI)逐渐过渡到CPU和GPU的异构并行计算。基于CPU和GPU异构并

行的高性能计算技术可显著提高模型的计算性能(Lacasta et al, 2015; Liang et al, 2015; Dazzi et al, 2019)。该技术的应用研究,将会极大地提高计算效率,促进基于过程的流域整体水环境模拟以及参数识别优化等技术在复杂大型流域上的应用。

(5) 流域水环境过程模拟与人工智能集成应用。流域水环境过程模拟存在很高的不确定性,特别是对复杂过程,并不能完全保证合理的精度。随着神经网络等人工智能技术的发展,研究人员提出了将过程模型与智能模型有机结合来协同模拟流域系统的水环境变化(Dibike et al, 1999; Chen et al, 2006; 唐洪武等, 2008; García-Alba et al, 2019; Seifi et al, 2019),并取得了明显的成效。但是由于学科的隔阂和人工智能算法对大数据的需求,现阶段过程模型与人工智能相结合的方法还没得到广泛的发展应用。随着人工智能技术的快速发展及数据的日益丰富,流域水环境过程模拟与人工智能集成应用将有望迎来新的发展空间,提升复杂系统内水环境过程的预测精度(Shen, 2018)。

参考文献(References)

- 程国栋,肖洪浪,傅伯杰,等. 2014. 黑河流域生态—水文过程集成研究进展 [J]. 地球科学进展, 29(4): 431-437. [Chen G D, Xiao H L, Fu B J, et al, 2014. Advances in synthetic research on the eco-hydrological process of the Heihe River Basin. *Advances in Earth Sciences*, 29(4): 431-437.]
- 傅伯杰. 2018. 新时代自然地理学发展的思考 [J]. 地理科学进展, 37(1): 1-7. [Fu B J. 2018. Thoughts on the recent development of physical geography. *Progress in Geography*, 37(1): 1-7.]
- 李新. 2013. 陆地表层系统模拟和观测的不确定性及其控制 [J]. 中国科学(地球科学), 43(11): 1735-1742. [Li X. 2014. Characterization, controlling, and reduction of uncertainties in the modeling and observation of land-surface systems. *Science China (Earth Sciences)*, 57(1): 80-87.]
- 芮孝芳. 2013. 水文学原理 [M]. 北京: 高等教育出版社. [Rui X F. 2013. *Principle of hydrology*. Beijing, China: Higher Education Press.]
- 唐洪武,雷燕,顾正华. 2008. 河网水流智能模拟技术及应用 [J]. 水科学进展, 27(2): 232-237. [Tang H W, Lei Y, Gu Z H. 2008. Intelligence simulation technique for rivernet flow and its application. *Advances in Water Science*, 27(2): 232-237.]
- 田富强,程涛,芦由,等. 2018. 社会水文学和城市水文学研究进展 [J]. 地理科学进展, 37(1): 46-56. [Tian F Q, Cheng T, Lu Y, et al. 2018. A review on socio-hydrology and urban hydrology. *Progress in Geography*, 37(1): 46-56.]
- 汪德燿. 计算水力学理论与应用 [M]. 北京: 科学出版社, 2011. [Wang D G. 2011. *Computational hydraulics: The theory and application*. Beijing, China: Science Press.]
- 王浩,严登华,贾仰文,等. 2010. 现代水文水资源学科体系及研究前沿和热点问题 [J]. 水科学进展, 21(4): 479-489. [Wang H, Yan D H, Jia Y W, et al. 2010. Subject system of modern hydrology and water resources and research frontiers and hot issues. *Advances in Water Science*, 21(4): 479-489.]
- 吴险峰,刘昌明. 2002. 流域水文模型研究的若干进展 [J]. 地理科学进展, 21(4): 341-357. [Wu X F, Liu C M. 2002. Progress in watershed hydrological models. *Progress in Geography*, 21(4): 341-357.]
- 夏军,翟晓燕,张永勇. 2012. 水环境非点源污染模型研究进展 [J]. 地理科学进展, 31(7): 941-952. [Xia J, Zhai X Y, Zhang Y Y. 2012. Progress in the research of water environmental nonpoint source pollution models. *Progress in Geography*, 31(7): 941-952.]
- 赵人俊. 1984. 流域水文模拟: 新安江模型与陕北模型 [M]. 北京: 水利电力出版社. [Zhao R J. 1984. *Watershed hydrological modeling: Xin'anjiang Model and Shaanbei Model*. Beijing, China: Water Resources and Electric Power Press.]
- Ajami N K, Duan Q, Sorooshian S. 2007. An integrated hydrologic Bayesian multimodel combination framework: Confronting input, parameter, and model structural uncertainty in hydrologic prediction [J]. *Water Resources Research*, 43. doi: 10.1029/2005WR004745.
- Alexandrov G A, Ames D, Bellocchi G, et al. 2011. Technical assessment and evaluation of environmental models and software: Letter to the editor [J]. *Environmental Modelling & Software*, 26: 328-336. doi: 10.1016/j.envsoft.2010.08.004.
- Allen J I, Polimene L. 2011. Linking physiology to ecology: towards a new generation of plankton models [J]. *Journal of Plankton Research*, 33: 989-997. doi: 10.1093/plankt/fbr032.
- Ambrose J, Wool T A, Barnwell J. 2009. Development of water quality modeling in the United States [J]. *Environmental Engineering Research*, 14: 200-210.
- Ambrose R B, Wool T A. 2009. WASP7 Stream transport model theory and user's guide, supplement to water quality analysis simulation program (WASP) user documentation [R]. EPA/600/R-09/100. Washington, DC, USA: U.S. Environmental Protection Agency.
- Arhonditsis G B, Adams-Vanham B A, Nielsen L, et al. 2006. Evaluation of current state of mechanistic aquatic biogeo-

- chemical modeling: Citation analysis and future perspectives [J]. *Environmental Science and Technology*, 40: 6547-6554.
- Arnold J G, Srinivasan R, Muttiah R S, et al. 1998. Large area hydrologic modeling and assessment part I: Model development [J]. *Journal of the American Water Resources Association*, 34: 73-89.
- Arnold J G, Youssef M A, Yen H, et al. 2015. Hydrological processes and model representation: Impact of soft data on calibration [J]. *Transactions of the ASABE*, 58(6): 1637-1660.
- ASABE. 2017. Guidelines for calibrating, validating, and evaluating hydrologic and water quality (H/WQ) models [R]. The American Society of Agricultural and Biological Engineers. ASABE EP621.
- Bennett N D, Croke B F W, Guariso G, et al. 2013. Characterising performance of environmental models [J]. *Environmental Modelling & Software*, 40: 1-20. doi: 10.1016/j.envsoft.2012.09.011.
- Beven K, Binley A, 1992. The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction [J]. *Hydrological Processes*, 6(3): 279-298.
- Bicknell B R, Imhoff J C, Kittle J L, et al. 2001. Hydrological Simulation Program-Fortran (HSPF): User's manual for release 12 [R]. US Environment Protection Agency, Athens, Ga.
- Blocken B, Gualtieri C. 2012. Ten iterative steps for model development and evaluation applied to computational fluid dynamics for environmental fluid mechanics [J]. *Environmental Modelling & Software*, 33: 1-22. doi: 10.1016/j.envsoft.2012.02.001.
- Blöschl G. 2006. On the Fundamentals of Hydrological Sciences [M]// Anderson M G, McDonnell J J. *Encyclopedia of hydrological sciences*. Wiley. doi: 10.1002/0470848944.hsa001a.
- Borah D K, Bera M. 2003. Watershed-scale hydrologic and nonpoint-source pollution models: Review of mathematical bases [J]. *Transactions of the ASAE*, 46: 1553-1566.
- Borah D K, Bera M. 2004. Watershed-scale hydrologic and nonpoint-source pollution models: Review of applications [J]. *Transactions of the ASAE*, 47: 789-803.
- Butenschon M, Zavatarelli M, Vichi M. 2012. Sensitivity of a marine coupled physical biogeochemical model to time resolution, integration scheme and time splitting method [J]. *Ocean Modelling*, 52-53: 36-53.
- Cerco C F, Noel M R. 2013. Twenty-one-year simulation of Chesapeake Bay water quality using the CE-QUAL-ICM eutrophication model [J]. *Journal of the American Water Resources Association*, 49(5): 1119-1133.
- Chapra S C. 2003. Engineering water quality models and TMDLs [J]. *Journal of Water Resources Planning and Management*, 129(4): 247-256.
- Chen Q, Mynett A E. 2006. Modelling algal blooms in the Dutch coastal waters by integrated numerical and fuzzy cellular automata approaches [J]. *Ecological Modelling*, 199: 73-81. doi: 10.1016/j.ecolmodel.2006.06.014.
- Cox B A. 2003. A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers [J]. *Science of the Total Environment*, 314-316: 335-377. doi: 10.1016/S0048-9697(03)00063-9.
- Crawford N H, Linsle R K. 1966. Digital simulation in hydrology, Stanford watershed model IV, Technical report No. 39 [R]. Stanford, USA: Department of Civil Engineering, Stanford University.
- Dazzi S, Vacondio R, Mignosa P. 2019. Integration of a levee breach erosion model in a GPU-accelerated 2D shallow water equations code [J]. *Water Resources Research*, 55: 682-702. doi: 10.1029/2018WR023826.
- Dibike Y B, Solomatine D, Abbott M B. 1999. On the encapsulation of numerical-hydraulic models in artificial neural network [J]. *Journal of Hydraulic Research*, 37(2): 147-161.
- Donigian A S J, Crawford N H. 1976. Modeling pesticides and nutrients on agricultural lands [R]. EPA-600/3-76-043. U.S. Environmental Protection Agency.
- Elshafei Y, Coletti J Z, Sivapalan M, et al. 2015. A model of the socio-hydrologic dynamics in a semiarid catchment: Isolating feedbacks in the coupled human-hydrology system [J]. *Water Resources Research*, 51(8): 6442-6471.
- EPA. 2009. Guidance on the development, evaluation, and application of environmental models [R]. EPA/100/K-09/003. US Environmental Protection Agency.
- Flynn K J. 2005. Castles built on sand: Dysfunctionality in plankton models and the inadequacy of dialogue between biologists and modellers [J]. *Journal of Plankton Research*, 27(12): 1205-1210. doi: 10.1093/plankt/fbi099.
- Fu B, Merritt W S, Croke B F W, et al. 2019. A review of catchment-scale water quality and erosion models and a synthesis of future prospects [J]. *Environmental Modelling & Software*, 114: 75-97.
- García-Alba J, Bárcena J F, Ugarteburu C, García A. 2019. Artificial neural networks as emulators of process-based models to analyse bathing water quality in estuaries [J]. *Water Research*, 150: 283-295. doi: 10.1016/j.watres.2018.11.063.
- Gong Y, Shen Z, Hong Q, Liu R, Liao Q. 2011. Parameter uncertainty analysis in watershed total phosphorus modeling using

- the GLUE methodology [J]. *Agriculture, Ecosystems & Environment*, 142: 246-255. doi: 10.1016/j.agee.2011.05.015.
- Graham D N, Butts M B. 2005. Flexible, integrated watershed modelling with MIKE SHE [M]// Singh V P, Frevert D K. *Watershed Models*. Boca Raton, USA: CRC Press: 245-272.
- Harmel R D, Baffaut C, Douglas-Mankin K. 2018. Review and Development of ASABE Engineering Practice 621: "Guidelines for Calibrating, Validating, and Evaluating Hydrologic and Water Quality Models" [J]. *Transactions of the ASABE*, 61: 1393-1401. doi: 10.13031/trans.12806.
- Harmel R D, Smith P K, Migliaccio K W, et al. 2014. Evaluating, interpreting, and communicating performance of hydrologic/water quality models considering intended use: A review and recommendations [J]. *Environmental Modelling & Software*, 57: 40-51. doi: 10.1016/j.envsoft.2014.02.013.
- Hollaway M J, Beven K J, Benskin C M H, et al. 2018. The challenges of modelling phosphorus in a headwater catchment: Applying a 'limits of acceptability' uncertainty framework to a water quality model [J]. *Journal of Hydrology*, 558: 607-624. doi: 10.1016/j.jhydrol.2018.01.063.
- Imhoff J, Donigan A. 2005. History and evolution of watershed modeling derived from the stanford watershed model [M]// Singh V P, Frevert D K. *Watershed models*. Boca Raton, USA: CRC Press: 2-45. doi: 10.1201/9781420037432.ch2.
- Jakeman A J, Letcher R A, Norton J P. 2006. Ten iterative steps in development and evaluation of environmental models [J]. *Environmental Modelling & Software*, 21: 602-614. doi: 10.1016/j.envsoft.2006.01.004.
- Javaheri A, Babbar-Sebens M, Miller R N, et al. 2019. An adaptive ensemble Kalman filter for assimilation of multi-sensor, multi-modal water temperature observations into hydrodynamic model of shallow rivers [J]. *Journal of Hydrology*, 572: 682-691. doi: 10.1016/j.jhydrol.2019.03.036.
- Jin X, Xu C-Y, Zhang Q, et al. 2010. Parameter and modeling uncertainty simulated by GLUE and a formal Bayesian method for a conceptual hydrological model [J]. *Journal of Hydrology*, 383: 147-155. doi:10.1016/j.jhydrol.2009.12.028.
- Jørgensen S E, Fath B D. 2011. *Fundamentals of ecological modelling: Applications in environmental management and research* [M]. Amsterdam, Netherland: Elsevier.
- Kim S, Seo D-J, Riazi H, et al. 2014. Improving water quality forecasting via data assimilation-Application of maximum likelihood ensemble filter to HSPF [J]. *Journal of Hydrology*, 519: 2797-2809. doi: 10.1016/j.jhydrol.2014.09.051.
- Lacasta A, Morales-Hernández M, Murillo J, et al. 2015. GPU implementation of the 2D shallow water equations for the simulation of rainfall/runoff events [J]. *Environmental Earth Sciences*, 74: 7295-7305. doi: 10.1007/s12665-015-4215-z.
- Lai X, Liang Q, Yesou H, et al. 2014. Variational assimilation of remotely sensed flood extents using a 2-D flood model [J]. *Hydrology and Earth System Sciences*, 18: 4325-4339. doi: 10.5194/hess-18-4325-2014.
- Liang Q, Smith L S. 2015. A high-performance integrated hydrodynamic modelling system for urban flood simulations [J]. *Journal of Hydroinformatics*, 17: 518-533. doi: 10.2166/hydro.2015.029.
- Lindenschmidt K-E, Fleischbein K, Baborowski M. 2007. Structural uncertainty in a river water quality modelling system [J]. *Ecological Modelling*, 204: 289-300. doi: 10.1016/j.ecolmodel.2007.01.004
- Liu Y, Gupta H V. 2007. Uncertainty in hydrologic modeling: Toward an integrated data assimilation framework [J]. *Water Resources Research*, 43. doi: 10.1029/2006WR005756.
- Lu Z, Wei Y, Feng Q, et al. 2018. A framework for incorporating social processes in hydrological models [J]. *Current Opinion in Environmental Sustainability, System Dynamics and Sustainability*, 33: 42-50. doi: 10.1016/j.cosust.2018.04.011.
- Margvelashvili N, Parslow J S, Herzfeld M, et al. 2010. Development of operational data-assimilating water quality modelling system for South-East Tasmania [M]// OCEANS'10 IEEE Sydney. Presented at the OCEANS 2010 IEEE - Sydney, IEEE, Sydney, Australia: 1-5. doi: 10.1109/OCEANS-SYD.2010.5603601.
- Martin P H, LeBoeuf E J, Dobbins J P, et al. 2005. Interfacing GIS with water resource models: A state-of-the-art review [J]. *Journal of the American Water Resources Association*, 41: 1471-1487. doi: 10.1111/j.1752-1688.2005.tb03813.x.
- Mitro M G. 2001. Ecological model testing: Verification, validation, or neither? [J]. *Bulletin of the Ecological Society of America*, 82: 235-236.
- Mohamoud Y, Zhang H. 2019. Applications of linked and non-linked complex models for TMDL development: Approaches and challenges [J]. *Journal of Hydrologic Engineering*, 24, 04018055. doi: 10.1061/(ASCE)HE.1943-5584.0001721.
- O'Connor D J. 1967. The temporal and spatial distribution of dissolved oxygen in streams [J]. *Water Resources Research*, 3(1): 65-79.
- Oreskes N, Shrader-Frechette K, Belitz K. 1994. Verification, validation, and confirmation of numerical models in the earth sciences [J]. *Science*, 263: 641-646. doi: 10.1126/science.263.5147.641.
- Park K, Kuo A Y. 1996. A multi-step computation scheme: Decoupling kinetic processes from physical transport in water quality models [J]. *Water Research*, 30(10): 2255-2264.

- Parker P, Letcher R, Jakeman A, et al. 2002. Progress in integrated assessment and modelling [J]. *Environmental Modelling & Software*, 17: 209-217. doi: 10.1016/S1364-8152(01)00059-7.
- Paudel R, Jawitz J W. 2012. Does increased model complexity improve description of phosphorus dynamics in a large treatment wetland? [J]. *Ecological Engineering*, 42: 283-294. doi: 10.1016/j.ecoleng.2012.02.014.
- Pianosi F, Beven K, Freer J, et al. 2016. Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow [J]. *Environmental Modelling & Software*, 79: 214-232. doi: 10.1016/j.envsoft.2016.02.008.
- Reckhow K H, Chapra S C. 1983. Confirmation of water quality models [J]. *Ecological Modelling*, 20(2-3): 113-133.
- Reichle R H. 2008. Data assimilation methods in the Earth sciences [J]. *Advances in Water Resources*, 31(11): 1411-1418.
- Robson B J, Hamilton D P, Webster I T, et al. 2008. Ten steps applied to development and evaluation of process-based biogeochemical models of estuaries [J]. *Environmental Modelling & Software*, 23: 369-384. doi: 10.1016/j.envsoft.2007.05.019.
- Rode M, Arhonditsis G, Balin D, et al. 2010. New challenges in integrated water quality modelling [J]. *Hydrological Processes*, 24: 3447-3461. doi: 10.1002/hyp.7766.
- Rykiel E J. 1996. Testing ecological models: The meaning of validation [J]. *Ecological Modeling*, 90: 229-244.
- Saltelli A, Aleksankina K, Becker W, et al. 2019. Why so many published sensitivity analyses are false: A systematic review of sensitivity analysis practices [J]. *Environmental Modelling & Software*, 114: 29-39. doi: 10.1016/j.envsoft.2019.01.012.
- Seibert J, McDonnell J J. 2003. The quest for an improved dialog between modeler and experimentalist [J]. *Water Science and Applications*, 6: 301-316.
- Seidl R, Barthel R. 2017. Linking scientific disciplines: Hydrology and social sciences [J]. *Journal of Hydrology*, 550: 441-452. doi: 10.1016/j.jhydrol.2017.05.008.
- Seifi A, Riahi-Madvar H. 2019. Improving one-dimensional pollution dispersion modeling in rivers using ANFIS and ANN-based GA optimized models [J]. *Environmental Science and Pollution Research*, 26: 867-885. doi:10.1007/s11356-018-3613-7.
- Sharma D, Kansal A. 2013. Assessment of river quality models: A review [J]. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, 12: 285-311. doi: 10.1007/s11157-012-9285-8.
- Shen C. 2018. A transdisciplinary review of deep learning research and its relevance for water resources scientists [J]. *Water Resources Research*, 54: 8558-8593. doi: 10.1029/2018WR022643.
- Simões F J M. 2011. Finite volume model for two-dimensional shallow environmental flow [J]. *Journal of Hydrological Engineering*, 137: 173. doi: 10.1061/(ASCE)HY.1943-7900.0000292.
- Singh V P, Woolhiser D A. 2002. Mathematical modeling of watershed hydrology [J]. *Journal of Hydrologic Engineering*, 7: 270-292. doi: 10.1061/(ASCE)1084-0699(2002)7:4(270).
- Sivapalan M, Savenije H H G, Blöschl G. 2012. Socio-hydrology: A new science of people and water [J]. *Hydrological Processes*, 26: 1270-1276. doi: 10.1002/hyp.8426.
- Snowling S D, Kramer J R. 2001. Evaluating modelling uncertainty for model selection [J]. *Ecological Modelling*, 138(1-3): 17-30.
- Song X, Zhang J, Zhan C, et al. 2015. Global sensitivity analysis in hydrological modeling: Review of concepts, methods, theoretical framework, and applications [J]. *Journal of Hydrology*, 523: 739-757. doi: 10.1016/j.jhydrol.2015.02.013.
- Thomann R V. 1998. The Future "Golden Age" of Predictive Models for Surface Water Quality and Ecosystem Management [J]. *Journal of Environmental Engineering*, 124: 94-103. doi: 10.1061/(ASCE)0733-9372(1998)124:2(94).
- Todini E. 2007. Hydrological catchment modelling: Past, present and future [J]. *Hydrology and Earth System Sciences*, 11: 468-482. doi: 10.5194/hess-11-468-2007.
- Toro E F, Garcia-Navarro P. 2007. Godunov-type methods for free-surface shallow flows: A review [J]. *Journal of Hydraulic Research*, 45(6): 736-751.
- Volk M, Liersch S, Schmidt G. 2009. Towards the implementation of the European Water Framework Directive? Lessons learned from water quality simulations in an agricultural watershed [J]. *Land Use Policy*, 26(3): 580-588.
- Wellen C, Kamran-Disfani A-R, Arhonditsis G B. 2015. Evaluation of the current state of distributed watershed nutrient water quality modeling [J]. *Environmental Science & Technology*, 49: 3278-3290. doi: 10.1021/es5049557.
- Whittemore R C, Beebe J. 2000. EPA's basins model: Good science or serendipitous modeling? [J]. *Journal of the American Water Resources Association*, 36(3): 493-499.
- Xie H, Wei G, Shen Z, et al. 2019. Event-based uncertainty assessment of sediment modeling in a data-scarce catchment [J]. *CATENA*, 173: 162-174. doi: 10.1016/j.catena.2018.10.008.
- Yang Y S, Wang L. 2010. A review of modelling tools for implementation of the EU water framework directive in handling diffuse water pollution [J]. *Water Resources Management*, 24: 1819-1843. doi: 10.1007/s11269-009-9526-y.

- Yen H, Bailey R T, Arabi M, et al. 2014. The role of interior watershed processes in improving parameter estimation and performance of watershed models [J]. *Journal of Environment Quality*, 43, 1601. doi: 10.2134/jeq2013.03.0110.
- Zheng Y, Han F, Tian Y, et al. 2014. Chapter 5 Addressing the uncertainty in modeling watershed nonpoint source pollution [M]// Jørgensen S E, Chang N B, Xu F L. *Developments in environmental modelling, ecological modelling and engineering of lakes and wetlands*. Elsevier: 113-159. doi: 10.1016/B978-0-444-63249-4.00006-3.
- Zhu Z, Chen Z, Chen X, et al. 2019. An assessment of the hydrologic effectiveness of low impact development (LID) practices for managing runoff with different objectives [J]. *Journal of Environmental Management*, 231: 504-514.

A review of integrated water quality modeling for a watershed

LAI Xijun

(Key Laboratory of Watershed Geographic Sciences, Nanjing Institute of Geography and Limnology, CAS, Nanjing 210008, China)

Abstract: Investigating the integrated modeling of water quantity and quality in a watershed has become an important research topic. The integrated modeling of hydrological and biogeochemical processes can quantitatively analyze the change of water cycle and water quality, which is an important means of aquatic environment research and management. By reviewing the development course and recent progress in water quality modeling, we summarized the theoretical methods and corresponding models for catchment-scale non-point source pollution and in-stream (or lake) water quality. The key points in integrated watershed modeling, including model selection, development and integration, and calibration and validation, were discussed in terms of model uncertainty. Finally, we suggested paying more attention to the integrated modeling of natural and human processes in watersheds (including the interaction between human and water environment, hydrological and biogeochemical processes integration) and the application of novel methods (including data assimilation methods, high-performance computation, and artificial intelligence technologies).

Keywords: watershed modeling; numerical model; non-point source pollution; water quality