

DOI:10.3880/j.issn.1004-6933.2015.06.014

国际水协会河流水质模型 1 号(RWQM1)述评

李 哲^{1,2,3}, 李 翀¹, 陈永柏¹, 刘 静^{2,3}, 郭劲松^{2,3}

(1. 中国长江三峡集团公司, 北京 100038; 2. 中国科学院重庆绿色智能技术研究院, 重庆 400714;
3. 中国科学院水库水环境重点实验室, 重庆 400714)

摘要:剖析河流水质模型 1 号(RWQM1)的建模背景、设计思路、基本框架与建模方法, 认为 RWQM1 从技术层面和建模方法上对当前水质模型进行了重大调整, 提供了全新的水质模型框架, 作为未来水质建模的科学标准, RWQM1 的标准化设计思路包括: ①较全面地划分水质组分, 统一水质组分的表述方式; ②基于严格的化学计量方程实现对水质转化过程及其动力学的数学描述, 确保反应物、产物的物质守恒; ③将各种水质过程通过化学计量矩阵的形式实现模型的结构化表达。结构化的思路使得 RWQM1 水质模型具有灵活、适用性广等特点, 但过于复杂的状态变量、缺乏强大的软件平台等问题, 在一定程度上限制了 RWQM1 水质模型的推广。
关键词:河流水质模型 1 号; 水质模型; 模型设计; 模型应用; 综述
中图分类号:TV121⁺.2 **文献标志码:**A **文章编号:**1004-6933(2015)06-0086-08

Review on international water association river water quality model no. 1

LI Zhe^{1,2,3}, LI Chong¹, CHEN Yongbai¹, LIU Jing^{2,3}, GUO Jinsong^{2,3}

(1. China Three Gorges Corporation, Beijing 100038, China;
2. Chongqing Institute of Green and Intelligent Technology, Chinese Academy of Sciences, Chongqing 400714, China;
3. Key Lab on Reservoir Water Environment, Chinese Academy of Sciences, Chongqing 400714, China)

Abstract: Through systematic analysis over the background, theories, framework and modeling approach of river water quality model no. 1 (RWQM1), it is believed that RWQM1 has a great adjustment on the current water quality model from the aspects of technology level and modeling method, providing a new standard for future water quality modeling. As the scientific standard for future water quality modeling, the standardized design routine of RWQM1 includes: ① defining a wide range water quality variables and standardizing the terminology of these variables; ② providing stoichiometric formulas with strictly mass balance among water quality variables; ③ using Peterson matrix among water quality processes to structuralize water quality models. The structuralized routine makes RWQM1 model flexible and applicable. However, problems including the complexity of variables and processes and lacking software platforms powerful enough for RWQM1 potentially limited its further popularization.
Key words: River Water Quality Model No. 1; water quality model; model design; model application; review

河流水质模型 1 号(river water quality model no. 1, RWQM1)是国际水协会(International Water Association, IWA)于 2001 年颁布的新型河流水质模型。RWQM1 既没有固定的模型结构和明确的模

型方程组,也没有成型的求解算法和相应的软件平台,其设计目标是在对当前水质模型的发展现状进行总结的基础上,提出标准化水质模型框架及其使用准则,建立一套未来水质建模的科学标准^[1]。

基金项目:国家自然科学基金(51179215, 51509233);中国长江三峡集团公司科研项目
作者简介:李哲(1981—),男,副研究员,博士,主要从事水库生态学研究。E-mail: lizhe@cigit.ac.cn

RWQM1 自颁布后在国外得到了广泛的重视。基于 RWQM1 的水质过程模拟研究已成为当前该领域的主要方向。10 余年来,欧洲环境管理部门已在 RWQM1 框架上构建新型水质管理模式^[2],但国内对 RWQM1 的关注仍未受到广泛重视,一些研究处于初步分析探讨阶段,相关研究报道也较为零散^[3]。在 IWA 出版的《技术研究报告 No. 12: 河流水质模型 1 号》^[1]基础上,笔者剖析 RWQM1 的研发背景、模型框架、建模方法,梳理其研究进展,对 RWQM1 进行较为全面的述评,探讨当前水质模型研究与应用的新思路、新动向。

1 问题的提出与 RWQM1 诞生

水质模型是对水体中污染物随空间和时间迁移转化规律的数学描述。1925 年,Streeter 和 Phelps 建立的 BOD-DO 双线性模型^[4]成为此后各种水质模型的鼻祖。在近百年的发展中,水质模型围绕着 BOD-DO 这一核心,在满足物质守恒的前提下增加对水质过程的描述,并通过不断更新、优化与升级,以应对诸如富营养化和化学品污染等新的环境问题。从起初对表观水质现象的方程求解到对环境系统复杂过程的机理描述,从早期建立一维稳态水质模型到今天对多尺度高维动态过程的模拟仿真,水质模型研究应用得到了长足的发展。但是,当前水质模型自身仍存在一些普遍性的问题,影响了其对环境变化的描述和预测,限制了水质模型在水质管理中的应用,这些问题亟待解决^[1]。

1.1 模型结构的合理性与物质守恒

以丹麦 DHI 公司 MIKE 系列^[5]、美国 USEPA 开发的 WASP 系列^[6]和 QUAL 系列^[7-9]为代表的当前主流通用水质模型(软件),对水质过程的认识不同,所设置的模型变量、概化的水质过程亦存在显著差别。一些模型变量、过程设置的合理性存在问题。如,BOD 是水质模型中常见的变量,MIKE 系列^[5]模型将 BOD 分成了 5 类,QUAL2K^[7]则分成了 2 类(Fast CBOD 与 Slow CBOD)等。但通常 BOD 指标仅为生化实验的测试结果,难以涵盖所有的有机污染物,也不能囊括水体中藻类等生物有机体自身所含的 BOD;以 DO 变化作为反映水体总体污染状况的核心指标,忽略了水体中可能存在的局部缺氧或厌氧条件下硝态氮作为电子受体而发生的水质变化,因此,以 BOD-DO 过程为核心的水质模型难以体现严格意义上的物质守恒原则^[10-11]。

1.2 模型结构的一致性与可扩展性

目前常见的水质模型通常情况下其结构(变量

与过程)均已相对固定。各种水质模型采用各不相同的组分表达方式、缺乏统一的术语表达,造成了模型接口不标准,使用中存在诸多麻烦,用户必须根据已有的监测数据选择特定的水质模型,或根据水质模型重新进行水质监测和参数估值。而且对特定水质过程的模拟,通常需要人为设定某些初始浓度值或参数值,以“屏蔽”或忽略其他过程的影响。如,如果仅有 BOD 的监测数据,在 QUAL2K^[7]中通常需要将 Slow CBOD 降解速率值设置成较大的值(如 10d^{-1}),以“屏蔽”原模型中描述的从 Slow CBOD 到 Fast CBOD 的降解过程。这种所谓的“简化”破坏了原模型的物质守恒原则,降低了模型的精度,也限制了模型的应用范围。

不仅如此,因模型结构已相对固定,所以模型后续升级拓展受到影响。如,QUAL2E 是 QUAL-II 的升级版本,相对于 QUAL-II,QUAL2E 增加了 TP 组分,认为水中 TN 和 TP 均来自于颗粒态有机物的水解,这一过程实际上是同时发生的,但二者的转化速率在 QUAL2E 中并不相同^[10-11]。这样的升级与拓展不仅在一定程度上破坏了物质守恒原则,而且也使得各个层面上的水质过程杂糅在一起,有时甚至出现内部矛盾。

上述问题给未来水质模型的构建提出了新的要求。一方面,有必要通过实现水质组分与过程描述的标准化与模块化来解决水质模型种类繁多但结构单一的问题;另一方面,解决当前水质模型内在的矛盾与建模步骤中存在的缺陷,需要建立一套相对完整的水质模型体系和建模方法论,形成一套具有普适性的水质建模方案。不仅如此,Rauch 等^[11-12]还认为加强对水环境生态响应的描述、水质过程的辨识以及建立水质预报与决策支持方案将成为未来 10 年水质模型发展的主导方向,而建立水质建模科学标准将是指导未来水质模型发展的关键。水质建模科学标准包括 3 个方面:①水质建模方案的总体框架;②标准化的水质模型;③模型辨识、验证、校正和不确定性分析的基本方法。

IWA 河流水质模型任务组于 20 世纪 90 年代中期成立。任务组提出了建立 RWQM1 的基本目标^[1]:①开发一系列从简单到复杂的水质生物转化过程子模型,包括:重新评估过去 30 年水质建模的发展,消除内在矛盾;优化天然水体水质生物转化过程,保证转化过程子模型同 IWA 活性污泥模型(activated sludge model, ASM)系列相互兼容;采用活性污泥模型中结构化建模思路,构建河流水质模型,并兼顾不同专业领域知识背景的差异。②确立

水质模型的科学标准以指导实际运用与结果评估。
③提供案例分析以说明子模型的应用方法。IWA 河流水质模型任务组于 2001 年出版了《技术研究报告 No. 12:河流水质模型 1 号》^[1],RWQM1 宣告诞生。

2 RWQM1 的设计思路

2.1 活性污泥模型与结构化建模思路

“结构化”思想^[13]可以概括为:自顶向下、逐步求精、分而治之,即将系统按照功能分解成为若干个模块,自顶向下,将一个复杂的系统分成若干个易于控制和处理的子系统,子系统又可以分解成更小的子模块,模块之间功能相对独立,模块接口简明、界面清晰。通过调用特定的模块并对各个模块进行优化组合,可以适应复杂的情况。结构化思想以模块化的模型体系和开放性、系统性的模型结构为主要特征,强调对系统的结构分析、功能的抽象和模块的分解,是一种非常有用的处理方式。

ASM 模型借鉴了化工反应器的结构化建模方法,将曝气池中的活性污泥过程分解成若干个子过程与组分(模块),用化学计量关系(接口)建立过程与组分之间的变化关系,利用 Peterson 矩阵将这系列复杂的反应过程加以整合,以严格满足曝气池内的物质守恒原则^[10]。在方程描述中,ASM 模型将开关函数引入单一过程的方程描述中,使之能根据底物浓度自动“启闭”某些过程的产生而不改变物质守恒原则,消除由于速率方程“开”或“关”的不连续性而产生的数值的不稳定性^[10]。由于使用开放性和模块化的模型框架,后续发展的 ASM 模型均只在 ASM1 的框架下增加模型中生化转化子过程和水质组分,或者调整模型组分与过程的相互关系以升级原有模型,保证了模型体系的完整、统一与延续。

20 世纪 90 年代中期开始,有研究尝试将 ASM 模型应用到水质建模中,搭建类似于 ASM 模型体系的水质模型平台。Masliev 等^[14]认为 ASM 模型结构紧凑且内在的组分与过程相互一致,而传统水质模型则结构多层次而相对松散。Maryns 等^[15]在 ASM1 中增加了颗粒态磷、溶解态磷、叶绿素 a 等组分进行水质建模,认为基于 ASM1 模型的水质过程模拟比传统模型更贴近实际情况。上述研究成为 RWQM1 研发前奏。

2.2 河流连续统概念

河流连续统概念 (river continuum concept, RCC)是由 Vannote 等^[16]于 1980 年提出的,他认为河流由源头集水区的第一级溪流起,向下流经各级河流流域,形成一个连续的、流动的、独特而完整的

系统。它不仅指地理空间上的连续,更重要的是生物学过程及其物理环境的连续^[17]。RWQM1 将 RCC 引入了河流水质建模的科学标准中,强调应根据不同河段生态系统的特征及其主要的影响区带,确立不同水质模型的时空尺度与过程描述。RWQM1 还较为完整地融合了包括沉积层过程(缺氧状态)在内的所有可能发生的水质过程,要求用户根据不同河段特征对模型进行简化并选择关键的水质过程进行建模。

2.3 生态化学计量学的研究

20 世纪五六十年代,Redfield 等^[18]认为海洋浮游植物生长的元素组成特征受到各生源要素(O、C、N、P)地球化学循环的影响,并提出了浮游植物的化学组成(碳、氮、磷之比为 100 : 16 : 1)。该比率被广泛应用到了许多水质模型。20 世纪 90 年代后,Sterner^[19]较早研究了生源要素在生产者与消费者之间的传递过程。Elser 等^[20]完善并提出了消费者驱使下的营养盐循环过程(Consumer-driven Nutrient Recycling),强调生源要素在生产者与初级消费者之间转移的比例关系。RWQM1 的生态动力学模拟延续了生态化学计量学的基本理论,强调在生源要素的层面上实现严格的物质守恒,而且引入消费者作为模型的状态变量,完善了水体中消费者和生产者之间的元素层面上生态动力学关系。

2.4 水质建模中科学术语与方法论的标准化

在水质建模中,研究人员来自于不同的学科领域,使用着各自领域的科学术语阐释水质过程,造成了在水质建模中常用科学术语和建模过程描述上的混乱,也成为各领域学术交流的障碍。RWQM1 大量引用了 Castensen 等^[21]提出的科学术语来阐释模型的基本框架与方程,借鉴活性污泥模型的符号表述法对水质组分进行标准化的描述,建立了水质模型描述与模型建立中通用的科学术语词汇表,提出了水质建模中统一模型组分的符号表达,从术语学角度统一了水质建模基本步骤和表述方法。

3 RWQM1 的基本框架与建模方法

3.1 水质模型总方程

天然水体中的水质变化可以归纳为随流输移、扩散/弥散、生化转化过程和沉积层-水相-大气之间的界面交换 4 个部分。RWQM1 采用 1986 年 Somlyódy 等^[22]所总结的水质模型基本方程作为河流水质变化的总方程:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -u \frac{\partial c}{\partial x} - \underbrace{v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z}}_{\text{随流输移}} +$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_x \frac{\partial c}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_y \frac{\partial c}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z \frac{\partial c}{\partial z}\right)}_{\text{扩散/弥散过程}} + \underbrace{\frac{r(c,p)}{\text{生物化学转化过程}}}_{(1)}$$

式中: c 为描述的 n 个水质组分的 n 维变量; $u、v、w$ 分别为水流在纵向、横向、垂向上的速度场; $\varepsilon_x、\varepsilon_y、\varepsilon_z$ 分别为物质在纵向、横向、垂向上的扩散系数; $r(c,p)$ 为水体中水质组分生化转化过程的转化速率。

上述方程中需增加水体与大气之间、水体与沉积层之间的界面交换过程,以满足完整的物质守恒原则^[23]。水动力学研究的进步,使得水质建模中时间尺度、空间维度、混合状态描述、随流输移等方面相对成熟,RWQM1 对水质建模仅进行了初步的探讨,提出了建模的基本步骤、准则、要领与运用策略,而针对水体中物质生化转化过程的描述则成了 RWQM1 重点关注的方面。

3.2 生化转化过程的描述

RWQM1 选择了 24 个水质组分与 23 个生化转化过程作为水质模型的核心,并对模型进行了 3 个方面的假设^[24]:①认为水质组分由 C、H、O、N、P 等 5 种化学元素组成(将其他元素合并为 X);②忽略生态系统不同层级上的差异,过程转化速率不随时间而变化;③假设水体中硝酸盐质量浓度足够。

为同 ASM 系列模型实现整体对接,实现对水质过程的标准化描述,RWQM1 采用了与 ASM 相同的状态变量和符号表示方式,以 S 作为溶解性组分的标识、 X 作为悬浮性组分的标识,将这 24 个水质组

分分为溶解态组分 15 个,悬浮态组分 9 个(表 1)。RWQM1 将物质守恒的原则严格限定在了元素层次上,即根据模型假设,通过确定组分中的 C、H、O、N、P 这 5 种元素所占质量分数($\alpha_C、\alpha_H、\alpha_O、\alpha_N、\alpha_P$)表述各水质组分的化学表达式: $C_{\alpha_C/12},H_{\alpha_H},O_{\alpha_O/16},N_{\alpha_N/14},P_{\alpha_P/31}$ 。如,异养微生物化学表达式为 $C_{\alpha_C,XH/12}H_{\alpha_H,XH}O_{\alpha_H,XH/16}N_{\alpha_N,XH/14}P_{\alpha_P,XH/31}$,而藻类的化学表达式则为 $C_{\alpha_C,ALG/12}H_{\alpha_H,ALG}O_{\alpha_H,ALG/16}N_{\alpha_N,ALG/14}P_{\alpha_P,ALG/31}$ ^[24]。

在水质过程描述中,RWQM1 几乎囊括了目前水体中的可能发生的生化转化过程(表 2)。RWQM1 中的每一个生化转化过程均是单一的化学反应方程式,包括了组分的计量学参数、化学反应过程的动力学参数等,过程之间互相平等。因此,RWQM1 对河流水质变化的模拟事实上已经从传统模型对水质组分的关注(面向对象, Object-Oriented)变成了对水质生化转化过程的描述(面向过程, Process-Oriented)。每一个生化转化过程相当于是水质模型生化转化部分的模块,采用 Peterson 矩阵将组分联系起来,形成了过程→组分的结构关系。用户可以根据模型简化的需要非常灵活地选择(或合并)所关心的生化转化过程进行模拟,而无须考虑其他组分对这一过程的影响。

3.3 建模过程与基本步骤

RWQM1 提出了标准化的 6 个水质建模基本步骤:定义时间尺度→定义空间尺度→定义水体混合状态的描述→定义平流输移过程的描述→定义生化

表 1 RWQM1 水质组分一览

溶解态水质组分			
符号	含义	符号	含义
S_S	溶解性有机物质,可以被异养微生物迅速降解	S_I	惰性溶解性有机物质。在短时间期限内不可生物降解
S_{NH_4}	铵根氮: NH_4^+-N	S_{NH_3}	氨态氮: NH_3-N
S_{NO_2}	亚硝态氮: NO_2^--N	S_{NO_3}	硝态氮: NO_3^--N
S_{HPO_4}	溶解性无机磷的一部分: $HPO_4^{2-}-P$	$S_{H_2PO_4}$	溶解性无机磷的一部分: $H_2PO_4^--P$
S_{O_2}	溶解氧: O_2	S_{CO_2}	溶解性 CO_2 和 H_2CO_3 的总和,以碳的质量形式表示
S_{HCO_3}	重碳酸盐: HCO_3^--C	S_{CO_3}	溶解性 CO_3^{2-}
S_H	氢离子: H^+ ,根据 pH 值反算	S_{OH}	OH^- 离子,以氢元素质量(或摩尔数)表示
S_{Ca}	溶解性钙离子		
悬浮态水质组分			
符号	含义	符号	含义
X_H	异养微生物,假定在好氧和兼性缺氧状态条件下生长	X_{ALG}	藻类和大型植物。模型只考虑了一个生态等级的藻类和大型植物,但可拓展至多个等级
X_{NI}	将氨氮氧化成亚硝态氮的微生物	X_{N_2}	将亚硝态氮氧化为硝态氮的为生物
X_{CON}	消费者。模型只考虑了一个生态等级的消费者,但可扩展至多个生态等级	X_I	惰性有机微颗粒物,在短时间内不可生物降解
X_S	有机微颗粒物,假定在水解后可生化降解的	X_P	吸附于微粒表面的磷酸盐,以 $HPO_4^{2-}-P$ 表示
X_{II}	无机颗粒物质。模型中仅综合成一个等级,可扩展至不同粒径组成和不同粒径范围		

表2 RWQM1 中的生化转化过程

编号	过程描述	编号	过程描述
(1a) *	NH ₄ 基质下的异养菌好氧生长过程	(1b)	NO ₃ 基质下的异养菌好氧生长过程
(2)	好氧条件下异养菌的呼吸过程	(3a)	NO ₃ 基质下的异养菌缺氧生长过程
(3b)	NO ₂ 基质下的异养菌缺氧生长过程	(4)	缺氧条件下异养菌的呼吸过程
(5)	第一层次硝化细菌的生长过程	(6)	第一层次硝化细菌的好氧呼吸过程
(7)	第二层次硝化细菌的生长过程	(8)	第二层次硝化细菌的缺氧呼吸过程
(9a)	NH ₄ 基质下的藻类生长过程	(9b)	NO ₃ 基质下的藻类生长过程
(10)	藻类好氧呼吸过程	(11)	藻类的死亡过程
(12a)	X _{ALG} 基质下的消费者生长过程	(12b)	X _S 基质下的消费者生长过程
(12c)	X _H 基质下的消费者生长过程	(12d)	X _{N1} 基质下的消费者生长过程
(12e)	X _{N2} 基质下的消费者生长过程	(13)	消费者的好氧呼吸过程
(14)	消费者的死亡过程	(15)	水解过程
(16)	化学平衡 CO ₂ ↔ CO ₃ ²⁻	(17)	化学平衡 HCO ₃ ⁻ ↔ CO ₃ ²⁻
(18)	化学平衡 H ₂ O ↔ H ⁺ + OH ⁻	(19)	化学平衡 NH ₄ ⁺ ↔ NH ₃
(20)	化学平衡 H ₂ PO ₄ ⁻ ↔ HPO ₄ ²⁻	(21)	化学平衡 Ca ↔ CO ₃ ²⁻
(22)	磷酸盐的吸附过程	(23)	磷酸盐的解吸过程

注:编号中 a、b 等英文字母为某一生化转化过程中可能存在的不同形式。

转化过程的反应形式→定义边界条件^[1]。虽然这 6 个步骤给出了水质建模的基本过程,但以下两个方面值得关注:①物理场对水质变化过程的影响。RWQM1 强调了水体的物理场对水质变化过程的影响,认为在水质建模中首先需确认水动力条件下水质组分的输移转化规律,完善物理环境场的模拟,而后才是水质组分的生化转化过程,从简单到复杂逐步发展生化转化模型。②生化转化过程子模型的使用与简化。RWQM1 采用 23 个过程与 24 个组分,基本上涵盖了当前水质建模中所需要考虑的所有问题,但实际使用中对全部过程实现模拟是相当困难的^[25],因此通常情况下,在使用 RWQM1 时需简化。RWQM1 强调需首先对河流进行生态分区,就不同河段的生态特征选择不同的生化转化过程,或对状态变量进行简化^[25]。如,通常情况下亚硝酸盐在河流中的质量浓度低,不会对水质模拟与预测产生较大的影响,因此可将涉及亚硝酸盐组分、亚硝化菌的生长删除,以亚硝化菌为底物的消费者的生长则可合并到以硝化细菌为底物的消费者生长过程中^[25]。

3.4 模型辨识与参数估计

RWQM1 以 Brun 等^[26]的水质模型参数校正及不确定性分析方法为基础,提出通过参数不确定度排序和敏感度计算,对水质模型进行参数辨识与估计,并解决这类模型因参数过多难以校正的问题^[27]。不同的监测方案对参数估计和模型可辨识性影响甚大,RWQM1 建议通过蒙特卡洛 (Monte Carlo) 模拟实现模型预测的不确定性分析^[28]。RWQM1 亦建议使用基于 Fisher 信息矩阵 (FIM) 的参数估计、不确定性分析的另一套方法^[26]。

4 RWQM1 的研究进展与存在问题

自 2001 年 RWQM1 颁布后,RWQM1 受到了广

泛的重视。根据 RWQM1 任务组的规划,RWQM1 的未来发展主要包括实例研究、敏感性综合分析、与 ASM 模型结合、模型水质过程的改进与增加、软件平台的开发等 5 个研究方向^[1]。但事实上,围绕欧盟新的水质管理框架 (EU Water Framework Directive,EU WFD)^[29]对 RWQM1 与 ASM 进行对接以实现 RWQM1 在环境管理中的应用,成为了 RWQM1 颁布后的 10 余年来的主要研究方向。

EU WFD 认为传统的水质管理将排水管网、污水处理厂与受纳水体分离独立,不足以实现水污染排放控制系统中对所有子系统控污措施的优化,单独的控污措施或对某单一排污系统 (如污水处理厂、合流制排污管道等) 进行调控,不足以实现真正意义上的水质改善^[30-31]。以综合水质模型 (Integrated River Basin Modeling) 为核心的具有整体意义的水质过程模拟的提出,成为了实现 EU WFD 目标的首要步骤^[30]。同 ASM 进行整体对接的优势使得 RWQM1 在综合水质模型体系中的作用越显突出,而 IWA 任务组原先设立的构建具有整体性的水质管理体系的目标正在逐步实现。

Huisman 等^[31-32]在 ASM3-RWQM1 基础上建立了下水道水质、水量变化模型,并实现了由下水道→污水处理厂的综合水质过程模拟。Erbe 等^[32]基于 RWQM1、ASM 模型的基本模型框架,提出了综合水质模型的基本特征:①所有模型在开放的管理平台 SIMBA 中,以 Peterson 矩阵为基础实现 ASM、RWQM1 的整合。②综合水质模型需实现动态的模拟,下水道与受纳水体水质过程基于圣维南方程进行模拟,而降雨、废水产生等水量平衡须在开放的水质平台下方便实现对接。③所有的水质过程模拟应采用并行模式同时进行。

此外,Reuter 等^[33]则基于 RWQM1 模型建立了

结构化的流域综合水质管理软件平台 RIONET,并以德国 Bode 河流域为范例,介绍了 RIONET 在河网综合水质模拟中的应用。Meirlean 等^[34]将 RWQM1 与 ASM 模型整合,通过串联 CSTR 方式将 RWQM1 应用到了意大利 Lambro 河的水质建模中,探讨了下水道→污水处理厂→受纳水体过程的模拟,完善了基于 RWQM1 的综合水质模型的实时控制系统的构建,确定了适合仿真与实时控制的简化的动态河流水质模型^[35]。Martín 等^[36]根据 RWQM1 采用串联完全混合连续流反应器 (Continuous Stirred Tank Reactor, CSTR) 方式建立了西班牙 Tajo 河水质模型,考虑了水沙两相流的输移过程,并在 RWQM1 的基础上增加了泥沙停留参数,在其自主开发软件平台 CalHidra2.0 上实现了 RWQM1 对氨氮、硝态氮以及溶解氧在不同季节下变化过程的模拟。van Grienseven 等^[37]对以 QUAL2E 为核心的 ESWAT (Extended Soil and Water Assessment) 模型进行了改进,形成了以 RWQM1 为核心的 ESWAT 模型,通过比利时 Dender 河的案例研究,认为就单纯水质过程模拟而言,QUAL2E 和 RWQM1 的模拟精度无显著差异,但 RWQM1 更适宜于对面源污染过程的描述以及综合水质模拟,但模型参数估值与校正却更为复杂^[37-38]。在国内,樊立萍等^[3]建立了一个以河流为核心的集成化城市废水系统的简单仿真环境,表明排水管网组合下水溢流和污水处理厂排放物的处理程度对河流水质会产生直接影响。

在富营养化和藻类生态动力学研究领域,Omlin 等^[39-40]参照 RWQM1 建立了瑞士苏黎世湖生源要素生物地化循环模型。通过对模型不同组分的计量学与不同生化过程的化学平衡描述,建立了磷元素内循环过程的生态动力学模型,重点探讨了由于季节的变化而导致的磷元素在生命体和非生命环境中的比例变化及其限制性作用。Mieleitner 等^[41]将上述模型应用到瑞士 Walensee 湖和 Greifensee 湖的生态动力学模拟,探讨了 RWQM1 在模型辨识和敏感性分析等方面的问题,并给出了不同营养状态湖泊生物地化过程的敏感性环节,揭示了不同营养状态下湖泊生源要素生物地化循环中关键过程的异同及其本因。Wichern 等^[42]则研究了德国 Wupper 河底栖沉积层与生物膜在河流水质过程的重要影响,模拟了氮平衡过程。

近年来,RWQM1 也应用到了其他领域,如藻类生物塘、水中农药及其他化学品等。de Schepper 等^[43]开发了用于农药和有毒有害化学品模拟的 RWQM1 模块,增加了相应的组分与过程。Hoque 等^[44]基于 RWQM1 模拟了污水稳定塘中个人日用

化学品的降解去除过程。Jupsin 等^[45]将 RWQM1 应用到了高效藻类生物塘 HRAPs (High-Rate Algal Ponds) 的水质模拟。Broekhuizen 等^[46]认为 RWQM1 对高浓度藻类生物塘的模拟精度不高,主要原因是 RWQM1 以生化反应动力学方程 (如 M-M 方程、Monod 方程) 为基础建立起来的水质生物转化动力学模型并不太适用于高浓度藻类聚集环境中,应予以修正。

可以看出,目前 RWQM1 已不仅仅只是一个相对全面的河流水质过程模型,更重要的是,RWQM1 已作为水质生物转化过程建模的科学标准,其开放性、结构化建模思想已渗透进水环境科学研究与工程应用等相关领域,发挥着指导性的作用。

尽管如此,RWQM1 在当前的研究与应用中仍存在问题,包括以下几个方面:

a. RWQM1 虽然强调了水动力条件对水质变化过程的影响,但在目前的研究中通常的做法是将河流视为一维的串联 CSTR 对水质变化过程进行模拟,虽然这有利于同污水处理厂的活性污泥模型相对接,实现在模型算法、系统辨识等方面的互通,但却在很大程度上简化了水动力条件对水质组分时空分布及其生化反应过程的影响。在真实的物理场上实现 RWQM1 生化转化过程的模拟,尤其是二维、三维的 RWQM1,至今仍鲜有报道。

b. 为实现同 ASM 的整体对接,RWQM1 采用了 ASM 中的许多状态变量和参数,但 RWQM1 专家组无法提供 ASM 中提供的典型参数值,造成了 RWQM1 的使用需要进行繁杂的参数估计和模型校正,如 RWQM1 将细菌生物量 X_H 作为独立的状态变量,但在天然水体中常规监测难以确定这一状态变量的浓度值,也难以采用类似 ASM 中的呼吸计量方式确定 X_H 的浓度值。RWQM1 的参数估计和模型校正也因此成了 RWQM1 实际应用的最大障碍,同时这也造成了在模拟精度差异不大的情况下,RWQM1 的模型使用效率不如传统水质模型,如 QUAL2E 和 WASP 等。

c. RWQM1 的生物转化过程以天然水体中低浓度底物下水质生物 (藻类、细菌) 转化过程为基础。对于某些特殊情况,如藻类生物塘或水华期间,藻类并不单纯以无机营养物为底物进行生长等,RWQM1 的模拟精度大为下降^[46],需要对其反应动力学方程进行修正或调整。但作为开放性、结构化的模型框架,在满足既有的组分和方程表达基础上,亦不难对 RWQM1 具体过程进行修正或升级。

d. 同目前的主流商业软件相比,RWQM1 至今仍未有成型的通用软件平台。而已有的商业模型软

件已能在相对成熟的软件界面上实现通用模拟。虽然瑞士 EAWAG 开发的 Aquasim^[47] 以及丹麦 DHI 开发的 WEST[®] 商用软件均能够实现 RWQM1 的使用,但如前所述,二者均将河流视为一维串联 CSTR 并在原有活性污泥模型平台的基础上实现 RWQM1 的模拟,对不同时空尺度下 RWQM1 的通用模拟软件平台仍十分紧缺。这在一定程度上限制了 RWQM1 的推广与使用。

5 结 语

RWQM1 从技术层面和建模方法上对当前水质模型进行了重大调整,提供了全新的水质模型框架。作为未来水质建模的科学标准,RWQM1 的标准化设计思路包括以下几个方面:①较全面地划分了水质组分,统一了水质组分的表述方式;②基于严格的化学计量方程实现对水质转化过程及其动力学的数学描述,确保反应物、产物的物质守恒;将各种水质过程通过化学计量矩阵的形式实现了模型的结构化表达。故在模型使用中,可根据实际需求在统一的模型构架下,选择水质组分与水质转化过程进行建模,体现 RWQM1 的灵活性和开放性。

在近 10 年的研究中,RWQM1 不仅实现了同 ASM 的整体对接,在水环境管理中发挥重要的基础性作用;更重要的是,RWQM1 完成了一套全新的标准化水质模型体系,其开放性、结构化的模型框架与建模思想在水环境科学研究与工程应用中具有重要的指导意义。

参考文献:

[1] REICHERT P, BORCHARDT D, HENZE M, et al. River water quality model no. 1, IWA publishing scientific and technical report No. 12 [R]. London: IWA Publishing, 2001.

[2] QUEVAUVILLER P, BORCHERS U, THOMPSON C, et al. The water framework directive [M]. New York: John Wiley & Sons, 2008.

[3] 樊立萍, 于海斌, 袁德成. 城市排污系统对河流水质影响的仿真研究 [J]. 计算机仿真, 2005, 22 (5): 251-253. (FAN Liping, YU Haibin, YUAN Decheng. Simulation investigation in the effect of urban wastewater system on river water quality [J]. Computer Simulation, 2005, 22 (5): 251-253. (in Chinese))

[4] STREETER H W, PHELPS E B. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River [M]. Washington D C: Public Health Service, 1925.

[5] MONNINKHOFF B. IFMMIKE11 1.1 coupling the groundwater model FEFLOW and the surface water model MIKE11-user manual [M]. Berlin: WASY Software, 2005.

[6] AMBROSE R B, WOOL T A, CONNOLLY J P, et al. WASP4, a hydrodynamic and water-quality model-model theory, user's manual, and programmer's guide [M]. Athens: Environmental Protection Agency, 1988.

[7] CHAPRA S C, PELLETIER G J. QUAL2K: a modeling framework for simulating river and stream water quality: documentation and user manual [M]. Medford, MA: Tufts University, 2003.

[8] BROWN L C, BARNWELL T O. The enhanced stream water quality models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: documentation and user manual [M]. Athens: Environmental Protection Agency, 1987.

[9] ROESNER L A, GIGUERE P R, EVENSON D E. Computer program documentation for the stream quality model QUAL- II [M]. Athens: Environmental Protection Agency, 1981.

[10] HENZE M, GUJER W, MINO T, et al. Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3: scientific and technical report No. 9. IWA task group on mathematical modelling for design and operation of biological wastewater treatment [R]. London: IWA Publishing, 2000.

[11] SHANAHAN P, HENZE M, KONCSOS L, et al. River water quality modelling: II. problems of the art [J]. Water Science and Technology, 1998, 38 (11): 245-252.

[12] SOMLYODY L, HENZE M, KONCSOS L, et al. River water quality modelling: III. future of the art [J]. Water Science and Technology, 1998, 38 (11): 253-260.

[13] 汤庸. 结构化与面向对象软件方法 [M]. 北京: 科学出版社, 1998.

[14] MASLIEV I, SOMLYODY L, KONCSOS L. On reconciliation of traditional water quality models and activated sludge models [R]. Laxenburge, Austria: International Institute for Applied Systems Analysis, 1995.

[15] MARYNS F, BAUWENS W. The application of the activated sludge model no. 1 to a river environment [J]. Water Science and Technology, 1997, 36 (5): 201-208.

[16] VANNOTE R L, MINSHALL G W, CUMMINS K W, et al. The river continuum concept [J]. Canadian Journal of Fisheries and Aquatic Sciences, 1980, 37 (1): 130-137.

[17] 蔡庆华, 唐涛, 刘建康. 河流生态学研究中的几个热点问题 [J]. 应用生态学报, 2003, 14 (9): 1573-1577. (CAI Qinghua, TANG Tao, LIU Jiankang. Several research hotspots in river ecology [J]. Chinese Journal of Applied Ecology, 2003, 14 (9): 1573-1577. (in Chinese))

[18] REDFIELD A C. The influence of organisms on the composition of sea-water [J]. The Sea, 1963, 2: 26-77.

[19] STERNER R W. The ratio of nitrogen to phosphorus resupplied by herbivores: zooplankton and the algal competitive arena [J]. American Naturalist, 1990, 136 (2): 209-229.

[20] ELSER J J, URABE J. The stoichiometry of consumer-driven nutrient recycling: theory, observations, and consequences [J]. Ecology, 1999, 80 (3): 735-751.

- [21] CARSTENSEN J, VANROLLEGHEM P, RAUCH W, et al. Terminology and methodology in modelling for water quality management: a discussion starter [J]. Water Science and Technology, 1997, 36(5): 157-168.
- [22] SOMLYÓDY L, STRATEN G V. Modeling and managing shallow lake eutrophication: with application to lake Balaton [M]. Berlin: Springer-Verlag, 1986.
- [23] SHANAHAN P, BORCHARDT D, HENZE M, et al. River water quality model no. 1 (RWQM1): I. modelling approach [J]. Water Science and Technology, 2001, 43(5): 1-10.
- [24] REICHERT P, BORCHARDT D, HENZE M, et al. River water quality model no. 1 (RWQM1): II. biochemical process equations [J]. Water Science and Technology, 2001, 43(5): 11-30.
- [25] VANROLLEGHEM P, BORCHARDT D, HENZE M, et al. River water quality model no. 1 (RWQM1): III. biochemical submodel selection [J]. Water Science & Technology, 2001, 43(5): 31-40.
- [26] WEIJERS S R, VANROLLEGHEM P A. A procedure for selecting best identifiable parameters in calibrating activated sludge model no. 1 to full-scale plant data [J]. Water Science and Technology, 1997, 36(5): 69-79.
- [27] BRUN R, REICHERT P, KÜNSCH H R. Practical identifiability analysis of large environmental simulation models [J]. Water Resources Research, 2001, 37(4): 1015-1030.
- [28] REICHERT P, VANROLLEGHEM P. Identifiability and uncertainty analysis of the river water quality model no. 1 (RWQM1) [J]. Water Science and Technology, 2001, 43(7): 329-338.
- [29] MOSTERT E. Much Ado About Nothing? The Water Framework Directive Explained in About 2500 Words [C]//Proceedings of the 4th training course "European Sustainable Water Goals". Venice: Water Civilizations International Centre, 2011.
- [30] ERBE V, SCHATZ M. An integrated modelling concept for immission-based management of sewer system, wastewater treatment plant and river [J]. Water Science & Technology, 2005, 52(5): 95-103.
- [31] HUISMAN J, KREBS P, GUJER W. Integral and unified model for the sewer and wastewater treatment plant focusing on transformations [J]. Water Science & Technology, 2003, 47(12): 65-71.
- [32] HUISMAN J, GUJER W. Modelling wastewater transformation in sewers based on ASM3 [J]. Water Science & Technology, 2002, 45(6): 51-60.
- [33] REUTER H, KRAUSE G, MNIG A, et al. RIONET: a water quality management tool for river basins [J]. Water Science & Technology, 2003, 48(10): 47-53.
- [34] MEIRLAEN J, HUYGHEBAERT B, SFORZI F, et al. Fast, simultaneous simulation of the integrated urban wastewater system using mechanistic surrogate models [J]. Water Science and Technology, 2001, 43(7): 301-310.
- [35] MEIRLAEN J, van ASSEL J, VANROLLEGHEM P A. Real time control of the integrated urban wastewater system using simultaneously simulating surrogate models [J]. Water Science & Technology, 2002, 45(3): 109-116.
- [36] MARTIN C, CARDONA C, San MARTIN D, et al. Dynamic simulation of the water quality in rivers based on the IWA RWQM1: application of the new simulator CalHidra 2.0 to the Tajo River [J]. Water Science & Technology, 2006, 54(11/12): 75-83.
- [37] van GRIENSVEN A, BAUWENS W. Concepts for river water quality processes for an integrated river basin modelling [J]. Water Science & Technology, 2003, 48(3): 1-8.
- [38] VANDENBERGHE V, van GRIENSVEN A, BAUWENS W, et al. Effect of different river water quality model concepts used for river basin management decisions [J]. Water Science and Technology, 2006, 53(10): 277-284.
- [39] OMLIN M, REICHERT P, FORSTER R. Biogeochemical model of Lake Zürich: model equations and results [J]. Ecological Modelling, 2001, 141(1): 77-103.
- [40] OMLIN M, BRUN R, REICHERT P. Biogeochemical model of Lake Zürich: sensitivity, identifiability and uncertainty analysis [J]. Ecological Modelling, 2001, 141(1): 105-123.
- [41] MIELEITNER J, REICHERT P. Analysis of the transferability of a biogeochemical lake model to lakes of different trophic state [J]. Ecological Modelling, 2006, 194(1): 49-61.
- [42] WICHERN M, KEHL O, ERBE V, et al. Modelling COD and N removal in the water and in the benthic biofilm for the River Wupper in Germany [J]. Water Science & Technology, 2006, 53(10): 163-171.
- [43] de SCHEPPER V C, HOLVOET K M, BENEDETTI L, et al. Extension of the River Water Quality Model No. 1 with the fate of pesticides [J]. Journal of Hydroinformatics, 2012, 14(1): 48-64.
- [44] HOQUE M E, CLOUTIER F, ARCIERI C, et al. Removal of selected pharmaceuticals, personal care products and artificial sweetener in an aerated sewage lagoon [J]. Science of the Total Environment, 2014, 487: 801-812.
- [45] JUPSIN H, PRAET E, VASEL J. Dynamic mathematical model of high rate algal ponds (HRAP) [J]. Water Science & Technology, 2003, 48(2): 197-204.
- [46] BROEKHUIZEN N, PARK J B, MCBRIDE G B, et al. Modification, calibration and verification of the IWA river water quality model to simulate a pilot-scale high rate algal pond [J]. Water Research, 2012, 46(9): 2911-2926.
- [47] REICHERT P. AQUASIM a tool for simulation and data analysis of aquatic systems [J]. Water Science & Technology, 2014, 30(2): 21-30.

(收稿日期: 2014-12-13 编辑: 彭桃英)