

非恒定一、二维耦合水质数值模拟技术研究

杨 丽

(南京工业大学城市建设与安全环境学院,江苏 南京 210002)

摘要 :真实环境中的湖区和周边河网通常是相互联系的,水中污染物会随水流在湖区和河道间发生迁移;为了更客观地模拟预测这类区域中的水质变化规律,从一、二维耦合区内公共单元的水质浓度应满足相容条件出发,对一、二维连接区利用重叠-投影法,建立了基于美国国家环保局 WASP5 模型的污染物迁移扩散机理以及有限体积法的一、二维耦合水质模型,并应用于苏北洪泽湖水系水质模拟,模拟成果验证了该耦合水质模型具有较高的可靠性与实用性的特点。

关键词 :一维;二维;WASP5 模型;有限体积法;耦合;水质模型

中图分类号 :X12 **文献标识码** :A **文章编号** :1004-693X(2006)04-0078-04

Study on 1-D and 2-D coupled unsteady water quality numerical simulation technique

YANG Li

(College of Urban Construction and Safety & Environmental Engineering, Nanjing University of Technology, Nanjing 210002, China)

Abstract :As lakes are usually connected to the river networks around, the pollutants in water would transport between rivers and lakes. Based on the compatible condition of the concentration of pollutants in common computational segments of 1-D and 2-D coupled domains, overlapping-projecting method is applied in the 1-D and 2-D domains and a 1-D and 2-D coupled unsteady flow water quality model is established based on finite volume method and transport and diffusion mechanisms of WASP5 model from EPA. Conclusions can be drawn through the case of Hongzehu Lake and its connected river networks, which prove that the coupled water quality model is of high reliability and practicability.

Key words :one dimension; two dimension; WASP5 model; finite volume method; coupling; water quality modeling

解决复杂水系的水环境规划与污染物预测计算问题,涉及到比较复杂的一维河道与二维海区或湖泊的相互影响、相互作用问题,此时用一、二维模型分别计算已不能够胜任,必须根据实际情况考虑一、二维耦合的数学模型。目前国内外对一、二维耦合水量模型已作了一定的研究,并经过多年的不断完善,一、二维水量耦合模型已经比较成熟,但与水量耦合模型相匹配的水质耦合模型并不多见。本文中提出了一种一、二维耦合的水质模型,并应用于洪泽湖水系水质模拟,验证了该耦合水质模型的可靠性和实用性。

本文中对于一维河网部分,采用美国国家环保局开发的 WASP5 模型进行水质模拟,将 WASP5 模型进行了适当改造,其水力部分的模拟采用四点加权隐格式离散的河网水力模型来代替,从而可以直接利用 WASP5 模型进行大型河网的水质计算,实现对湖区水域周边河网一维水域的水质数值模拟。对于湖区区域,采用有限体积法(FVM)配合通量向量分裂格式(FVS)的二维水质模型,实现对湖区水体二维水域的水质数值模拟。在一、二维连接区域利用重叠-投影法,建立了一、二维耦合的整体的水流-水质模型,实现了由一维计算区域向二维计算区域的准确过渡。

1 一维水质模型^[1]

WASP5 是动力箱式模型,模拟范围包括水生生态系统生物量和水中有毒物质的积累与转化,水质与底质的交换等方面,考虑了污染物在水体中的对流、扩散和转化的时空变化规律,具有处理点源、面源及边界交换的功能。

1.1 基本方程

WASP5 模型基本原理是质量守恒定律,质量平衡方程中考虑到水体中溶解的每种物质的所有进出形式,包括点源和面源、对流和扩散输运、物理过程和化学过程以及生物转换过程等。该模型的网格是一系列能代表水体的物理结构扩展的控制体体积,将水体在横向、垂向和纵向上分格,划分的网格包括水流单元与河床单元。

在一个有限单元的水体体积内,水质组分运移的基本方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x}(U_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(U_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(U_z C) + \\ & \frac{\partial}{\partial x}\left(E_x \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(E_y \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \\ & \frac{\partial}{\partial z}\left(E_z \frac{\partial C}{\partial z}\right) + S_L + S_B + S_K \end{aligned} \quad (1)$$

式中: C 为水质组分的浓度; t 为时间; U_x, U_y, U_z 为纵向、横向、垂向对流速度; E_x, E_y, E_z 为纵向、横向、垂向扩散系数; S_L 为点源和面源负荷; S_B 为边界负荷; S_K 为源汇项(源为正,汇为负)。

假定垂向和横向是均匀的,则可得到一维水质组分运移方程:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(AC) = & \frac{\partial}{\partial x}\left(-U_x AC + E_x A \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \\ & A(S_L + S_B) + AS_K \end{aligned} \quad (2)$$

式中: A 为横断面面积,其余同上。

从这一方程的基本形式出发,可以写出各种水质指标的表达式。

1.2 方程的离散

采用显式差分格式对方程进行离散,时间差分用 Euler 前差分,空间用中心差分,差分形式如下:

$$\begin{aligned} \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t} = & -(U_x)^n \left[(1-2\nu) \frac{C_j^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} + \nu \frac{C_{j+1}^n - C_{j-1}^n}{\Delta x} \right] + \\ & (E_x)^n \frac{C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n}{(\Delta x)^2} + (S_L)^n + (S_B)^n + (S_K)^n \end{aligned} \quad (3)$$

式中: ν 为对流因子。 ν 的取值不同,可以改变对流项差分的性质: $\nu=0$ 时为后差分; $\nu=0.5$ 时为中心差分; $\nu \neq 0$ 会引起数值弥散,在模型中一般取 $\nu=0.0 \sim 0.4$ [参见文献 2]。

1.3 水力、水质模型的耦合

在水力、水质模型的耦合中,河网水动力学模型

提供水质计算必需的流速、流量等水力参数,并通过水动力学模拟产生的外部文件把水力、水质模拟连接起来。水质模型在每一个单元中计算水质浓度,在连接单元的交界面上计算水质输运率。

2 二维水质模型^[3]

2.1 控制方程

控制方程由二维浅水方程和污染物对流-扩散方程组成,它的守恒形式可表达为

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial(hu)}{\partial t} + \frac{\partial(hu^2 + gh^2/2)}{\partial x} + \frac{\partial(huv)}{\partial y} &= gh(s_{0x} - s_{fx}) \\ \frac{\partial(hv)}{\partial t} + \frac{\partial(huv)}{\partial x} + \frac{\partial(hv^2 + gh^2/2)}{\partial y} &= gh(s_{0y} - s_{fy}) \\ \frac{\partial(hC_i)}{\partial t} + \frac{\partial(huC_i)}{\partial x} + \frac{\partial(hvC_i)}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{ix}h \frac{\partial C_i}{\partial x}\right) + \\ & \frac{\partial}{\partial y}\left(D_{iy}h \frac{\partial C_i}{\partial y}\right) - K_{Ci}hC_i + S_i \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

式中: h 为水深; u, v 分别为 x, y 向平均流速分量; C_i 为污染物(COD、NBOD、CBOD、 $\text{NH}_3\text{-N}$ 、DO 等)的垂线平均浓度; g 为重力加速度; s_{0x} 和 s_{fx} 分别是 x 向的水底底坡和摩阻坡度; s_{0y} 和 s_{fy} 分别是 y 向的水底底坡和摩阻坡度; D_{ix} 和 D_{iy} 分别为 x, y 向各污染物的扩散系数; K_{Ci} 是各污染物综合降解系数; S_i 为各污染源的源汇项。

方程(4)可表示为矢量形式:

$$\frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}(\mathbf{q})}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{g}(\mathbf{q})}{\partial y} = \mathbf{b}(\mathbf{q}) \quad (5)$$

式中: $\mathbf{q} = \{h, hu, hv, hC_i\}^T$ 为守恒物理量; $\mathbf{f}(\mathbf{q}) = \{hu, hu^2 + gh^2/2, huv, huC_i\}^T$ 为 x 向通量; $\mathbf{g}(\mathbf{q}) = \{hv, huv, hv^2 + gh^2/2, hvC_i\}^T$ 为 y 向通量; $\mathbf{b}(\mathbf{q}) = \{b_1, b_2, b_3, b_4\}^T$ 为源汇项,其中 $b_1=0, b_2=gh(s_{0x} - s_{fx}), b_3=gh(s_{0y} - s_{fy}), b_4=\nabla \cdot [D_i \nabla (hC_i)] + S_i - K_{Ci}hC_i$; ∇ 为梯度算子, $\nabla \cdot \nabla = \nabla^2$ 是 Laplace 算子。

2.2 数值求解

对于任意单元 Ω (图 1),其边界为 $\partial\Omega$,对方程(5)进行积分并利用散度定理可得到 FVM 的基本方程:

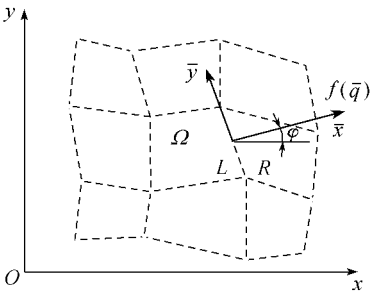


图 1 有限体积示意图

$$\iint_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{q}}{\partial t} d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{F}(\mathbf{q}) \mathbf{n} dL + \iint_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{q}) d\Omega \quad (6)$$

式中: $\mathbf{n}$ 为单元边界的外法向单位向量, $d\Omega$ 和 dL 为面积分和线积分微元, $\mathbf{F}(\mathbf{q}) \mathbf{n}$ 为法向数值通量, $\mathbf{F}(\mathbf{q}) = \{f(\mathbf{q}), g(\mathbf{q})\}^T$ 。

离散后, FVM 基本方程的最终形式为

$$A \frac{dq}{dt} = - \sum_{j=1}^m F_n^j(\mathbf{q}) L_j + b_*(\mathbf{q}) \quad (7)$$

式中: $b_*(\mathbf{q})$ 为单元的源项平均值; m 为单元边总数; L_j 为第 j 单元边的长度。

单元边法向通量为

$$F_n(\mathbf{q}) = f(\mathbf{q}) \cos \varphi + g(\mathbf{q}) \sin \varphi \quad (8)$$

式中: φ 为法向向量 $\mathbf{n}$ 与 x 轴的夹角。

根据通量向量 $f(\mathbf{q})$ 和 $g(\mathbf{q})$ 的旋转不变性, 有:

$$F_n(\mathbf{q}) = T(\varphi)^{-1} f(\bar{\mathbf{q}}) \quad (9)$$

将式(9)代入式(7), FVM 方程表达为

$$A \frac{dq}{dt} = - \sum_{j=1}^m T(\varphi)^{-1} f(\bar{\mathbf{q}}) L_j + b_*(\mathbf{q}) \quad (10)$$

其中 $\bar{\mathbf{q}} = T(\varphi) \cdot \mathbf{q}$; $T(\varphi)$ 和 $T(\varphi)^{-1}$ 是坐标旋转变换及逆变换矩阵:

$$T(\varphi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$T(\varphi)^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (11)$$

由方程(10)可见, 问题又归结为确定法向通量 $f(\bar{\mathbf{q}})$, 即跨单元边界的水量、动量、污染物运输量的通量, 此时可通过解一维黎曼问题求得。模型采用平面对称网格, 时间项用显格式离散。由黎曼近似解模型 Osher 格式 (Osher scheme) 求解法向数值通量, 参见文献 [4]。

3 一、二维水质模型的耦合^[5]

一、二维水质模型耦合的出发点在于要求一、二维耦合区内公共单元的水质浓度满足相容条件, 即耦合公共区内的水质浓度应满足质量守恒条件。

设 $U = [Z, Q, C]$ 为一维区内的水位、流量、污染物浓度, V 为二维区的同一物理量, L 为 Courant 数, 耦合过程分步算法如下:

a. 一维虚边界的时间滞后条件取为 $\Delta U^{n+1} = 0$;

b. 求解一维隐格式 (包括虚节点在内), 可得到各水力、水质要素在二维真实边界点处的时间精确

解, 若时间步长不等, 则对其在一维时间步长内插合适的物理量 (如水位、流量、污染物浓度等), 将其作为二维区计算的边界条件;

c. 虚拟重叠区域的投影, 即将二维区计算得到的精确解投影到一维区虚拟点, 即 $U_{-i+1}^{n+1} = V_{k,i}^{n+1}$, $i = 1, 2, \dots, L$, k 为二维区对应物理量的下标;

d. 重复上述步骤, 直至计算结束, 见图 2。

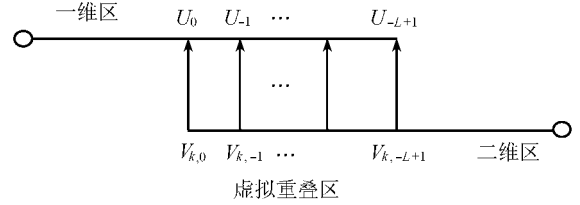


图 2 一、二维连接处重叠-投影示意图

4 模型验证

4.1 计算条件

苏北洪泽湖及周边河网所形成的水系以洪泽湖为中心, 区域内河道地势平坦, 河湖相串, 水网密布, 纵横交错, 沿湖部分连接河道, 如二河、三河、灌溉总渠等, 已建闸控制。

对周边河网进行概化后, 得到概化河道 32 条, 河流节点 81 个, 边界节点 25 个, 闸门 11 个, 对湖区利用网格自动剖分软件将计算区域剖分成无结构网格, 最终生成 3 146 个不规则四边形网格单元, 然后根据水下地形实测数据, 采用内插法确定各单元高程。

针对洪泽湖水系, 采用典型年 (1978 年) 典型水文站点的水量实测资料确定水力模型中的糙率, 得到河道的计算糙率分布在 0.0162 ~ 0.0220 之间; 采用二维水流计算参数的反分析方法^[6], 得到洪泽湖湖区的二维计算糙率在 0.0175 ~ 0.0231 之间。

考虑到计算稳定性和计算精度的需要以及所划分网格单元大小, 依据水流和水质的不同计算特征, 选定计算时间步长均为 600 s。

计算区域的上、下边界为水位过程, 若完全开启按堰顶溢流计算, 若完全关闭按零流量计算, 闸及泵站工况按典型年实际运行工况设定, 河道内初始水位取正常水位 11.5 m, 初始流量条件取零, 湖泊内初始水位条件取正常水位 11.5 m, 初始流速条件取零。选用 COD_{Mn} 为主要控制指标来进行水质模拟, 边界水质条件都按照 GB 3838—2002《地表水环境质量标准》Ⅴ类水的水质标准给定, 河道的初始水质条件根据相应的功能区划给定, 湖泊的初始水质条件采用Ⅲ类水的水质标准给定。

4.2 计算结果与分析

从模型计算输出的流速场结果来看, 对于湖区

部分,淮河入湖河口区的流速最大,在非河流入口区沿岸带流速较小,微水区的流速比沿湖岸浅滩地区的要大,在成子湖湾和湖西沿岸带,湖流速度很小,有时甚至为零,与实际观测的湖流流态基本相符。将典型年(1978年)6月份的流量计算结果,与有流量资料的水文站的实测流量对比,结果列入表1中。由表1可见,计算结果合理。

表1 90%保证率下典型年设计流量与实测流量对比结果 $m^3 \cdot s^{-1}$

主要河道	站名	设计流量	实测流量范围	实测流量均值
苏北灌溉总渠(洪泽)	高良涧闸	23.35	0~134	67.90
新汴河	团结闸(闸下游)	60.67	0.24~80	53.30
淮洪新河	峰山	84.86	2.24~100.46	83.10
徐洪河(小王庄-金锁)	金锁镇	77.77	5.66~50.71	25.05
徐洪河(金锁-入湖)	金锁镇	32.13	5.66~50.71	25.05
新濉河	泗洪	28.18		
濉河	泗洪	31.50	-4.08~50.0	27.04

根据模型计算输出的水质结果来看:就整个水系的浓度场来看,在河道入湖处 COD_{Mn} 浓度较高,湖泊西部水域的浓度值高于东部水域,且经过一段时间的降解过程, COD_{Mn} 浓度逐步趋于稳定状态,与实际水质检测值的变化趋势吻合。湖区 COD 浓度场分布见图3。

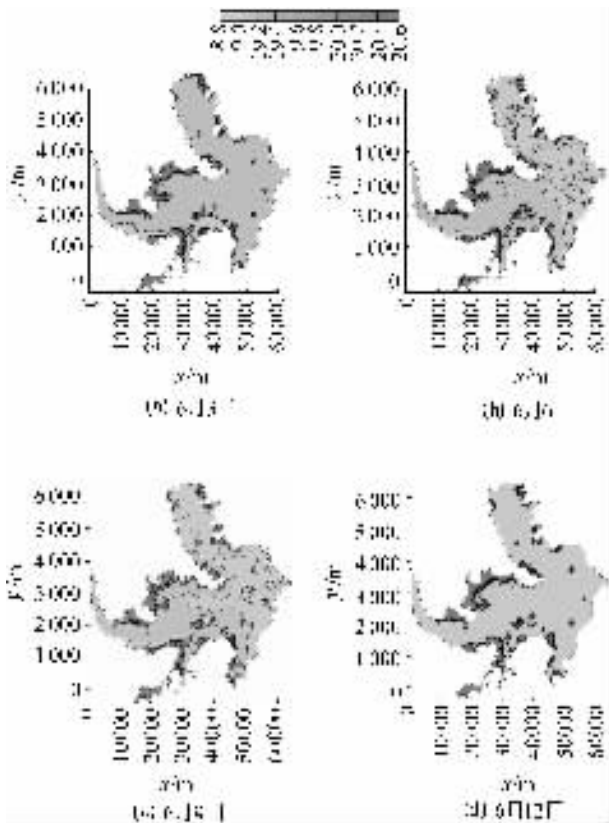


图3 洪泽湖典型年 COD 浓度场分布

5 结 论

本文中建立了适合多湖泊-河网水系的一、二维耦合水质模型,采用质量守恒相容条件的区域重叠-投影技术,并应用了FVM的FVS格式来计算污染物的通量,使无结构网格在水质模型中得到了应用。该耦合模型物理概念明晰,稳定性好,容易编程实现,既能够耦合计算,又能够独立分区计算,具有时间精度高的特点。模型的验证结果也表明了该模型的可靠性和实用性,能够解决湖泊与周边连接河网水系的水质定量预测问题。

但是,在这种耦合的水质模型中,由于采用了质量守恒相容条件的区域重叠技术,计算时一、二维区域若采用的时间步长不同,且在重叠区域采用基于质量守恒相容条件的显式方法离散,可能会引起累积误差,因此尚需进一步改进。而且一般湖区的水位会随着季节和年度发生变化,有时这种变化会很大,此时采用一、二维耦合模型进行计算,重叠区间的设定会遇到一定的困难。如何设定一个可适应不同水位条件又可保证一定精度的通用重叠区间,以改善模型的可靠性和模拟能力,尚需进一步研究。

参考文献:

[1] ROBERT B A. The water quality analysis simulation program , WASP5 PART A : Model documentation[M]. Washington :U S EPA ,1993.

[2] 赖锡军,汪德. 非恒定一维支流与二维主流连接区数值模型新法[J]. 水利水运工程学报, 2002, (2): 48-51.

[3] ZHAO D H, SHEN H W, LAI J S, et al. A finite volume two-dimension unsteady flow model for river basin[J]. J Hydr Engng, 120(7) 863-883.

[4] 赵棣华,姚琪,蒋艳,等. 通量向量分裂格式的二维水流-水质模拟[J]. 水科学进展, 2002, 13(6) : 701-706.

[5] 汪德. 计算水力学理论与应用[M]. 南京: 河海大学出版社, 1989: 172-180.

[6] 李光积. 流域洪水演进模型及其参数反问题研究[D]. 南京: 河海大学, 2001.

(收稿日期 2005-11-04 编辑 徐 娟)

