

基于有限单元算法的三峡水库水质模拟

许其功¹, 刘鸿亮², 冒亚明³, 沈珍瑶¹

(1. 北京师范大学 环境学院, 北京 100875; 2 中国环境科学研究院, 北京 100012;
3. 中国石油勘探开发研究院 廊坊分院, 河北 廊坊 102801)

摘要: 三峡水库建成蓄水后,随着库区经济的发展,污染物排放量有进一步增加的趋势。为全面了解水库建成后污染物排放对水质的影响及水质变化趋势,将二维水质模型和有限单元算法引入到水质模拟预测中,开展了二维水质模型模拟三峡库区水质的适用性研究。经验证, $\text{NH}_3 - \text{N}$ 模拟值与实测值的误差最大,为 23.8%; BOD_5 模拟值与实测值的误差最小,为 5.3%,说明所采用的模型具有较高的预测精度,能够用来预测三峡水库蓄水后的水质变化情况。预测结果表明,三峡水库建成后,重庆至三峡大坝的污染物浓度总体上呈现出逐渐减小的趋势,但是受城市工业废水、生活污水和农业非点源排放的影响,城市江段和支流河口区的岸边污染物浓度明显高于长江中心处的污染物浓度。

关键词: 三峡水库; 水质模型; 有限单元算法

中图分类号: TU991 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000 - 4602(2007)01 - 0026 - 05

Simulation of Three Gorges Reservoir Water Quality Using Finite Element Algorithm

XU Qi-gong¹, LU Hong-liang², MAO Ya-ming³, SHEN Zhen-yao¹

(1. School of Environment, Beijing Normal University, Beijing 100875, China; 2 Chinese Research Academy of Environmental Science, Beijing 100012, China; 3 Langfang Branch, PetroChina Exploration & Development Research Institute, Langfang 102801, China)

Abstract: Within the Three Georges Reservoir Area, the pollutant quantity has increased owing to economical developments. Therefore, a two-dimensional water quality model and finite element algorithm were built for an experiment. The effects of pollutant discharge on water quality and the trend of water quality changes were to be determined. It is found in the model that the $\text{NH}_3 - \text{N}$ concentration is off the measured concentration by the greatest amount, 23.8% and that the BOD_5 concentration is off by the least amount, 5.3%. These differences in concentrations prove that the simulative predictions should be reliable. The calibrated results show that there is a decrease in pollutant concentration from Chongqing to the dam area. However, because of the effects of industrial and domestic wastewater and non-point pollution source on the water quality in nearby cities, the shore pollutant concentration in municipal sections and estuary is higher than that of the center of the Yangtze River.

Key words: Three Georges Reservoir; water quality model; finite element algorithm

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973)项目(2003CB415204); 中国博士点专项基金资助项目(20050027011)

2003年6月,三峡水库二期蓄水后,受回水顶托的影响,库区部分支流的流速变缓,支流回水区的水质恶化趋势进一步加剧,部分次级河流发生了不同程度的富营养化现象^[1]。水库建成后,其运行和调度改变了河流的天然流态,继而影响污染物在水库中的迁移转化^[2],为揭示三峡水库建成后的水质变化情况,应用基于有限单元算法的二维水质模型对建成后的三峡水库水质进行了预测。应用数学模型对水质进行模拟和预测,是人们了解河流及水库水质变化趋势的重要手段^[3,4]。另外,由于水质模拟中存在着很多的不确定性因素,因此运用不确定性模型进行水质的模拟与预测是近年来的主要研究方向之一^[5,6]。

1 数学模型

1.1 基本方程

采用二维水质模型进行模拟,其基本方程为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u_x \frac{\partial c}{\partial x} + u_y \frac{\partial c}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + S \quad (1)$$

式中 c —— (x, y) 处污染物的浓度, mg/L

S ——源汇项, g/s

u_x, u_y ——分别为水流沿 x, y 轴方向的流速分量, m/s

D_x, D_y ——分别为纵向离散系数和横向扩散系数, 1/d

1.2 算法简介

有限单元算法的基本思路是把一个连续的环境空间离散为若干个单元,而每个单元都可被看作一个完全混合的子系统,通过对每个单元建立质量平衡方程,就可建立体系的模型。

$$V_j \frac{dc_j}{dt} = (G_{ji} + H_{ji}) + S_j \quad (2)$$

式中 V_j ——第 j 个有限单元的体积, m^3

S_j ——第 j 个单元中的物质来源与削减量, g/s

G_{ji} ——第 $j(j=1, 2, \dots, m)$ 个单元与第 $i(i=1, 2, \dots, n)$ 个单元之间由推流作用引起的质量交换, g/s

H_{ji} ——第 j 个单元与第 i 个单元之间由扩散作用引起的质量交换, g/s

在稳态条件下,物质平衡方程可写为:

$$\{ [D_{ji} - (1 - \beta_{ji})Q_{ji}] \} C_i - [(\beta_{ji}Q_{ji} + D_{ji}) C_j] = S_j \quad (3)$$

式中 D_{ji} ——单元 j 和 i 之间的弥散系数, m^2/s

β_{ji} ——推流交换系数,通常取 1

Q_{ji} ——单元 j 和 i 之间的介质流量

C_i, C_j ——分别为网格 i 和 j 的污染物浓度, mg/L

D_{ji} 的计算公式为:

$$D_{ji} = D_{ji} A_{ji} / L_{ji}$$

式中 A_{ji} ——单元 j 和 i 之间的界面面积

L_{ji} ——特征长度,可取单元 j 和单元 i 之间的重心距

在对三峡水库的水质模拟中,将水库分为 $m \times n$ 个单元,因而可以写出 $m \times n$ 个与式(3)相似的方程,由这 $m \times n$ 个方程就可以得到系统的矩阵方程:

$$AC = S \quad (4)$$

式中 C ——由系统各单元的污染物浓度组成的 $m \times n$ 维向量

S ——由各单元与系统外交换的污染物质组成的 $m \times n$ 维向量

A ——污染物浓度系数矩阵

由式(4)可以计算出各单元污染物浓度:

$$C = A^{-1} S$$

1.3 网格单元划分

为满足二维水质模型有限单元算法的计算需要,将三峡水库划分成一定数量的计算网格,即纵向为 20条流带,纵向每 500 m设一个计算断面,并将长约 660 km的水库划分为等距离的 20段,对每段分别进行计算。这样,就将三峡水库划分成了 26 400个平面网格,可满足有限单元算法的计算要求。

由于有限单元算法是基于每个网格分别计算的方法,而每个网格内的水深、流量、流速、扩散系数、衰减系数等参数都各不相同,为满足计算要求并保证计算结果的相对准确性,模拟中对每个网格内的参数分别进行了计算;在进行同一断面上的网格内参数计算时,则取断面水深、流速等参数的平均值进行计算。

2 模型输入

2.1 横向扩散系数

横向扩散系数反映了河流对污染物的横向扩散

能力,是研究二维水质模型的一个基本参数,根据 Fisher 的研究,它与河流其他特征有关,即:

$$E_z = hu^* \quad (5)$$

式中 E_z ——河流横向扩散系数, m^2/s

——无量纲横向扩散因子

h ——河流水深, m

u^* ——河流摩阻流速, m/s

根据三峡水库建成后的水深、河流比降、水流速度等因素,即可确定横向扩散系数。在此次研究中,根据“三峡水利枢纽环境影响评价报告书”中所列的 E_z 值,通过换算得 $E_z = 0.157$; 横向扩散系数的计算量为每种设计条件下的 1 320 个值,同一横断面网格内的横向扩散系数采用均值进行计算。

2.2 污染物衰减系数

BOD_5 是反映水体污染状况的重要指标之一。在进行 BOD_5 的模拟时,人们常考虑的参数有生化衰减系数和沉降系数,在此次研究中仅考虑生化衰减系数,而假定沉降系数为零。耗氧反应过程受污水性质、 BOD_5 浓度、水温、水流条件和水体中溶解氧浓度等因素影响。 COD 衰减系数的率定与 BOD_5 的类似,其主要受水流条件和温度的影响。根据三峡水库的相关研究成果^[7-10], BOD_5 的衰减系数可表示为流速、水深和温度的函数,见式(6); COD 和 NH_3-N 的衰减系数可以式(7)表示。

$$K_b = (K_{20} + \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (6)$$

$$K = a(b + cI^0.599 \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (7)$$

式中 K_b —— BOD_5 的衰减系数, $1/d$

K —— COD 或 NH_3-N 的衰减系数

i ——河流比降

u ——水流速度, m/s

T ——水温,

K_{20} ——20 时静止环境中的 BOD_5 衰减系数

a ——系数

b, c ——常数

2.3 污染物来源

污染物主要有 4 种来源: 长江、嘉陵江、乌江入库断面的外来输入,其污染物负荷量与来水浓度和入库流量有关; 库区直排长江的点源污染,主要是库区内的重点工业污染源和城市污水污染源;

库区沿岸的农业非点源污染,主要为农田径流及经雨水淋溶进入长江的垃圾; 流动污染源,即在库区内航行的大型船舶排放的含油污水。

对于工业废渣污染源,主要含重金属污染物,而含有机物及总磷较少; 另外,对于水库蓄水后淹没土壤中污染物的释放这部分负荷,则很难建立适当的模型来计算,因此在进行水质预测时未将以上两种污染源统计在内。对于三峡库区的不同污染源,其排放的时空特性有很大的差别,因模型需要以 g/s 为单位进行污染物的输入,故在模拟过程中需要根据库区各类污染源的排放特点对污染源进行简单的转换。

3 结果和讨论

3.1 模型验证

以重庆市的黄谦断面为模拟的起始点,选择 1998 年丰水期进行三峡水库建成后二维水质模型的验证。丰水期验证江段选取重庆黄谦至重庆主城区的长约 100 km 的江段,在该江段内的常规水质监测断面是望龙门和寸滩。水质验证的指标为 COD 、 BOD_5 、 NH_3-N 三项。由《长江三峡库区城市江段水质监测报告》可知,在进行水质监测时,每个断面设左、中、右三条垂线,采集垂线水面下 0.5 m 深的水样进行分析,其结果代表断面总体水质。由于所用二维水质模型可计算整个水面每个点的污染物浓度,因此在模型验证时采用两侧岸边的计算浓度值与实测值进行了比较,并得出相对误差。

对于 COD 而言,望龙门断面的左岸和右岸模拟值分别为 10.3 mg/L 和 12.1 mg/L,实测值为 11.4 mg/L,左、右岸与实测值的误差分别为 9.6% 和 6.1%; 寸滩断面的左岸和右岸模拟值分别为 10.1 mg/L 和 12.0 mg/L,误差分别为 11.4% 和 5.3%。望龙门断面 BOD_5 的左、右岸模拟值分别为 2.0 mg/L 和 2.2 mg/L,与实测值的误差分别为 5.3% 和 15.8%; 寸滩断面 BOD_5 的左、右岸模拟值分别为 2.0 mg/L 和 2.1 mg/L,与实测值的误差分别为 5.3% 和 10.5%。由于缺少望龙门断面处的 NH_3-N 实测值,因此对 NH_3-N 的验证只在寸滩断面处进行。寸滩断面 NH_3-N 的左、右岸模拟值分别为 0.16 mg/L 和 0.18 mg/L,与实测值的误差分别为 23.8% 和 14.3%。由以上结果可知,三个重要指标的模拟值与实测值比较吻合,说明所应用的二维水质模型具有较高的精度,能够较好地模拟计算三峡

库区水质的变化情况。

3.2 模拟结果

模拟了三峡水库建成后 COD、BOD₅、NH₃ - N 三种污染物浓度的变化趋势, 结果见图 1~3。

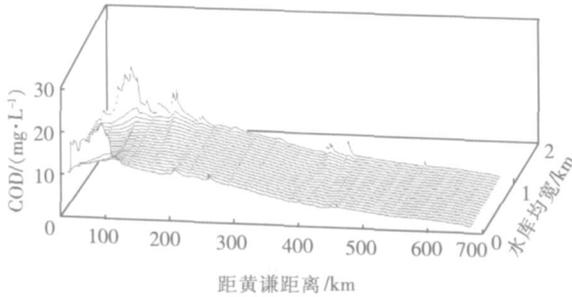


图 1 三峡水库 COD 浓度的预测值

Fig 1 Simulated COD concentration of Three Georges Reservoir

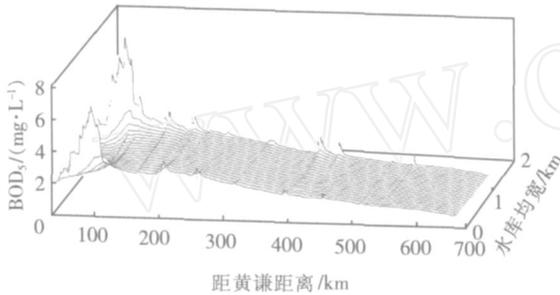


图 2 三峡水库 BOD₅ 浓度的预测值

Fig 2 Simulated BOD₅ concentration of Three Georges Reservoir

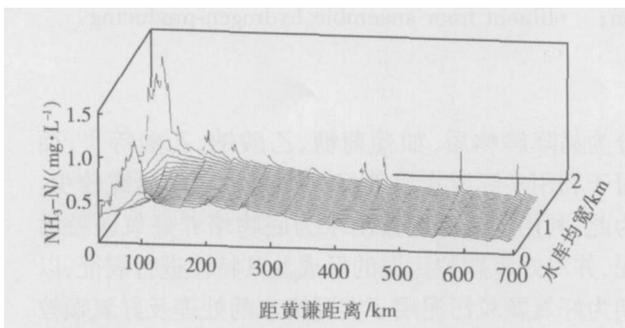


图 3 三峡水库 NH₃ - N 浓度的预测值

Fig 3 Simulated NH₃ - N concentration of Three Georges Reservoir

由水质模拟结果可知, 由于重庆主城区位于水库的回水末端, 附近的河道形态、水流条件变化不

大, 因此水库建成前后的水质变化很小。在库区的淹没江段内, 随着水深的加大, 水流速度减小, 一方面, 由于污染物在水中的停留时间增加, 污染物衰减总量也明显增加, 因而污染物浓度沿程变化很快, 在淹没区内, 各种污染物的浓度都急剧下降; 另一方面, 水流速度的减小导致泥沙沉降加快, 颗粒态污染物随泥沙沉降而进入江底, 也导致污染物浓度沿程降低, 此时的坝前水质要比建库前的水质状况好。

预测结果还表明, 在沿江城镇的排污口和支流河口处, 由于受城市生活污水、工业废水和农业非点源污染排放的影响, 这些地点的岸边污染物浓度明显高于江中心区, 说明城市排污和农业非点源污染对岸边水质的影响很大。

4 结论

运用模型进行河流、湖泊和水库的水质模拟研究, 是了解水体水质变化的重要手段之一, 它可以为决策者进行水库、湖泊的管理提供科学依据。三峡水库建成后, 由于受城市工业废水、生活污水的岸边排放和农业非点源污染的影响, 岸边的污染物浓度较高, 而江心区由于流速较大, 对污染物的稀释扩散能力强, 污染物浓度较低, 水质受影响的程度较小。因此, 充分利用水库的自净能力, 进行城市污水的中心排放是防止水库水质恶化的重要手段之一。

三峡水库建成后, 污染物浓度从库首至库尾呈现出逐渐降低的趋势。但是, 受城市污水排放的影响, 大城市库段的岸边水质状况仍不容乐观。在部分支流河口处, 由于农业非点源污染物的排放, 已经出现了不同程度的富营养化现象, 然而有关三峡库区的非点源污染研究却开展较少, 因此非点源污染及其对水库水质的影响应成为今后三峡库区水污染防治工作的重点。

参考文献:

[1] 李永建, 李斗果, 王德蕊. 三峡工程二期蓄水对支流富营养化的影响 [J]. 西南农业大学学报 (自然科学版), 2005, 27 (4): 474 - 478

[2] Wu Ray-Shyan, Sue Wen-Ray, Chen Ching-Ho, et al Simulation model for investigating effect of reservoir operation on water quality [J]. Environ Software, 1996, 11 (1 - 3): 143 - 150

(下转第 33 页)

85%增加到颗粒污泥成熟稳定后的 95%左右。

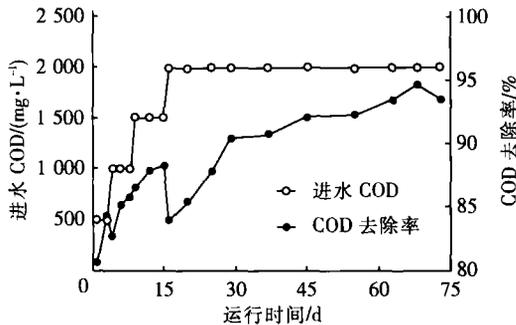


图 7 对 COD 的去除率随运行时间的变化

Fig 7 Variation of COD removal efficiency with operating time

3 结论

以普通絮体活性污泥为种泥,以厌氧产氢反应器出水为底物,利用序批式反应器在 60 d 内能够培养出具有较大粒径和优异沉降性能的好氧颗粒污泥。

活性污泥的颗粒化过程可以分为污泥适应期、颗粒污泥形成期、颗粒污泥生长期和颗粒污泥成熟期四个阶段。

在活性污泥的颗粒化过程中,污泥体积指数逐渐降低,而污泥的粒径、沉速和浓度明显增加;伴随着颗粒污泥的形成,反应器对 COD 的去除能力增强。

参考文献:

- [1] Morgenroth E, Sherden T, van Loosdrecht M C M, *et al* Aerobic granular sludge in a sequencing batch reactor [J]. *Water Res*, 1997, 31 (12): 3191 - 3194.
- [2] Peng D, Bemet N, Delgenes J P, *et al* Aerobic granular sludge—a case report [J]. *Water Res*, 1999, 33 (3): 890 - 893.
- [3] Zheng YM, Yu H Q, Sheng G P. Physical and chemical characteristics of granular activated sludge from a sequencing batch airlift reactor [J]. *Process Biochem*, 2005, 40 (2): 645 - 650.
- [4] Liu Y, Tay J H. State of the art of biogranulation technology for wastewater treatment [J]. *Biotechnol Adv*, 2004, 22 (7): 533 - 563.
- [5] 崔成武,纪树兰,任海燕,等. 好氧颗粒污泥形成的影响因素及应用 [J]. *中国给水排水*, 2005, 21 (10): 31 - 35.
- [6] APHA. Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater (19th ed) [M]. Washington DC: American Public Health Association, 1995.
- [7] Zheng YM, Yu H Q, Liu S J, *et al* Formation and instability of aerobic granules under high organic loading conditions [J]. *Chemosphere*, 2006, 63 (10): 1791 - 1800.

作者简介:郑煜铭 (1978 -), 男, 福建泉州人, 博士, 研究方向为水污染控制。

电话: (0551) 3607592

E-mail: hqyu@ustc.edu.cn

收稿日期: 2006 - 08 - 28

(上接第 29 页)

- [3] David P Hamilton, Geoffery Schladow. Controlling indirect effects of flow diversions on water quality in an Australian reservoir [J]. *Environ Int*, 1995, 21 (5): 583 - 590.
- [4] Mahajan A U, Chalapatirao C V, Gadkari S K. Mathematical modeling (A tool for coastal water quality management) [J]. *Water Sci Technol*, 1999, 40 (2): 151 - 157.
- [5] Ahmad Shamshad, Khan Iqbal H, Parida B P. Performance of stochastic approaches for forecasting river water quality [J]. *Water Resour*, 2001, 35 (18): 4261 - 4266.
- [6] Gunter James T, Hodges Donald G, Regens James L. Probability models for predicting local water quality regulations in the southern United States [J]. *Forest Policy and Economics*, 2005, 7 (6): 868 - 876.
- [7] 李锦秀,廖文根,黄真理. 三峡水库整体一维水质数学模拟研究 [J]. *水利学报*, 2002, (12): 7 - 10.
- [8] 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*, 2002, (8): 84 - 87.
- [9] 王祥三,陈小江. 三峡库湾二维随机水质预测模型的研究 [J]. *水电能源科学*, 2001, 19 (3): 55 - 58.
- [10] 侯国祥,翁立达,叶闯,等. 三峡水库重庆库区水质预测 [J]. *长江科学院院报*, 2002, 19 (1): 13 - 16.

作者简介:许其功 (1972 -), 男, 河南周口人, 博士研究生, 研究方向为流域水污染防治。

电话: 13366835103

E-mail: xuqigong@tom.com

收稿日期: 2006 - 08 - 20