

# 有限单元算法在水质模拟中的应用研究

许其功<sup>1</sup>, 刘鸿亮<sup>2</sup>, 沈珍瑶<sup>1</sup>

(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)

**摘要:** 利用模拟河流水质的二维水质模型和有限单元算法, 使用 MATLAB 软件进行计算程序的编写, 开展该模型和有限单元算法在三峡库区水质模拟的适用性研究。有限单元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, 每一个单元都可以是作为一个完全混合的子系统, 通过对每一个单元建立质量平衡方程, 从而建立起体系模型。模拟因子包括: BOD<sub>5</sub>、COD、NH<sub>3</sub>-N 三项。由计算值与监测值进行比较后可知, 与监测值误差最大的为 NH<sub>3</sub>-N, 可达 23.8% 最小的为 BOD<sub>5</sub>, 误差为 5.3%。由此可以说明, 本课题的用于三峡水库水质预测的二维水质模型具有较高的精度, 能够用来模拟预测三峡水库蓄水以后的水质变化状况。

**关键词:** 三峡水库; 水质模型; 有限单元算法; MATLAB

**中图分类号:** X11 **文献标识码:** A **文章编号:** 1003-6504(2006)09-0011-03

应用数学模型对水库水质进行模拟和预测, 是人们了解水库水质变化趋势的重要手段, David 对 DYRESM 模型进行了详尽的论述<sup>[1]</sup>。Gray 等建立了滇池的水质模型, 并对总磷的浓度变化趋势进行了预测<sup>[2]</sup>。另外, 随机方法也被广泛的应用于河流的水质预测<sup>[3]</sup>。三峡工程二期蓄水后, 三峡库区排放的各类污染物几乎未经任何处理直接进入三峡库区, 成为三峡水库水质恶化的极大隐患。因此, 为了解三峡水库建成后的水质变化趋势, 本文采用河流二维水质基本方程和有限单元算法将建成后的三峡水库离散为若干网格, 输入网格的参数包括离散系数、扩散系数、污染负荷等, 网格输出为所模拟的污染物浓度。

## 1 模型及算法

### 1.1 基本方程

二维水质模型是通过一个微小的体积元的质量平衡推导的, 在这个体积元中, x、y 方向上存在浓度梯度, 其基本模型为<sup>[4]</sup>:

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

式中: c 为 x、y 处污染物的浓度, mg/L;  $u_x$ 、 $u_y$  分别为水流沿 x、y 坐标方向的流速分量, m/s;  $D_x$ 、 $D_y$  分别为纵向离散系数和横向扩散系数,  $1/d$ ; S 为源汇项, g/s;

### 1.2 算法简介

有限单元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, 每一个单元都可以是作为一个完全混合的子系统, 通过对每一个单元建立质量平衡方程, 从而建立起体系模型。

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

式中:  $V_j$  为第 j 个有限单元的体积,  $m^3$ ;  $S_j$  为第 j 个单元中的物质来源与消减量, g/s;  $G_{ji}$  为第 j 个单元和第 i 个单元之间由推流作用引起的质量交换, g/s;  $H_{ji}$  为第 j 个单元和第 i 个单元之间由扩散作用引起的质量交换, g/s ( $i=1, 2, \dots, n, j=1, 2, \dots, m$ )。

推流作用质量交换项可以写作:

$$G_{ji} = Q_{ji} [\delta_{ji} C_i + (1 - \delta_{ji}) C_j] \quad (3)$$

式中:  $Q_{ji}$  为单元 j 和 i 之间的介质流量;  $\delta_{ji}$  为推流交换系数, 通常可取为 1。弥散交换量可写作:

$$H_{ji} = D_{ji} (C_i - C_j) \quad (4)$$

$$D_{ji} = D_{ji} (A_{ji} / L_{ji}) \quad (5)$$

式中:  $D_{ji}$  为单元 j 和 i 之间的弥散系数,  $m^2/s$ ;  $A_{ji}$  为单元 j 和 i 之间的界面面积,  $m^2$ ;  $L_{ji}$  为特征长度, 可取为单元 j 和 i 之间的重心距, m。

在稳态条件下, 将式 (3) 和 (4) 带入 (2) 得

$$\left\{ \sum_i [D_{ji} - (1 - \delta_{ji}) Q_{ji}] \right\} C_i - \sum_i [(\delta_{ji} Q_{ji} + D_{ji}) C_j] = S_j \quad (6)$$

上式即为表达第 j 个单元的物质平衡方程。在对三峡水库的水质模拟中, 水库被分为  $m \times n$  个单元, 就可以写出  $m \times n$  与上式相似的方程, 由这  $m \times n$  个方程可以写出系统的矩阵方程:

$$\vec{AC} = \vec{A}$$

式中:  $\vec{C}$  为系统各单元的污染物浓度组成的  $m \times n$  维向量;  $\vec{S}$  为由各单元与系统外交换的污染物质组成的  $m \times n$  维向量;  $\vec{A}$  为污染物浓度系数矩阵。由式 (7) 可以计算出各单元污染物浓度的公式:  $\vec{C} = \vec{A}^{-1} \vec{S}$ 。

### 1.3 空间离散

为满足有限单元法的计算需要, 将待模拟区域离散为正交曲线坐标系统。在待模拟河段中, 沿水流方

基金项目: 国家科技攻关计划资助项目 (2003BA614-04); 国家重点基础研究计划 973 项目 (2003CB415204)

作者简介: 许其功 (1972-), 男, 博士, 主要从事流域水污染防治的研究。(电子邮箱) xuqigong@tom.com。

向将河宽分成  $m$  个流带, 同时在垂直水流方向, 将河段分为  $n$  个子河段, 构成一个含有  $m \times n$  个有限单元的平面网格系统, 对每一个有限单元来说, 水质变化的原因包括: 由纵向或横向水流的携带作用造成的输入与输出; 由纵向及横向弥散作用形成的输入与输出; 污染物的转化与衰减; 系统外部的输入。根据这些关系, 可以针对每一个有限单元写出质量平衡方程, 然后联立求解  $m \times n$  个方程, 就可以获得二维系统中的污染物分布。

二维系统中的横向水流分量的确定是非常困难的。如果在划分流带时, 使得每条流带的流量保持恒定, 就可以忽略横向的水流交换。为了保持流带内的流量恒定, 流带的宽度就必然要随河流的形状不断变化。河流断面上任一单位宽度上的流量可以用下式计算:

$$q = a \left( \frac{h}{H} \right)^b \frac{Q}{B} \quad (7)$$

式中:  $q$  为河流断面上某一单位宽度上的流量;  $h$  为河流断面上某一单位宽度上的局部水深;  $H$  为河流断面的平均水深;  $Q$  为河流流量;  $B$  为河流断面的水面宽度;  $a, b$  为参数, 在弯曲的江段中,  $0.80 \leq a \leq 0.95, 1.78 \leq b \leq 2.48$ 。

确定河流断面上的单宽流量之后, 就可以求出断面上的横向累计流量, 根据累计流量曲线, 可以确定相对于某一确定流量的流带的宽度。由此, 由流线和断面线构成一个正交曲线坐标系统, 这个系统共含有  $m \times n$  个单元。单元的长度为  $\Delta x_i$ , 宽度为  $\Delta y_i$ , 深度为  $h_i$ 。如果假定每一个单元内部的浓度是均匀的, 就可以就每一个单元写出物质平衡方程, 从而建立起系统水质模型。

## 2 参数估值

### 2.1 横向扩散系数

横向扩散系数是河流对污染物横向扩散能力的一个度量, 是研究二维水质模型的一个基本参数, 根据 Fisher 的研究, 它与河流其它特征有关, 即:

$$E_x = a h u^* \quad (8)$$

式中:  $E_x$  为河流横向扩散系数  $m^2/s$ ;  $a$  为无量纲横向扩散因子;  $h$  为河流水深  $m$ ;  $u^*$  为河流摩阻流速  $m/s$ ;

根据三峡水库建成后的模拟水深、河流比降、水流速度等因素, 即可确定横向扩散系数, 在本课题中,  $a$  值暂取“三峡水利枢纽环境影响评价报告书”中所列的  $E_x$  值, 通过换算得  $a=0.157$ 。同横向扩散系数的计算相同, 本课题的纵向扩散系数计算量为每种设计条件 1320 个值, 同一个横断面上的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

#### 2.2.1 BOD<sub>5</sub> 模型参数

BOD<sub>5</sub> 是反映水体污染状况的重要指标之一。在进行 BOD<sub>5</sub> 的模拟时, 人们常考虑的参数有生化衰减系数

和沉降系数, 本文在确定 BOD<sub>5</sub> 的衰减系数时, 仅考虑生化衰减系数, 假定沉降系数为零。耗氧反应过程受污水性质、BOD<sub>5</sub> 浓度、水温、水流条件和水体中溶解氧浓度等因素影响。根据三峡水库的相关研究成果<sup>[9]</sup>, 将 BOD<sub>5</sub> 的衰减系数表示为流速、水深和温度的函数如下:

$$K_b = (K_{20} + a \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (9)$$

根据库区江段多组次的测试分析, 并选择清溪场至奉节洪峰过程的水文水质同步资料, 利用模型进行率定, 得到三峡库区江段 BOD<sub>5</sub> 衰减系数计算公式为:

$$K_b = (0.015 + 0.197 i^{0.589} \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (10)$$

式中:  $K_b$  为 BOD<sub>5</sub> 衰减系数 ( $1/d$ );  $i$  为河流比降;  $u$  为水流速度  $m/s$ ;  $h$  为水深  $m$ ;  $T$  为水温 ( $^{\circ}C$ );  $K_{20}$  为 20  $^{\circ}C$  时静止环境中的 BOD<sub>5</sub> 衰减系数;

#### 2.2.2 COD 模型参数

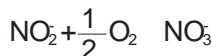
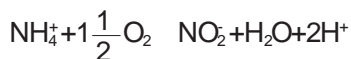
COD 的衰减系数的率定与 BOD<sub>5</sub> 类似, 系数主要受水流条件和温度的影响, 假定是温度和流速的函数, 经率定得到三峡库区江段 COD 的衰减系数计算公式如下:

$$K_c = a \times (0.015 + 0.197 i^{0.589} \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (11)$$

式中:  $a$  为系数, 本文取值为 1.3, 其它符号意义同上。

#### 2.2.3 NH<sub>3</sub>-N 模型参数

水体中的含氮物质在一定条件下, 发生十分复杂的生化循环过程, 主要包括硝化过程和反硝化过程。硝化过程为氨氮、亚硝酸盐氮氧化成硝酸盐氮的过程, 氨氮的氧化主要在亚硝化杆菌的作用下进行; 而亚硝酸盐氮则主要在硝化杆菌属的作用下进行氧化反应。其反应历程为:



在三峡水体中, 一般溶解氧浓度较高, 只存在硝化过程, 并且水体的碱性较高, 不会对硝化过程产生抑制作用。因此, 三峡水体中的氨氮转化过程只需考虑温度和水流条件的影响。在本论文的氨氮模型中忽略底泥的释放, 只估计氨氮氧化成亚硝酸盐氮的衰减系数。

$$K_n = b \times (0.015 + 0.197 i^{0.589} \frac{u}{h}) 1.047^{T-20} \quad (12)$$

式中符号意义同上。

## 3 模型验证

本文以重庆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随机水质模型的验证。丰水期验证江段选取重庆黄谦至重庆主城 (下转第 21 页)

子, 其存在降低了溶胶-凝胶法样品的光催化能力。

### 3 结论

(1) 在 500 的焙烧温度下, 化学沉淀法和溶胶-凝胶法制备的样品为锐钛矿相。由于制备体系的复杂, 微乳液法在近工业化制备条件下易混入杂质, 样品为金红石型。

(2) 以次甲基兰溶液进行光催化实验, 化学沉淀法的光催化性能最好, 扣除吸附因素以后, 对次甲基兰溶液的降解率为 75.7% 优于微乳液法和溶胶-凝胶法的样品。

(3) 通过以上研究可看出, 在相近实验条件下, 化学沉淀法制备纳米 TiO<sub>2</sub> 具备设备简单、原材料价廉易得, 且产品纯度高、色泽好、粒度小、颗粒尺寸分布窄等

优点, 易于实现规模生产。

### [参考文献]

- [1] Wang R, Hashimoto K, Fujishima A, et al. Light-induced am-philic surface[J]. Nature, 1997, 388: 431-432.
- [2] 高原, 马永祥, 力虎林. 用模板法制备 TiO<sub>2</sub> 纳米线阵列膜及光催化性能的研究[J]. 高等学校化学学报, 2003, 24(6): 1089-1092.
- [3] 高濂, 郑珊, 张青红. 纳米氧化钛光催化材料及应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2002.
- [4] Maruska P H, Ghosh A K. Photocatalytic decomposition of water at semiconductor electrodes[J]. Sol. Ener, 1978, 20: 443-458.

(收稿 2005-10-24; 修回 2005-12-01)

(上接第 12 页)

区的长约 100km 的江段, 该江段内的望龙门和寸滩两个断面是水质的常规监测断面, 利用这两个断面的水质监测结果与模拟结果进行比较, 可以对模型进行验证, 水质验证的指标为 COD、BOD<sub>5</sub>、NH<sub>3</sub>-N 三项。由于长江江面较宽, 在水质的常规监测中, 同一断面上左岸和右岸同时采样并分别记录监测结果, 因此, 本文中的模型验证中, 也分别利用左岸和右岸的监测值与模拟值的比较, 对模型进行验证。三项水质指标的模拟值与监测值的比较见图 1~3, 图中的星形标志为监测值, 其中 NH<sub>3</sub>-N 仅在寸滩断面有监测值。由图 1~3 可以看出, 二维水质模型计算出的三个重要指标的模拟值与监测值比较吻合。

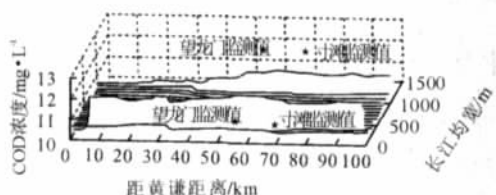


图1 长江重庆段COD模拟值与监测值的比较

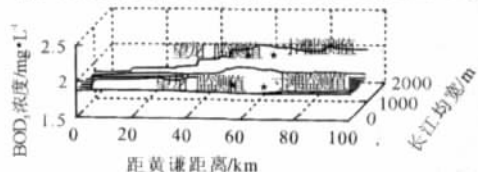


图2 长江重庆段BOD<sub>5</sub>模拟值与监测值的比较

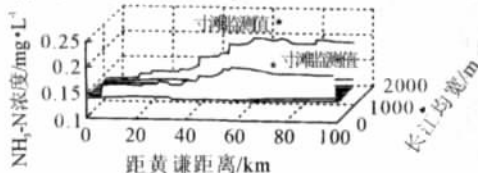


图3 长江重庆段NH<sub>3</sub>-N模拟值与监测值的比较

### 4 结论

对于 COD 而言, 望龙门断面的左岸模拟值为

10.3mg/L, 实测值为 11.4mg/L, 误差为 9.6%; 望龙门断面的右岸模拟值为 12.1mg/L, 误差为 6.1%。寸滩的 COD 左岸模拟值为 10.1mg/L, 误差为 11.4%; 右岸模拟值为 12.0mg/L, 误差为 5.3%。望龙门断面的 BOD<sub>5</sub> 左岸与右岸模拟值分别为 2.0mg/L 与 2.2mg/L, 与实测值的误差分别达到了 5.3%和 15.8%; 寸滩断面的 BOD<sub>5</sub> 左岸与右岸模拟值分别为 2.0mg/L 与 2.1mg/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 NH<sub>3</sub>-N 的实测值浓度, 因此, 对 NH<sub>3</sub>-N 的模拟值与实测值的验证只在寸滩断面处进行。由图可以看出, 寸滩断面处 NH<sub>3</sub>-N 的左、右岸模拟浓度分别为 0.16mg/L 和 0.18mg/L, 误差分别为 23.8%和 14.3%。由 3 种主要污染因子的计算值与实测值进行比较后可知, 与实测值误差最大的为 NH<sub>3</sub>-N, 可达 23.8%; 最小的为 BOD<sub>5</sub>, 误差为 5.3%。由此可以说明, 本课题的用于三峡水库水质预测的二维水质模型具有较高的精度, 能够用来模拟预测三峡水库蓄水以后的水质变化状况。

### [参考文献]

- [1] David P Hamilton, S Geoffery Schladow. Prediction of water quality in lakes and reservoirs. Part 1: Model description[J]. Ecological Modelling, 1997, 96: 91-110.
- [2] A V Gray, Wang Li. Case study on water quality modelling of Dianchi lake, YunNan province, South West China[J]. Water Science and Technology, 1999, 40(2): 35-43.
- [3] Shamshad Ahmad, Iqbal H Khan, B P Parida. Performance of stochastic approaches for forecasting river water quality [J]. Water Resources, 2001, 35(18): 4261-4266.
- [4] 程声通, 陈毓龄. 环境系统分析[M]. 北京: 高等教育出版社, 1990. 69-72.
- [5] 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]. 环境科学与技术, 2002(12): 7-10.

(收稿 2005-11-07; 修回 2006-01-06)



# PM<sub>10</sub> and SO<sub>2</sub> Adsorption Attributable to Garden Plants in Beijing and Its Health Effects

WANG Lei<sup>1,3</sup>, LIU Lian-you<sup>2</sup>, WANG Zhi<sup>3</sup>,  
HA Shi<sup>3</sup>, GAO Shang-yu<sup>2</sup>

(1.School of Resource Environment and Tourism,Capital Normal University,Beijing 100037; 2.Key Laboratory of Ministry of Education of Environment Envolvement; 3.School of Resources, Beijing Normal University, Beijing 100875)

Abstract ID: 1003- 6504(2006)09- 0001- 03- EA

Abstract: Models related to adsorption of air pollutants (PM<sub>10</sub>, SO<sub>2</sub>) by plants were used to calculate the total amount of PM<sub>10</sub> and SO<sub>2</sub> absorbed by the garden plants of Beijing City in 2003 as well as the relevant health effects. Reduction of the mortality and morbidity due to respiratory diseases was also estimated.

Key words: Beijing; garden plants; PM<sub>10</sub> and SO<sub>2</sub>; health effects

# Impact of Lithology on Attenuation of Contaminants in Landfill Leachate Pollution Plume

LIU Ying-ying, ZHAO Yong-sheng, DONG Jun,  
HAN Rong, LI Zhi-bin, ZONG Fang

(College of Environment and Resources, Jilin University, Changchun 130026)

Abstract ID: 1003- 6504(2006)09- 0004- 03- EA

Abstract: Three simulated columns filled with fine sand, sandy soil and fine sandy soil respectively were used to study the impacts of lithological effect on attenuation of pollutants in leachate plume. Results of the experiment indicated that removal of pollutants varied with the different sand and soil, soils (sandy soil and fine sandy soil) being better than fine sand with respect to TOC and NH<sub>4</sub><sup>+</sup>-N removals. In general, the pollutants attenuation ability ranked as: fine sand soil > sandy soil > fine sand.

Key words: lithology; pollution plume; attenuation

# An Experimental Study on Flue Gas Desulfurization by Non-equilibrium Plasma

XIE Xing-xing, GU Nian-fu, LI Ying, YI Cheng-wu  
(Institute of Biology and Environmental Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang 212013)

Abstract ID: 1003- 6504(2006)09- 0006- 03- EA

Abstract: A benchscale desulfurization experiment based on non-equilibrium plasma was conducted. Several affecting factors including input voltage, H<sub>2</sub>O content and residence time were studied using orthogonal test. It was concluded that desulfurization rate reached over 80% in optimum condition.

Key words: non-equilibrium plasma; strong ionization dielectric barrier discharge; orthogonal test; desulfurization

# Removing Nitrate by Surface-flow Constructed Wetland at Low Temperature

ZHANG Yan-yan, ZHENG Shao-kui,

YANG Zhi-feng, LIU Jia-gang

(State Key Lab of Water Environmental Simulation, Beijing Normal University, Beijing 100875)

Abstract ID: 1003- 6504(2006)09- 0009- 03- EA

Abstract: This paper introduces a new type of constructed wetland, which consists of plants belonging to subspecies of hyacinth and duckweed, working at a low range of temperatures of 5.1 - 11.5 °C. Studies are conducted at a greenhouse to investigate the nitrate removal from water by this kind of surface-flow wetland. The studies showed that dissolved oxygen and initial carbon source (COD level) are the essential limiting factors as regards nitrate removal from water.

Key words: surface constructed wetland; nitrate; floating plant; low temperature; de-nitrification

# Research on Water Quality Simulation Using Finite Cell Algorithm

XU Qi-gong<sup>1</sup>, LIU Hong-liang<sup>2</sup>, SHEN Zhen-yao<sup>1</sup>

(1. School of Environment, Beijing Normal University, Beijing 100875;

2. Chinese Academy of Environmental Science, Beijing 100012)

Abstract ID:1003- 6504(2006)09- 0011- 03- EA

Abstract: This paper relates to the two-dimensional model for simulation of river's water quality and application of finite cell algorithm, the software MATLAB being used as a programming tool. Three factors including BOD<sub>5</sub>, COD and NH<sub>3</sub>-N were modeled and compared to values of in-situ monitoring, obtaining the maximum error for NH<sub>3</sub>-N and minimum error for BOD<sub>5</sub> respectively. Result can be used in modeling of water quality of Three Gorges reservoir.

Key words: Three Gorges reservoir; water quality model; finite cell algorithm; MATLAB

# Probing into Aerobic Granular Sludge in MGSBR

GAO Fang-shu<sup>1</sup>, PENG Song<sup>1</sup>, LI Xiu-fen<sup>2</sup>, DU Guo-cheng<sup>2</sup>

(1. Suqian Research Institute of Environmental Science, Suqian 223800;

2. Environmental Biotechnology Lab, Jiangnan University, Wuxi 214036)

Abstract ID:1003- 6504(2006)09- 0013- 03- EA

Abstract: The purpose is to study the feasibility and advantages of MGSBR (membrane granular sludge bio-reactor) in treating sewage by investigating the property of its aerobic granular sludge. Result indicates that color of the sludge changes with time and mean diameter of the sludge decreases as micro-structure of sludge changes remarkably.

Key words: aerobic granular sludge; culture; MGSBR; sludge property

# Design for Ecological Remediation of Beigu Wetland in Zhenjiang

LIU Ji-zhan<sup>1</sup>, LI Ping-ping<sup>1</sup>, TAO Ming-qing<sup>2</sup>, WU Yan-you<sup>1</sup>,  
WU Chun-du<sup>3</sup>, FU Wei-guo<sup>4</sup>

(1. Institute of Agricultural Engineering, Jiangsu University, Zhenjiang

212013; 2.Zhongtian Urban Environmental Protection Co, Zhenjiang

212000; 3. School of Biological & Envir. Engineering, Jiangsu

University, Zhenjiang 212013; 4. Nanjing Agricultural University,

Nanjing 210095)