

可降解的地表水污染物随机游走改进模式

韩龙喜^{1,2,3}, 陈丽娜³

(1. 水文水资源与水利工程科学国家重点实验室, 江苏 南京 210098; 2. 浅水湖泊综合治理与资源开发教育部重点实验室, 江苏 南京 210098; 3. 河海大学环境科学与工程学院, 江苏 南京 210098)

摘要: 针对随机游走水质模型仅考虑污染物对流输移、扩散效应而忽略污染物降解作用的缺陷, 基于可降解污染物的一级反应动力学假设, 对现有的随机游走水质模式进行了改进, 建立了考虑自净作用的二维随机游走水质模型。作为模型检验, 构造典型案例, 将改进的随机游走模型计算结果与二维对流分散方程的解析解进行了对比分析, 模拟结果表明改进的随机游走水质模式与解析解具有一致性。改进的随机游走模型具有既可考虑水污染物的降解特性, 又能够形象直观地描述污染物迁移特征的优点。

关 键 词: 可降解污染物; 随机游走; 水质模型; 二维

中图分类号: TU991 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-6791(2009)05-0689-06

污染物在环境水体中的迁移过程可以分解为随水体宏观运动的对流过程和紊流作用下的扩散过程, 而数值模拟方法是研究污染物迁移过程的重要手段之一。研究污染物迁移过程的方法大致可以分为两类: 一类为所谓的欧拉型, 即以污染物所处水域的空间点为研究对象, 采用解析解法或数值解法, 求解水污染物的对流-扩散方程, 得到水体中各空间点的污染物浓度随时间的变化特征^[1]; 另一类为拉格朗日型, 将水体中污染物概化为一定数量的、具有一定质量的质点颗粒, 根据环境水体中的水流速度, 并考虑水流的紊动作用, 在流场中追踪其运动轨迹, 得到每一时刻、每一个颗粒所处的空间位置, 此种方法具有两方面的作用: 一方面, 通过记录不同时刻每一质点所处的不同空间位置清晰地反映其在环境水体中的运动轨迹; 另一方面, 统计各时刻污染物颗粒的所处位置、数量, 可得到各时刻污染物浓度的空间分布。

在所有的拉格朗日型方法中, 随机游走模式(Random Walk Model, 简称为 RWM 模式)是应用效果较好的方法之一, 自 Bugliarello 和 Jackson 于 1964 年首次提出后^[2], 被较多应用于大气、地下水、地表水中的污染物迁移特征模拟。池兵等研究开发的随机游走大气扩散 RWM 模型^[3], 能够较好地模拟核事故发生条件下的大气扩散过程; 于洪彬、蒋维楣将大气 RWM 模型应用于预测沿岸陆上熏烟扩散^[4]; 李宗恺将随机游走模型应用于对流边界层中的扩散^[5], 均取得良好的成果。

Salamon^[6]采用 RWM 模式模拟污染物质在地下水中的迁移规律; 黄勇^[7]等对 RWM 进行改进, 并用于模拟裂隙网络的溶质运移; Sullivan^[8]建立了地表水污染物的 RWM, 模拟示踪质点的对流扩散, 以估计污染带的分布范围; Bayazit^[9]、Wade E. Hathhorn^[10], 采用 RWM 对地表水紊流中污染物的运动进行模拟, 并与解析解做了比较; Margolin G 等采用连续随机游走模型, 研究了污染物在多孔介质中的迁移转化规律^[11]; 作为应用, 张学庆、孙英兰^[12]建立了三维质点追踪 RWM 模型, 并将其应用于胶南海域的水质预测。以往研究表明, RWM 可以较好地模拟环境水体中无降解守恒物质的对流扩散。但对于可降解型污染物, 自净作用对污染物浓度的时间、空间分布具有重要影响。现有的地表水 RWM 未考虑污染物降解作用, 必然对污染物浓度空间模拟结果造成一定的误差。因此, 本文以污染物浓度平面二维空间分布问题为例, 重点针对可降解型污染物, 对现有的 RWM 进行改进, 给出考虑自净作用的 RWM 质点颗粒空间分布及其质量随时间变化过程的求解程序, 并采用解析模式对改进的 RWM 进行检验, 建立适用于可降解的污染物随机游走模型。

收稿日期: 2008-09-04

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (50239030)

作者简介: 韩龙喜(1964 -), 男, 江苏扬州人, 教授, 博士, 主要从事环境水力学研究。E-mail: hanlongxi@sina.com

1 随机游走模式(RWM)及其改进

污染物粒子一方面在水流对流作用下作对流输送,同时又因紊动扩散而产生一系列的随机位移,两者合成得到粒子的运动轨迹,跟踪所有粒子的运动轨迹,最后统计这些粒子在时间和空间上的总体分布,从而得出污染物的迁移扩散规律。

1.1 对流位移扩散位移及合成位移的数学表述

通常采用确定性方法模拟粒子在水体中的对流过程。对一般污染物,一般不考虑其密度与水的差异,可认为粒子的对流速度与其所处空间点的水流速度相同。因此,可利用流体动力学数值模型所求得的速度场计算RWM对流过程所导致的质点迁移^[13]。

假设所研究的污染物粒子在水体中的对流扩散具有平面二维特征,污染物粒子在研究时域内连续释放,可将研究时域划分为若干个子时段组成的时间序列,表示为 $\{t_1, t_2, t_3, \dots, t_i, \dots, t_n\}$ 。假定粒子在某时刻(假设为 t_i)所处的空间位置为 (x_i, y_i) ,如前所述,粒子的空间位移由对流作用及扩散作用两方面构成,在时段 (t_i, t_{i+1}) 所产生的对流位移、扩散位移分别记为 $(\Delta x_C, \Delta y_C)$, $(\Delta x_D, \Delta y_D)$,则对流位移可表示为

$$\begin{cases} \Delta x_{Ci} = u_i \Delta t_i \\ \Delta y_{Ci} = v_i \Delta t_i \end{cases} \quad (1)$$

式中 Δx_{Ci} 、 Δy_{Ci} 分别为污染物粒子在时段 (t_i, t_{i+1}) 内沿 x 、 y 方向的对流位移; (u_i, v_i) 为 (x_i, y_i) 处 x 、 y 方向的水流流速; Δt_i 为计算时段长,表示为 $\Delta t_i = t_{i+1} - t_i$ 。

同样,时段 (t_i, t_{i+1}) 内由水流脉动引起的 x 、 y 方向的随机扩散位移 $(\Delta x_D, \Delta y_D)$ 可表示为^[14]

$$\begin{cases} \Delta x_{Di} = R_x \sqrt{2 K_x \Delta t_i} \\ \Delta y_{Di} = R_y \sqrt{2 K_y \Delta t_i} \end{cases} \quad (2)$$

式中 R_x 、 R_y 为分布在区间 $(-1, 1)$ 内,均值为0、方差为1的标准正态分布随机数; K_x 、 K_y 分别为 x 、 y 方向的紊动扩散系数。根据污染物粒子在 t_i 时的空间位置 (x_i, y_i) ,叠加粒子对流位移、扩散位移,得到时刻 t_{i+1} 时粒子所处的新位置 (x_{i+1}, y_{i+1}) ,其数学表示为

$$\begin{cases} x_{i+1} = x_i + \Delta x_{Ci} + \Delta x_{Di} \\ y_{i+1} = y_i + \Delta y_{Ci} + \Delta y_{Di} \end{cases} \quad (3)$$

1.2 可降解污染物浓度模拟

假设时刻 t_i 时排放的污染物质量为 $m^{(i)}$,粒子总数设为 $P^{(i)}$,据式(3),可预测得时刻 t_{i+1} 任一网格(设编号为 j)内的质点数 $N_j^{(i)}$ 。显然,时刻 t_{i+1} 第 j 个单元内的 $N_j^{(i)}$ 个质点可能来自于 $\{t_1, t_2, t_3, \dots, t_i\}$ 时间段内释放的粒子,对于可降解的污染物质,不同时刻排放的污染物其降解历时不同,假设污染物降解服从一级反应动力学方程,即污染物降解速率与其浓度成正比。通过粒子跟踪,可分别得到在 $t_1, t_2, t_3, \dots, t_i$ 时刻释放、在时刻 t_{i+1} 分布在第 j 个控制单元内的粒子数,分别表示为 $n_j^{(1)}, n_j^{(2)}, \dots, n_j^{(k)}, \dots, n_j^{(i)}$,有 $N_j^{(i)} = n_j^{(1)} + n_j^{(2)} + \dots + n_j^{(k)} + \dots + n_j^{(i)}$ 。相应地,根据粒子所代表的污染物在时刻 t_{i+1} 的残留质量得到单元 j 的污染物浓度,采用卷积形式表示为

$$C_j^{(i+1)} = \sum_{k=1}^i \left[\frac{m^{(k)}}{P^{(k)}} n_j^{(k)} \exp(-K(t_{i+1} - t_k)) \right] / V_j \quad (4)$$

式中 V_j 为第 j 个单元的水体体积(可通过水动力模型得到); K 为污染物的降解系数。

2 参数确定

2.1 紊动扩散系数的确定

纵向、横向紊动扩散系数 K_x 、 K_y 与污染物粒子所在位置的水动力特征有关,可表示为^[14]

$$K_x = \beta_x h u^* \quad (5)$$

$$K_y = \beta_y h u^* \quad (6)$$

式中 $u^* = \sqrt{ghI}$ 为摩阻流速; g 为重力加速度; h 为水深; I 为水力坡度; β_x 、 β_y 为经验系数。

2.2 标准正态分布随机数的生成

利用 FORTRAN 函数 RAN() 产生随机数^[15], 即由 RAN() 函数生成 $[0, 1]$ 区间上的均匀分布随机数 x_1 、 x_2 ; 令 $v_1 = 2x_1 - 1$, $v_2 = 2x_2 - 1$, 则 v_1 、 v_2 是 $[-1, 1]$ 上的均匀分布随机数; 令 $r = \sqrt{v_1^2 + v_2^2}$, 若 $r \leq 1$, 则由式(7)、式(8)得到两个独立的标准正态分布随机数。

$$R_x = v_1 [(-2 \ln r) / r]^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

$$R_y = v_2 [(-2 \ln r) / r]^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

若 $r > 1$, 则按上述过程重新生成 $[-1, 1]$ 区间上的均匀分布随机数 r_1 、 r_2 。

3 改进的 RWM 模型的检验及应用

实测数据、控制方程解析解是用于检验数学模型的两个重要工具。由于解析解是对控制方程的精确解, 因此常用解析解来检验模型的可靠性。本文以矩形断面、棱柱形渠道中, 中心连续排放污染源为例, 采用公认的对流分散方程的解析解^[16]来检验改进的 RWM 模型。

3.1 案例构造

宽浅、矩形断面、棱柱形渠道中, 水流为均匀流, 假设水深为 1 m、流速为 0.1 m/s, 水流紊动为各向同性。污染物于河道中心瞬时释放, 设源强为 40 kg。根据水动力条件, 改进的 RWM 模型设计 8000 个示踪粒子, 代表瞬时源源强, 则每个粒子所代表的质量为 5 g。改进的 RWM 模型中, 计算时间步长为 $\Delta t = 600$ s。

3.2 粒子分布特征检验

根据均匀流中污染物输运理论, 瞬时投放的污染物在投放任意时段后, 其在环境水体中的浓度分布, 应服从正态分布^[16]。采用 RWM 模型, 计算得到瞬时源释放后任意时刻示踪粒子在环境水体中的分布状况。选取粒子释放后 $t = 65\Delta t$ 时刻为代表时刻, 分析粒子的空间分布特征, 图 1 形象显示了该时刻的粒子空间分布, 图 2 为考虑降解后粒子群中心及其相邻水域粒子浓度的空间分布。由图 2 可知, 粒子浓度等值线以粒子群中心为圆心呈同心圆分布。

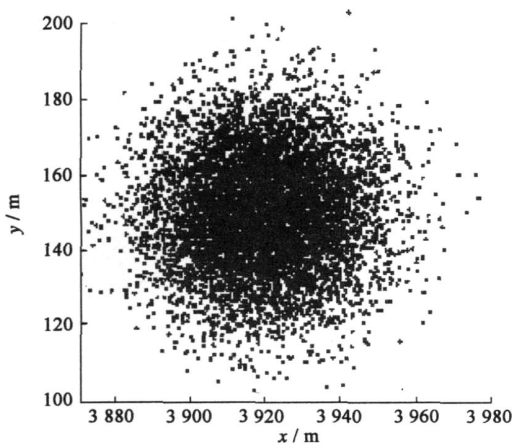


图 1 $t = 65\Delta t$ 时刻粒子空间分布

Fig. 1 Particle distribution in $t = 65\Delta t$

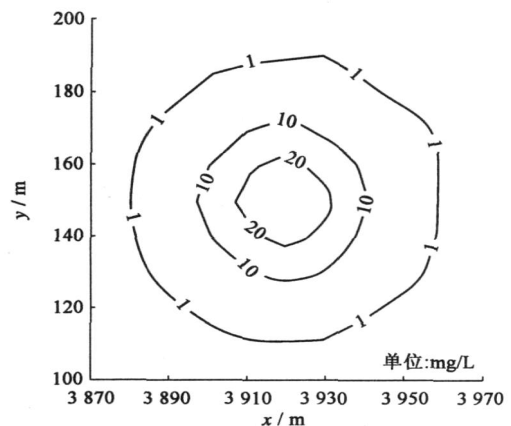


图 2 $t = 65\Delta t$ 时刻粒子浓度等值线分布

Fig. 2 Particle concentration distribution in $t = 65\Delta t$

同样地, 采用统计方法, 分别得到该时刻粒子群中心处横向、纵向的粒子分布频率, 如图 3、图 4 所示

(图中 f 为粒子在横向轴线单位长度的出现频率, x 为纵向距离, y 为横向距离), 与正态分布密度函数理论曲线比较可见, 采用 RWM 模型得到的粒子空间分布很好地吻合了正态分布特征, 符合均匀流中污染物输运理论。

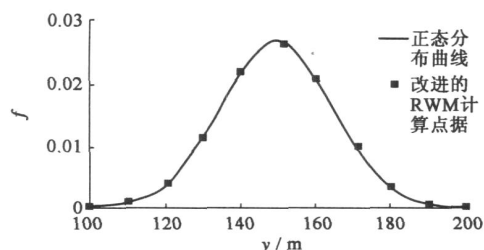


图 3 $t = 65\Delta t$ 时刻粒子横向分布频率

Fig. 3 Particle distribution frequency in y -direction

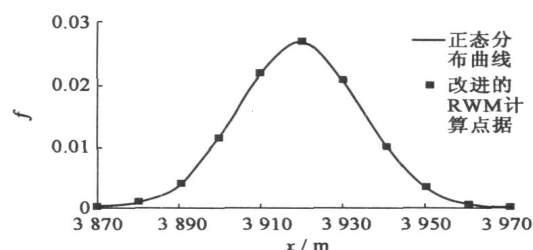


图 4 $t = 65\Delta t$ 时刻粒子纵向分布频率

Fig. 4 Particle distribution frequency in x -direction

3.3 均匀流条件下空间浓度分布场检验

控制方程的解析解通常是验证数学模型可靠性的一个重要依据。本文采用熟知的平面二维解析解, 验证改进的 RWM 的可靠性。对于宽浅、矩形断面、棱柱形河道, 可采用二维对流扩散方程描述污染物在水体中的迁移转化规律, 并可得到关于浓度场的精确解, 源强为 M 的瞬时源, 任意时刻、任意空间点污染物浓度 $C(x, y, t)$ 的平面二维解析解为

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi t \sqrt{E_x E_y}} \exp\left[-\frac{(x - ut)^2}{4 E_x t} - \frac{y^2}{4 E_y t} - Kt\right] \quad (10)$$

式中 x 、 y 分别为纵向、横向坐标; t 为时间; u 为纵向流速; E_x 、 E_y 为纵向、横向紊动分散系数(若各向同性, 则有 $E_x = E_y$); K 为污染物降解系数。

(1) 降解系数 K 改进的 RWM 与平面二维解析模式, 均假设污染物降解符合一级反应动力学, 具有相同的物理机理, 因此, K 取值相同, 不妨取为 0.1 d^{-1} 。

(2) RWM 中 $K_x K_y$ 与解析解 $E_x E_y$ 的相关分析 改进的 RWM 模式及基于平面二维对流扩散方程的解析模式, 在处理污染物扩散(分散)项时均采用了质点随机运动理论, 分别通过 K_x 、 K_y 与 E_x 、 E_y 来反映随机扩散(分散)的影响, 因此具备相同的物理背景。但由于两者数学处理方法的差异, 因而两者取值不同。

为简化问题起见, 不妨假设紊动扩散为各向同性, 因此, 可以 E_x 为参照, 分析 K_x 与 E_x 的对应关系。对于平面二维解析模式, 常用 Elder 公式确定分散系数:

$$E_x = \alpha_x h u^* \quad (11)$$

关于随机游走扩散系数 K_x 的研究较少, 一般采用与 E_x 相同类型的经验公式计算参数值^[14], 见式(5), 主要参数为 β_x 。

根据 α_x 的可能取值范围^[16], 在其可能的取值范围内分别选取不同的 α_x 取值, 通过调试 K_x 值, 使得由改进的 RWM 与解析模式所得到的浓度场充分吻合, 得 β_x 与 α_x 的相关关系, 如图 5 所示。

由图 5 可知, β_x 与 α_x 成显著线性正相关, 采用一元线性回归方法拟合, 得到表达式为:

$$\beta_x = 4.848\alpha_x - 0.160 \quad (12)$$

(3) 与解析模式模拟结果对比 由以上分析可知, 只要选取合适的 β_x 值, 改进的 RWM 可以得到任一时刻与平面二维解析模式相同的浓度场, 其中, 第 $25\Delta t$ 、 $35\Delta t$ 、

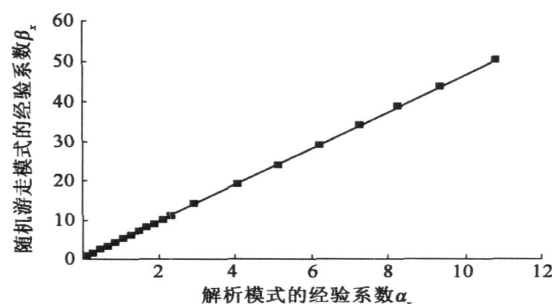


图 5 本案例经验系数 α_x 、 β_x 相关关系拟合曲线

Fig. 5 Relation curve between α and β in the case

$45\Delta t$ 时刻,改进的 RWM 模式与解析模式得到的浓度场对比如图 6 所示。由图 6 可知,改进的 RWM 与平面二维解析模式的模拟结果具有高度一致性。案例说明,与平面二维解析模式相比,改进的 RWM 具有既可模拟浓度场的空间分布,同时又可形象、直观地显示污染粒子空间分布的优点。

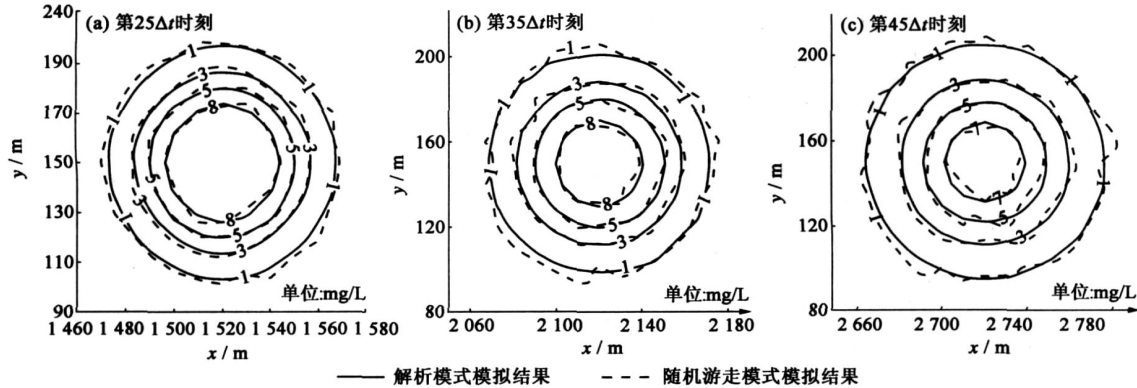


图 6 改进的 RWM 与二维解析模式模拟浓度场对比

Fig. 6 Comparison of calculated concentration fields by Revised RWM and theoretical solution

4 结 论

基于可降解污染物的一级反应动力学假设,对现有的随机游走水质模式进行了改进,建立了考虑自净作用的二维随机游走水质模型。研究结果表明:

(1) 与 RWM 模型相比,改进的 RWM 模型考虑了污染物的降解作用,把 RWM 模式的运用范围从守恒性污染物拓展到可降解的非守恒性污染物;

(2) 改进的 RWM 中扩散系数经验公式的经验系数 β_x 与与解析模式中分散系数经验公式的经验系数 α_x 成显著的线性正相关;

(3) 与解析模式相比,改进的 RWM 具有既可模拟浓度场的空间分布,同时又可形象、直观地显示污染粒子空间分布的优点。

参考文献:

- [1] 彭勤文. 随机扩散水质模型研究[J]. 水科学进展, 2006, 17(1): 113-115. (PENG Qin-wen. Research on stochastic diffusion water quality model[J]. Advances in Water Science, 2006, 17(1): 113-115. (in Chinese))
- [2] BUGLIARELLO G, JACKSON E D. Random walk study of convective diffusion[J]. Engineering Mechanics Division, ASCE, 1964, 90(4): 49-77.
- [3] 池兵, 方栋, 李红. 随机游走大气扩散模型在核事故应急中的开发和应用[J]. 核科学与工程, 2006, 26(1): 39-45. (CHI Bing, FANG Dong, LI Hong. Development and application of random walk model of atmospheric diffusion in emergency response of nuclear accidents[J]. Nuclear Science and Engineering, 2006, 26(1): 39-45. (in Chinese))
- [4] 于洪彬, 蒋维楣. 一个预测沿岸陆上熏烟扩散的随机游走模式[J]. 大气科学, 1993, 17(5): 625-635. (YU Hong-bin, JIANG Wei-mei. A stochastic model for prediction of fumigation dispersion over coastal area[J]. Scientia Atmospherica Sinica, 1993, 17(5): 629-635. (in Chinese))
- [5] 李宗恺, 杜曙明. 一个对流边界层中的随机扩散模式[J]. 大气科学, 1993, 17(1): 1-9. (LI Zong-kai, DU Shu-ming. A random walk diffusion model in the convective boundary layer[J]. Scientia Atmospherica Sinica, 1993, 17(1): 1-9. (in Chinese))
- [6] SALAMON P, FERNANDEZ-GARCIA D, GOMEZ-HERNANDEZ J J. A review and numerical assessment of the random walk partical tracking

- method[J]. Contaminant Hydrology, 2006, 87(33): 277-305.
- [7] 黄勇, 周志芳, 王锦国. 改进的随机步进法在溶质运移模拟中的应用[J]. 岩土力学与工程学报, 2004, 23(14): 2326-2330. (HUANG Yong, ZHOU Zhi-fang, WANG Jin-guo. Application of modified stochastic walk method to solute transport simulation[J]. Rock Mechanics and Engineering, 2004, 23(14): 2326-2330. (in Chinese))
- [8] SULLIVAN PAUL J. Longitudinal dispersion within a two dimensional turbulent shear flow[J]. Fluid Mech, 1971, 49: 551-576.
- [9] BAYAZIT M. Random walk model for motion of a solid particle in turbulent open-channel flow[J]. Hydraulic Research, 1972, 10(1): 1-14.
- [10] WADE E HATHORN. Simplified approach to particle tracking methods for contaminant transport[J]. Hydraulic Engineering, 1997, 123(12), 1157-1160.
- [11] MARGOLIN G, BERKOWITZ B. Continuous time random walk revisited: First passage time and spatial distributions[J]. Physica A, 2004, 334: 46-66.
- [12] 张学庆, 孙英兰. 三维质点追踪模型及在胶南海域的应用[J]. 水科学进展, 2006, 17(6): 873-876. (ZHANG Xue-qing, SUN Ying-lan. 3-D particle tracer model and its application in Jiaonan sea area[J]. Advances in Water Science, 2006, 17(6): 873-876. (in Chinese))
- [13] 韩龙喜. 三峡大坝施工期水环境三维数值预测方法[J]. 水科学进展, 2002, 13(4): 427-432. (HAN Long-xi. 3-D numerical simulation for water environment in the region of Three-Gorge Project during construction period[J]. Advances in Water Science, 2002, 13(4): 427-432. (in Chinese))
- [14] ANDREW LANE, DAVID PRANDLE. Random-walk particle modelling for estimating bathymetric evolution of an estuary[J]. Estuarine, Coastal and Shelf Science, 2006, 68: 175-187.
- [15] 孙颖娜, 芮孝芳. 随机输入情况下汇流计算方法的探讨[J]. 水科学进展, 2005, 16(5): 661-665. (SUN Ying-na, RUI Xiao-fang. Investigation on calculation method for flow concentration with stochastic input[J]. Advances in Water Science, 2005, 16(5): 661-665. (in Chinese))
- [16] 罗定贵, 王学军. 水质模型研究进展与流域管理模型 WARMF 评述[J]. 水科学进展, 2005, 16(2): 289-294. (LUO Ding-gui, WANG Xue-jun. Progress in study of water quality model and review of river basin management model WARMF[J]. Advances in Water Science, 2005, 16(2): 289-294. (in Chinese))

Revised random walk model for degradable water pollutant^{*}

HAN Long-xi^{1,2,3}, CHEN Li-na³

(1. State Key Laboratory of Hydrology-Water Resource and Hydraulic Engineering, Nanjing 210098, China;

2. Key Laboratory of Integrated Regulation and Resource Development on Shallow Lakes, MOE, Nanjing 210098, China;

3. College of Environmental Science and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: The random walk model for the existing water quality is improved and a quality 2D random walk model considering the role of self-purification is established based on the assumption of a reaction kinetics of biodegradable pollutants and considering the defects that the water quality model for random walk only takes the convection-diffusion of pollutants into account, and neglects the effect of their own degradation of pollutants. Through the typical case of a model test, the results of the improved random walk model and the 2D convection-diffusion equation analytical solutions are analyzed. It shows that the water quality of the random walk model is consistent with that of the analytical solution. The improved model considers the characteristics of the degradation of water pollutants and visually describes the pollutant migration characteristics.

Key words: degradable water pollutant; random walk model; water quality model; two dimension

* The study is financially supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 50239030).