

# 通量差分裂格式的二维水流水质计算的适用性分析

丁 玲<sup>1</sup>, 逢 勇<sup>1</sup>, 赵棣华<sup>2</sup>, 吴建强<sup>1</sup>, 吕 俊<sup>3</sup>

(1. 河海大学环境科学与工程学院, 江苏 南京 210098; 2. 南京水利科学研究院, 江苏 南京 210029;  
3. 广西水文水资源局, 广西 南宁 530023)

**摘要:** 将通量差分裂(FDS)格式应用于二维水流-水质数值模拟中。应用若干理想条件下的简化模型对格式的计算精度进行分析, 结果表明: FDS 格式不仅能高精度地模拟浓度梯度较缓的污染物稳定排放情况, 且其二阶格式能高分辨率捕捉水质间断, 与理论值吻合很好, 说明 FDS 二阶格式能高精度地计算污染物间断排放引起的大浓度梯度或水质突跃情况。该格式在长江南通江段水环境数值模拟中的应用验证了它的实际应用能力。

**关 键 词:** 通量差分裂格式; 二维水流水质模型; 计算精度

**中图分类号:** X143; TV131.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1001-6791(2004)05-0561-05

二维浅水流动计算在近 20 年来得到广泛应用, 空气动力学中的几种基于黎曼近似解的高性能格式(Osher, FDS, FVS 等)也逐渐应用于浅水流计算并获得了满意的结果<sup>[1,2]</sup>, 但其在水质模拟中应用甚少。近几年来, Osher、FVS 格式已应用于水流-水质数值模拟中<sup>[3,4]</sup>。本文在有限体积法及黎曼近似解理论框架下建立二维通量差分裂(FDS)格式水流-水质耦合模型, 应用 FDS 格式计算二维水流-水质模型中各跨单元边界的数值通量, 并以各种水环境问题在理想条件下的简化模型检验格式的计算精度, 结合长江南通江段的实际水质问题论证了该格式的实际应用能力。

## 1 二维 FDS 水流-水质模型

### 1.1 控制方程

二维浅水方程和对流-扩散方程的守恒形式可表达为<sup>[5]</sup>

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial f(q)}{\partial x} + \frac{\partial g(q)}{\partial y} = b(q) \quad (1)$$

式中  $q = [h, hu, hv, hC]^T$  为守恒物理量;  $f(q) = [hu, hu^2 + gh^2/2, huv, huC]^T$  为  $x$  向通量;  $g(q) = [hv, huv, hv^2 + gh^2/2, hvC]^T$  为  $y$  向通量;  $u, v$  分别为  $x, y$  向垂线平均流速分量;  $h$  为水深;  $b(q) = [0, gh(S_{0x} - S_{fx}), gh(S_{0y} - S_{fy}), \nabla \cdot (D_i \nabla(hC)) + S/A - KhC]^T$ ;  $S_{0x}, S_{0y}$  为  $x, y$  向的河底底坡;  $S_{fx}, S_{fy}$  为  $x, y$  向的摩阻底坡;  $C$  为污染物的垂线平均浓度。

### 1.2 方程离散

对任意单元  $A$ , 采用有限体积法对方程进行离散, 得离散后的表达式为<sup>[6]</sup>

$$A \frac{dq}{dt} = - \sum_{j=1}^m T(\bar{n}_j) \cdot f(\bar{q}_j) L_j + b^*(q) \quad (2)$$

式中  $A$  为单元  $A$  的面积;  $m$  为单元边总数;  $L_j$  为单元第  $j$  边的长度;  $T(\bar{n}_j)$  为坐标旋转逆变换矩阵;  $f(\bar{q}_j)$  为法向通量, 可通过解局部一维黎曼初值问题的外法向数值通量  $f_{LR}$  得到; 本文采用 FDS 格式计算该跨越控制体界面的法向数值通量。

收稿日期: 2003-05-28; 修订日期: 2003-09-03

基金项目: 国家高技术研究发展计划资助项目(2003AA6011002); 江苏省自然科学基金资助项目(BK2002067)

作者简介: 丁 玲(1979-), 女, 江苏淮安人, 河海大学博士研究生, 主要从事水环境方面的研究。

E-mail: dl7779@sohu.com

1.3 FDS 格式法向数值通量

局部一维黎曼初值问题可表达为<sup>[6]</sup>

$$\frac{\partial \bar{q}}{\partial t} + \frac{\partial f(\bar{q})}{\partial x} = 0 \quad \bar{q} = \bar{q}_L(\bar{x} < 0, t = 0) \quad \bar{q} = \bar{q}_R(\bar{x} > 0, t = 0)$$

采用的 FDS 格式为 Roe<sup>[5]</sup>1981 年提出并被用于二维浅水方程数值解的格式。该格式与 FVS 格式一样都是以特征理论为依据,符合波动观点并且完全体现逆风原则。在任意区间上对通量差进行分裂并采用文献[6]的推导途径,跨单元界面的法向数值通量  $f$  可分解为

$$f_{LR} = \frac{1}{2} [f_L(\bar{q}) + f_R(\bar{q}) - \sum_{i=1}^4 | \bar{\lambda}_i | \bar{R}_i]$$

式中  $\bar{\lambda}_1 = \bar{u} + \bar{c}$      $\bar{\lambda}_2 = \bar{u}$      $\bar{\lambda}_3 = \bar{u} - \bar{c}$      $\bar{\lambda}_4 = \bar{u}$      $\bar{R}_1 = \frac{1}{2\bar{c}} [(hu)_L - (hu)_R - \bar{c}(h_L - h_R)]$

$\bar{R}_2 = (hv)_L - (hv)_R - \bar{v}(h_L - h_R)$      $\bar{R}_3 = (h_L - h_R) - \bar{c}$      $\bar{R}_4 = (hC)_L - (hC)_R - \bar{C}(h_L - h_R)$

$$\bar{R} = (\bar{R}_1, \bar{R}_2, \bar{R}_3, \bar{R}_4) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ \bar{u} + \bar{c} & 0 & \bar{u} - \bar{c} & 0 \\ \bar{v} & 1 & \bar{v} & 0 \\ \bar{C} & 0 & \bar{C} & 1 \end{bmatrix}$$

2 FDS 格式精度及适用性分析

FDS 格式既能高精度计算光滑流动,又能以高分辨率自动捕捉间断,不产生虚假振动,且二价格式的精度显著高于一价格式<sup>[3]</sup>。本文试图验证 FDS 格式应用于水质计算的精度。设计了两种理想条件(光滑平底,恒定均匀流)下的简化模型(点源稳定连续排放;方形浓度场在均匀流场中的输移)对格式的计算精度进行验证。

2.1 污染物稳定排放时格式精度验证

设计一平底矩形水槽,槽边某处有一稳定连续点源,排放源强为 15 g/s。解析解和数值解均采用相同的水力条件和水质参数:槽内水流恒定均匀,流速为 0.2 m/s,紊动扩散系数  $D$  为 0.1 m<sup>2</sup>/s。在槽内布置均匀的矩形网格,网格大小为 10 m × 10 m。二维对流扩散时间连续源恒定状态的解析解为<sup>[7]</sup>

$$C(x, y) = \frac{m}{\bar{u} \sqrt{4Dx}} \exp\left(-\frac{y^2}{4Dx}\right) \tag{3}$$

式中  $C$  为垂线平均浓度;  $m$  为排放源强;  $\bar{u}$  为纵向时均流速。分别用式(3)和模型一价格式数值解进行计算,两种方法下距槽边 5 m 和 15 m 处污染物浓度随  $x$  方向距离变化的对比(图 1)。由此可见,数值解和解析解计算结果的相对误差在 5% 以下。说明 FDS 一价格式具有较高的计算精度,可用于污染物稳定排放时的数值计算。

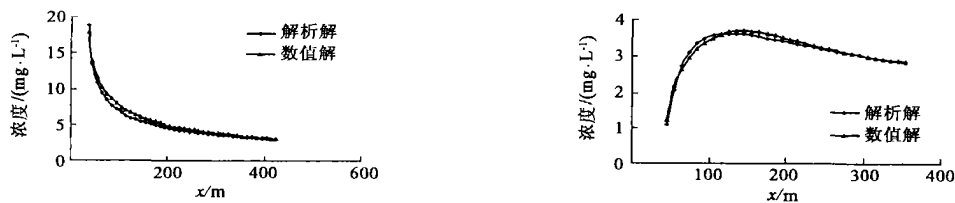


图 1 数值解与解析解比较

Fig. 1 Comparison of analytic and numerical solution

### 2.2 污染物间断排放(水质突跃、大浓度梯度)时模型精度验证

大多数对流扩散方程一阶逆风格式在大浓度梯度(包括突发水污染事故引起的水质间断)时的数值弥散比较严重<sup>[6]</sup>, 对间断的分辨率较低, 因此本文采用 Sweby 等<sup>[8]</sup>的通量限制法在一阶格式中加入受限制的反弥散通量达到二阶精度格式以提高对间断的分辨率, 减小数值弥散。通过一水质间断的理想模型(方形浓度场在均匀流场中的输移)对一阶和二阶格式的计算精度进行了对比分析。

(1) 二阶无震荡格式 二阶法向数值通量的表达式为<sup>[6]</sup>

$$f_{LR}^{(2)} = f_{LR} + \frac{1}{2} [ (r_L^+) \bar{L}_R f_{LR}^+ - (r_R^-) \bar{L}_R f_{LR}^- ] \tag{4}$$

式中  $r_L^+ = \frac{\bar{L}_R - 1}{\bar{L}_R} \frac{f_{LR}^+}{f_{LR}^+}$   $r_R^- = \frac{\bar{L}_R + 1}{\bar{L}_R} \frac{f_{LR}^-}{f_{LR}^-}$   $r_{LR}^+ = 1 - \frac{f_{LR}^+}{q_{LR}}$   $r_{LR}^- = 1 + \frac{f_{LR}^-}{q_{LR}}$   
 $f_{LR}$  为一阶法向数值通量,  $\bar{L}_R = u/x$ ; 为限制函数, 常表示为压缩参数  $r$  的函数, 其整个区域可统一表示为  
 $(r) = \max(0, \min(1, r), \min(1/r, 1))$

在允许区域内选取不同的非线性限制函数  $(r)$ , 就建立起不同性能的格式。FDS 格式二维水流水质模型中采用以下 4 种限制函数建立 4 种二阶格式:

$$(r) = \max(0, \min(2r, 1), \min(2, 1/r)) \quad \text{Superbee 限制函数} \quad (r) = \frac{r^2 + r}{r^2 + 1} \quad \text{Van Albada 限制函数}$$

$$(r) = \frac{|r| + r}{1 + |r|} \quad \text{Van Leer 限制函数} \quad (r) = \max(0, \min(r, 1)) \quad \text{Minmod 限制函数}$$

(2) 方形浓度场在均匀流中的输移 假定一宽浅水域, 长宽均为 5 000 m, 平底, 无摩阻, 水深为 0.5 m, 域内为均匀流, 流速为 0.5 m/s。在水域的左边缘有一个方形浓度场, 初始浓度为 2.0 mg/L, 其余单元浓度均为 0.0 mg/L。可知该方形浓度场边缘为水质间断线。将该水域划分为均匀的矩形网格, 大小为  $x = y = 100$  m。分别采用一阶格式和 4 种二阶格式进行计算, 水流和水质计算步长分别为 20 s 和 180 s, 该初始方形浓度场输移 1 h 和 2 h 后的结果如图 2~图 5 所示。

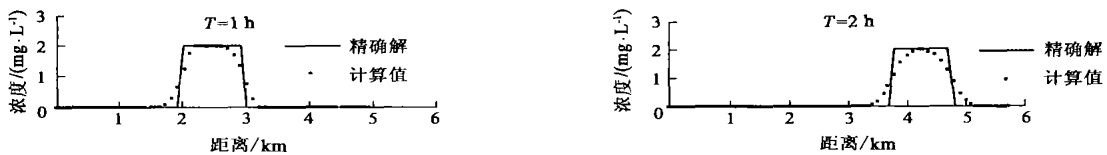


图 2 一阶格式计算值与理论值比较

Fig. 2 Comparison of theoretic and first order scheme value

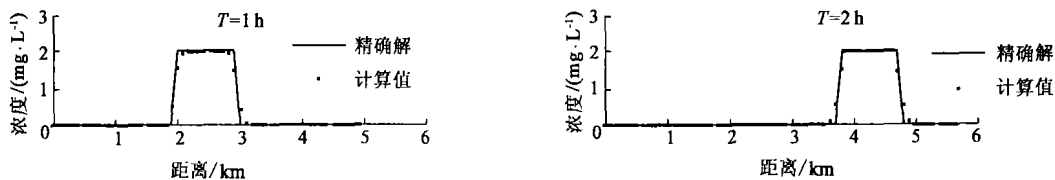


图 3 二阶 Superbee 格式计算值与理论值比较

Fig. 3 Comparison of theoretic and second order Superbee scheme value

(3) 计算结果分析 从理论上说, 该方形浓度场在输运过程中应当保持形状不变, 既不会出现数值弥散也不发生数值振荡。计算结果表明, 5 种格式在计算过程中均没有负值及数值振荡出现, 但一阶格式的计算结果呈现较大的数值弥散, 而 4 种二阶精度格式的结果除了在边缘处有一点弥散与细微波动外均与理论值一致。这个结论与 Sweby<sup>[8]</sup>一致, 证明 FDS 二阶格式在处理水质间断解时具有较高的计算精度。4 种二阶精度格式中, 以 Superbee 限制函数的计算结果最为理想, Van Leer 和 Van Albada 的弥散情况基本一致, 略优于 Minmod 函数,

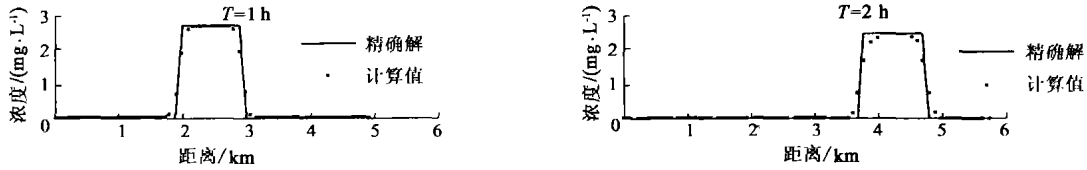


图4 二阶 Van Leer 格式计算值与理论值比较

Fig.4 Comparison of theoretic and second order Van Leer scheme value

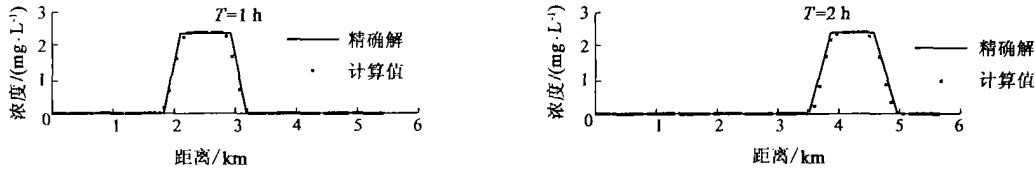


图5 二阶 Minmod 格式计算值与理论值比较

Fig.5 Comparison of theoretic and second order Minmod scheme value

这与 Sweby 的结论相同。

综上所述，一阶格式对水质间断的分辨率较低，数值弥散严重，而二阶格式处理间断解时的计算精度高于一阶格式，与理论值吻合较好，说明 FDS 二阶格式具有更高的计算精度。对突发水污染事故造成的局部区域水质突跃等实际问题，应采用二阶格式进行水质预测。

### 3 FDS 一阶格式的应用研究

根据 FDS 一阶格式对污染物稳定排放的数值模拟具有较高计算精度的特点，采用 FDS 一阶格式进行长江南通段水环境研究。利用 1999 年 1 月 11~12 日的实测水位资料对汇丰码头 11~12 日的潮位过程进行率定，率定结果见图 6，经率定得出的河底糙率、COD<sub>Mn</sub>纵、横向扩散系数及降解系数分别为 0.02、6 m<sup>2</sup>/s、0.6 m<sup>2</sup>/s、0.3/d。采用 1999 年 1 月 18~19 日的实测水位资料、同期 A1、A2 两处垂线平均流速监测资料以及 21 日姚港测点实测水质资料对该模型进行验证，验证结果见图 7 及表 1。计算的全潮最大污染物影响范围如图 8 所示。

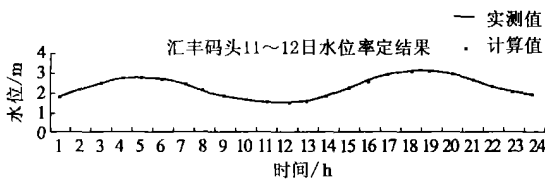


图6 1999年1月11~12日水位率定成果

Fig.6 Calibration of water level

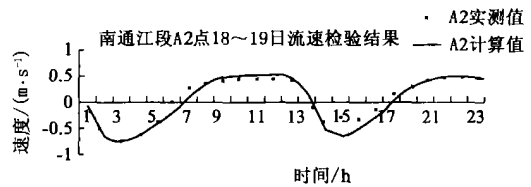


图7 1999年1月18~19日流速验证成果

Fig.7 Validation of flow velocity

表1 姚港水质验证结果

Table 1 Validation of water quality of Yaogang

验证点时间 (姚港)	实测 COD <sub>Mn</sub> / (mg L <sup>-1</sup> )	计算 COD <sub>Mn</sub> / (mg L <sup>-1</sup> )	相对误差 / %
1 00	3.9	4.4	11.4
2 00	2.7	3.1	12.9
3 00	2.9	3.0	3.3
4 00	3.0	3.0	0

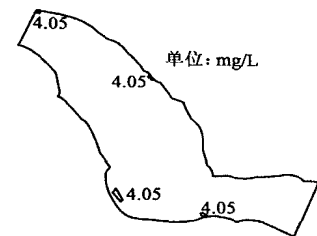


图8 全潮最大污染物影响范围

Fig.8 Biggest influence scope of pollutant during the whole tide

由图8和表1可知,水位率定最大、最小及平均相对误差分别为0.154 m、0.001 m、3.35%;流速验证最大、最小及平均相对误差分别为0.165 m/s、0.011 m/s、19.8%;水质指标 $COD_{Mn}$ 浓度计算值与实测值平均相对误差为6.9%;计算污染带范围也基本合理。表明模拟结果基本反映了南通江段的水力特性和水质特征,FDS一阶格式可用于模拟区域内污染物输移降解过程和污染带影响范围预测。

## 4 结 论

本文将FDS格式应用于水流-水质模拟中,应用理想条件下的两个简化模型详细验证了FDS格式的计算精度,得出:FDS一阶格式可用于污染物稳定排放水质浓度梯度平缓时的水质模拟;FDS二阶格式能高分辨率地捕捉水质间断,对突发水污染事故造成的局部区域水质突跃等实际问题,应采用二阶格式进行水质预测。最后用长江南通江段的实际水质问题验证了该格式的实际应用能力,计算结果与监测值吻合较好,表明FDS格式在水质预测评价中具有较好的应用前景。

### 参考文献:

- [1] 胡四一,谭维炎.无结构网格上二维浅水流动的数值模拟[J].水科学进展,1995,6(1):1-9.
- [2] Zhao D H, Shen H W, Lai J S, et al. Approximate Riemann Solvers In FVM For 2-D Hydraulic Shock Wave Modelling[J]. Journal of Hydraulic Engineering, 1996, 122(12):692-702.
- [3] Zhao D H, Qi C. Water quality simulation in reaches of Hanjiang River by 2-D model[A]. Proceedings of The Second International Symposium on Environmental Hydraulics[C]. Hong Kong, CHINA, 1998.
- [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] Roe P M. Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors, and Difference Schemes[J]. JCP, 1981, 43:357-371.
- [6] 赵棣华,戚晨,庚维德,等.平面二维水流-水质有限体积法及黎曼近似解模型[J].水科学进展,2000,11(4):368-373.
- [7] 张书农.环境水力学[M].南京:河海大学出版社,1988.
- [8] Sweby P K. High Resolution Schemes Using Flux Limiters for Hyperbolic Conservation Laws[J]. J. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1984, 21(5):995-1011.

## Analysis of applicability of flux difference splitting scheme on 2D flow pollutant calculation<sup>\*</sup>

DING Ling<sup>1</sup>, PANG Yong<sup>1</sup>, ZHAO Di-hua<sup>2</sup>, WU Jian-qiang<sup>1</sup>, LU Jun<sup>3</sup>

(1. College of Environment Science and Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China; 2. Nanjing Hydraulic Research Institute, Nanjing 210029, China; 3. Guangxi Hydrology and Water Resource Bureau, Nanning 530023, China)

**Abstract:** In this paper, The flux difference splitting (FDS) scheme is applied to two-dimension flow-pollutant numerical simulation. Some simplified models in ideal conditions are used to analyze the accuracy of FDS scheme. The model of steady point source discharge shows high accuracy. To reduce numerical diffusion in big concentration grades, a limited flux is added to the first order scheme so as to derive the second order scheme. The results of water quality discontinuities model prove that FDS second order scheme can catch discontinuities with so high resolution that it can accurately simulate big concentration grades or abrupt water quality jump. The successful application in water environment numerical simulation of Nantong section of Yangtze River ulteriorly validates the practical application ability of FDS scheme.

**Key words:** flux difference splitting scheme; two-dimension flow-pollutant model; calculation accuracy

<sup>\*</sup> The project is supported by the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (No. BK2002067).