

MATHEMATICAL MODEL OF WATER ENVIRONMENT AND ITS APPLICATION

水环境数字模型 及其应用

● 彭泽洲 杨天行 梁秀娟 谷照升 等编著



化学工业出版社

水环境数学模型及其应用

Mathematical Model of Water Environment and Its Application

彭泽洲 杨天行 梁秀娟 谷照升 等编著



化学工业出版社

· 北 京 ·

图书在版编目 (CIP) 数据

水环境数学模型及其应用/彭泽洲等编著.

北京: 化学工业出版社, 2006.7

ISBN 7-5025-9140-0

I. 水… II. 彭… III. 水环境-数学模型

IV. X143

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 087235 号

水环境数学模型及其应用

彭泽洲 杨天行 梁秀娟 谷照升 等编著

责任编辑: 赵玉清 满悦芝

文字编辑: 刘莉珺

责任校对: 陶燕华

封面设计: 于 兵

*

化学工业出版社出版发行

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010)64982530

(010)64918013

购书传真: (010)64982630

<http://www.cip.com.cn>

*

新华书店北京发行所经销

大厂聚鑫印刷有限责任公司印刷

三河市前程装订厂装订

开本 720mm×1000mm 1/16 印张 15 $\frac{1}{4}$ 字数 380 千字

2007 年 1 月第 1 版 2007 年 1 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-9140-0

定 价: 45.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

随着水环境问题的日益增多,在解决各类水环境问题中,全面、系统、深入、定量地进行水资源和水质模拟、预测、管理研究成为关注的焦点。目前,有关水环境中污染物混合和扩散,特别是关于地下水流动和污染质迁移理论的优秀著作很多,这些著作从理论和应用方面都在日趋完善和成熟,水环境数学模型在近20~30年内已经发展成为重要的学科,在教学、科研、生产领域均起着重要的指导作用,还被应用于水污染治理与规划之中。

首先,目前已有的著作在内容上多侧重于地下水流及溶质迁移模型研究,然而地表水体有机污染和富营养化问题日益突出,有关地表水体污染质迁移的数学模型和数值模拟的系统论述相对较少。其二,在实践上,多为20世纪90年代以前的著作,由于测试和计算手段的限制,在求解方法及参数选取上均具有一定局限性,少量高维问题只能采用分块、分片的办法,用一维和稳态技术加以刻画,在实际应用中与客观实际差距较大,因此提高模型的仿真性、实用性已势在必行。近年来有关研究正在迅速发展,仿真和力求逼近客观实际的研究成果已有明显的进展。第三,以往污染迁移模型大多局限于模拟BOD、DO、重金属、氮污染等。事实上,水体富营养化的发展与控制,以及大量有毒有机污染物的研究不断扩展,水生生态系统问题引起广泛关注,要求水环境数学模型模拟研究由一个组合模型向多重综合模型发展,用于湖泊、水库的数学模型和三维综合的富营养化模型尚在探索和发展中。针对上述问题,为满足科研生产之需,从提高模型实用价值出发,适应环境评价、污染治理和控制规划的要求,进行未来发展的科学预测和管理,培养相关学科的技术人才成为急需。为此,以彭泽洲博士后出站报告、博士生导师杨天行教授和曹玉清教授多年来有关地表水、地下水环境数学模型的研究成果和讲稿为主,吸纳国内外最新专著和科研论文,编者组织学生及其合作者编著了《水环境数学模型及其应用》一书。

《水环境数学模型及其应用》以仿真、逼近客观实际为目标,以地面水环境为重点,以完善的理论和方法,突出实际应用为特点。本书给出了多种因素影响的水体和多孔介质中流体和污染质迁移方程,求解的近代数值方法,解析解法和应用实例;深入论述了定解条件和定解问题的提法;系统严格地推导了描述水环境污染质迁移规律的数学模型。必须强调的是:①在地表水体模型中,全面、系统地建立水库、湖泊中有机污染物和富营养化物质总磷、三氮、重金属三态(溶解态、悬浮态、底泥态)迁移转化模型,考虑到分子扩散、紊流扩散,底泥、水温 and 生物对浓度的影响,建立了总磷迁移转化的三维水动力—水质—生态—水温耦合模型,使总磷迁移模型反映的迁移规律更加精确,并根据实测资料进行了模拟预测;建立了地表水—地下水联合水质模型。②在地下水模型中吸收了国内外最新研究成果,加强了海水入侵、热迁移及非饱和带的污染质迁移问题探讨,并用理想的三维数值例子分析了非饱和带污染质迁移模型参数对污染质迁移的影响。③在模型求解中,详细阐述并推导了水体污染质迁移模型中具有实用价值的分析解,特别是边界条件对污染质迁移的影响问题。在数值解法上不仅阐述了一般常用的数值方法,而且特别介绍和论述了解对流占优的特征有限元法、特征差分法、三维特征有限体积分法及应用、边界元法,探讨分析了无单元径向基方法,该方法的引入,使采用数值法求解三维问题向前推进了一步。④对数值法中新近发展的全局大范围收敛效果好的

“同伦算法”求解非线性逆问题进行了详细介绍，同时还介绍了求参数的小参数扰动方法及其有效的迭代格式，这对解决参数初值难以获取的高精度非线性反演问题的求解提出了有效地解决该问题的新方法，具有极为重要的意义。⑤对数值方法的应用条件、优缺点进行了比较，提出了解对流占优的有效的数值方法。这些方法的引入对于环境数学模型预测及逆向问题求解起到了推动作用，特别是加强了三维数学模型的推导及应用实例，使水环境数学模型预测更加逼近实际，使本书具有较强的实用性。

本书由彭泽洲、杨天行主编，梁秀娟、谷照升（长春工程学院）、赵全升（青岛大学）副主编，马瑞杰、刘金英、聂晶、徐清参加了编写，曹玉清参与了大纲和书稿的修改工作，全书由杨天行、曹玉清统稿，参加本书整理工作的还有肖长来、王静、孟小路、冯波、王鹤明、钟凤远、马喆、梁煦枫等，在此一并致谢。

本书地表水水环境数学模型部分内容主要参考了W. 金士博 [德]、叶守泽、夏军、张书农、徐孝平、李家星、雒文生、郭生练、陈小红、赵振兴等有关著作的内容；地下水污染质运移数学模型部分内容主要参考了J. Bear、朱学愚、谢春红、王秉忱、孙纳正、孙永堂等有关著作和论文的内容；数值方法的部分内容主要参考了李荣华、冯国忱、吴宗敏、韩华等有关著作和论文的内容。

本书也得益于973项目的支持，使用了大量的国家重点基础研究发展规划研究项目（973项目）（编号G1999045700）第五课题《密云水库及上游水环境污染形成、输送机理及其环境效应》（编号199945705）的研究内容、基础数据和实例。本书编写中得到课题负责人刘晓端、葛晓立及课题组全体同仁的大力支持，在此深表谢意。

由于编者水平所限，书中不妥或错误之处，欢迎读者批评指正。

编者
2006年4月

目 录

1 环境数学模型概述	1
1.1 数学模型在环境问题中的应用	1
1.2 建立数学模型的步骤	1
1.3 水环境数学模型的分类与水质模型	2
1.4 建立数学模型的一个实例	3
2 污染物在水体中迁移模型的建立和应用范围	5
2.1 流体运动的某些概念	5
2.2 水流连续方程	8
2.3 污染物在水体内迁移的主要方式	9
2.4 分子扩散方程	9
2.5 污染物在水体中的随流扩散方程	10
2.6 紊动扩散方程	12
2.7 剪切流的弥散方程	14
2.8 污染物在水体内迁移方程的正逆定解问题	15
3 污染物迁移模型的解析解及其应用	19
3.1 一维污染物迁移问题的解析解	19
3.2 二维和三维污染物迁移问题解析解	24
3.3 污染物有连续点源注入情况下的扩散	29
3.4 有边界影响的扩散	33
3.5 河流一维随流具有降解污染物的弥散方程的解析解及其应用	36
3.6 河流二维降解污染物质具有边界影响的扩散规律及其应用	40
3.7 确定扩散系数的解析方法	43
3.8 河流水力学参数估值	52
4 解污染物扩散方程的数值方法	53
4.1 有限差分法	53
4.2 一维随流污染物扩散方程的四种差分格式	55
4.3 二维污染物扩散方程的有限差分法	57
4.4 解二维污染物随流扩散方程的迦辽金有限单元法	61
4.5 解三维随流污染物扩散方程的迦辽金 (Galerkin) 有限单元法	65
4.6 解三维污染物扩散方程的无单元径向基函数方法	70
4.7 解二维污染物随流扩散方程的特征有限元法	77
4.8 三维无随流稳态扩散方程的边界元法	80
4.9 河流一维降解污染物弥散方程的差分解法	82
5 水体的温度模型	85
5.1 水与大气之间的热交换	85
5.2 河流水温模型	86
5.3 湖泊、水库的水温迁移模型	89

6 有机污染物的数学模型及其预测	95
6.1 有机污染物的分类及危害.....	95
6.2 水体的耗氧和复氧.....	96
6.3 有机污染的衰减变化.....	96
6.4 河流 BOD-DO 模型及其预测	98
6.5 QUAL-II 河流水质综合模型	103
6.6 河口 BOD-DO 模型及其预测	105
6.7 混合型水库湖泊分层 BOD-DO 模型及模拟预测	110
6.8 水库(湖泊)三维 BOD-DO 模型及模拟预测	113
6.9 水库湖泊垂向一维 BOD-DO 与水温耦合数学模型	116
6.10 水库湖泊三维 BOD-DO 模型及模拟预测	117
6.11 应用实例分析.....	127
7 水库(湖泊)富营养化的数学模型及其模拟预测	129
7.1 磷元素在水体中迁移转化的数学模型	129
7.2 混合型水库、湖泊总磷数学模型及其分析解	131
7.3 浮游植物质量平衡模型及其分析解	134
7.4 总磷浓度与富营养化状态的统计相关模型	137
7.5 罗伦珍模型	138
7.6 氮迁移转化的数学模型	138
7.7 在氧化条件下三氮迁移转化的数学模型	139
7.8 应用实例分析	140
8 重金属“三态”数学模型及其模拟预测	145
8.1 重金属在水库(湖泊)和河流中的迁移转化形式	145
8.2 重金属三态迁移转化的微分方程和数学模型	145
8.3 一维流场中重金属随水悬浮物迁移转化的总量方程	149
8.4 一维流场中重金属迁移转化方程的解析解及其应用	150
8.5 重金属随底泥迁移转化一维模型	152
8.6 应用实例分析	155
9 地下水运动数学模型	158
9.1 地下水模型概述	158
9.2 地下水流方程逆问题提法	166
10 多孔介质中污染物迁移预测	169
10.1 多孔介质中溶质运移的机制.....	169
10.2 溶液中一种组分的质量与对流扩散方程.....	171
10.3 多孔介质中的溶质运移微分方程.....	174
10.4 地表水地下水污染质运移转化的耦合数学模型.....	187
10.5 海水入侵的对流——弥散数学模型及其模拟.....	190
10.6 含水层中热量迁移的数学模型.....	197
10.7 应用实例——山东济宁市水质预测.....	202

11 污染质迁移三维模型的数值解法	207
11.1 三维污染质迁移模型的迦辽金有限元特征有限体积法.....	207
11.2 饱和-非饱和流污染物迁移三维 Galekin 有限元方法及应用	210
11.3 确定模型系数或参数的数值方法.....	217
12 地下水水质管理模型	234
12.1 地下水水质管理模型.....	234
12.2 地下水系统管理模型的解法及其应用.....	238
参考文献	243

1 环境数学模型概述

1.1 数学模型在环境问题中的应用

数学是科学的语言，是自然科学与工程技术的基础。在科学技术的研究与实践中，为获得量的分析与描述，必须用数学的语言，通过数学的表达来实现，这是数学建模的过程，所建立的描述规律或关系等的数学表达式称为数学模型。随后，还要对其进行求解、检验，并用于分析预测等各种研究。这是解决问题的过程。

随着工业化社会的飞速发展，环境问题已成为全社会共同关注的焦点，对环境影响的准确评估、控制、修复、预测，成为环境科学与环境保护工作者的首要课题。而借助数学工具和数学方法来解决这些问题，是必需的，也是最经济的。

例如，大量含有氮、磷等营养物质的居民生活污水、工农业废水流入湖泊、水库后，会导致水体的富营养化，而绝对限制其流入又是不可能的。为防止湖泊、水库的富营养化，需要掌握湖泊、水库水质随时间推移的变化情况，以及如何控制流入水体的污染物浓度。这就是相关的两个环境数学模型问题。

一个环境污染问题，往往涉及气象、水文、化学、生物等多种主要因素的影响，还与不同污染物的形态、扩散速率等参数有关。通过区分主、次因素，抽象出主要因素（变量），将这些因素（变量）间的作用关系或规律，表示成一定的数学关系式，并将相应的控制条件（初始情况、边界变化情况）表述为正确的数学表达式。由这些数学关系式、控制条件表达式联合起来，就是针对一个环境污染问题所建立的一个环境数学模型。通过这些模型，不仅可以模拟、预测水质分布的现状及其随时间发展的变化规律，而且能够为进一步的水质控制、改善、调节、管理，提供科学的依据和决策方案。

从学术观点看，环境问题的解决是非常困难的。这种复杂性源于原因的多样性。如生物、化学、物理等各种因素范围太广，可利用的满足模型的数据严重缺乏，数据获取的费用太高昂。运用合适的数学方法，通过简化的数学模型，往往可以克服许多困难，在一定的精度水平上给出可靠的答案或可行方案。

近几十年来，环境科学中的数学工具已经在环境质量评价、环境质量分析、环境灾害预报、环境质量维护等应用领域起着越来越重要的作用。

1.2 建立数学模型的步骤

尽管要解决的问题及建立数学模型的步骤有所不同，但基本上都涉及到下列过程。

① 分析问题的主要因素与次要因素，尤其是与控制目标相关的影响因子，将这些主要因素量化、规范化，抽象为相应的数学变量。

② 根据相关的专业知识和原理，抽象出控制目标和影响因子间的数学关系或规律，建立相应的表达式。这一步骤要伴随模型类型（方案）、数学工具的选择。

③ 参数识别、数据验证与模型的修订，对所建立的数学模型通过实际数据进行合理性检验及系列参数的调整确定，甚至对模型的重新修改，包括对变量（影响因素）的取舍，直至模型达到与实际数据基本一致或吻合。

④ 还要考虑模型的适用范围、精度（可靠性）与可操作性（如果模型只具有实验室意义，计算过于复杂，难以使用，则仍需重新调整）。

⑤ 模型的应用与发展，所建立的模型不仅要用于解决某一具体问题，还应该具有一定的可扩展性，从而用于解决更多的相似或更为复杂的问题，并在新的应用中进一步发展和完善。

同一个问题可以有不同的数学方法加以求解，并且有其不同的精度和优缺点。所以，在具体研究中，需要考虑根据具体问题，对不同方案进行比较，做出选择。

一个大的环境问题，一般涉及诸多领域的各个方面，往往要分解为一些子问题。因解决问题的角度不同，通常要针对具体需求或问题建立不同的数学模型，这些模型既是相关的、统一的，又是各自独立的。这样，更有利于问题的层次化、阶段化、简单化和模型的求解。

1.3 水环境数学模型的分类与水质模型

环境数学涉及到大气、森林、植被、水系统循环、生态等许多分支。本书主要研究水环境（主要针对水污染）的数学问题。

依据不同的标准，水环境数学模型可以有不同的分类。

① 根据研究对象的不同，可以分为地表水、地下水环境数学模型。

② 根据所用的数学工具不同，水环境数学模型可以分为确定性模型（以数学物理方程为主）、随机模型（包括统计模型）、规划模型（以运筹学为主要工具）、灰色模型（以灰色系统理论为主要工具）、模糊模型（以模糊数学为主要工具，较多用于环境质量评价）等不同类型。随着应用数学的发展和计算工具性能的不断提高，新的数学工具不断被应用到水环境问题的研究中，如神经网络、遗传算法以及 GIS 等各种数字模拟技术，为环境数学开辟了新的方向。同时许多问题的研究，都有赖于多种方法的联合处理，所以，简单的分类也是不合适的。

③ 根据模型表达式对应的空间结构，可以分为零维（不含空间变量）、一维、二维、三维及高维模型。

④ 根据模型表达式是否含有时间变量，可以分为稳定模型（不含时间变量）和动态模型（含时间变量，多用于描述水质随时间变化的规律）。

⑤ 按模型所考虑因素的广泛性，可以分为单因素（单变量）模型和多因素（多变量）模型。水质模型一般都是多因素模型，但有时为了进行多因素比较，可以把多因素分割为单因素加以研究。

⑥ 从模型建立的基础看，可以分为经验模型和物理模型。经验模型主要依靠实地观测或试验提取数据，而不是依靠理论推导来建立。其可靠性依赖于人的经验，但模型相对简单，方便求解或计算。物理模型通过理论和原理分析建立，精确可靠，但往往比较复杂，需要大量物理参数支持。

⑦ 从问题研究的角度看，水环境数学模型又可分为评价与管理、模拟与预测、数据处理与参数识别等不同的技术类型。

其他还有集中参数模型与分散参数模型等分类方法，在此不一一列举。

本书重点讨论水质模型。水质模型是指用于描述水体（如河流、水库）的水质要素（如 BOD、DO 等）在各种因素作用下随时间和空间变化及控制条件的数学表达式。

污染物随水进入水体后，随水流而迁移。迁移过程中受水力学、水文、物理、化

学、生物、气候等因素的作用，产生物理、化学、生物等多方面演变，从而引起污染质的稀释和降解。建立水质模型的目的就是力图把这些相互制约因素的定量关系确定下来。在实际研究中，主要针对水体中的溶解氧（DO）、生化需氧量（BOD）、总氮、总磷、氨态氮（ NH_4^+ ）、亚硝酸盐氮（ NO_2^- ）、硝酸盐氮（ NO_3^- ）、重金属、水温等主要水质要素分别建立相对独立又相互关联的数学模型。

通过正确的水质模型，可以根据出入流量、流速、浓度及初始分布等初始、边界条件计算出在水体中的污染物浓度及其随时间发展的详细变化情况，并可获知在控制调整出入口浓度、流量等因素后浓度分布情况。因而水质模型对预测未来水质和制定预防控制水污染对策具有十分重要的意义。

1.4 建立数学模型的一个实例

下面以湖水的污染为例，介绍环境数学模型的一个简单应用。

湖泊一般是工业民用水源、水产养殖、交通运输、休闲旅游等的重要资源，往往要容纳大量生活垃圾、工业排出物等污染物质，形成磷酸盐、杀虫剂和重金属等多种污染。湖泊污染的特征是，水体覆盖面积大，污染源复杂，不易控制，水体流动性差，不利于水体的更新和自净。

为研究湖水的污染变化规律。假设：污染物同质，以污染物的含量标志污染的状况；单流入，单流出，流速不变；变化充分光滑；湖水体积不变；将水体视为一个混合整体；不考虑水体自净问题和其他因素的作用。

设湖水体积 V ，湖水浓度等于流出浓度 $C(t)$ ，流入流出流量 q ，流入浓度 $C_1(t)$ ，湖水中某污染物的背景浓度 C_s ，则有 $V \frac{dC}{dt} = q(C_1 - C)$ ， $\tau \frac{dC}{dt} = C_1 - C(t)$ ， $\tau = V/q$ 为湖水保留时间。

分析几种不同的情况（初始、边界条件）下湖水污染的变化规律。

(1) 自由倾倒 $C_1 = K$ ， $C(0) = C_s$ 。

解得 $C(t) = (C_s - K)e^{-t/\tau} + K$

① $C_s < K$ 时， $C(t)$ 随时间 t 增加而增加， $C_s > K$ 时， $C(t)$ 随时间 t 增加而减少， $C_s = K$ 时， $C(t) \equiv K$ 。显然总有 $\lim_{t \rightarrow \infty} C(t) = K$ ，即湖水最终将与倾倒浓度 K 一致，这与实际情况相符合。称 K 为饱和污染状况，称 $\beta(t) = C(t)/K$ 为湖水在时刻 t 的污染水平。

不难得到 $\beta(t) = \frac{C_s - K}{K} e^{-t/\tau} + 1$ 。当 $\beta = 1$ 时，为饱和水平； $\beta > 1$ 为超饱和状态， $C(t)$ 将会下降。

② 令 $C_s = 0$ （最初是一池清水），则 t 时刻的污染水平为 $\beta(t) = C(t)/K = 1 - e^{-t/\tau}$ ，给定 $\beta < 1$ ，记 T_β 为达到 β 水平污染的时间，则有 $T_\beta = -\tau \ln(1 - \beta)$ 。当 $\beta = 1/2$ 时，有 $T_{1/2} = (\ln 2)\tau \approx 0.7\tau$ 。

一般来说，对于 $C_s \leq K$ ，若给定 $\beta_s = C_s/K < \beta < 1$ ，则有 $T_\beta = \tau \ln \frac{1 - \beta_s}{1 - \beta}$ 。

③ 如果 $K = 0$ 且 $C_s > 0$ ，则 $C(t) = C_s e^{-t/\tau}$ 将递减并且趋于零。

令 $\alpha(t) = C(t)/C_s$ ，它表示污染状况相对降低的强度。则用 $T_\alpha = \tau \ln(C_s/C(t)) = -\tau \ln \alpha(t)$ 给出了污染水平降低到初始状态的 α 倍时所用的时间。取 $\alpha = 1/2$ ，则有 $T_{1/2} = 0.7\tau$ 。

由此可知，在完全断绝污染物流入的前提下，湖泊污染状况缓解一半所用的时间是

湖水保留时间的 0.7 倍。

(2) 控制污染 $C_1(t) = K_0 e^{-\alpha t}$, 即流入的污染物逐年降低, 污染状况以强度 α 逐年得到控制。这时, $\frac{dC}{dt} = -\frac{C(t)}{\tau} + \frac{K_0 e^{-\alpha t}}{\tau}$ 。

令 $C(0) = K_0$, 则模型有解 $C(t) = \frac{K_0}{1-\alpha\tau} (e^{-\alpha t} - \alpha\tau e^{-t/\tau}) = \frac{K_0}{1-\alpha\tau} [1 - \alpha\tau e^{(\alpha-1)t/\tau}] e^{-\alpha t}$ 。

由此不难证明, 当 $\alpha > 1/\tau$ 时, $C(t)$ 是 t 的减函数, 而且有 $\lim_{t \rightarrow \infty} C(t) = 0$ 。它表明只要控制污染的强度 α 足够大, 湖水的污染程度将会不断得到改善。

(3) 混合情形 在初期, 湖泊属于自由污染阶段, 当湖水被污染到一定的水平, 将对污染源加强管理和控制, 降低排污量。

如果在初期有 $C_s = 0$, $C_1 = K_1$, 则湖水将在 $t_\beta = -\tau \ln(1-\beta)$ ($\beta < 1$) 时达到 β 水平的污染, 即有 $C(t_\beta) = \beta K_1$ 。此后对污染源加强管理, 将排污量降低为 $C_1(t) = K_2 < \beta K_1$, 则有如下的

输入函数 $C_1(t) = \begin{cases} K_1, & t < t_\beta \\ K_2, & t \geq t_\beta \end{cases}$, $C_s = 0$, 解得 $C(t) = \begin{cases} K_1(1 - e^{-t/\tau}), & t < t_\beta \\ (\beta K_1 - K_2)e^{-(t-t_\beta)/\tau} + K_2, & t \geq t_\beta \end{cases}$ 。

本节给出的是一个简单的数学模型。要建立更为可靠的湖水污染分析模型, 还应该考虑到蒸发与渗漏、复杂的输入输出、污染物沉降与底泥污染物的释放等其他因素, 这些将在后面的章节中逐一进行讨论。

可以看出, 通过建立并求解合适的水质数学模型, 不仅可以及时预报各种水资源的水质变化状况和趋势, 还可以为水资源的管理、决策和控制提供科学依据。

2 污染物在水体中迁移模型的建立和应用范围

本章主要建立在静止和流动环境中污染物在水体中扩散的微分方程和数学模型,为研究污染物在水体中的扩散输移规律及其应用奠定理论基础。

2.1 流体运动的某些概念

2.1.1 流体的质点、密度

在流体研究区域中任取一点 $p(x, y, z)$, 作以 p 点为中心的立方体 ΔU , 设 ΔU 的体积为 ΔV , 立方体的流体质量为 ΔM_0 , 定义 p 点的密度 (ρ) 为

$$\rho(p) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta M_0}{\Delta V} \quad (2-1)$$

应当指出, 这里的 $\Delta V \rightarrow 0$ 是单纯从数学上来说的, 是用“连续”的概念来描述实际物理量的一种方法, 而实际上只能是 ΔV 趋于某个 ΔV_0 , ΔV_0 所占据的空间单元记为 $[\Delta V_0]$ 这个 $[\Delta V_0]$ 比单个分子要大得多, 但和所考虑的整个物体相比又是非常小的。我们把 $[\Delta V_0]$ 称为和数学点 p 相联系的流体的物理点或质点。假如对流体区域中的每个点都这样去考虑, 就得出了一个密度函数 $\rho(p)$, 这是一个点为变元的函数, 或者表示以坐标为变数的函数 $\rho(x, y, z)$ 。以后我们假定这个函数是连续的且是可微的。若流体是二元体系, 是水和污染物质的混合物, 这里 ρ 表示在水域污染物组成的二元体系中单位体积含污水的质量, 即表示污水的质量密度。重量密度即容重 $\gamma = \rho g$, 式中 g 为重力加速度。

2.1.2 流速场

在垂直流体流动的方向上取一横截面, 如图 2-1 所示, 设其面积为 A , 单位时间内通过的流量为 Q , 则定义 Q 与 A 的比值, 即

$$V = Q/A \quad (2-2)$$

式中, V 为流体的流速, m/s 。但要注意这一概念与实际流速的概念不同, 它并不表示流体质点在单位时间内通过的距离。

用 2.1.1 中类似的方法可以把流体的流速也确定为点的函数, 以刻画流体速度的大小和方向随位置的变化。

在直角坐标系中, 要确定一个向量只需要确定它在各个坐标轴的分量。

以下定义流速在各个坐标轴上的分量, 考虑到以 p 点为中心并与 x 轴垂直的正方形, 设其面积为 ΔA_x , 通过它的流量为 ΔQ_x , 同时规定当流向在 x 轴正向一侧时为正, 反之为负。定义极限 $\lim_{\Delta A_x \rightarrow 0} \frac{\Delta Q_x}{\Delta A_x}$ 的值为 p 点的流体流速在 x 方向的分量, 记作 $u_x(p)$, 即

$$u_x(p) = \lim_{\Delta A_x \rightarrow 0} \frac{\Delta Q_x}{\Delta A_x} \quad (2-3)$$

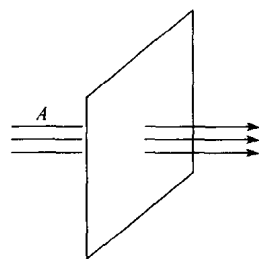


图 2-1

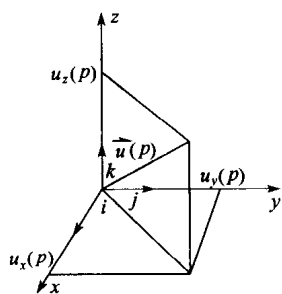


图 2-2

同理可以分别定义流体流速在 y 方向和 z 方向的分量 $u_y(p)$ 和 $u_z(p)$ ，这样一来，流体 p 点的流速向量为

$$\vec{u} = u_x(p)i + u_y(p)j + u_z(p)k \quad (2-4)$$

式中， i, j, k 分别为坐标轴 x, y, z 方向上的单位向量，如图 2-2 所示。

通常流速 $\vec{u}$ 不仅依赖于空间位置而且还依赖于时间 t ，即 $\vec{u}$ 是 x, y, z, t 的函数，即

$$\vec{u} = \vec{u}(x, y, z, t)$$

若在流体区域中，任意点 (x, y, z) 在某个时刻 t 都有一个确定的流速向量与之相对应，则称为一个流速场。当各点流速不随时间变化时称为稳定流速场，否则称为不稳定流速场。

2.1.3 浓度

设 ΔV 是以点 (x, y, z) 为中心的微小体积， ΔM 是该微小体积内包含的污染物的质量，某时刻 t ，点 (x, y, z) 的浓度定义为

$$C(x, y, z, t) = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta M}{\Delta V} \quad (2-5)$$

浓度的量纲为 ML^{-3} ，单位通常使用 kg/m^3 ， mg/L 或用 ppm，ppb 为单位。

$$1\text{ppm} \approx 1\text{mg/L} \quad 1\text{ppb} = 1 \times 10^{-3}\text{ppm}$$

某一时刻污染物质在水域中的分布，一般来说是随着空间位置而变化的。某时刻水域中某点 (x, y, z) 都有一个确定的浓度 $C(x, y, z, t)$ 与之相对应，所以

$$C = C(x, y, z, t) \quad (2-6)$$

确定了一个浓度场。式(2-6)表达的是浓度在 t 时刻的空间分布。

2.1.4 时间平均浓度

时间平均浓度定义为

$$\bar{C}_t(x, y, z, t) = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} C(x, y, z, t) dt \quad (2-7)$$

式中， t_0 为讨论时段的起始时刻； T 为时段长度。

2.1.5 通量平均浓度

设水流的流速为 u ，由一个污染源引导出一个污染带，如图 2-3 所示。

在断面 A-A 处，污染带占有断面积为 A ， Q 为通过 A-A 断面的污水流量，则通量的平均浓度定义为

$$\bar{C} = \frac{\int_A C u dA}{Q} \quad (2-8)$$

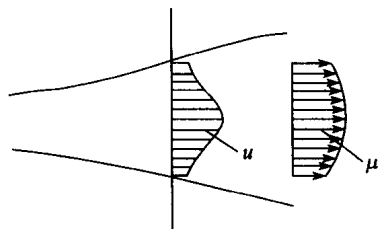


图 2-3

2.1.6 空间平均浓度

设 (x_0, y_0, z_0) 为空间 $[V]$ 的中心坐标，如采样时采样器的中心坐标； V 为空间的体积，例如采样器容积， t 为讨论时刻。空间平均浓度定义为

$$\bar{C}(x_0, y_0, z_0, t) = \frac{1}{V} \iiint_{[V]} C(x, y, z, t) dV \quad (2-9)$$

空间平均浓度是空间 $[V]$ 中心坐标和时间的函数。

2.1.7 样品的平均浓度

设有 N 个瓶装样品，其容积和样品所含污染物的浓度分别为 V_i 和 C_i ($i=1, 2, \dots, N$)，则这组样品的平均浓度定义为

$$\bar{C}_N = \frac{\sum_{i=1}^N V_i C_i}{\sum_{i=1}^N V_i} \quad (2-10)$$

2.1.8 稀释度定义

$$\text{稀释度定义为 } S = \frac{\text{污水稀释后的总容积}}{\text{污水未稀释前的容积}} \quad (2-11)$$

如果环境水体中已经含有某种污染物，它的背景浓度为 C_s ，排出污水所含这种污染物的浓度是 C_d ，当污水与环境水体混合得到的浓度为 C 时，则稀释度为

$$S = \frac{C_d - C_s}{C - C_s} \quad (2-12)$$

从式(2-12)可解出稀释后浓度为

$$C = C_s + \frac{1}{S} (C_d - C_s) \quad (2-13)$$

2.1.9 有关污染源的几个概念

从污染源相对于被污染环境水体的空间关系出发：如果污染源占有的空间尺度相对很小，可以视为一个点不致影响精度时，这个污染源称为点源；如果污染源在空间分布占有一定长度，可视为一条线，则称为线源；如果污染源在空间分布占有一定面积或者体积，而源的这种空间分布情况又不允许忽视的时候，则称为“面源”或“体源”。

从污染物进入水体的时间过程来看：如果污染物在很短时间内泄入水体中，称为瞬时源；如果污染物持续泄入水体中，称为时间连续源；如果污染物的排放速率恒定则称为恒定源或稳定源，否则称为非恒定源或不稳定源。

费克扩散定律

费克 (Fick) 是德国的一位生理学家，他在 1855 年提出热在导体中的传导规律也可以适用于盐分在溶液中的扩散现象。

费克扩散定律可表述如下，单位时间内通过单位面积的溶解质（扩散质）与溶质浓度在该面积的法线方向的梯度成正比例，用数学表示为

$$F_x = -D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2-14)$$

式中， F_x 表示溶质在法线 x 方向的单位通量； C 表示溶质浓度； D 表示扩散系数， L^2/s ； $\frac{\partial C}{\partial x}$ 表示溶质浓度在 x 方向的梯度。式(2-14)中“负号”表示溶质从高浓度向低浓度扩散。

一般费克 (Fick) 定律的数学一般表示是：

$$F = -D \text{grad} C \quad (2-15)$$

式中, F 为通量密度向量。设 F_x, F_y, F_z 为 F 在 x, y, z 方向上的分量, 则

$$F_x = -D \frac{\partial C}{\partial x}, F_y = -D \frac{\partial C}{\partial y}, F_z = -D \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2-16)$$

式中, D 一般称为分子扩散系数, 影响分子扩散系数的因素有温度、扩散质的浓度、浓度梯度、压力等, 其中温度是最主要因素, 例如实验测定:

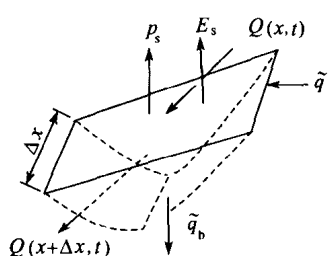
NaCl 在水中扩散系数 25℃ 时, $D = 1.61 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$

NaCl 在水中扩散系数 0℃ 时, $D = 0.784 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{s}$

从费克定律可知, 只要存在浓度梯度, 必然发生物质扩散, 人们把符合梯度型费克扩散定律的扩散现象统称为费克型扩散。

2.2 水流连续方程

设 $Q(x, t)$ 为 t 时刻通过断面 $A(x, t)$ 的流量 (m^3/s); $\tilde{q}$ 为侧向流量强度 [$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{m})$];



$\tilde{q}_b$ 为底部渗出流量强度 [$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{m})$], p_s 为大气降水强度 [$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$]; E_s 为蒸发强度 [$\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$]; b 为河流的水面宽度 (m); A 为河床过水断面面积 (m^2); f 为河流平均水深 (m)。下面建立任意 x 处在时刻 t 过水断面 $A(x, t)$ 与通过该断面流量 $Q(x, t)$ 之间的关系式。

从河流中任取一个薄片水体如图 2-4 所示, 在 dt 时段内进行水量平衡分析。

① 由上游来水引起的该薄片内水量增量为

$$Q(x, t)dt - Q(x + \Delta x, t)dt = -\left. \frac{\partial Q}{\partial x} \right|_{(x, t)} \Delta x dx$$

② 由侧向强度 $\tilde{q}$ 引起的水量增量为 $\left. \tilde{q} \right|_{(x, t)} \Delta x dt$

③ 由河流底部渗出流量强度 $\tilde{q}_b$ 引起的水量增量为 $-\left. \tilde{q}_b \right|_{(x, t)} \Delta x dt$

④ 由降水强度 p_s 引起的水量增量为 $\left. p_s \right|_{(x, t)} b \Delta x dt$

⑤ 由蒸发强度 E_s 引起的水量增量为 $-\left. E_s \right|_{(x, t)} b \Delta x dt$

在 dt 时段内, 薄片水体总增量为 $\left(-\frac{\partial Q}{\partial x} + \tilde{q} - \tilde{q}_b + p_s b - E_s b \right) \Big|_{(x, t)} \Delta x dt$

另一方面, 由于薄片内水量增量引起过水断面面积改变 ΔA 所需要的流量为

$$[A(x, t + dt) - A(x, t)]\Delta x = -\left. \frac{\partial A}{\partial t} \right|_{(x, t)} \Delta x dt$$

根据质量守恒定律, 得到

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\partial Q}{\partial x} + (\tilde{q} - \tilde{q}_b) + (p_s - E_s)b \quad (2-17)$$

一般情况下, 可忽略 p_s , E_s 和 q_b , 这时方程式(2-17)简化为

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = \tilde{q} \quad (2-18)$$

称方程式(2-17)和方程式(2-18)为水流连续性方程。

若 $\tilde{q}=0$ ，则式(2-18) 简化为

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (2-19)$$

2.3 污染物在水体内迁移的主要方式

水体中含有的物质可通过各种方式而发生位置的迁移，这些方式主要有如下几种。

(1) 分子扩散

分子扩散是指物质分子的布朗运动而引起的物质迁移，当水体内部物质浓度不均匀时，浓度梯度的存在将使物质从浓度高的地方向浓度低的地方迁移，以求浓度趋于一致。即使在静止的水体中，分子扩散也会使物质散布到越来越大的范围。

物质在水中分子扩散的快慢与物质的性质及浓度分布的不均匀程度有关，也与温度和压力有一定关系。

(2) 随流输移

当水体处在流动状态时，水中含有的物质可随水质点的流动一起而移动至新的位置，此种迁移作用称为随流输移。

(3) 紊动扩散

在水体作紊流运动的情况下，随即紊动作用也可以引起水中物质的扩散，这种扩散称为紊动扩散。紊动扩散作用的强弱与水流漩涡运动密切相关。

(4) 剪切流弥散

当垂直于流动方向的横断面上流速分布不均匀或者随流输移，以平均流速的均匀流计算，则由于实际上剪切流中各点流速与平均流速不同，将引起附加的物质分散。这种附加的物质分散称为弥散。

2.4 分子扩散方程

设静止溶液中，含有某种物质的浓度为 $C(x, y, z, t)$ ，由于浓度梯度而引起的分子扩散可以用质量守恒原理和 Fick 定律来描述。

在静止溶液中以点 (x, y, z) 为中心取出一微元六面体，六面体的各边长分别为 dx, dy, dz ，其面平行于坐标面如图 2-5 所示。

设扩散通量密度矢量 F 在三个坐标方向上的分量分别为 F_x, F_y, F_z 。对于在 $(t, t+dt)$ 时段内，由于分子扩散作用引起的微元体内物质质量的增量。

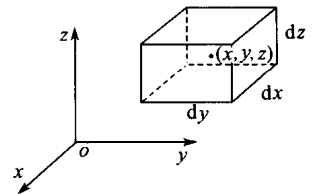


图 2-5

在 y 轴方向，由于分子扩散作用引起的物质质量增量为

$$F_y(x, y - \frac{dy}{2}, z, t) dx dz dt - F_y(x, y + \frac{dy}{2}, z, t) dx dz dt = - \frac{\partial F_y}{\partial y} \bigg|_{(x, y, z, t)} dx dy dz dt$$

同理在 x 轴方向和 z 轴方向由于分子扩散作用引起的物质质量增量分别为

$$- \frac{\partial F_x}{\partial x} \bigg|_{(x, y, z, t)} dx dy dz dt \text{ 和 } - \frac{\partial F_z}{\partial z} \bigg|_{(x, y, z, t)} dx dy dz dt$$

在 dt 时段内，由于分子扩散作用在微元体内物质质量增量为

$$- \left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) \bigg|_{(x, y, z, t)} dx dy dz dt = - \operatorname{div} F(x, y, z, t) dx dy dz dt$$