



水环境 数值模型导论

Introduction to
Water Environmental Numerical Models

任华堂 著



海洋出版社

水环境数值模型导论

任华堂 著

海洋出版社

2016 年 · 北京

内 容 简 介

本书是一本系统阐释水环境数值模型的专著,又是易于教学的教材。本书共分8章,内容包括绪论、物质扩散方程、对流方程、一维水流水质模型、二维水流水质模型、三维水流水质模型、岸线弥合模型和生态系统动力学模型。书末附录包含正文相关的数学、流体力学和算法语言的知识。

该书可作为环境工程、水利工程等专业高年级本科生、研究生的教材,以及相关专业教师、科研及工程技术人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

水环境数值模型导论/任华堂著. —北京:海洋出版社,2016.3

ISBN 978-7-5027-9380-7

I. ①水… II. ①任… III. ①水环境-数值模拟 IV. ①X143

中国版本图书馆CIP数据核字(2016)第042978号

责任编辑:高朝君

责任印制:赵麟苏

海洋出版社 出版发行

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

北京市海淀区大慧寺路8号 邮编:100081

北京华正印刷有限公司印刷

2016年3月第1版 2016年3月北京第1次印刷

开本:787mm×1092mm 1/16 印张:17

字数:360千字 定价:38.00元

发行部:62132549 邮购部:68038093

总编室:62114335 编辑室:62100038

海洋版图书印、装错误可随时退换

前 言

城市水源地的水质污染、频频报警的河流污染、此起彼伏的湖泊水华现象、海上石油泄漏等污染事件,已经将昔日发达国家特有的水环境污染问题摆在了国人面前,我国环保工作者也因此面临更大的社会责任。为社会培养能够控制和改善水环境污染的人才,向公众普及水环境保护的知识,利用所掌握的专业知识为相关单位提供科技服务,成为高等院校的重大战略任务。水环境数值模型也应运成为环境科学专业学生和从业者的必备知识。

水环境数值模型和环境科学领域内的其他内容不同,除包含大量化学、生物学基础知识外,还涉及大量数学、流体力学等知识,如高等数学、线性代数、矩阵论、数值分析、数学物理方程、水力学、计算流体力学、海洋动力学、湖泊学等,而其中的大部分课程尚未被列入环境科学专业的教学课程体系中。在环境专业教学中,水环境数值模型是一门令教师和学生都感到头疼的课程,都有事倍功半之感。毕业生在日后工作中,在水环境数学模型方面多局限于商业软件的应用,而对其内部的机理和求解方式尚不够清楚,在一定程度上存在“知其然不知其所以然”的现象。在数学模型软件应用中,一旦出现新问题时,就容易手足无措,难以独立分析其原因并予以解决。

目前,各种水环境数值模型的著作和资料多种多样,但均是针对具有一定数学、流体力学知识的水利工程专业人士编写的,其中直接给出的大量微分方程令环境专业背景的学生或工作者望而生畏,无法理解其描述的物理意义,遑论其后的各种数值离散格式。

笔者在河海大学本科及硕士期间主攻近岸海洋水文学,后在国家海洋环境预报中心从事海洋环境预报工作,又于清华大学攻读博士期间学习水库水环境知识,及至进入高校工作以来,一直从事线性代数、水力学、水环境数值模型课程的科研和教学任务,接触过陆地水文、海洋水文、大气科学、环境科学等各方面的知识。在此过程中,深切体会到水环境数值模型的困难性和复杂性,数学、流体力学背景薄弱的环境科学专业人士掌握起来尤为不易。在

教学过程中,急需一本针对环境专业人士编写的水环境数值模型教材。本书即为尝试。

该书具有如下特点:

(1)读者对象为具备高等数学和线性代数知识的普通理工科大学生,不需要流体力学、数学物理方程、数值分析等专业基础,起点低,易入门。

人类认识自然界流体的运动从有限空间点和时间点的物理量开始,通过观察离散空间点物理量不同时刻的变化,总结出变化规律,然后引入数学分析的工具将其抽象为一系列的连续函数微分方程组,而在数值求解中由于电脑无法进行精确的积分,微分方程组需要重新还原为离散物理量的变化规律。基于该认识,本书在讨论离散的物理量变化规律之后,直接将其和数值求解衔接,避免其中的微分方程环节,数值离散格式的物理意义更加明确,而微分方程主要应用于理论研究和精度分析。

(2)将复杂的流体力学现象分解为一系列简单物理现象的叠加,将各种简单物理现象和微分方程中的各项相对应,提高对流体运动规律、污染物迁移规律和微分方程的认识。

自然界的物理现象是多种因素综合作用的结果,其演化极为复杂,而人类对自然的认识总是从简单到复杂,从单因素到多因素。本书将污染物的迁移转化分解为不同的过程,如对流、扩散、弥(离)散、降解等。将水体运动分解为不同作用力的影响,如压强梯度力、科氏力、浮力等。将不同的物理过程或不同的强迫因子和微分方程中的各项相对应,利于加深对物理方程和物理现象的认识。

(3)水环境数值模型是一门理论性和实用性并重的课程,本书在讲解理论知识的过程中加入大量的程序实例,并对程序计算结果进行适当的分析,将理论和实践有机地融为一体。

水环境数值模型的最终目标就是利用计算机程序求解水环境中污染物质的迁移转化过程,现有资料多注重离散格式的分析,而缺少相应的计算程序。本书在讲解离散格式的同时,插入大量的计算程序,对一维到三维非定常条件下微分方程的求解均有涉及,有利于水环境数值模型计算者建立对程序的认识,养成良好的编程习惯,并掌握数值计算中的一些处理方法和技巧。运行计算程序、分析计算结果有助于对物理现象深入理解,同时有利于培养学生对该学科的兴趣。

(4) 对水环境中的流体运动规律和物质的迁移扩散规律的论述均基于质量守恒定律,该方式既揭示了流体环境中物理现象演化的本质,又容易引入非结构单元求解等新离散方式,启发读者进行进一步的探索,将基础性和前沿性有机结合在一起。

传统的水环境数学模型离散格式多基于数学分析中的泰勒展开式得到,过程严谨,但容易掩盖其中的物理本质。本书基于自然界中普遍存在且为人所熟知的质量守恒定律进行推导,物理意义明确,对计算结果的分析直观易懂。离散格式易于从结构单元拓展至非结构单元,实现从基础性向前沿性的跨越。在水环境数值模型中,一切前沿性算法都有简单明确的物理本质,本书在论述本质之后,适当引申,对进一步学习和研究起到重要的启发作用。

本书在编写过程中得到中央民族大学夏建新教授的大力支持,邢璇博士对书中的生态动力学部分提了大量的建议,许多研究生在本书的文字编辑方面做了大量工作,国家自然科学基金项目(No. 50909108, 51479218)为本书提供了资助。特别感谢中央民族大学自由包容的学术氛围,能够让作者有机会将自己的工作诉诸文字。

如前所言,本书既为大胆尝试,便存在许多前人未言的论述方式和对知识的理解方式。虽经推敲,错误之处必不可免,还请读者海涵并批评指正。

作者

2016 年春于中央民族大学

目 录

第 1 章 绪论	(1)
1.1 液体的连续介质模型	(2)
1.2 液体的压缩性、密度变化和黏滞性	(3)
1.3 研究流体运动的拉格朗日法和欧拉法	(3)
1.4 水质模型发展	(6)
第 2 章 物质扩散方程	(10)
2.1 物质扩散方程的推导和物理意义	(10)
2.2 物质扩散方程的离散求解	(14)
2.3 有限差分	(25)
2.4 差分方程的相容性、收敛性和稳定性	(29)
2.5 差分格式稳定性的判别方法	(36)
第 3 章 对流方程	(41)
3.1 对流方程的推导和物理意义	(41)
3.2 对流方程的离散求解	(43)
3.3 TVD 格式	(58)
3.4 欧拉 - 拉格朗日 (Euler - Lagrange) 格式	(62)
3.5 有限差分的频散和耗散效应	(66)
第 4 章 一维水流水质模型	(76)
4.1 一维水流水质模型	(76)
4.2 一维水流方程的物理意义及定解条件	(80)
4.3 水流水质方程的离散求解	(86)
4.4 非线性差分格式稳定性分析	(96)
4.5 多变量差分格式稳定性分析方法	(102)
4.6 分子扩散、紊动扩散和弥散	(105)
4.7 拉格朗日粒子追踪技术	(109)
第 5 章 二维水流水质模型	(114)
5.1 二维水流水质模型	(114)
5.2 二维水流方程的物理意义及水体运动性质	(118)

5.3	二维模型的数值离散格式	(126)
5.4	复杂微分方程离散的分步法	(153)
第6章	三维水流水质模型	(156)
6.1	三维水流水质模型	(156)
6.2	水动力学方程的物理意义	(165)
6.3	准拉格朗日坐标系	(169)
6.4	三维模型的离散求解	(175)
第7章	岸线弥合模型	(183)
7.1	正交曲线坐标系下的水环境模型	(183)
7.2	非结构网格的有限体积模型	(191)
7.3	动边界模拟	(199)
第8章	生态系统动力学模型	(206)
8.1	零维模型	(206)
8.2	水生态系统	(209)
8.3	藻类生长动力学	(211)
8.4	有机碳	(220)
8.5	营养盐	(224)
8.6	溶解氧	(234)
8.7	总活性金属	(236)
8.8	粪大肠杆菌	(237)
8.9	求解方法	(238)
附录1	矩阵特征值和向量、矩阵范数	(240)
附录2	傅里叶级数	(242)
附录3	FORTRAN 语言简介	(244)
附录4	牛顿流体的本构方程	(252)
附录5	紊流模型	(257)
主要参考文献		(262)

第1章 绪论

随着社会的发展,生产力水平不断提高。人类由简单的采集果实、狩猎动物的原始社会,发展到大规模、机械化生产的工业社会,从自然环境的被动接受者和被动适应者逐渐转变为主动改造自然环境的最强力量,对自然的影响能力产生了翻天覆地的变化。由于认知水平的局限性和短期经济效益的驱使,人类在对自然界的改造中也出现了一系列的负面影响和严重后果,大量的污染物、生产生活垃圾被排放到环境介质中,同时规模宏大的水利工程、海洋工程、资源矿产开发等人类活动直接改变了人类生存的环境。

在环境问题中,化学性质稳定的固态污染物相对容易处理,因为可以将其封存至固定位置,其影响将限于局部区域。而流态污染物或分布于大气、水体等流体中的污染物,因为其位置不断发生变化,影响范围可能是人类始料未及的,环境污染的控制和治理则远为复杂和困难。1986年4月26日,苏联基辅市以北130千米的切尔诺贝利核电站的灾难性大火造成放射性物质泄漏。由原子炉熔毁而漏出的辐射尘通过大气环流不仅飘过俄罗斯、白俄罗斯和乌克兰,而且飘过欧洲的其他部分地区,如土耳其、希腊、摩尔多瓦、罗马尼亚、立陶宛、芬兰、丹麦、挪威、瑞典、奥地利、匈牙利、捷克、斯洛伐克、斯洛文尼亚、波兰、瑞士、德国、意大利、爱尔兰、法国(包含科西嘉)和英国,引发欧洲大规模恐慌。2011年3月日本大地震导致福岛核电站产生放射性物质泄漏,由于我国部分居民恐惧海洋污染,导致当年海鲜销量大量减少,部分地区甚至出现疯抢食盐的现象,对正常生产生活秩序造成重大影响。

除了流体介质中的污染物之外,工程或其他人类活动导致的水体或大气流动形态的改变也会深刻影响到生活其中的人类和动植物。由于人口密集、工厂及车辆排热、居民生活用能的释放、城市建筑结构及下垫面特性的综合影响导致的城市热岛效应使大气局地环流产生显著改变。城市热岛以市中心为热岛中心,一股较强的暖气流在此上升,而郊外上空相对冷的空气下沉,这样便形成了城郊环流,空气中的各种污染物在这种局地环流的作用下,聚集在城市上空,如果没有很强的外部气团来临,城市空气污染将加重,人类生存的环境被破坏,导致人类患各种疾病,甚至死亡。

作为对自然环境影响更为明显的水利工程更需要人类慎重决策,否则引发的后果将会成为人类不可承受之重。新中国成立之初在苏联专家帮助下建设的黄河三门峡工程就是一例。三门峡大坝的修建导致水库水流速度减小,黄河所挟带的泥沙在库区严重淤积,后来虽然采取了一系列补救措施,但是并未彻底消除其消极影响,黄河中游支流渭河

河床不断抬高,使渭河平原面临前所未有的防洪压力。

正是由于流体环境问题的复杂性,大气和水环境研究目前已经成为环境科学研究的焦点和最具有前途的研究方向。

1.1 液体的连续介质模型

与固体相比,流体的复杂性主要源于其任意变形性,某一时刻相邻的流体分子在一段时间后其相对位置会出现较大的变化,而固体的分子之间不会出现大的位移,否则固体就会被破坏掉。因此,在研究固体时,一般我们可以将其作为一个整体进行研究。而流体由于巨大的变形,不同时刻分子之间的相对位置处于不断变化之中,必须将流动空间分解成系列单元进行研究。将流动空间分解为多大尺度的单元能既体现流体运动特性又利于分析研究是流体力学的基础问题。

我们知道,由于物质是由不同层次的微观粒子构成的,如分子、原子、电子、夸克等,但是这些微观粒子之间并不是完全没有空隙的,因此,如果我们使研究单元的尺度等于或小于微观粒子之间的空隙尺度,流动空间内的若干流动单元就可能处于无物质的状态,速度、压强等概念将不再有意义。因此,流动单元必须大于微观粒子空隙的空间尺度。

因为流体是由大量的分子组成的,将流动单元取为微观粒子分子的尺度就可以解决每个流动单元都必须包含物质的要求。在分子尺度的微观范畴内,流体内的分子在做永不停息的、不规则的运动,分子和分子之间还存在相互的作用力。对该尺度的流体单元进行研究必须考虑分子的布朗运动和分子之间的相互作用力,这对于流体力学而言是一个非常大的挑战。

为简化研究,流体力学研究者将流体分解为尺度远大于分子的流体单元,每个单元内含有大量的分子,因此,每个单元所具有的物理特性,如密度、速度、压强等均体现为其内部大量分子的统计特性。换言之,流体单元在微观尺度上必须足够大,以消除分子微观布朗运动的影响。

流体单元能否取得非常大呢?当流体单元非常大时,分子运动的统计值在不同流体单元之间也会出现大的差异,此时,我们无法将这些运动参数在空间的分布函数作为连续函数处理,数学分析的一系列理论将无法应用。因此,我们必须要求流体单元在宏观上足够小以满足物理参数在数学上连续分布的要求。

在流体力学上将满足以上要求的流体单元称为“质点”,其概念是每个质点包含足够的分子并保持着宏观运动的一切特性,但其体积与研究的流动空间范围相比又非常小,可以在数学上处理为一个点。简而言之,流体质点就是一个分子尺度“微观大”,运动空间内数学处理上“宏观小”的流体微团。

在研究流体运动时,可以将流体视为无数质点毫无间隙紧密组成的连续体,利用数学分析中连续函数的一系列性质和处理方法刻画速度、加速度、压强等参数随时间和空间的变化。我们将这一假定称为“流体的连续介质模型”。

至此,初学者最为担心的一个问题是在自然界中能找到满足“微观大,宏观小”的流体质点吗?答案是在绝大多数情况下是可以的。在标准状态下,1 cm³ 体积的水中约含有 3.3×10^{22} 个分子,相邻分子间的距离约为 3.1×10^{-8} cm。工程问题中所研究的流动空间远远大于分子尺度,工程问题可以视为大量分子微观运动的宏观统计结果。同时,大量的应用案例也表明,基于连续介质模型所得到的结论能够满足精度要求,只有在掺气水流、空穴现象、高空稀薄气体等特殊情况的研究中连续介质模型才会出现问题。

1.2 液体的压缩性、密度变化和黏滞性

液体的体积随所受外部压强的增大而减小,这一性质称为液体的压缩性。压缩性常用体积压缩系数 β 衡量,其定义如下:

$$\beta = - \frac{dV/V}{dp} \quad (1.2.1)$$

式中: V 为液体的体积, dp 为液体所受到的外部压强增量, dV 为液体所受到的外部压强增量 dp 作用下的体积增量。液体的压缩性很小,压强每升高一个大气压,水的密度大约增加 1/20 000。

影响水体密度的另一个因素为温度,在常温条件下(10 ~ 20℃),温度每增加 1℃,水的密度大约减小 1.5/10 000。

由于水体密度对于外部条件的变化不敏感,在大部分情况下,我们可以认为水体的密度为一常数,或特定质量水体的体积为常数,这一假定也称为水体的不可压缩假定。

1.3 研究流体运动的拉格朗日法和欧拉法

在流体力学中,将流体视为无数的宏观小、微观大的质点所组成的连续体。在研究中显然无法对所有质点的时间空间变化逐一进行分析,选取一种方便可行的研究方法极为重要。

(1) 拉格朗日法

最直观和最容易想到的方法就是针对研究对象选取一系列具有代表性的质点,对这些质点直接运用固体力学中质点动力学的研究方法进行逐一分析,综合这些代表性质点随时间的运动规律,就可以获得对流体在流动空间内运动的总体认识。这种方法就是拉格朗日法。

为了区分不同的质点,我们采用它们在 t_0 时刻三维直角坐标系中的位置 (a, b, c) 作为标志,当 (a, b, c) 取不同的值时代表不同的质点。在该种方法下,质点在 t 时刻的位置可以表示为:

$$\begin{cases} x = x(a, b, c, t) \\ y = y(a, b, c, t) \\ z = z(a, b, c, t) \end{cases} \quad (1.3.1)$$

式中: a, b, c 表示该质点在 t_0 时刻位于 (a, b, c) ; t 为时刻; x, y, z 为质点在 t 时刻的空间位置。当 a, b, c 为固定值, t 为变量时,式(1.3.1)给出了质点运动的轨迹。当 t 为固定值, a, b, c 为变量时,式(1.3.1)给出了同一时刻不同质点在空间内的分布情况。 a, b, c, t 也被称为拉格朗日变数。

对于特定的质点,其位置关于时间的导数即为该质点的速度,采用数学语言表示就是在式(1.3.1)中固定 a, b, c , 对时间 t 求偏导数,得到流体质点的运动速度 u :

$$\begin{cases} u_x = \frac{\partial x(a, b, c, t)}{\partial t} \\ u_y = \frac{\partial y(a, b, c, t)}{\partial t} \\ u_z = \frac{\partial z(a, b, c, t)}{\partial t} \end{cases} \quad (1.3.2)$$

同理,在式(1.3.1)中固定 a, b, c , 对时间 t 求二次偏导数,得到流体质点的运动加速度 a :

$$\begin{cases} a_x = \frac{\partial^2 x(a, b, c, t)}{\partial^2 t} \\ a_y = \frac{\partial^2 y(a, b, c, t)}{\partial^2 t} \\ a_z = \frac{\partial^2 z(a, b, c, t)}{\partial^2 t} \end{cases} \quad (1.3.3)$$

拉格朗日法的最大特点是能够对特定质点或质点系进行跟踪研究。例如,我们在追踪污染云团随水流的迁移过程时,采用该方法能够准确模拟预测污染云团在不同时刻的影响范围和输移速度等参数,为污染防治提供必要的参考依据。

当然使用拉格朗日法研究流体运动时也会出现一些困难,譬如我们在某一时刻所选取的具有代表性的流体质点经过一定时间后可能汇聚于有限的几个小的局部区域,无法根据这些局部区域的质点运动情况得到整个区域的流体流动规律,即某一时刻具有代表性的质点系列在其他时刻未必具备代表性。另外,如果研究对象是不断有流体进出的开放性区域,选取的代表性质点就不断流出研究区域,而上游不断进入新的质点,我们选取的代表性质点就需要不断更换,研究将会变得非常复杂和繁琐。

(2) 欧拉法

欧拉法与拉格朗日法最大的区别是研究对象并非针对特定质点,而是针对特定空间位置。欧拉法在流动空间中设置若干空间点,通过观测不同时刻在这些固定空间点的质点运动规律进行分析,得到研究区域内流体随时间的运动规律。

采用欧拉法,空间点 (x, y, z) 处的流体质点在 t 时刻的速度 u 可以表示为:

$$\begin{cases} u_x = u_x(x, y, z, t) \\ u_y = u_y(x, y, z, t) \\ u_z = u_z(x, y, z, t) \end{cases} \quad (1.3.4)$$

式中: x, y, z, t 称为欧拉变数。当固定 x, y, z 且 t 作为变量时,式(1.3.4)表示在不同时刻 (x, y, z) 位置处质点的运动速度;当固定 t 且 x, y, z 作为变量时,式(1.3.4)表示在 t 时刻不同空间位置的速度分布。

接下来,如同拉格朗日法中的做法一样,貌似只要对式(1.3.4)中的速度关于时间 t 求偏导数就可以得到 (x, y, z) 位置处质点的运动加速度。但是,事实并非如此。因为在拉格朗日法中式(1.3.2)中是固定质点的速度,而式(1.3.4)中的速度却是固定位置的速度,当时间发生变化时,该位置对应的质点不一定是同一个质点(只有速度为零,才会是同一个质点)。而根据牛顿力学,加速度是特定质点的速度对时间求导数。

在欧拉法中, t 时刻在 (x, y, z) 位置的质点在 $t + \Delta t$ 时刻已经运动到 $(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$ 。因此, t 时刻在 (x, y, z) 位置质点的加速度为

$$a(x, y, z, t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t + \Delta t) - u(x, y, z, t)}{\Delta t} \quad (1.3.5)$$

在欧拉法中,由于位置 $(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z)$ 不易直接确定,流体力学中將上式右端分子进行处理,转化为如下形式:

$$\begin{aligned} a(x, y, z, t) = & \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t + \Delta t) - u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t)}{\Delta t} \\ & + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta t} \end{aligned} \quad (1.3.6)$$

上式右端分为两部分,第一部分表示特定空间点的速度随时间变化,因此也叫作时变加速度,第二部分是同一时刻不同位置的速度变化,因此也叫作位变加速度。利用微积分的知识,时变加速度可以转化为

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t + \Delta t) - u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t)}{\Delta t} = \frac{\partial u}{\partial t} \quad (1.3.7)$$

位变加速度部分远较时变加速度复杂,为方便求解将其进一步转化为如下形式:

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta t}$$

$$\begin{aligned}
 &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t) - u(x, y + \Delta y, z + \Delta z, t)}{\Delta t} \\
 &\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, y + \Delta y, z + \Delta z, t) - u(x, y, z + \Delta z, t)}{\Delta t} \\
 &\quad + \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x, y, z + \Delta z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta t} \quad (1.3.8)
 \end{aligned}$$

根据微积分知识,上式进一步转化为

$$\begin{aligned}
 \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{u(x + \Delta x, y + \Delta y, z + \Delta z, t) - u(x, y, z, t)}{\Delta t} &= \frac{\partial u}{\partial x} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t} + \frac{\partial u}{\partial y} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta y}{\Delta t} + \frac{\partial u}{\partial z} \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta z}{\Delta t} \\
 &= u_x \frac{\partial u}{\partial x} + u_y \frac{\partial u}{\partial y} + u_z \frac{\partial u}{\partial z} \quad (1.3.9)
 \end{aligned}$$

综合式(1.3.5)—(1.3.9),可得

$$a = \frac{\partial u}{\partial t} + u_x \frac{\partial u}{\partial x} + u_y \frac{\partial u}{\partial y} + u_z \frac{\partial u}{\partial z} \quad (1.3.10)$$

其分量形式为

$$\begin{cases} a_x = \frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_x}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_x}{\partial z} \\ a_y = \frac{\partial u_y}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_y}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_y}{\partial z} \\ a_z = \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_x \frac{\partial u_z}{\partial x} + u_y \frac{\partial u_z}{\partial y} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} \end{cases} \quad (1.3.11)$$

可见,由于欧拉法的研究角度基于特定位置而不是特定质点,在进行加速度等力学分析中比拉格朗日法大大增加了工作量。尤其是位变加速度涉及速度的乘积运算,由此产生的非线性特性成为流体力学研究中的难点。

本节最后采用一个形象化的例子说明拉格朗日法和欧拉法的区别。我们为了观察学校学生体育锻炼、学习、休息、就餐所占用时间的比例,可以采取两种方法。一种方法是根据专业、性别、生源所在地等影响因素寻找一部分学生作为代表,只需逐一调查这部分同学的时间安排,就可以了解全校学生的时间安排,这种方法就相当于流体力学中针对一系列质点开展研究的拉格朗日法。除此之外,我们还可以分析体育锻炼场所、食堂、教室、餐厅这些位置的监控录像资料,根据这些空间位置的录像资料我们也可以得到全校学生的时间安排,这相当于流体力学中针对空间点开展研究的欧拉法。

1.4 水质模型发展

人类对水体的改造过程,可以认为依次经历了解决“水过多”“水过少”“水质差”三个主要阶段。在人类文明的诞生时代,从西方诺亚方舟到中国女娲补天的故事,多

数都留有对大洪水的原始记忆。我国《史记》记载“水之利害,自古而然。禹疏沟洫,随山浚川”,已经开始了大型防洪工程的建设。在获得人类自身安全的基础上,为了进一步获得衣食保证,提高农作物产量,解决农田旱涝问题的农田水利工程成为水利发展的又一个重大阶段。我国在周代已经形成农田沟洫系统,战国时代的都江堰、郑白渠等充分表明中国人民的水利工程技术在当时已是独步天下。也正是凭借着领先其他文明的治水能力,中华文明成为历史上规模最大和最先进的农业文明。其后,工业革命的发生极大地提高了人类改造自然的能力,人类对自然的改造力度空前,同时自然环境又以其独特的方式将改造后果反馈给人类。一方面,大型水利工程的建设保证了人类的生命财产安全和水资源的利用效率,给人类社会提供了前所未有的发展机会;另一方面,跨流域调水等大型工程导致生态环境出现巨变,工业化大生产排出的大量污水、废水超过了水资源再生的能力,水环境质量显著下降,水环境面临人类有史以来最大的威胁。实现人与环境的和谐发展成为摆在人类面前的重大课题。水环境数学模型正是在这一背景之下得到蓬勃发展的。

水环境质量取决于水体中的一系列物理、化学、生物等指标是否异常以及是否会引发生态环境危害。水环境数学模型是描述水环境中物质混合、输移和转化规律的数学模型的总称。水环境数学模型的研究内容主要包括两大部分,一部分为水体运动导致的物质迁移过程,如移流、扩散、弥散、沉降等以水力学为基础的研究,另一部分主要为影响水体参数变化的物理、生物、化学等过程,如化学反应、生物降解、吸附与解吸、挥发、生物本身的生长、大气沉降、水气界面的物质交换,等等。因此,水质模型既包含了传统水利工程学科中涉及水体运动物理规律的数学模拟,也涵盖了微观的化学、生物等过程的数学模拟,具有高度的学科综合性和交叉性。而水环境模型也正是沿着水力学和以生物化学为基础的环境学两个方向逐步发展相互交融形成的。

(1) 从水力学到水质模型的发展

对于流体的认识,100多年前,历经 Navier、Poisson, Saint – Venant 和 Stokes 卓有成就的研究,已经完全确定了揭示流体运动一般规律的理论,即 Navier – Stokes 方程。纵观其发展的历程,许多科学家都为此做出了杰出的贡献,如 Bernoulli、Euler、Laplace、Lagrange、Coriolis、Boussinesq、Renolds、Karman 等。

水流模型的理论起源于 19 世纪的圣维南 (Saint – Venant), 他确定了非恒定水流的理论基础。20 世纪初, Sterneck 和 Defant 对狭长海域的潮流进行了模拟,取得了非常好的效果。水流模型发展过程大致可以分为三个阶段: 20 世纪 50、60 年代, 是数学模型发展的起点, 建立了许多一维模型, 同时也出现了一些简单的二维模型。20 世纪 70 年代, 二维模型得到深入研究和广泛应用, 对三维问题的研究也开始起步。20 世纪 80 年代至今, 一方面, 二维数学模型的研究和应用日臻完善和成熟, 积累了许多成功的经验; 另一方面, 三维数学模型的发展和应用方兴未艾, 随着高性能计算机的不断涌现, 三维数学模

型已经成为当今水流数值模拟的主流和趋势。

三维流动数值模拟领域取得今天的辉煌成就,经过了许多学者的研究和发展。

1972 年 Gendy 和 Heaps 开始了三维数学模型的研制工作。1973 年,Leendertse 基于三维的浅水方程在垂直方向采用固定分层法,即将计算水域划分为固定的多层,将每一层的变量沿垂向积分,把一个三维问题转化为一系列的二维问题,并用 ADI 法进行了数值离散。其后,陆续出现了一系列简单的三维模型。1994 年,Kin 等应用固定分层方法建立了海湾三维潮流、盐度模型。为了更好地模拟底部边界地形的变化,人们将 Philips 提出的 σ 坐标变换应用到河流海洋的三维模拟中。以普林斯顿(Princeton)大学 Mellor 教授为代表的科研人员开发并发展至今的 POM 模型(普林斯顿海洋模型),在实际应用中模拟效果非常好。自 20 世纪 90 年代以来,该模型在世界上的许多海区都得到了应用。美国佛罗里达大学 Sheng 建立了一般曲线坐标下的三维水动力模型(CH3D),该模型也采用了 σ 坐标系,水平方向的运动采用水平流速矢量的逆变分量来表示。美国休斯敦大学 Wang 将三维水动力模型的控制方程用普遍张量的形式描述,并对美国加尔维斯敦(Galveston)海湾的水动力进行模拟。目前,国外涌现出大批量的三维水流数值模型,如 POM、MOM(GFDL 模块化海洋模型)、CANDIE(加拿大 DIECAST 海洋模型)、MICOM(Miami 等密度坐标海洋模型)、ECOM 等。

同样,国内学者在三维水流数值模型的开发和应用方面也做出了自己的贡献。南京水利科学研究院易家毫、赵士清采用与 Leendertse 相似的固定分层方法,建立了简单的三维数值模型,模拟了长江口的水流特性。河海大学韩国其等采用 σ 坐标系和内外模分裂法,并应用 $k-\varepsilon$ 模型计算紊动扩散系数,建立了三维的水流数值模拟方法。河海大学宋志尧等基于内外模的分裂和 ADI 法建立了准三维的水流数值计算模型。上海交通大学刘桦等建立了考虑水体分层影响的三维水流模型。纵观国内三维水流数值模型,虽然起步较晚,但是发展速度很快,在工程中的应用成效显著。

由于河流、海洋中,温度、盐度、悬浮颗粒物浓度等本身会影响水体的流动规律。因此,这些指标也是水利专家研究水动力学或河床冲淤所关注的问题。在水动力学模型的开发中为了提高模拟精度已经加入了这些指标的模拟。随着水环境问题的不断凸显,水利专家自然将更多的水质指标加入到数学模型中。

(2)从化学、生物学到水质模型的发展

最早的水质模型是于 1925 年在美国俄亥俄河上开发的 S-P 模型(Streeter-Phelps 模型)。S-P 模型是 1925 年由 Streeter 和 Phelps 提出的,又称 BOD-DO 模型,是应用最普遍的一维地表水水质模型。此模型建立的基本假定是:只考虑好氧微生物参加的 BOD 一级衰减反应,即任何时候反应速率都和剩余的有机物数量成正比;水体中溶解氧(DO)的减少只认为是由微生物的作用使 BOD 衰减而引起的,水体中 DO 减少的速率与 BOD 的反应速率相同;水体中复氧速率与水体中的氧亏量成正比。此模型在水体流动方面做

了极大的简化,忽略水体导致的扩散作用,将断面流速作为沿程不变的常数,且只考虑稳态的情况。

1970年,美国环保局(EPA)研究开发并推出 QUAL-I 水质综合模型,该模型为稳态水流条件下的一维水质模型,利用体积守恒条件计算沿程不同位置的流量,再通过流量-流速关系的经验曲线确定流速。QUAL-I 模型较为完善地概化了水气之间的传热过程、生化耗氧量-溶解氧之间的平衡机制、物质的输移扩散机制等,能够模拟多种水质参数,将水质模型在生物化学过程的研究向前推进了一大步。之后,不断完善并推出一系列改进版本,至今 QUAL 系列模型仍是水环境研究领域最有影响的模型之一。

1983年,美国环保局(EPA)研发了 WASP 水质模型。WASP 模型功能强大,可以模拟一维、二维、三维空间的线性和非线性水质问题,适用范围覆盖河流、湖泊、海湾、海洋等不同水域,可以模拟溶解氧、细菌、富营养化、毒性物质等涉及的生物化学过程。该模型的局限性是缺少水动力学过程的模拟,因此输移机制所涵盖的平流、弥散等过程需要结合其他水动力学模型计算给定。之后,该版本得到不断改进,并提供了一些水动力学模型与其衔接,成为水环境研究领域又一个具有广泛影响的水质模型。

此后,地表水水质模型研究进入深化、完善与广泛应用的新阶段。模型的可靠性和精确性有了极大提高,研究的空间尺度发展到了三维;考虑水质模型与面源模型的对接;模型生化过程更加复杂完善,其中状态变量及组分数量大大增加,重金属、有毒化合物、生态动力学机制得到大发展;大气污染的影响纳入到水质模型中,与地下水的水质水量有机结合,建立了综合水质模型;人工神经网络、3S 技术等多种新技术方法引入到地表水水质模型研究中。

由于水利专家在水动力学研究中,积累了数值计算的丰富经验,而环境学家对于污染物转化的化学、生物过程有着更深刻的认识,水利学科和环境学科的交融,促进了水环境数学模型的快速发展,如 EFDC 模型将水利工作者开发的水动力学模块和环境工作者开发的水质模块相结合,成功地解决了大量的水环境问题,成为美国环保部推荐使用的模型。

目前,世界上应用较广的水质模型主要有 QUAL2E、QUAL2K、CE-QUAL-W2、RMA-12、EPDRiv1、WASP6、WASP7、ECOLab、DELFT3D、MIKE11、MIKE21、MIKE3、SMS 等。这些模型所考虑的生物化学机制有一定差异,其推荐采用的参数也是基于不同的地区得到,可以根据具体的应用实例进行选择。