

小城镇河流水质数学模型参数估计

徐 丰

(中国科学院力学研究所)

摘要 本文以颍塘河为例,研究了中小河流水质模型参数,提出了一整套更为简便易行的估计中、小河流模型参数的方法,分析了准确估计模型参数的影响因素,得到了适用于颍塘河水质模型参数 K_1 、 K_2 、 K_3 及 D_L 的估计结果。该结果可直接应用于颍塘河的水质数值模拟,对于其它中、小河流也有一定借鉴意义。

一、引言

自从Streeter-Phelps的氧平衡模型问世以来,对水质数学模型的理论研究相当广泛而深入,与此同时建立起大量适用于各种水体及不同应用目标的水质数学模型。尽管河流水质数学模型已有所论,但是每条河流的水质模型各有其特点。因为数学模型是对实际过程的极大简化,模型中的参数将因实际河流的不同而有很大差异。因此,给出正确的河流模型参数已成为实际河流水质数学模拟成功与否的关键,即模型参数估值是理论模型连接实际河流必不可少的纽带。

本文以颍塘河震泽段为研究对象,在该研究河段的流动及水质监测基础上,参考前人研究成果,给出了用来模拟所研究河段耗氧过程的Streeter-Phelps(Thomas修正式)模型参数。通过对该研究河段的模型参数分析、估计,建立起估计中、小河流水质数学模型参数的简便、易行的方法。

二、基本方程

在进行水质数学模拟之前,应当仔细分析所研究河段的水流特点及污染现状,以便给出适当的水质数学模型,准确地再现实际河流中污染物迁移转化规律。考虑到颍塘河震泽段当前水质污染主要是耗氧污染,而河流水体又有如下特点:

- (1) 该河段地势平坦,流量平稳。
- (2) 航运繁忙,排放的污染物沿河流

断面混合比一般河流快。

对该河段的水质模拟研究本文采用Streeter-Phelps模型Thomas修正式^[1],计及纵向弥散作用。BOD及DO的平衡方程如下:

$$\left\{ \begin{aligned} A \frac{\partial L}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial X} \left(D_L A \frac{\partial L}{\partial X} \right) \\ &\quad - \frac{\partial (AUL)}{\partial X} \pm AS_{BOD} \\ A \frac{\partial D}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial X} \left(D_L A \frac{\partial D}{\partial X} \right) \\ &\quad - \frac{\partial (AUD)}{\partial X} \pm AS_{DO} \end{aligned} \right. \quad (1)$$

式中, $S_{BOD} = - (K_1 + K_3) L$
 $S_{DO} = K_2 (D_s - D) - K_1 L$
 A : 断面面积 (m^2);
 U : 断面平均流速 (m/s);
 D_L : 弥散系数 (m^2/s);
 D_s : 饱和溶解氧浓度 (mg/L);
 D : 溶解氧浓度 (mg/L);
 L : 生化耗氧浓度 (mg/L);
 K_1 : 生化降解率 ($1/d$);
 K_2 : 大气复氧率 ($1/d$);
 K_3 : BOD沉降再悬浮率 ($1/d$)。

$$\left\{ \begin{aligned} L(t, x)|_{x=0} &= L_0(t), D(t, x)|_{x=0} \\ &= D_0(t) \\ \text{边界条件} \left\{ \begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial X} \Big|_{x=L} &= \frac{\partial D}{\partial X} \Big|_{x=L} = 0 \end{aligned} \right. \end{aligned} \right. \quad (2)$$

$$\text{初始条件} \begin{cases} L(t, x) |_{t=0} = L_1(x) \\ D(t, x) |_{t=0} = D_1(x) \end{cases} \quad (3)$$

由于上述方程无法给出其解析解, 因此可利用四点隐式差分格式将其差分, 然后利用“追赶法”求解差分方程, 从而给出方程(1)式的数值解^[2]。

三、模型方程中的参数估值

(一) 弥散系数的估计

河流纵向弥散系数是衡量天然河流中由于流速横向分布不均匀造成纵向弥散作用的尺度, 弥散系数 D_L 是河流水力学参数, 有别于模型中生化反应系数。为此, 本文以一次离散实验所得数据为基础, 给出其弥散系数估计结果。离散实验是以水质指标 COD 为“示踪剂”(由于水团通过该实验段时间较短, 可视 COD 为非降解物质), 在取得来流背景浓度值及污染源(1h 均匀排放)排放量的同时, 对下游 2km 大断面, 做 COD 浓度值随时间变化的监测。由于排放点与监测断面间干流顺直, 无任何支流, 而对监测断面处 COD 浓度横向分布取样, 显示 COD 浓度横向分布均匀。因此, 方程式(1)可简化得到 COD 迁移方程式:

$$A \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_L A \frac{\partial C}{\partial x} \right) - \frac{\partial (AUC)}{\partial x} \quad (4)$$

式中, C —COD 浓度值 (mg/L)。

以上离散实验虽然简便易行, 但只适用于在中小河流上进行。一般来说, 是指那些河道较窄, 水体流过离散实验河段时间较短的河流。

根据 Fisher 提出的 D_L 经验公式^[3]:

$$D_L = a \cdot U \cdot H^{0.838} \quad (5)$$

式中, a : 待定系数;

H : 平均水深 (m)。

可知对弥散系数 D_L 的估计, 即是对公式中待定系数 a 的估计 (式中 U 及 H 可通过实测取得)。以待定系数 a 的初值出发, 求

解方程(4)式, 给出 COD 监测断面处与实测时间点对应的数值解, 进而求得 COD 的数值解与实测值间的误差平方和:

$$J = \sum_{i=1}^n (C_i(\theta, U, H) - \tilde{C}_i)^2 \quad (6)$$

式中, i : 实测时间点序号;

C_i : 第 i 时刻的数值解 (mg/L);

\tilde{C}_i : 第 i 时刻的实测值 (mg/L)。

搜索系数 a 使得目标函数 J 最小, 从而得到弥散系数 D_L 的估计结果:

$$D_L = 16.18 \cdot U \cdot H^{0.838} \quad (7)$$

利用 D_L 估计结果, 求解方程(5)式, 给出监测断面处 COD 浓度数值解(见图1), 可见实测值与数值计算结果拟合良好。

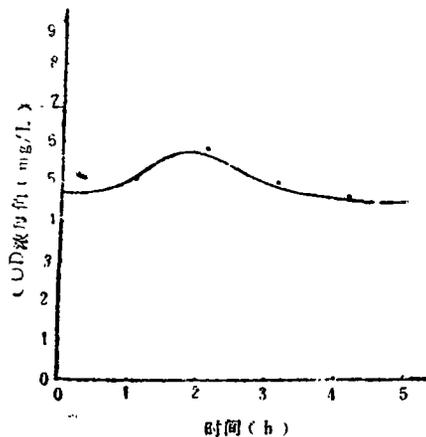


图1 实测COD浓度值与模拟计算结果的比较

(二) 氧平衡模型中生化参数的估计

为能从实际河流流动过程中更全面地提取信息, 本文以“水团追踪”实测为基础, 利用多维参数最优化估值方法, 搜索 K_1 、 K_2 、 K_3 的最优结果。

首先, 在对多次实测资料及历史资料的分析基础上, 参考其它河流得到的 K 值估计结果^[2], 给出模型生化反应参数 K_1 、 K_2 、 K_3 较为普遍采用的函数形式:

$$\begin{cases} K_1 = a_1 \cdot a_2^{(T-20)} \\ K_2 = a_3 \cdot U^{a_4} \cdot H^{a_5} \cdot 1.005^{(T-20)} \quad (8) \\ K_3 = a_6 \cdot e^{(-1.7 \cdot U)} - a_8 \end{cases}$$

式中, $a_1 \sim a_8$: 待定系数。

T : 水温 ($^{\circ}\text{C}$)。

将方程(1)式与边界条件(2)式及初值条件(3)式联立求解(参数 K_1, K_2, K_3 以初值代入, D_L 利用前述估计结果), 可得到方程(1)式的数值解。因此, 对于第*i*次实测, 第*j*个断面可求出BOD、DO数值解与实测值差的平方:

$$\begin{cases} \varepsilon_L^{(i,j)} = [L(x^j, K_1^i, K_2^i, D_L, L^{(i,0)}) - \tilde{L}^{(i,j)}]^2 \\ \varepsilon_D^{(i,j)} = [D(x^j, K_1^i, K_2^i, D_L, D^{(i,0)}) - \tilde{D}^{(i,j)}]^2 \end{cases} \quad (9)$$

其中, L, D 分别为BOD、DO的计算浓度值; \tilde{L}, \tilde{D} 分别为BOD、DO的实测浓度值, 从而可求出对应第*i*次实测的BOD、DO各断面偏差和:

$$J^i = \sum_{j=1}^n (W \cdot \varepsilon_L^{(i,j)} - (1 - W) \cdot \varepsilon_D^{(i,j)}) \quad (10)$$

式中, W 为权值(0-1), 表示BOD、

DO数据的可信度。

定义*J*为目标函数, 利用“最速下降法”搜索 K_1, K_2, K_3 。即先确定目标函数*J*的最陡方向:

$$\bar{V} = - \left[\frac{\partial J^i}{\partial K_1^i}, \frac{\partial J^i}{\partial K_2^i}, \frac{\partial J^i}{\partial K_3^i} \right] \quad (11)$$

然后给出各参数沿最陡方向的修正量:

$$\Delta K^i = p \cdot \frac{\bar{V}}{|\bar{V}|} \quad (12)$$

$$\Delta \bar{K}_m^i = \frac{-\frac{\partial J^i}{\partial K_m^i}}{\sqrt{\sum_{m=1}^n \left[\frac{\partial J^i}{\partial K_m^i} \right]^2}} \quad (13)$$

式中, p 为搜索步长。

上述微商可以差分形式替代, 以 K_1, K_2, K_3 某一初值为出发点, ΔK 为步长, 对 K_1, K_2, K_3 迭代计算直至*J*值最小。因此, 对于各测次可得对应于不同水文、水温条件的 K_1, K_2, K_3 估计结果, 见表1。

调整权值*W*可得到 K_1, K_2, K_3 不同

表1 不同水温、水文条件下的*k*估计值

次	$T(^{\circ}\text{C})$	$u(\text{m/s})$	$H(\text{m})$	$k_1(1/d)$	$k_2(1/d)$	$k_3(1/d)$
1	6.8	0.1976	4.0525	0.1716	0.1884	0.0334
2	7.8	0.1760	4.0625	0.1916	0.1814	0.0437
3	14.0	0.2075	4.2900	0.1412	0.1895	0.0305
4	27.5	0.1650	4.0975	0.3579	0.1706	0.0461

的估计结果(见表2, 本文选取 $W = 0.7$)。

表2 多参数最佳拟合中不同权重与所估计的*k*值对应表

W	$k_1(1/d)$	$k_2(1/d)$	$k_3(1/d)$
0.1	0.1793	0.2037	0.1343
0.3	0.1776	0.1949	0.0339
0.5	0.1720	0.1916	0.0336
0.7	0.1716	0.1884	0.0334
0.9	0.1699	0.1853	0.0332

利用所求得的 K_1, K_2, K_3 估计结果(共四组), 同样可求出三个参数(各组加权)估计值与根据公式(8)计算结果的误差平方和:

$$\begin{cases} J_1 = \sum_{i=1}^4 W_i [K_1(a_1, a_2, T) - \tilde{K}_1^i]^2 \\ J_2 = \sum_{i=1}^4 W_i [K_2(a_3, a_4, a_5, U^i, H^i, T^i) - \tilde{K}_2^i]^2 \\ J_3 = \sum_{i=1}^4 W_i [K_3(a_6, a_7, a_8, U^i) - \tilde{K}_3^i]^2 \end{cases} \quad (14)$$

式中, W_i —每次实测数据的可信度。

同样再利用“最速下降法”迭代 $a_1 \sim a_8$, 使得目标函数 J_1 、 J_2 、 J_3 最小, 从而得到待定系数 $a_1 \sim a_8$ 的估计结果:

$$\begin{cases} K_1 = 0.280 \cdot 1.038^{(T-20)} \\ K_2 = 2.516 \cdot U^{0.547} \cdot H^{-1.178} \\ \quad \cdot 1.005^{(T-20)} \\ K_3 = 0.479 \cdot e^{-0.0980 \cdot U} - 0.361 \end{cases} \quad (15)$$

以上利用“最速下降法”求得的目标函数值为极值解, 非最小值, 因此, 应在求解过程中适当调整初值 (K_i 或 a_i), 以求得最优估计结果。上述分两步估计 $a_1 \sim a_8$ 最优值的方法又称“两步法”。该法降低了待估参数的维数, 从而大量节省了计算时间。

四、模型参数检验及灵敏度分析

由于利用“两步法”估计系数 a_i 所得到的解为准最优解^[3], 因此, 必须对其拟合误差进行检验。根据 $a_1 \sim a_8$ 所计算的与利用实测数据估计得到的 K_1 、 K_2 、 K_3 相比较, 其结果分别示于图2、图3及图4。从图中不难看出, 这种简捷的迭代算法对该河段有较好的拟合效果, 并大量节省机时。

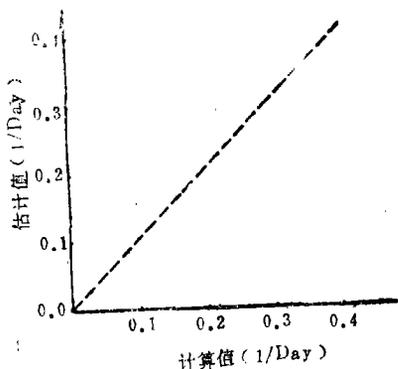


图2 “两步法”估计 K_1 的检验

将该研究河段参数估计结果于其它河流上的模型参数相比较, 二者变化范围较为相近, 详见表3。

关于模型参数 D_s 、 D_L 、 K_1 、 K_2 、 K_3 的灵敏度分析见表4。

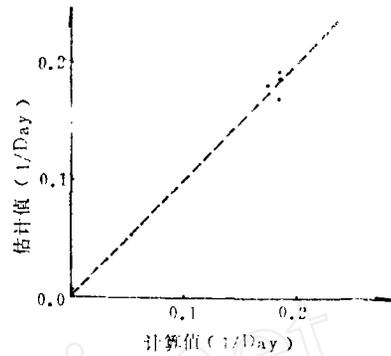


图3 “两步法”估计 K_2 的检验

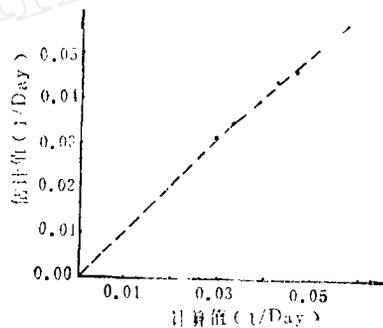


图4 “两步法”估计 K_3 的检验

表3 不同河流模型参数的比较

河流名称	K_1	K_2	K_3
迈尔河(美)	0.14—2.10	0.02—0.51	
圣安东尼奥河(美)	0.32	6.78	-0.36—0.36
内卡河(西德)	0.1—2.0	0.01—10.0	
颀塘河(中)	0.16—0.41	0.05—0.62	-0.07—0.12

从表4给出的灵敏度分析结果可见, 模型参数边值对河流下游断面的水质指标 (BOD 、 DO) 影响最大, 而参数 D_L 影响最小。一般来说, 在不考虑污染源排放方式的模拟计算中, 弥散作用可以忽略。

五、结 论

1. 本文模型参数估计是颀塘河震泽段数值模拟的基础, 估计得到的结果对于该河段有良好的适用性, 对于同类河网地区亦有一定的借鉴意义。

表4 灵敏度分析(增量值为20%)

参数名	D _L		K ₁		K ₂		K ₃		D _s		边 值			
											BOD		EO	
增量	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+
计算值	7.9	11.9	0.14	0.21	0.14	0.21	0.031	0.047	10.1	15.1	0.9	1.4	8.6	12.8
偏差(%)	0.11	-0.10	3.09	-3.16	-0.54	0.51	0.70	-0.70	-3.75	3.49	-14.6	11.3	-12.5	10.0

2. 因河流各具特点, 对参数估计所采用的公式形式不要求完全相同。

3. 在参数估计过程中, 针对各实测数据的质量应当给出适当的权重(W_i), 力求参数估计合理。

参考文献

- (1) Gerald T. Orlob, *Mathematical Modeling of Water Quality, Stream, Lakes and Reservoirs*, John Wiley and Sons Inc, 176~226, (1983)。
- (2) The Texas Water Development Board, *Simulation of Water Quality in Streams and Canals Theory and Description of QUAL-1 Mathematical Modeling System*, (1971)。
- (3) 付国伟, 程声通, *水污染控制系统规划*, 清华大学出版社, (1985)。

PARAMETER ESTIMATION IN MATHEMATICAL MODELING OF WATER QUALITY FOR STREAMS

Xu Feng

(*Institute of Mechanics, Chinese Academy of Science*)

Abstracts

The method for estimating water quality parameters is proposed in this paper. The present estimation procedure is easier in implementation compared with some previous ones. Taking Ditan river for an example, the water quality parameters such as K_1 , K_2 and K_3 , which have been used in practical numerical modeling of Ditan river are also valuable to the other streams.