

数值分析三峡库区突发事故污染物运移特性

司 鹄^{1,2}, 毕海普¹

(1. 重庆大学资源及环境科学学院, 重庆 400030; 2. 重庆大学西南资源开发及灾害控制教育部重点实验室, 重庆 400030)

摘要 三峡库区蓄水后水体自净能力降低, 突发水污染事故对库区水质的威胁加大. 基于对库区水质现状和污染危险源的分析 and 调查, 运用物质迁移扩散理论建立流体动力学模型, 应用选择断面的流速模拟值与实测值的对比结果验证模型的精确度. 数值模拟了突发水污染事故后物质在水体中的迁移扩散情况, 研究事故后污染物在水体中的运动规律, 并结合实际情况和具体特点, 设定污染物在水中的衰减参数, 对采取相关措施后污染物在水体中的消减趋势进行了数值模拟, 得到了形象直观的动态可视化显示结果. 对应急措施的方法和效果进行了分析和讨论, 为事故后相关处理方法和措施的采取及实施方式和地点的选择提供了决策支持, 为突发水污染事故的处理处置提供辅助决策工具.

关键词 三峡库区; 突发水污染事故; 数值模拟

中图分类号: X507 文献标识码: A 文章编号: 10250-3301(2008)09-2432-05

Numerical Analysis on Pollutant Decline in the Emergency of Water Pollution in Three Gorges

SI Hu^{1,2}, BI Hai-pu¹

(1. College of Resource & Environment Science, Chongqing University, Chongqing 400030, China; 2. Key Laboratory for the Exploitation of Southwestern Resource & the Environment Disaster Control Engineering, Ministry of Education, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract The water self-clarification ability in the reservoir area is much lower and the risk of the emergency of water pollution is more serious after the accomplishment of water storage in Three Gorges. This paper presented a hydrodynamic model for emergency of water pollution by the investigating the water states in Three Gorges, validated the veracity of the model by comparing flow velocity on the selected cross sections between the computed and measured data, and introduced numerical method to give visual show of the pollutant's diffusion and to study the movement rules of pollutant after an accident. Further, analyzing the actual instance and characteristic, the decay process of pollutant was numerically simulated after controlling polluting source and taking decontaminating measure in river, and the effect of emergency measure was analyzed and discussed. It is more helpful for emergency to make a scientific decision in the respect of selecting control areas and methods after a pollution accident, putting forward a new way to effectively prevent and control water pollution.

Key words Three Gorges; emergency of water pollution; numerical simulation

长江水资源量占全国的 35%, 三峡水库控制着长江上游近 100 万 km² 流域面积的水量, 上游两岸化工厂林立, 大中型工矿企业 3 000 多家, 船舶流量平均每年 10 万余艘, 易燃、易爆、有毒化学危险品的生产、贮存、运输日益增加, 加大了库区突发事故水质污染的风险. 而且, 三峡库区蓄水后流速减缓, 污染物在水体中的稀释、扩散、降解和转化等净化能力降低, 水体自净能力大为减弱, 在排污量不变的情况下, 江中污染带将加宽 0.85 倍, 污染度将升高 34.5% ~ 146%; 同时, 库区污染物混合区掺混强度减弱, 复氧能力降低, 减少了生化需氧量的降解, 在库湾和静水区造成氮磷的局部富集, 给藻类的过度生长提供了营养条件, 加大了库区水质富营养化的可能性^[1,2]. 库区事故污染的后果更加严重.

数值模拟技术的应用为污染后水质的快速分析和处理处置提供形象直观的决策支持工具:

Kachiasivili 等^[3]开发了水平对流扩散模型, 给出了相应的有限差分法和数值运算法则, 模拟了化学物质在水体中的扩散传输情况; Meyer 等^[4]运用水平对流扩散的偏微分方程模型进行了相应的数值模拟, 得到了污染物在沼泽系统中扩散情况的形象展示; Yuan 等^[5]建立了水质模型, 数值模拟了渤海湾污染物的物理、化学和生物转化过程, 预测了排污后沿海水体的污染负荷和影响区域; Chau 等^[6]通过建立三维污染物传输数值模型, 对珍珠港口水体中 COD 的不稳定传输进行了数值模拟, 并对广东和香港之间 PRDR 排污口物质的运动趋势进行了模拟和研究; 许仕荣等通过建立水流动力模型, 模拟了湖泊水库

收稿日期: 2007-09-26; 修订日期: 2007-12-27

基金项目: 国家自然科学基金创新团队项目(50621403); 重庆大学研究生科技创新基金项目(200701Y1B0270213)

作者简介: 司 鹄(1964 ~), 女, 博士, 教授, 博士生导师, 主要研究方向为环境流体力学.

的流场结构,得到了水质水量的入流特征、紊动能和耗散率的分布规律^[7-9];许其功等分别建立动力学模型,模拟和预测了营养物质氮、磷的循环特征、动态变化和运动轨迹,为营养物质迁移转化特征的研究提供了科学手段^[10-12];郭磊等^[13]对北大港水库氯离子进行了动态数值模拟,得到了水库流场及水体和底泥氯离子浓度动态变化规律;李怀恩等^[14]对黑河流域磷的迁移转化进行了连续模拟,预测了流域磷的迁移输出情况和污染负荷量;对长江流域,吴继伟等^[15]和徐祖信等^[16]分别建立水流数学模型模拟了长江口北支和南支的流场分布,研究了咸潮倒灌方案和排污污染带扩散的特征;Pang等^[17]应用二维不稳定流动和传输模型模拟了长江水流特征和水质状况,得出了长江长期供水的江苏省最佳取水区域;刘成等^[18]运用 Delft3D 对上海市污水排放口污染物运动轨迹进行了数值模拟,得到了形象直观的污染物运动轨迹情况;江春波等^[19]通过建立计算系统工作站机群和采用分步有限元格式求解,得到了涪陵江段典型排污口河道内流速和污染物浓度分布情况;彭杨等^[20]采用有限元方法建立了平面二维非恒定水沙数学模型,模拟了重庆河段的流场和泥沙

的运动特征;陈景秋等^[21]数值模拟了重庆城区内长江和嘉陵江在不同水位的流速、流量及泥沙的运动轨迹,为两江流域的河道治理提供了科学依据。

但是目前对突发水污染事故后污染物的运动轨迹的模拟还不够成熟和系统化,对采取相关措施后污染物消减趋势的模拟和研究更是鲜见。本研究基于对三峡库区水质现状的分析,建立力学模型,对突发水污染事故后污染物在水体中的运动情况以及采取相关措施后的消减趋势进行数值模拟,探讨突发事故后水体中污染物的迁移扩散规律,得到形象直观的物质运动轨迹显示,并且动态展示了物质消减的趋势和结果,以期对事故后相关处理方法和措施的采取及实施方式的选择提供决策支持。

1 流体动力学模型

1.1 污染物扩散控制方程

本文基于 Boussinesq 假设^[22],应用不可压缩流体的 Navier Stokes 方程,构建流体运动的力学模型。水流运动的连续性方程、动量方程和物质传输方程分别如下^[23]:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial (d + \zeta)U \sqrt{G_{\eta\eta}}}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial (d + \zeta)V \sqrt{G_{\xi\xi}}}{\partial \eta} = Q \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{v}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\omega}{d + \zeta} \frac{\partial u}{\partial \sigma} + \frac{uv}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\xi\xi}}}{\partial \eta} - \frac{v^2}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\eta\eta}}}{\partial \xi} - fv \\ = - \frac{1}{\rho_0 \sqrt{G_{\xi\xi}}} P_{\xi} + F_{\xi} + \frac{1}{(d + \zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(v_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) + M_{\xi} \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{u}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{v}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\omega}{d + \zeta} \frac{\partial v}{\partial \sigma} + \frac{uv}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\eta\eta}}}{\partial \xi} - \frac{u^2}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\xi\xi}}}{\partial \eta} - fu \\ = - \frac{1}{\rho_0 \sqrt{G_{\eta\eta}}} P_{\eta} + F_{\eta} + \frac{1}{(d + \zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(v_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) + M_{\eta} \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial (d + \zeta)c}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \left\{ \frac{\partial \sqrt{G_{\eta\eta}} (d + \zeta)uc}{\partial \xi} + \frac{\partial \sqrt{G_{\xi\xi}} (d + \zeta)vc}{\partial \eta} \right\} + \frac{\partial \omega_c}{\partial \sigma} \\ = \frac{d + \zeta}{\sqrt{G_{\xi\xi}} \sqrt{G_{\eta\eta}}} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} \left[D_H \frac{\sqrt{G_{\eta\eta}}}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial c}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[D_H \frac{\sqrt{G_{\xi\xi}}}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial c}{\partial \eta} \right] \right\} + \frac{1}{d + \zeta} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[D_v \frac{\partial c}{\partial \sigma} \right] - \lambda_d (d + \zeta)c + S \end{aligned} \quad (4)$$

式中, Q 是单位面积的输入或输出量, $\sqrt{G_{\xi\xi}}$ 和 $\sqrt{G_{\eta\eta}}$ 是直角坐标和曲线坐标之间的转化系数, ζ 和 d 分别是参考面以上和以下的水深; P_{ξ} 和 P_{η} 是压力梯度, F_{ξ} 和 F_{η} 是水平雷诺压力的不平衡数, M_{ξ} 和 M_{η} 是外部运动的源和汇, u 是 ξ 方向的速度, v 是 η 方向的速度, f 是 Coriolis 系数, v_v 是垂向蜗旋粘性, λ_d 是一阶衰减系数, S 为单位源、汇项, c 为物质浓度,

D_H 和 D_v 分别为水平粘性扩散和垂向粘性扩散。

1.2 污染物衰减控制方程

水系统中的农药的浓度和停留时间主要取决于微粒物质(包括浮游植物)的分类转化和传输扩散,其控制方程如下^[23]:

$$c = (f_{im} + f_{poc} + f_{alg} + f_d) \times c_t \quad (5)$$

$$f_d = \frac{\phi}{\phi + K_{im} \times c_{im} + K_{poc} \times c_{poc} + K_{alg} \times c_{alg}} \quad (6)$$

$$f_{im}=(1-f_d)\times\frac{K_{im}\times c_{im}}{K_{im}\times c_{im}+K_{poc}\times c_{poc}+K_{alg}\times c_{alg}}\tag{7}$$

$$f_{poc}=(1-f_d)\times\frac{K_{poc}\times c_{poc}}{K_{im}\times c_{im}+K_{poc}\times c_{poc}+K_{alg}\times c_{alg}}\tag{8}$$

式中 c_{alg} 、 c_{im} 、 c_{poc} 是单位体积内藻类浓度、无机质浓度、微粒有机质浓度； c_t 是总有机质浓度； f_{alg} 、 f_{im} 、 f_{poc} 分别是被藻类、无机质、微粒有机质吸附的有机质的分数； f_d 是有机质溶解部分； K_{alg} 、 K_{im} 、 K_{poc} 分别是藻类、无机质、微粒状有机质的分类系数； ϕ 是多孔性。

2 数值模拟

2.1 模型验证

水动力模块采用有限差分法对控制方程组进行离散求解。模拟区域的边界和验证断面的分布如图 1 所示。设定嘉陵江和长江上游开边界的流速分别为 -1.35 m/s 和 1.75 m/s ，汇合后的长江下游开边界水位取 0 m ，模拟区域的初始流场分布如图 2 所示。应用选择断面的流速模拟值与实测值（由西南水运科学研究所提供）的对比结果来验证模型的精确度，模型验证断面的对比结果如图 3 所示。

图 3 中横轴为验证断面一侧到另一侧边界的距离，纵轴为相应断面位置的流速值。图 3(a) 为嘉陵江一平直断面的模拟值与实测值的对比结果，3(b) 为两江汇合后的长江一弯道断面的模拟值与实测值的对比结果图。由图 3 可以看出，平直河道断面的流速基本保持中间大、两边小，呈现抛物线形状，弯道

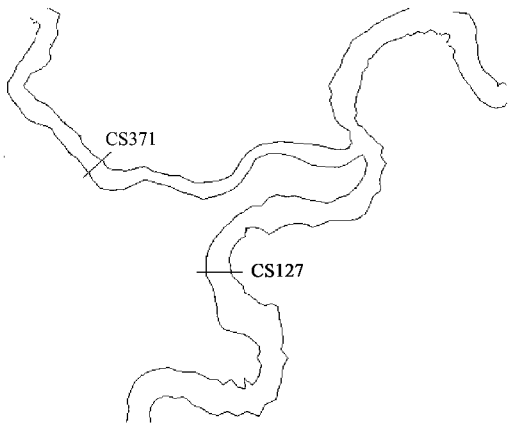


图 1 模拟区域边界
Fig.1 Boundary of simulation domain

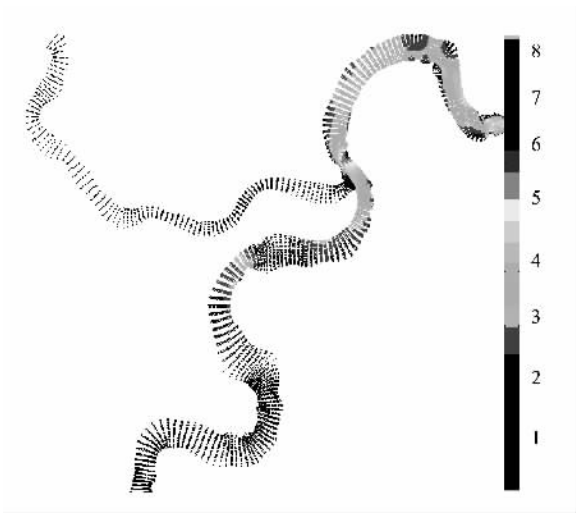


图 2 模拟区域流场分布
Fig.2 Flow velocity vector in simulation domain

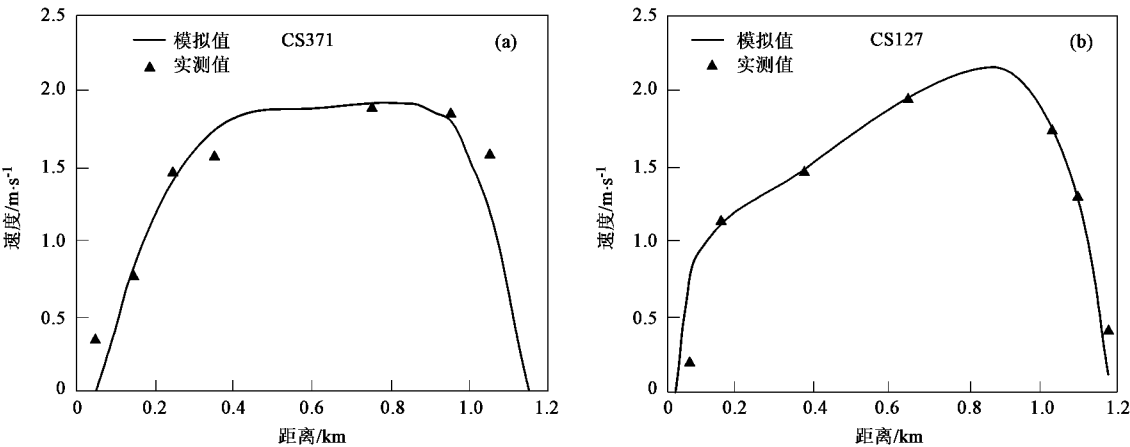


图 3 选定断面流速模拟值与实测值的对比
Fig.3 Comparison between the computed and measured values on the selected cross section

断面内测流速偏大,呈不规则的抛物线形,对比研究表明模拟结果与实测值相关,模型能够较好地反应实际流动情况.

2.2 污染物扩散模拟

我国每年发生的农药环境污染事故呈上升趋势,已经成为环境污染纠纷的重要组成部分.本研究对库区重庆段两江沿岸分布的危险源进行了实地调研,以嘉陵江和长江沿岸 2 家典型农药生产企业 A

和 B 为例模拟突发事故后含农药 HCH 的污水的运动轨迹.企业 A 农药商品储量 20 000 t,其中包括乐果原粉、40% 乐果乳油、40% 氧乐果乳油、18% 杀虫双水剂等;企业 B 生产农药氟戊菊酯,储仓库量约 200 t/a.模拟中设定突发事故后含农药 HCH 的污水分别以 500 m³/s、50 g/m³和 100 g/m³的流量和浓度排放 12 h,水体中污染物在第 6、12、18、24 h 的扩散情况如图 4 所示.

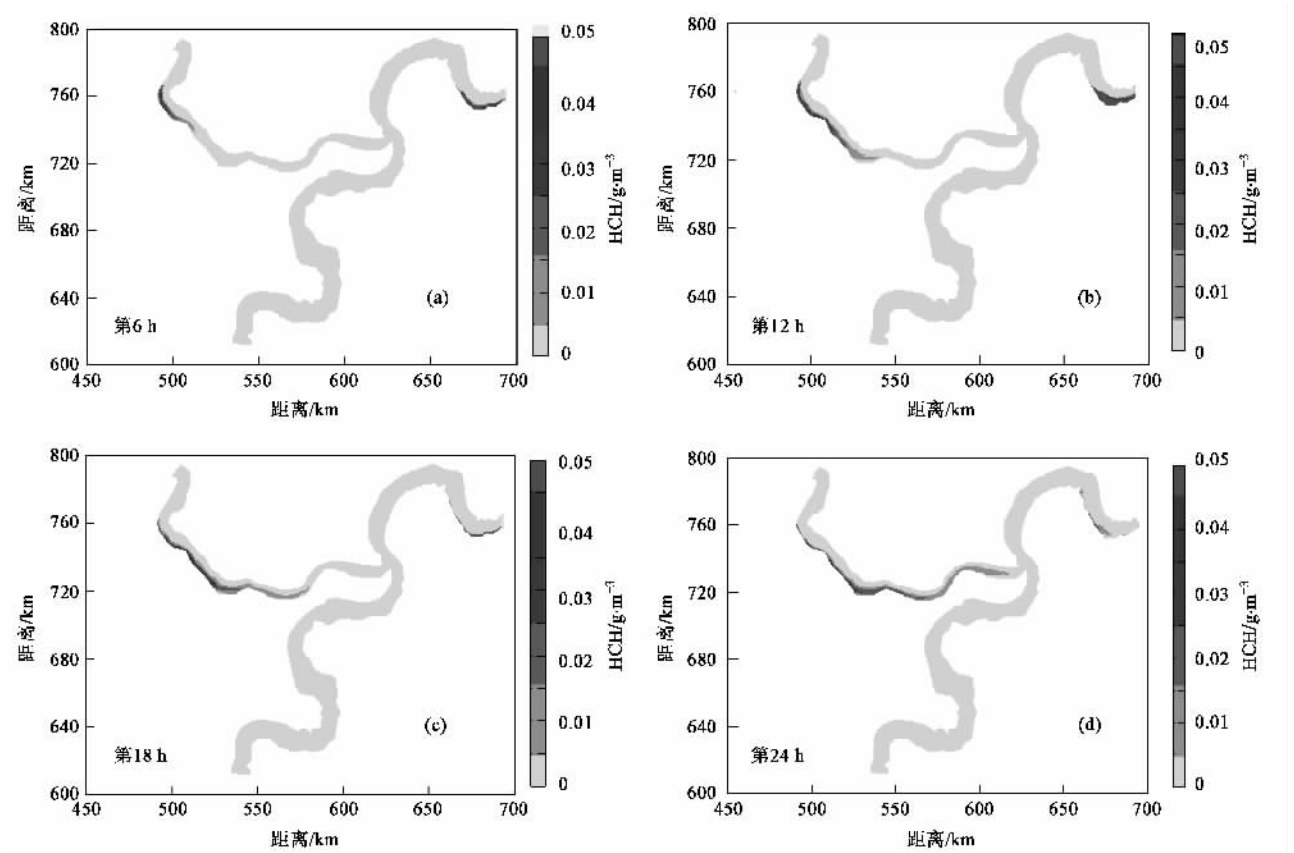


图 4 突发事故后第 6、12、18、24 h 污染物扩散

Fig.4 Constituent-distribution at the 6th, 12th, 18th and 24th h

从图 4 中可以看出,事故后污染物在水体中沿水流流动纵向运动,同时由于紊动作用横向扩散,事故后 6 h 在排污口附近形成一个污染区域,由于两江汇合后流速增大导致排污口 B 处污染带纵向运动更快,污染区域更大,如图 4(a)所示;事故后第 12 h 污染带加长,污染浓度达到最大,如图 4(b)所示;排污口被控后由于水体的稀释自净作用污染浓度缓慢减小,但污染扩散区域继续增加.

2.3 污染物衰减模拟

再次模拟嘉陵江和长江沿岸 2 家企业 A 和 B 的突发水污染事故,含 HCH 污水分别以 5 000 m³/s 和

50 g/m³ 的流量和浓度排放 12 h,第 12 h 排污口被控后采取相关吸附和过滤的应急措施以加快污染物的衰减和水体的净化.水体中污染物第 18、24 h 衰减情况如图 5 所示.

图 5 表现了污染事故被控并采取相关措施后污染物的衰减情况,采取相关措施后第 18 h 的污染区域和污染物浓度已经有所减小,如图 5(a)所示,到第 24 h 污染区域和污染物浓度有大幅的减小,嘉陵江只有下游沿岸有较窄的污染带分布,长江下游沿岸只有微量污染物剩余,污染物衰减效果显著,如图 5(b)所示.

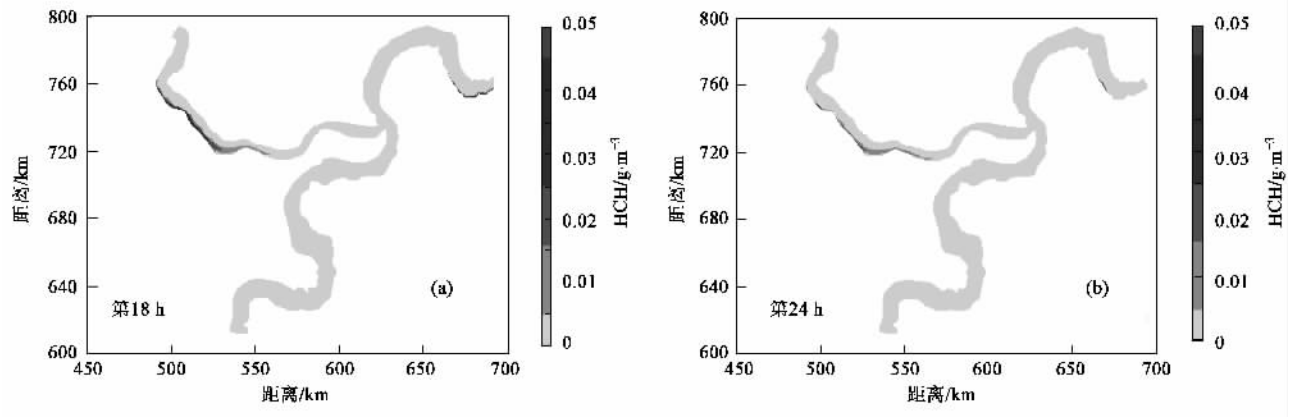


图 5 突发事故后第 18、24 h 污染物衰减

Fig.5 Constituent-decay at the 18th and 24th h

3 结论

(1) 基于对库区水质现状的分析和水污染危险源的实地调研,运用物质迁移扩散理论建立了流体动力学模型,通过模拟流速和实测值的对比验证了模型的有效性,对突发事故后污染物在水体的运动情况进行了数值模拟,研究了突发水污染事故后污染物在水体中的运动规律,并结合实际情况和具体特点,通过设定污染物在水中的衰减参数,对采取相关措施后污染物在水体中的消减趋势进行了数值模拟和分析,得到了形象直观的可视化模拟结果,为水污染事故的处理提供了决策支持。

(2) 从模拟结果的对比分析中可以明显看出,事故后针对性控制措施对污染影响的减低有至关重要的作用,模拟为消减措施的采取和实施地点、方式的选取提供了形象直观的辅助决策工具,为水污染事故的处理处置提供了科学依据,对库区水环境保护的科学手段研究有一定的学术价值。

参考文献:

[1] 赵刚,冉光和,张波.三峡库区水资源污染问题及对策研究[J].自然资源学报,2002,17(5):635-639.

[2] 重庆环境科学研究院.长江、嘉陵江与重庆水污染控制规划研究[R].2003.

[3] Kachiashvili K, Gordeziani D, Lazarov R, et al. Modeling and simulation of pollutants transport in rivers[J]. Applied Mathematical Modeling, 2007, 31(7):1371-1396.

[4] Meyer J C, Diniz G L. Pollution dispersion in wetland systems: Mathematical modeling and numerical simulation[J]. Ecological Modeling, 2007, 200(8):360-370.

[5] Yuan D, Lin B, Falconer R A, et al. Development of an integrated model for assessing the impact of diffuse and point source pollutant on coastal waters[J]. Environmental Modeling & Software, 2006, 10(5):1-9.

[6] Chau K W, Jiang Y W. Simulation of transboundary pollutant transport action in the Pearl River delta[J]. Chemosphere, 2003, 52(3):1615-1621.

[7] 许仕荣,周永潮,张伟.雨水流域径流水质水量动态模拟[J].环境科学与技术,2006,29(11):39-40.

[8] 孙卫红,逢勇,姚琪.三维水动力方程模拟太湖风生流[J].水资源保护,2003(3):27-30.

[9] 张春财,孙建,卿笃兴.高坝下游水垫塘中三种典型流态的数值模拟[J].长沙理工大学学报(自然科学版),2006,3(4):43-48.

[10] 许其功,刘鸿亮,沈珍瑶,等.茅坪河流域非点源污染负荷模拟[J].环境科学,2006,27(11):2176-2181.

[11] 张文菊,童成立,吴金水,等.典型湿地生态系统碳循环模拟与预测[J].环境科学,2007,28(9):1905-1911.

[12] 丁玲,逢勇,李凌,等.水动力条件下藻类动态模拟[J].生态学报,2005,25(8):1863-1868.

[13] 郭磊,高学平,张晨,等.北大港水库水质模拟及分析[J].长江流域资源与环境,2007,16(1):11-16.

[14] 李怀恩,胥彦玲,张强,等.黑河流域磷迁移转化过程连续模拟研究[J].环境科学,2006,27(7):1292-1298.

[15] 吴继伟,刘新成,潘丽红.长江口北支咸潮倒灌控制工程水动力数值模拟[J].水利水电科技进展,2006,26(4):43-55.

[16] 徐祖信,华祖林.长江口南支三维水动力及污染物输送数值模拟[J].同济大学学报,2003,31(2):239-243.

[17] Pang Y, Li L, Cui G B, et al. Identification of river sections for domestic water supply along the Yangtze River in Jiangsu province, China[J]. Water Resources Management, 2006, 20(1):61-75.

[18] 刘成,何耘,李行伟,等.上海市污水排出口污染物运动轨迹模拟[J].水利学报,2003,34(4):114-118.

[19] 江春波,张黎明,陈立秋.长江涪陵段污染物混合区并行数值模拟[J].水利发电学报,2005,24(3):84-87.

[20] 彭杨,张红武,张羽.长江重庆河段平面二维非恒定水沙数值模拟[J].水力发电学报,2005,24(1):47-52.

[21] 陈景秋,刘雪兰,赵万星,等.重庆主城区两江汇流场处置模拟[J].重庆大学学报(自然科学版),2005,28(8):135-141.

[22] 刘应中,缪国平.高等流体力学[M].上海:上海交通大学出版社,2000.

[23] Delft H. Delft3D-Flow user manual[Z]. Holland: WL Delft Hydraulics, 1999.