

问题讨论

水质模型应用中的问题

夏 青 杨汝钧

(中国环境科学研究院) (北京工业大学四系)

一、从“一个河流水质预测预报模型”

文章谈起

《环境科学》1981 年第一期刊有“一个河流水质预测预报模型”(以下简称“预报模型”)一文。文章的内容有一定影响,可以用来说明当前水质模型应用中的一些共同问题,试引录加以讨论。

1.“预报模型”一文中公式(1),查作者所列参考书目,系出自 Rich 所著《环境系统工程》一书,为 139 页(5.1.1)公式:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{A(x, t)} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left[E(x, t) A(x, t) \frac{\partial c}{\partial x} \right] - \frac{1}{A(x, t)} \frac{\partial}{\partial x} [Q(x, t)c] + \Sigma S(c, x, t) \right]$$

原著明确规定 ΣS 项的量纲是 $F/L^3 T^{[1]}$, 并说明 S 是“被传递物质的源和漏”(Sources and sink of transported material)。从量纲可看出 S 是由于各种来源或消减过程,河水中所考察物质的浓度随时间变化的速率,而不同于“预报模型”一文所注“ S 为污水某成分浓度的增减量”。

2.“预报模型”一文定义稀释系数 $\alpha = \frac{Q}{Q+q}$ (Q 为河水流量, q 为污水流量)

作者推导过程如图 1:

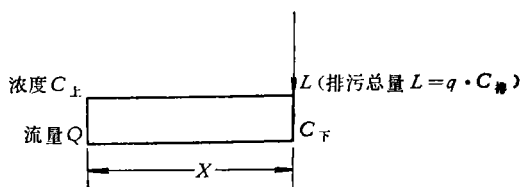


图 1

设段内流速为 u , 污染物衰减系数为 k , 则该段水体的物质平衡为:

$$C_F = (Q + q) = C_U Q - 0.0116 C_U \times \frac{KX}{u} Q + 0.0116 L^*$$

$$C_F = C_U \frac{Q}{Q + q} - 0.0116 C_U \times \frac{KX}{u} \frac{Q}{Q + q} + 0.0116 \frac{L^*}{Q + q}$$

将第三项 $0.0116 \frac{L^*}{Q + q}$ 乘 $\frac{Q}{Q} \cdot \frac{C_U}{C_U}$ 式,

做恒等变换,提公因子 $\left(C_U \cdot \frac{Q}{Q + q} \right)$, 并定

义 $\frac{Q}{Q + q} = \alpha$ 为稀释系数,则有该文公式

(3):

$$C_F = C_U \left(1 - 0.0116 \frac{KX}{u} + 0.0116 \frac{L^*}{C_U Q} \right) \alpha$$

此处之 α 的物理意义是河水被污水稀

释,而不是通常概念的污水被河水稀释。

3. “预报模型”原文的图 1 没有标出污染源位置,该文的图 2 则在第 V 段中间标有工矿排污点和 2 号引水渠出流点。该文公式(3)中之 X ,系指全河段长。显然,污染物衰减变化距离有误。联系作者发表在“水文副刊”上的例题,一个排污点在(1)、(2)断面间 2/3 处,另一个排污点在(3)、(4)断面间

3/4 处(见《水文副刊》1980 年第四期 24 页表 1),均未将污染源置于计算段之首,该文公式(3)与图不符,公式含义不清。

4. “预报模型”一文,对一阶常微分方程提出用差分方法求近似解,即公式(3)。若以没有排放口的河段为例,利用公式(3)为近似解进行精确解(解析解)与近似解的对比计算,得结果如表 1、表 2。

表 1 河段参数表(摘自“预报模型”原文)

河 段	流 量 (米 ³ /秒)	流 速		河 段 长 (公里)	酚的 K_1 (1/天)
		(米/秒)	(公里/天)		
I	9.04	0.92	79.488	2.5	8
II	9.04	0.82	70.848	2.5	7.7
III	8.04	0.74	63.94	2.5	7.5
IV	8.04	0.60	51.84	2.5	7.2

表 2 精确解与近似解计算对照表

河段断面号	酚浓度(毫克/升)			偏差值(毫克/升)		相对误差*(%)	
	近 似 解		精确解	近似解—精确解		$\Delta x = 2.5$	$\Delta x = 0.1$
	$Dx = 0.25$	$Dx = 0.01$		$\Delta X = 2.5$	$\Delta X = 0.1$		
(0)	0.006	0.006	0.006	—	—	—	—
(1)	0.00449	0.00466	0.00467	-0.00018	-0.0001	3.75	0.21
(2)	0.00327	0.00355	0.00356	-0.00029	-0.0001	8.15	0.28
(3)	0.00231	0.00264	0.00266	-0.00035	-0.0002	13.16	0.75
(4)	0.00151	0.00186	0.00188	-0.00037	-0.0002	19.75	1.06

$$* \text{ 相对误差} = \left| \frac{C_{x+\Delta x} - C_{x+\Delta x}^*}{C_{x+\Delta x}^*} \right| \times 100\%$$

$C_{x+\Delta x}^*$ —精确解
 $C_{x+\Delta x}$ —近似解

从表 2 看出,当取 $\Delta x = 2.5$ 公里时(与“预报模型”作者取值相同),到断面(4)近似解的相对误差达 19.75% (河段总长仅 10 公里)。

二、几点看法

上述内容可归纳为下列几方面的问题:

1. 在转述国外文献或引伸文献内容时,应强调准确,以避免同一出处、不同解释造成的分歧。

2. 推演公式最主要之点是演绎基础明确,数学恒等变换只是一种手段。如果忽视每一步数学运算的物理意义,就可能如上节所述,从正确的前提导出河水被污水稀释的概念。

3. 计算过程的细节应认真推敲,特别是注意公式应用条件。将污染源置于段首,不仅考虑逐段递推求解的便利,更重要的是:一维稳态水质模型以计算段内流量、流速定常为必要的条件,河段中间有排污点或者支流时,

不符合公式应用条件。

4. 水质模型的求解方法应以简便、精确两个标准衡量。为了避免计算误差削弱模型的有效性,有解析解精确求值时,不宜另寻近似求解方法。只有在不能解析求解或解析解使用不便时,才求助于数值解法^[2-5]。

鉴于应用水质模型为工具来进行水质模拟,制订管理规划等工作在我国都刚刚开始,因而强调引进国外模型理论时严格准确就更为重要。

例如“预报模型”这一提法本身就可商榷。预报、预测和模拟等都属于水质模型的功能,而并非由模型形式本身所决定。近一年来,我国环境科学工作者在第一松花江^[6]、漓江、图门江、第二松花江等河流上曾成功地应用过水质模型理论,在制订水质管理规划上,研究自净能力、识别模型参数等问题上进行了探索。但是,这些工作,一是直接选用国外广为承认的成熟数学模型形式,二是就某一专题进行研究,由于理论水平和实测数据质量的限制,要真正达到预测预报水平,还待进一步努力。

一个河流水质模型,能否起预报作用,关键在于模型结构的选择和应用大量有代表性的实测数据正确识别参数,使模型真正能反映水质变化的规律。

“预报模型”一文的算例,是以官厅水系洋河的酚污染资料为基础的。根据我们最近一年在洋河调查所做的工作来看,还要补充一些实测资料,才能识别模型参数并说明该模型对酚污染的预报能力。因此,重要的是实测数据。只要原型监测的基础工作扎实,应用简单的模型也能很好地解决问题。从我国现实条件出发,目前应强调监测资料的质量,利用模型的检验作用,高效率地收集数据,指导制订监测计划,布设监测站网,拟订水质规划。

数学模型是整理大量监测数据的有效方法。若没有实测资料,模型则变成了无源之

水。模型不会造出比实测值更好的资料,也绝对不能替代实测工作。“不要在建立模型之后,只熟悉模型本身,而忘记了真实系统。……模型永远不应比真实系统更重要”^[7]。

三、水质模型发展前景

据国际信息处理联合会(IFIP)1978年总结,当今各学科应用的数学模型(水质模型也在其中)的有效性范围是:帮助理解目标、归纳整理资料;充当制订规划的工具;进行实验计划的模拟等,而在预测、预报、模型结构识别、参数估计、控制管理等问题上,还有待各有关学科对基本问题更好地理解。因此,发展数学模型的动力是各学科本身的理论突破,而不是数据归纳技术。“应该防止在建立一个模型之后,对该模型的认识比所研究的系统本身还要多,模型似乎变得比手边的问题更加重要”^[7]。切不可陷入数学符号而忘记了模型的有效性,忘记了去鉴别模型是否代表真实系统。数学模型是一组反映真实系统的方程式,模型的性质应当适合于所研究问题的性质。数学模型的有效性,并不由数学模型本身的繁杂程度来决定,而是由模型结构和数据资料的质量所左右。因此,重要的还是基本数据资料的积累。目前水资源系统数据质量有限,导致其模型预测力相当低。其中水量资料质量稍好,使水量模型能做较长时期的预测。发展中的水质模型、生物系统模型,都还有待广泛收集数据来完善,亦即获得符合模型假设条件的水文、水质数据。权宜之计是根据问题的性质侧重某一方面。如主要考虑拟合水质数据。根本办法则在于探讨水质变化与水文要素的关系,找寻正确获得水文、水质数据的途径。

此外,还应寄希望于多学科合作。水质模型理论是在传统的水利学科、给排水学科、化学、生化、生态等学科的基础上发展起来的一门应用科学,尤需强调学科交叉、渗透、跨学科进行研究。从污染水力学、化学、生物化

学等方面去深入探讨污染物在水中迁移转化的物理、化学、生化机制,奠定发展水质模型的演绎基础,同时,也要采用先进的数学手段,发展数据归纳技术,在提高模型的有效性、实用性上开展学术争鸣,真正把模型当作一种工具,而不是摆设。无须使用模型时,不迎合热潮勉强用之,确实需要模型时,力求简便、实用,真正解决我国实际问题。这样,我国的水质模型研究就一定能更快地发展。

参 考 文 献

[1] Linvil, G. R., Environmental Systems Engi-

neering, McGraw-Hill Book Company, 1973.

[2] Robert, V. T., Systems Analysis and Water Quality Management, McGraw-Hill Book Co. 1972.

[3] Joseph, L. P. Ed., Handbook of Water Quality Management Planning, Van Nostrand Reinhold Co., 1977.

[4] Wolfgang, K. H. Kinzelbach, 杨汝钧, 环境科学, 2(1) 25 (1981).

[5] 夏青、朱仲平等, 水文 1981 年 1 期.

[6] James, A. Ed., Mathematical Models in Water Pollution Control, John Wiley and Sons, pp. 1—38, 1976.

[7] Vansteenkiste, G. C. Ed., System Simulation in Water Resources, IFEP, North-Holland, 1978.

科技简讯

硅 的 无 烟 浸 蚀

由于 HF/HNO₃ 稀释液(用水或醋酸),是硅浸蚀液中唯一能获得抛光表面的浸蚀液。但硝酸的存在,使得浸蚀过程伴有大量氮氧化物,恶化操作,污染环境。因此,寻求污染少的新浸蚀溶液和浸蚀工艺,具有实际意义。

显然,氮氧化物是硝酸还原的产物,因此只要我们能加入一种物质来代替硝酸起氧化作用,或是能使硝酸的还原产物变成无害的物质如 CO₂、N₂ 或水汽等,不仅可以消除氮氧化物,而且 HF/HNO₃ 型浸蚀液的固有优点也能保持。

经过试验,我们发现高锰酸钾加入 HF/HNO₃ 混酸液中,可以减少黄烟(氮氧化物去除率达 99% 以上)。因此,用高锰酸钾作添加剂以减轻污染是有前途的。

(一) 试剂、配方和加工工艺

1. 试剂: HNO₃ 优级纯, 浓度 65—68%; HF 优级纯, 浓度 >40.0%; KMnO₄ 化学纯。

2. 配方: HF:HNO₃ (重量比 1:1—1:8): KMnO₄ (酸重的 1—3%, 过饱和也行)。混合液呈紫色。

3. 加工工艺: 在浸蚀时, 只要硅材料沉浸在浸蚀液中, 而浸蚀液的紫色又没完全消退, 就不会产生黄烟。如果紫色消退, 添加高锰酸钾后还可再用。必要时应补充氢氟酸。我们曾连续添加高锰酸钾和氢氟酸六次, 混合液已呈胶状, 但浸蚀效果仍然很好。

为了改善浸蚀的均一性, 硅材料和浸蚀液之间应有相对运动。简便的做法是把硅材料放在塑料提篮或特制夹具中, 一面摇动, 一面浸蚀。浸蚀完毕应立即把硅材料浸入热去离子水中, 尽可能减少和空气接触。否则, 表面会发污。由于浸蚀过程受浸蚀液浓度、成分、温度、浸蚀时间以及硅材料和浸蚀液的料液比等许多因素的影响, 因此, 选用何种配方和操作温度, 以及料液比应根据具体情况决定。

(下转第 53 页)