

星湖水动力条件及水质模型的研究

II. 水质模型*

李耀初 李适宇 周劲风 赵明辉 李娟

(中山大学环境科学研究所 中山大学环境科学系 广州 510275)

提要 根据星湖的湖泊特征和水污染特点,建立了包括 $\text{NH}_4^+ \text{-N}$ 、 $\text{NO}_2^- \text{-N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{-N}$ 、CBOD、DO 的多元耦合氧平衡模型、P 平衡模型以及 Chl. *a*-P 关系统计模型。模型中的参数采用实验法、经验公式法以及利用实测资料率定等方法进行估值。经实测资料验证,模型精度达到基本要求,可应用于星湖水质管理的实际工作中。

关键词 水质模型 参数 验证 星湖

中图分类号 X524

肇庆星湖是位于城市边缘的旅游性湖泊,面积较小、封闭性较强,湖水位主要由人工调节。周围的污染物进入该水域后,逐步缓慢与湖水混合;受人为因素和水流、风浪等自然因素的影响作用,污染物与湖水混合得较为充分。本文根据星湖的湖泊特征和水污染特点,首次进行了星湖水水质数学模型的研究,不但为星湖的综合整治和科学管理提供了依据,也为全国其它同类湖泊的水质数学模型研究积累了经验。

1 模型识别

1.1 湖泊自然特征

星湖是人工调节水位的封闭型湖泊,各子湖互相连通,见本文 I 图 1(李耀初等, 2001)。湖泊正常水位水面总面积 6.24km^2 ,正常水深 2.4m。在风力和湖流作用下,湖水和污染物混合得较充分,可以达到均匀混合的程度。因此,采用均匀混合型水质模型是适合的。

1.2 模型选择

星湖的水环境质量现状调查评价结果表明,星湖的水环境问题是富营养化、有机物和营养物质 P 超标。因此,基于湖库综合水质模型(张逢甲等, 1991),选择 $\text{NH}_4^+ \text{-N}$ 、 $\text{NO}_2^- \text{-N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{-N}$ 、CBOD、DO、P、Chl. *a* 等 7 个水质项目作为模型水质指标。根据湖泊中水质成分的迁移、演化等特征,以及水质成分与水生生物之间的相互联系,建立包括 $\text{NH}_4^+ \text{-N}$ 、 $\text{NO}_2^- \text{-N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{-N}$ 、CBOD、DO 的多元耦合氧平衡模型、P 平衡模型以及 Chl. *a*-P 关系统计模型。这些模型在以往的应用中证明能较为真实地反映实际情况。

* 广东省高校重点学科重点科研项目资助。李耀初,男,出生于 1965 年 9 月,讲师, E-mail: eeslyc@zsu.edu.cn

收稿日期: 1998-07-05, 收修改稿日期: 1998-12-09

2 模型方程

2.1 多元耦合氧平衡模型

各态氮和 BOD 在湖水中的降解和转化, 是遵循一级动力反应进行的(张逢甲等, 1991)。因此可参照 S-P 方程的基本形式, 建立多元耦合氧平衡模型, 模型各组分方程如下。

$$\text{NH}_4^+ \text{N}: V \frac{dN_1}{dt} = Q_0 \times N_{10} - Q_1 \times N_1 - K_{11} V N_1 + Q_{01} N_{11} \quad (1)$$

$$\text{NO}_2^- \text{N}: V \frac{dN_2}{dt} = Q_0 \times N_{20} - Q_1 \times N_2 - K_{22} V N_2 + K_{12} V N_1 + Q_{01} N_{21} \quad (2)$$

$$\text{NO}_3^- \text{N}: V \frac{dN_3}{dt} = Q_0 \times N_{30} - Q_1 \times N_3 - K_{33} V N_3 + K_{23} V N_2 + Q_{01} N_{31} \quad (3)$$

$$\text{CBOD}: V \frac{d\text{CBOD}}{dt} = Q_0 \times \text{CBOD}_0 - Q_1 \times \text{CBOD} - K_{1c} V \text{CBOD} + Q_{01} \text{CBOD}_1 \quad (4)$$

$$\text{DO}: \frac{dO}{dt} = -K_{1c} \text{CBOD} - \alpha_1 K_{12} N_1 - \alpha_2 K_{23} N_2 + K_s (O_s - O) + A_s \quad (5)$$

2.2 P 平衡模型

星湖的水质调查结果表明, 富营养化物质 P 呈超标状态, 而且是星湖富营养化限制因素。因此建立反映湖中 P 收、支平衡方程如下:

$$V \frac{dP}{dt} = Q_0 \times P_{10} - Q_1 \times P - K_P V P + Q_{01} P_{01} \quad (6)$$

2.3 Chl. a 统计模型

湖水中藻类含量(用 Chl. a 测定)是湖泊富营养化的一项重要指标, 因此, 仿照国际经济协作与开发组织(OECD)提出的 P 与 Chl. a 的关系模型(舒金华, 1987)¹⁾, 建立星湖 P 与 Chl. a 关系统计模型, 方程如下:

$$\log_{10}[\text{Chl. } a] = a \log_{10}[(P) \cdot 1000] - b \quad (7)$$

(1) —(7) 式中, Q_0 、 Q_1 、 Q_{01} 为入湖径流、出湖湖径流和污水入湖流量 (m^3/s); N_1 、 N_2 、 N_3 为湖水中 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 、 $\text{NO}_2^- \text{N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{N}$ 浓度 (mg/L); P 、 CBOD 、 O 为湖水中磷、碳化 BOD、溶解氧浓度 (mg/L); P_1 、 N_{11} 、 N_{21} 、 N_{31} 、 CBOD_1 为入湖污水中各项的浓度 (mg/L); P_0 、 N_{10} 、 N_{20} 、 N_{30} 、 CBOD_0 为入湖径流中各项的浓度 (mg/L); K_{11} 、 K_{22} 、 K_{33} 为 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 、 $\text{NO}_2^- \text{N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{N}$ 的降解系数 ($1/\text{d}$); K_{12} 、 K_{23} 为 $\text{NO}_2^- \text{N}$ 、 $\text{NO}_3^- \text{N}$ 向前转化系数 ($1/\text{d}$); K_P 、 K_{1c} 、 K_s 为 P 的沉降系数、CBOD 降解系数和大气复氧系数 ($1/\text{d}$); α_1 、 α_2 为化学计量常数; A_s 、 O_s 、 V 为藻类净增氧速率 ($\text{mg}/\text{L} \cdot \text{d}^{-1}$)、饱和溶解氧浓度 (mg/L)、湖泊体积 (m^3); a 、 b 为待定系数。

3 模型求解

对方程(1) —(6) 在稳态下求解, 得各方程的解分别为:

$$N_1 = \frac{Q_0 N_{10} + Q_{01} N_{11}}{Q_1 + K_{11} V} \quad (8)$$

1) 舒金华, 1987. 湖泊水质预测程序和技术要点. 见: 中国科学院南京地理研究所《环境污染与防治》编辑部编. 我国主要湖泊水污染现状与趋势预测, 61—62

$$N_2 = \frac{Q_0 N_{20} + K_{12} N_1 V + Q_{01} N_{21}}{Q_1 + K_{22} V} \quad (9)$$

$$N_3 = \frac{Q_0 N_{30} + K_{23} N_2 V + Q_{01} N_{31}}{Q_1 + K_{33} V} \quad (10)$$

$$CBOD = \frac{Q_0 CBOD_0 + Q_{01} CBOD_1}{Q_1 + K_{1C} V} \quad (11)$$

$$O = O_S - \frac{K_{1C} CBOD + \alpha_1 K_{12} N_1 + \alpha_2 K_{23} N_2 - A s}{K_S} \quad (12)$$

$$P = \frac{Q_0 P_0 + Q_{01} P_1}{Q_1 + K_P V} \quad (13)$$

4 模型参数估计

本研究对模型中的各参数采用了实验室化验值估算、经验公式估算以及利用实测资料率定等方法。

4.1 K_{1C} 的实验室化验估算

在实验室内, BOD 的反应方程式是: $\frac{dBOD}{Dt} = -K_1 BOD$ (14)

在 $t = 0$, $BOD = BOD_0$ 的初始条件下, 上式解得: $BOD = BOD_0 \cdot e^{-k_1 t}$

基于式(14), 将水样在 20°C 下培养 10 天, 并逐日测定其 BOD , 观查逐日 BOD 记录值, 如发现第 N 天 BOD 浓度突然增大, 则说明第 N 天以前是碳化阶段, 第 N 天以后是硝化阶段。将连续几天的碳化阶段的 BOD 值与对应时间, 在半对数纸上作图, 设法拟合一条直线, 使各化验值离开均值的偏差平方和达到最小, 这根直线即为最佳拟合线, 其斜率即为所求 K_{1C} 。

4.2 K_{11} 、 K_{22} 、 K_{33} 、 K_{12} 、 K_{23} 的实验室估算

在实验室条件下, 可以认为三氮循环的水质数学模型的微分方程如下:

$$dN_1/dt = -K_{11} \cdot N_1 \quad (15)$$

$$dN_2/dt = -K_{22} \cdot N_2 + K_{12} \cdot N_1 \quad (16)$$

$$dN_3/dt = -K_{33} \cdot N_3 + K_{23} \cdot N_2 \quad (17)$$

将(15)式积分求解, 依次迭代求解, 可得解析式: $N_1(t) = N_{10} e^{-K_{11} t}$ (18)

$$N_2(t) = N_{20} e^{-K_{22} t} + \frac{K_{12} N_{10}}{K_{22} - K_{11}} \left(e^{-K_{11} t} - e^{-K_{22} t} \right) \quad (19)$$

$$N_3(t) = N_{30} e^{-K_{33} t} + \frac{K_{23} N_{20}}{K_{33} - K_{22}} \left(e^{-K_{22} t} - e^{-K_{33} t} \right) + \frac{K_{12} K_{23} N_{10}}{K_{22} - K_{11}} \left[\frac{e^{-K_{11} t} - e^{-K_{33} t}}{K_{33} - K_{11}} - \frac{e^{-K_{22} t} - e^{-K_{33} t}}{K_{33} - K_{22}} \right] \quad (20)$$

(18) — (20) 式中, $N_1(t)$ 、 $N_2(t)$ 、 $N_3(t)$ 为任一时刻三氮的浓度; $N_{10}(t)$ 、 $N_{20}(t)$ 、 $N_{30}(t)$ 为初始时刻三氮的浓度; 其它符号意义同前。

基于式(18) — (20) 方程, 各参数的测定方法如下。

K_{11} : 将水样在 20°C 以下连续 10 天测定其中 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 浓度, 再将所测 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 值与对应时间在半对数纸上作 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 与时间的相关直线图, 直线的斜率即为 K_{11} 。

K_{22} : 将样品加入浓碱, 加热至 $70^{\circ}\text{C} - 80^{\circ}\text{C}$, 将 $\text{NH}_4^+ \text{N}$ 去掉, 再加入 HCl 调回 pH 值, 测定不同时段的 $\text{NO}_2^- \text{N}$ 值, 同上法一样求得拟合直线斜率, 即得 K_{22} 。

K_{33} : 将样品加入已知量的 H_2O_2 (过量), 从而将 $\text{NO}_2^- \text{N}$ 氧化成 $\text{NO}_3^- \text{N}$, 测定不同时段的 $\text{NO}_3^- \text{N}$, 同上法一样求得拟合直线斜率, 即得 K_{33} 。

K_{12} : 用未加干扰的样, 测定不同时段的 $\text{NO}_2^- \text{N}$, 然后将求得的 K_{11} 、 K_{22} 以及不同时刻的 N_2 值代入 (19) 式, 即求得 K_{12} 值。

K_{23} : 用未加干扰的样, 测定不同时段的 $\text{NO}_3^- \text{N}$, 然后将求得的 K_{11} 、 K_{22} 、 K_{33} 、 K_{12} 及不同时刻 N_3 值代入 (20) 式, 即求得 K_{23} 值。

4.3 K_P 的实验室估算

P 是一种难降解的物质, 入湖 P 的减少主要是因为沉积作用。在实验室里, P 的含量满足下列式子:
$$\frac{dP}{dt} = -K_P P \quad (21)$$

式 (21) 类似于 BOD 的一级反应动力式, 只是 K_P 是沉降系数, 而 K_{1c} 是降解系数; 其机理虽然不同, 但仍可用求 K_{1c} 同样的方法求得 K_P 。

4.4 K_S 、 O_S 的经验公式估算

O' connor (1961) 根据液膜理论建立了如下公式:
$$K_S = (Emu)^{1/2} / H^{3/2} \quad (22)$$
 式中, u 为湖泊平均流速 (m/s); H 为湖泊平均水深 (m); E_m 为水中氧的分子扩散系数 (m^2/d)。

O_S 的经验公式估算式为:
$$O_S = 468 / (31.6 + T) \quad (23)$$
 式中, T 为实测水温 ($^{\circ}\text{C}$)。

4.5 利用实测资料进行参数率定

式 (1) — (7) 中各参数, 还可利用式 (8) — (13) 进行模拟迭代计算。用实验室化验值估算的参数只代表了湖泊中特定点和特定时间的污染物反应速率, 它提供了迭代中的初始值。将初步估算的参数值代入模型试算, 对不合理的参数再次进行假定与迭代, 一直到与实测值基本相符为止。本研究在 1997 年 7 月 18 日采集了里湖和中心湖两个点的水样, 经过实验室化验对模型中各参数进行了估算。然后, 利用 1996—1997 年实测水质资料和污染源资料进行了参数率定。实验室参数估算值与实测资料参数率定值见表 1。从表 1 可见, 实验室估算值与实测资料率定值有一定的差别, 其中以 K_{22} 、 K_{23} 、 K_{1c} 的差别较为明显。 K_{22} 和 K_{23} 的实验室估值比实测资料率定值偏小 2—4 倍, 而 K_{1c} 的前者比后者偏大 2—7 倍, 其余参数两者基本接近。这种差别反映了理论值与实际值, 室内值与室外值的差别, 也反映了模型对现实系统的模拟误差和实验室测定方法的系统误差。另外, 从参数的率定值可以看出, 仙女湖、波海湖、中心湖和青莲湖 4 湖的参数值比较接近, 而里湖与前者有较大的差别。这是因为前者是互通的, 水动力条件和水质状况较为相似; 而里湖是相对独立的一个湖泊, 其水文条件与前者明显不同。因而这种差别正好从侧面反映了率定参数的可信性和实用性。

表 1 星湖水质模型参数估值

Tab. 1 Estimation of the parameters for water quality model of Xinghu Lake

参数	仙女湖	波海湖	中心湖	青莲湖	里湖	实验估值
$K_p(d^{-1})$	0.065	0.03	0.13	0.05	0.3	0.05
$K_{11}(d^{-1})$	0.08	0.04	0.13	0.06	0.6	0.05
$K_{22}(d^{-1})$	0.6	0.3	0.6	0.6	0.6	0.133
$K_{33}(d^{-1})$	0.1	0.03	0.07	0.07	0.35	0.123
$K_{12}(d^{-1})$	0.0352	0.02	0.04	0.04	0.02	0.027
$K_{23}(d^{-1})$	0.4	0.2	0.4	0.4	0.2	0.1
$K_{1c}(d^{-1})$	0.055	0.02	0.05	0.02	0.082	0.15
$K_s(d^{-1})$	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
$A_s(mgL^{-1}d^{-1})$	0.088	0.067	0.076	0.024	0.41	0.078

4.6 统计参数 a 、 b 的推求

利用实测的 P 和 Chl. a , 运用最小二乘法原理, 可得到 a 、 b 的估值。本研究将星湖视作一个整体来推求 P 和 Chl. a 的统计关系, a 、 b 的估值分别是 1.56、2.12。

5 模型验证

模型验证资料选用 1993 年星湖水质资料和湖泊纳污资料。1993 年星湖各湖泊的纳污情况见表 2。表 2 中的点源指各湖泊的生活污水排放源, 面源指集雨径流以及各湖泊入湖径流。

表 2 1993 年星湖纳污统计

Tab. 2 Statistics of the quantity of pollutants entering Xinghu Lake in 1993

湖泊	点 源 (g/s)					面 源 (g/s)				
	NH_4^+	NO_2^-	NO_3^-	BOD	TP	NH_4^+	NO_2^-	NO_3^- N	BOD ₅	TP
仙女湖	0.171	0.002	0.142	1.02	0.085	0.037	0.005	0.0526	0.395	0.013
波海湖	0.138	0.002	0.115	0.82	0.06	0.030	0.004	0.043	0.323	0.011
中心湖	0.3	0.00	0.25	1.83	0.15	0.02	0.002	0.041	0.391	0.024
青莲湖	0.069	0.001	0.058	0.41	0.03	0.03	0.001	0.037	0.308	0.012
里湖	0.234	0.003	0.195	1.40	0.11	0.000	0.0000	0.0016	0.012	0.0002

表 3 计算值与实测值偏差百分数 (%)

Tab. 3 Deviation (in percentage) of calculated and real values

湖泊	NH_4^+ N	NO_2^- N	NO_3^- N	BOD	DO	TN
仙女湖	- 17.5	2.5	5.7	- 4.5	- 1.1	5.7
波海湖	13.3	- 18.9	- 9.8	- 28	- 2.2	- 40
中心湖	- 5	- 35	- 6.25	2.5	- 1.7	72.7
青莲湖	- 14	45	25	- 46	10.7	- 100
里湖	23.7	- 2	18.4	1.5	- 1	4.25

将各湖泊的污染源数据以及上述率定的参数值代入模型进行计算, 计算结果与实测

值的偏差百分数见表 3。从表 3 可以看出, 大多数的计算值与实测值是基本吻合的, 有 73% 的数据偏差在 $\pm 20\%$ 以内, 最大偏差也不超过 100%, 说明模型基本上能模拟星湖水水质状况, 可在星湖实际管理工作中应用。

6 结语

根据星湖特点, 采用均匀混合型水质模型, 建立包括 NH_4^+ -N、 NO_2^- -N、 NO_3^- -N、CBOD、DO 的多元耦合氧平衡模型、P 平衡模型以及 Chl. α -P 关系统计模型。对模型中的各参数采用了实验室化验值估算、经验公式估算以及利用实测资料率定等方法; 用实验室化验值估算的参数作为初始值代入模型进行迭代计算, 利用 1996—1997 年实测水质资料和污染源资料进行了参数率定, 结果真实地反映了理论值与实际值、室内值与室外值的差别, 也反映了模型对现实系统的模拟误差和实验室测定方法的系统误差以及率定参数的可信性和实用性。选用 1993 年星湖水水质资料和湖泊纳污资料进行模型验证, 大多数的计算值与实测值是基本吻合的, 有 73% 的数据偏差在 $\pm 20\%$ 以内, 最大偏差也不超过 100%, 说明模型基本上能模拟星湖水水质状况, 可在星湖实际管理工作中应用。

参 考 文 献

- 李耀初, 李适宇, 周劲风等, 2001. 星湖水动力条件及水质模型的研究 I. 水动力条件与水环境质量调查. 海洋与湖沼. 32(1): 81—87
- 张逢甲, 金传良, 顾丁锡等主编, 1991. 水污染物容许排放量计算方法. 北京: 中国科学技术出版社, 194—226
- O'connor, D J, 1961. Oxygen balance of an estuary. Trans, ASCE, 126(11): 556

RESEARCH OF HYDROLOGICAL CONDITION AND WATER QUALITY MODEL OF XINGHU LAKE II. WATER QUALITY MODELING

LI Yao- Chu, LI Shi- Yu, ZHOU Jin- Feng, ZHAO Ming- Hui, LI Juan

(Institute of Environmental Science of Zhongshan University, Guangzhou, 510275)

(Department of Environmental Science of Zhongshan University, Guangzhou, 510275)

Abstracts Based on water pollution characteristics of Xinghu Lake, an oxygen equilibrium water quality model, in which the water quality indexes NH_4^+ -N, NO_2^- -N, NO_3^- , CBOD, DO were included, a phosphate equilibrium model and a Chl. α -P relation statistical model were established. The parameters of the models were determined on basis of chemical experiments, empirical formula and statistical analysis. Water quality data of Xinghu Lake in 1993 were used to verify models and the results show that the deviation (in percentage) of calculated and real values is mostly less than 20%, which indicates that the models approximately simulate the movement of water flow and pollutants in Xinghu Lake. The models can be used in the water quality management work of Xinghu Lake.

Key words Water quality model, Parameter, Verification, Xinghu Lake