

基于欧拉-拉格朗日分裂法的供水管网多组分水质模拟

陈国强, 龙天渝

(重庆大学 环境与生态学院, 重庆 400045)

摘要: 供水管网中的水质模型通常为对流反应方程, 往往忽略扩散项。在水质模型中加入扩散项, 并探讨了水质模拟中扩散效应的影响。采用一种适用于供水管网的欧拉-拉格朗日分裂算法求解多组分(有机质、余氯和微生物量)传质反应模型的对流扩散反应方程组, 并应用于动态水力条件下的算例管网中。实例证明, 下游节点的污染物浓度随时间逐渐积累增加, 尤其在管网终端扩散效应显著。相比有机质和余氯的浓度变化, 轴向扩散效应和径向传质反应效应相互促进的综合效应使得微生物量显著变化, 低流速情况下表现更为明显。

关键词: 供水管网; 多组分水质模拟; 欧拉-拉格朗日分裂算法; EPANET-MSX; 轴向扩散

中图分类号: TU991 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000-4602(2019)21-0069-06

Multicomponent Water Quality Simulation with Axial Dispersion Solved by Eulerian-Lagrangian Operator-splitting Method in Water Distribution System

CHEN Guo-qiang, LONG Tian-yu

(College of Environment and Ecology, Chongqing University, Chongqing 400045, China)

Abstract: Water quality models in water distribution system are usually convective reaction equations, and diffusion terms are often neglected. The effects of water quality simulation results by embedding axial dispersion into the classical advective-reactive model in water distribution system were explored. The Eulerian-Lagrangian operator-splitting method was employed to solve the model with axial dispersion. The results showed that contaminant concentration at downstream node was gradually accumulated with time along the upstream pipelines from the source, which was particularly reflected in the terminal. Compared with the changes of organic matter and residual chlorine, the biomass concentration might demonstrate synthetic effects of axial dispersion and reaction which were mutual promotion, and it was particularly reflected in the low flow velocity.

Key words: water distribution system; multicomponent water quality simulation; Eulerian-Lagrangian operator-splitting method; EPANET-MSX; axial dispersion

污染物入侵、微生物再生长以及腐蚀等会造成水质恶化, 从而对人类健康造成潜在危害^[1-3]。而水质模拟研究可以作为预测和监督污染事件的一种重要手段。

供水管网中经典的水质模型主要为对流反应形式的偏微分方程, 这种模型通常不考虑轴向扩散的影响。这是由于通常情况下轴向扩散效应相对平流推动效应小很多, 然而, Axworthy 和 Karney^[4]提出了

把扩散项嵌入氯衰减模型中,并在一个简单的低速流体管中进行模拟分析,证明了低速水流情况下扩散对水质影响明显。此后针对供水管网水质研究中扩散项都集中于低速、稳态、简易的管网或管段中^[5-6]。但是这并不能说明真实的非稳态且复杂的水力情况下扩散效应是否显著,是否能如经典模型中忽略扩散项。

本研究致力于寻求更能反映管网中水质情况的数学模型,水质模型中考虑轴向扩散项和液压不稳定流动的条件。鉴于供水管网中存在水流区和管壁区,前者为流动区,后者为固定区,提出一种适合供水管网水质模拟的欧拉-拉格朗日(E-L)分裂算法,用于划分时间和空间域的网格并求解上述对流扩散方程。拉格朗日算法适用于求解平流的部分,欧拉算法求解扩散和反应项。

1 研究方法

1.1 控制方程

水质模型控制方程为一维对流扩散反应方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D_s \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + r[C(x, t)] \quad (1)$$

式中: $C(x, t)$ 为物质浓度,mg/L; u 为平均水流速度,m/s; $r[C(x, t)]$ 为反应项; D_s 为扩散系数, m^2/s 。

多组分传质反应模型主要包含微生物新陈代谢,消融转化沉淀脱离,有机物、余氯消耗传质等过程^[6]。管网分为水流区、管壁区,其方程表示如下:

① 水流区

a. 有机物

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{sbi}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{sbi}}{\partial x_i} = D_{sb} \frac{\partial^2 C_{sbi}}{\partial x_i^2} - \frac{k_{fsbi}(C_{sbi} - C_{swi})}{r_i} - \\ \mu_{\max} \frac{C_{sbi}}{k_s + C_{sbi}} C_{bbi} + a(k_{\text{mort}} + k_{Cl} C_{cbi}) C_{bbi} \end{aligned} \quad (2)$$

b. 微生物

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{bbi}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{bbi}}{\partial x_i} = D_b \frac{\partial^2 C_{bbi}}{\partial x_i^2} + Y \mu_{\max} \frac{C_{sbi}}{k_s + C_{sbi}} C_{bbi} + \\ k_{\text{shear}} C_{bbi} - k_{\text{fix}} C_{bbi} - (k_{\text{mort}} + k_{Cl} C_{cbi}) C_{bbi} \end{aligned} \quad (3)$$

c. 余氯

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{cbi}}{\partial t} + u \frac{\partial C_{cbi}}{\partial x_i} = D_c \frac{\partial^2 C_{cbi}}{\partial x_i^2} - k_{Cl} C_{cbi} - \\ \frac{k_{fci}(C_{cbi} - C_{cwi})}{r_i} \end{aligned} \quad (4)$$

② 管壁区

a. 有机物

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{swi}}{\partial t} = D_{sb} \frac{\partial^2 C_{swi}}{\partial x_i^2} - \mu_{\max} \frac{C_{swi}}{k_s + C_{swi}} C_{bbi} + \\ \frac{k_{fsbi}(C_{sbi} - C_{swi})}{r_i} + a(k_{\text{mort}} + \frac{k_{Cl} C_{cwi}}{k_{rl}}) C_{bbi} \end{aligned} \quad (5)$$

b. 微生物

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_{bbi}}{\partial t} = D_b \frac{\partial^2 C_{bbi}}{\partial x_i^2} + Y \mu_{\max} \frac{C_{swi}}{k_s + C_{swi}} C_{bbi} + k_{\text{fix}} C_{bbi} - \\ (k_{\text{mort}} + \frac{k_{Cl} C_{cbi}}{k_{rl}}) C_{bbi} - k_{\text{shear}} C_{bbi} \end{aligned} \quad (6)$$

c. 余氯

$$\frac{\partial C_{cwi}}{\partial t} = D_c \frac{\partial^2 C_{cwi}}{\partial x_i^2} - k_{wi} C_{cwi} + \frac{k_{fci}(C_{cbi} - C_{cwi})}{r_i} \quad (7)$$

式中: C_{sbi} 为*i*管道中的有机物浓度,mg/L; C_{bbi} 为*i*管道中存活的微生物量,mg/L; C_{cbi} 为*i*管道中氯浓度,mg/L; C_{swi} 为*i*管壁区的有机物浓度,mg/L; C_{bbi} 为*i*管壁区生物膜的微生物量,mg/cm²; C_{cwi} 为*i*管壁区生物膜中氯的浓度,mg/L; D_{sb} 为有机物扩散系数, m^2/s ; D_b 为微生物扩散系数, m^2/s ; D_c 为余氯扩散系数, m^2/s ; μ_{\max} 为最大有机物利用率, s^{-1} ; k_s 为半饱和常数,mg/L; Y 为微生物生长系数,mg生物量/mg基质; k_{mort} 为自然死亡系数, s^{-1} ; k_{Cl} 为氯致死系数,L/(mg·s); k_{fix} 为沉积系数, s^{-1} ; a 为死亡微生物裂解后转为有机物的系数,mg基质/mg生物量; k_{shear} 为微生物剪切系数; k_w 为管壁区氯衰减系数; k_{fc} 为管道中氯衰减系数。

1.2 水力模型

供水管网由多个管段和节点连接而成,包含管道、泵、阀门、节点、水塔和水源等。水力学模型包括连续性方程、压降方程和能量方程,利用成熟的EPANET来模拟管网各节点和各管段动态流的压强、流量、流速等^[7]。假设各物质在不同尺寸管段的节点处按照流量比例瞬间完全混合^[8]。

1.3 水质模型的求解

E-L法^[8-11]的基本思路是分裂出对流项,但在本研究中由于供水管道有水流区和管壁区,多组分反应传质过程中,管壁区和水流区会进行物质交换,则水流区和管壁区就需要相同尺寸的计算单位,本研究提出再次分裂反应项,使得分裂项的前两项

统一坐标和网格后再计算反应项。故在计算时间 $\Delta t(t_n, t_{n+1})$ 内采用 E-L 法分裂对流扩散项以及反应项,即:

$$\begin{cases} \frac{\partial C^*}{\partial t} = -u \cdot \frac{\partial C^*}{\partial x} \\ \frac{\partial C^{**}}{\partial t} = D_s \cdot \frac{\partial^2 C^{**}}{\partial x^2} \\ \frac{\partial C^{***}}{\partial t} = r[C^{***}] \end{cases} \quad (8)$$

式中: C^* 、 C^{**} 、 C^{***} 为过度变量。

上式分裂为对流步、扩散步以及反应步,分别对应以下3个方程,最终的 $C^{***}(t_{n+1}, x_j)$ 就是所求的结果。

$$\begin{cases} C^{**}(t_n, x_j) = C^*(t_{n+1}, x_j) \\ C^{***}(t_n, x_j) = C^{**}(t_{n+1}, x_j) \\ C(t_{n+1}, x_j) = C^{***}(t_{n+1}, x_j) \end{cases} \quad (9)$$

① 对流步

对流步虽然简单但是 C^* 未知,本研究使用特征法求得 $C^{*[8]}$:

$$\frac{dx}{dt} = u \quad (10)$$

物质浓度在分配时,一般是在欧拉坐标下标注的,然而 C° 是在拉格朗日网格下的点,由文献可知欧拉网格和拉格朗日网格之间相差 $u \times \Delta t$,由特征法可证得图1中虚线上各点浓度相等,即 $C^* = C^\circ$ 。由此可得:

$$C^\circ = (1 - \lambda)C(t_n, x_j) + \lambda C(t_n, x_{j-1}) \quad (11)$$

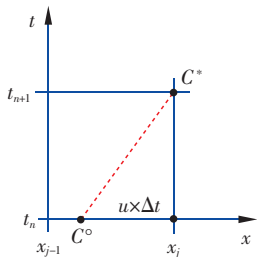


图1 特征法示意

Fig. 1 Schematic of characteristic method

② 扩散步

对于扩散步,Thomas 算法^[12]可以避免数值解震荡。Thomas 算法是基于对三角回追算法求得的,这一步在欧拉网格下计算。

$$C^{**}(t_{n+1}, x_j) = D_s \frac{\Delta t}{\Delta x^2} [C^{**}(t_n, x_{j-1}) \cdots -$$

$$2C^{**}(t_n, x_j) + C^{**}(t_n, x_{j+1})] + C^{**}(t_n, x_j) \quad (12)$$

③ 径向物质传输与反应步

$$\frac{\partial C^{***}}{\partial t} = r[C^{***}] \quad (13)$$

采用 Runge-Kutta 法求解第3步,这一步也是基于欧拉坐标计算的。

2 算例分析

将提出的水质模型应用于一个算例管网(见图2),该管网由41根管道、36个节点(包括1个水源和1个水塔)构成。此管网水力条件为动态水力参数,其小时用水曲线见图3。

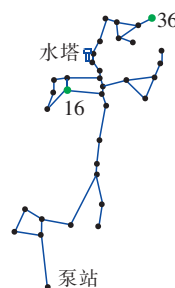


图2 供水管网示意

Fig. 2 Schematic diagram of water distribution system

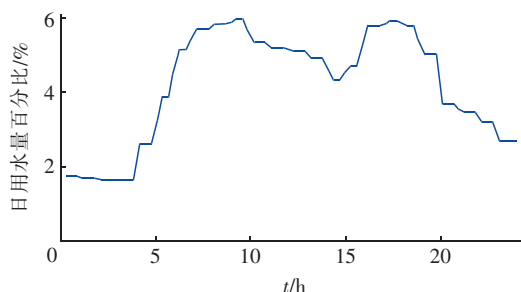
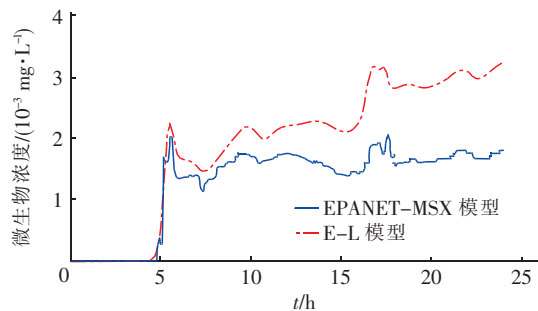


图3 小时用水量曲线

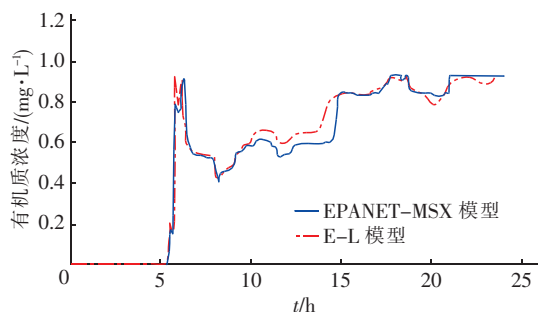
Fig. 3 Hourly water consumption curve

水质模拟采用具有代表性的节点16和节点36,其中节点16代表用水集中区的水质情况,节点36代表远离水源的用户端。轴向扩散对节点16和节点36处水质的影响分别见图4、5。设置水源处有机质、余氯和微生物量分别为1.065、1.5和0.006 mg/L。图4的仿真结果表明,EPANET-MSX(无扩散)和E-L(有扩散)模型对余氯和有机质的模拟结果相差不大,而微生物量的模拟结果则相差很大,E-L模拟结果要明显大于EPANET-MSX模拟结果,这说明有扩散项对微生物量的影响较大。通过

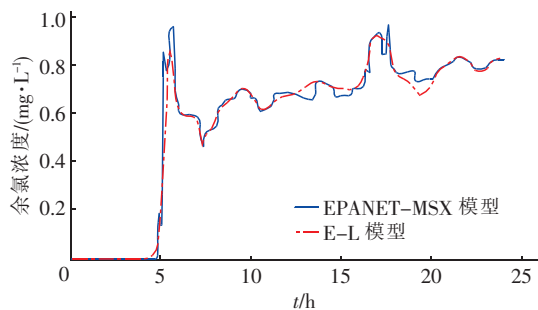
图5的仿真结果可知,类似的现象也发生在节点36处,不同的是余氯浓度与有机质浓度相差也较大,当水流速度较低时,扩散占主导地位,显著影响数值模拟结果。



a. 对微生物浓度的影响



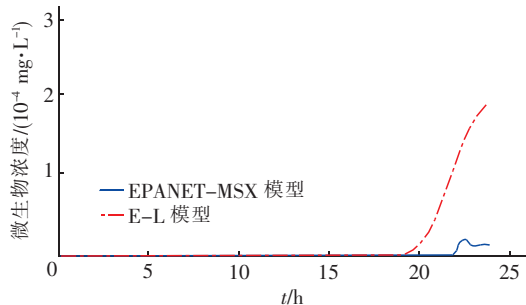
b. 对有机质浓度的影响



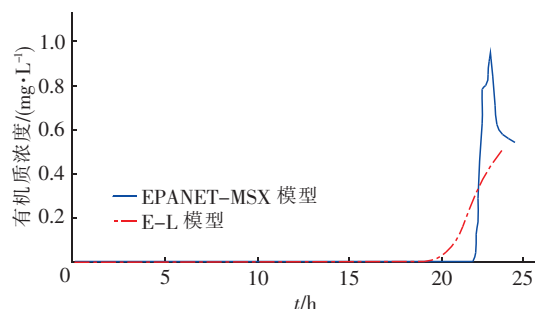
c. 对余氯浓度的影响

图4 轴向扩散对节点16处余氯、有机质、微生物浓度的影响

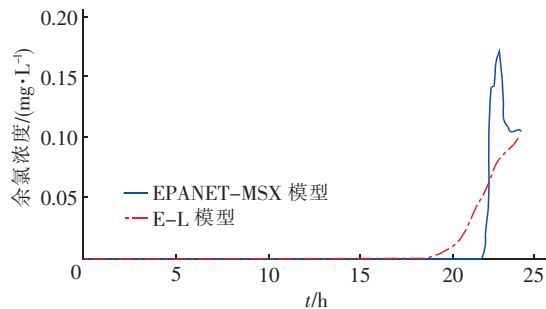
Fig.4 Effect of axial dispersion on residual chlorine, organic matter and biomass concentrations at node 16



a. 对微生物浓度的影响



b. 对有机质浓度的影响



c. 对余氯浓度的影响

图5 轴向扩散对节点36处余氯、有机质、微生物浓度的影响

Fig.5 Effect of axial dispersion on residual chlorine, organic matter and biomass concentrations at node 36

有机物的浓度、余氯和微生物量主要受沿管轴向扩散的影响。相比有机质和余氯,微生物受扩散项的影响更加明显。低流速时扩散效应显著,这在文献[4]中已有报道。但是在文献[4]中采用的是持续的低流速情况,本研究中用水模式更接近真实用水规律。节点16处管道流向如图6所示。它由管道16、18和21组成,且3个管道的流向(图中箭头的方向)都没有改变,则可知节点16处水质只受管道16影响。

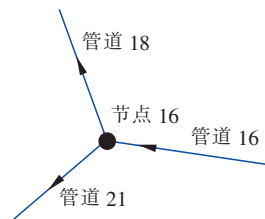


图6 节点16处管道结构

Fig.6 Pipelines structure at node 16

分析管道16的流速分布可知,在10~24h内管内流速较大(>0.2 m/s)。这种情况下发现扩散效应仍然存在,表现为对余氯和有机质的影响较小,而对微生物的影响较大,通过多次试验和观察,总结

出综合效应。综合效应指的是,因为扩散引起水流区和管壁区浓度差增大,而使得径向传质和反应增加,径向传质和反应增加也会促进轴向相邻间浓度差增大而促进扩散,从而使得轴向扩散以及径向传质和反应相互促进。这种效应对于敏感性高的微生物更具影响。

假设管道被网格划分为如图7所示的区域,每个区域的浓度分别为水流区 C_{sbi} 、 C_{bbi} 、 C_{cbi} ,管壁区 C_{swi} 、 C_{bwi} 、 C_{cwi} ,其中 i 代表第 i 网格区域。水流区和管壁区的扩散效应发生在轴向,管壁区和水流区之间发生径向物质传输,各自区域内发生微生物新陈代谢活动和余氯致微生物失活等活动。当各区域间存在浓度差时发生轴向扩散,使得各区域浓度改变,则可能使得径向浓度差相比未发生轴向扩散之前改变,则径向传质的物质的量发生改变,各区域内的反应也会发生改变,径向传质和反应物质的量的改变又反过来影响轴向的浓度差而使得轴向扩散效应更加明显。

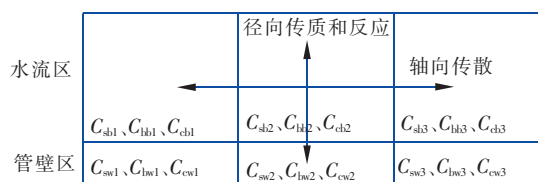


图7 综合效应示意

Fig. 7 Schematic diagram of comprehensive effect

有机质和余氯在管道中呈衰减趋势,微生物代谢消耗有机物^[13]。余氯衰减包含两个方面^[14]:余氯作为消毒剂结合微生物酶使微生物失活和生成消毒副产物的氧化还原反应,这也显示了一个衰减趋势(衰减趋势是停留时间的函数),同时,微生物数量随着有机质浓度和余氯的变化而变化,多组分的扩散效应加速径向传质和反应单位时间的变化,当流速较低时,相对保留时间更长;下游节点的水质一直受到扩散效应的影响,这种扩散效应一直积累,随着时间的推移污染物浓度逐渐从水源开始向下游累积,到终端时扩散效应达到最大,在远离水源处的终端点表现更为突出。最终使得本研究提出的有扩散项的模型(E-L)模拟结果显著大于没有扩散项的模型(EPANET-MSX)模拟结果。

3 结论

在经典的水质模型中,轴向扩散通常被忽略。

本研究加入扩散项进行管网水质模拟,并研究扩散项对多组分水质模拟的影响。以某管网为例,在不稳定水力条件并假设水源处污染物入侵模式下进行数值模拟试验。利用欧拉-拉格朗日分裂法求解多组分传质反应方程组,并将求解结果与没有扩散项的EPANET-MSX模型的模拟结果进行比较。结果显示,流速较大时(通常认为 $u > 0.2$ m/s),扩散效应几乎可忽略;然而,当 $u < 0.1$ m/s时,下游节点的水质一直受到扩散效应的影响,这种扩散效应一直积累,随着时间的推移污染物浓度逐渐从水源开始向下游累积,到终端时扩散效应达到最大,在远离水源处的终端点表现更为突出。考虑到多组分反应运输过程,生物量可能会受到轴向扩散和径向反应的综合效应,即扩散效应和轴向反应项相互促进使得综合效应更大,这一现象在低流速区域更加明显。

参考文献:

- [1] 周广宇,莫耀,赵新华,等. 基于多组分水质模型的供水管网细菌风险研究[J]. 中国给水排水,2016,32(5):64-69,73.
Zhou Guangyu, Mo Li, Zhao Xinhua, et al. Assessment of bacteria risk in water distribution system based on multi-species water quality model [J]. China Water & Wastewater, 2016, 32(5): 64-69, 73 (in Chinese).
- [2] 宋兰合. 城镇供水水质监测预警系统建设实践[J]. 中国给水排水,2014,30(18):15-17.
Song Lanhe. Construction practice on water quality monitoring and early warning system for urban water supply [J]. China Water & Wastewater, 2014, 30(18): 15-17 (in Chinese).
- [3] 石艳玲,郑广宏,王磊,等. 饮用水及相关材料的安全评价技术[J]. 环境与健康杂志,2007,24(5):363-366.
Shi Yanling, Zheng Guanghong, Wang Lei, et al. Safety evaluation of drinking water and the related products [J]. Journal of Environment and Health, 2007, 24(5): 363-366 (in Chinese).
- [4] Axworthy D H, Karney B W. Modeling low velocity/high dispersion flow in water distribution systems [J]. J Water Resour Plan Manage, 1996, 122(3): 218-222.
- [5] Yang Y J, Goodrich J A, Clark R M, et al. Modeling and testing of reactive contaminant transport in drinking water pipes: Chlorine response and implications for online contaminant detection [J]. Water Res, 2008, 42: 1397-

- 1412.
- [6] Zhang W, Miller C T, DiGiano F A. Bacterial regrowth model for water distribution systems incorporating alternating split-operator solution technique [J]. J Environ Eng, 2004, 130(9): 932–941.
- [7] 沈承. 城市供水管网节点混合模型研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2012.
Shen Cheng. Solute Mixing Model of Joints for Urban Water Distribution Networks [D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2012 (in Chinese).
- [8] 忻孝康, 黄光伟. 对流-扩散型方程一种简单、有效的欧拉-拉格朗日分裂格式[J]. 水动力学研究与进展, 1985(1): 100–109.
Xin Xiaokang, Huang Guangwei. A simple and efficient Eulerian-Lagrangian splitting scheme diffusion convection equation [J]. Journal of Hydrodynamics, 1985(1): 100–109 (in Chinese).
- [9] Wang H Q, Lacroix M. Interpolation techniques applied to the Eulerian-Lagrangian solution of the convection-dispersion equation in natural coordinates [J]. Computers & Geosciences, 1997, 23(6): 677–688.
- [10] Scardovelli R, Zaleski S. Interface reconstruction with least-square fit and split Eulerian-Lagrangian advection [J]. Int J Numer Meth Fluids, 2003, 41: 251–274.
- [11] Xin X K, Wong Y S. Eulerian-Lagrangian splitting methods for convection dominated equations [J]. Fluid Dynamics Research, 1989, 5(1): 13–27.
- [12] Press W, Teukolsky H, Saul A, et al. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1988.
- [13] Şeker Ş, Beyenal H, Tanyola A. The effects of biofilm thickness on biofilm density and substrate consumption rate in a differential fluidized bed biofilm reactor (DFBBR) [J]. J Biotechnol, 1995, 41(1): 39–47.
- [14] 钟丹. 给水管网余氯衰减规律及影响因素研究[D]. 哈尔滨: 哈尔滨工业大学, 2010.
Zhong Dan. Chlorine Decay Variation and Influential Factors in Water Distribution Network [D]. Harbin: Harbin Institute of Technology, 2010 (in Chinese).



作者简介: 陈国强 (1986 –), 男, 江西上饶人, 博士研究生, 研究方向为供水管网水力、水质模拟。

E-mail: lingcgq@gmail.com

收稿日期: 2019-03-12

