

SELFE-WASP-CANDI 在三峡水库水质模拟中的应用

李健

1 模拟参数取值

由于底泥埋深、其中的孔隙水运动以及化学反应的时空尺度均较上覆水的时空循环及反应要慢，因此，SELFE-WASP 模型（水体模拟）与 CANDI 模型（底泥生化模型）采用单向的松散耦合方式，即将 SELFE-WASP 模拟得到的底层水流及水质变量值（例如模拟 1 天后的结果），作为 CANDI 模型的输入（模型可选择是否考虑上覆水与底泥表层的交换）。

CANDI 模型中的计算参数应该根据三峡水库底泥的取样测试分析来设置，但目前缺少此方面的钻孔取样分析数据，因此主要参考 CAEDYM-CANDI 手册以及 CANDI 原始论文中的海岸(Coast)环境下的参数设置，作为三峡水库底泥生化过程及上覆水体水质水生态系统之间相互影响的初步研究。

其中一些工况计算涉及到的关键参数取值如表 1，表中不列出 CANDI 模型中生化反应的标准参数(Boudreau, 1996; Luff R., 2000; Luff R., 2004)。

表 1 CANDI 模型计算参数取值列表

参数	符号	工况 1（标准）	工况 2	工况 3	单位
生物扰动强度	DB0	0.01			cm ² /yr
生物扰动厚度	X1	2.0			cm
生物扰动厚度	X2	3.0			cm
与上覆水交换系数	α_0	30.0			yr ⁻¹
与上覆水交换厚度	X _i	10.0			cm
底泥埋深速率	w00	0.3	0.03	0.003	cm/yr
底泥表层孔隙度	P0	0.877			
底泥底层孔隙度	P00	0.726			
孔隙度衰减系数	BP	0.074			
模拟的底泥厚度	XL	15.0			cm
模拟底泥分层数	Npoints	100			层
模拟天数	Ndays	31			天
水沙界面分子扩散底层厚度	DEL	0.1			cm

2 边界条件设置

对于底泥计算的上部边界条件，由于 CANDI 模型需要输入的一些化学物质浓度的种类较多，如 SO₄、H₂S、Mn、Fe、CO₂、CH₄ 等的浓度，目前只能

参考一些已有的关于三峡水库底泥的取样分析数据和文献。还要注意：CANDI 模型中的化学物质浓度单位为 mMol/L，需要根据各种化学物质的分子量将 SELFE-WASP 模型的输出变量值(单位：mg/L)转换。

表 2 CANDI 模型底泥表层输入的变量值(X=X0)

变量	输入值	单位	说明
水温	SELFE 输出值	℃	
压力	SELFE 输出值	atm	根据水深换算
盐度	0.01	ppt	淡水的盐度很低
SO ₄	0.01	mMol/L	可根据盐度计算
O ₂	WASP 输出值	mg/L	
NO ₃	WASP 输出值	mg/L	
PO ₄	WASP 输出值	mg/L	
NH ₄	WASP 输出值	mg/L	
H ₂ S	0.0	mMol/L	
Mn ²⁺	0.0	mMol/L	
Fe ²⁺	0.0	mMol/L	
CO ₂	0.1	mMol/L	
CH ₄	0.01	mMol/L	
Ca	0.0	mMol/L	

CANDI 模型还需要设置底泥底部边界条件，本模拟选择设置已知浓度的边界条件。如果是底泥很薄，底部接触基岩，可以设置为零梯度边界条件。

表 3 CANDI 模型底泥底部边界化学物质浓度设置（X=XL）

变量	输入值	单位	说明
SO ₄	0.003	mMol/L	
O ₂	0.0	mMol/L	底部厌氧环境
NO ₃	0.01	mMol/L	
PO ₄	0.0	mMol/L	
NH ₄	0.0	mMol/L	取值均参考文
H ₂ S	0.03	mMol/L	献(Boudreau,
Mn ²⁺	0.07	mMol/L	1996; Luff R.,
Fe ²⁺	0.1	mMol/L	2000, Luff R.,
CO ₂	0.5	mMol/L	2004)
CH ₄	10.0	mMol/L	
Ca	1.2	mMol/L	

3 模拟结果分析

通过初步的几组工况计算表明：底泥的埋深速率 w_{00} 和底泥上下部边界浓度（特别是 CO_2 和 CH_4 的浓度）对底泥垂向上的化学物质浓度分布计算结果影响很大。因此，需要对三峡水库近坝区域的底泥化学物质浓度进行仔细测量和研究分析。

3.1 底泥各层的化学物质浓度分布

三组不同底泥埋深速率的工况计算，在于说明底泥埋深对底泥生化过程的影响。针对三峡水库底泥与水质的耦合精确模拟，需要现场和实验室测量结合进行。

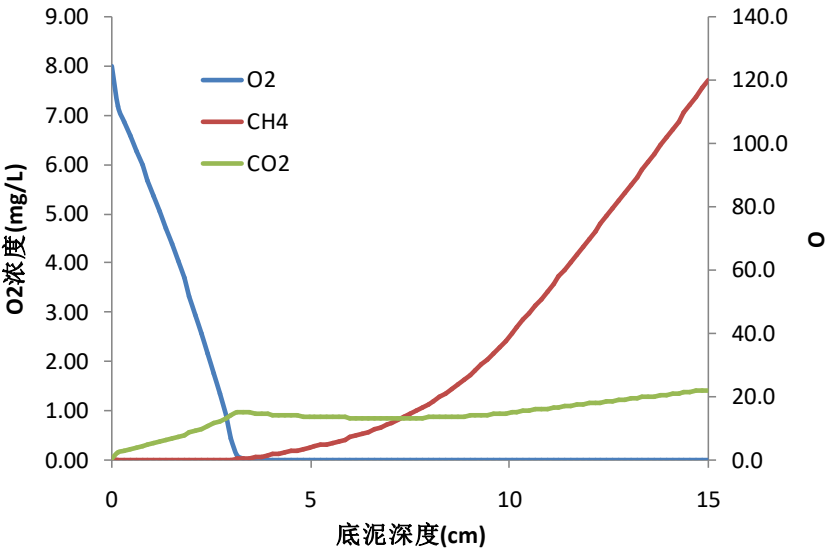


图 3.1 长江 CJ01 测点计算的底泥垂向组分浓度分布($w_{00}=0.3\text{cm/yr}$)

如图 3.2，垂向网格分层分别设置为 30,100 和 300 层，在 CJ01 测点分别做 O_2 和 CH_4 的垂向分布曲线，表明：网格分辨率整体对浓度计算值影响不大，但在水沙界面处和底泥底层附近，网格分辨率对浓度计算值有较明显影响。总体来说，底泥层分 100 层计算可满足计算精度要求。

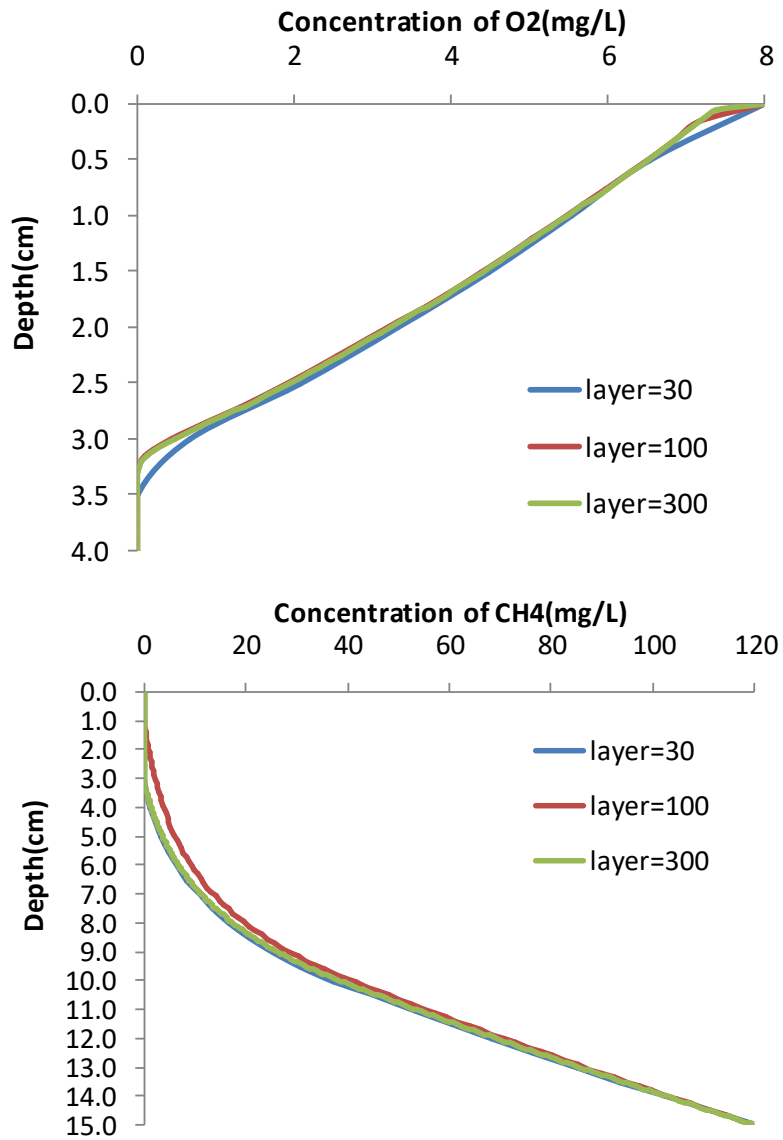


图 3.2 垂向网格分辨率对计算结果的影响

如图 3.3，底泥中的 NO_3 浓度在大约 32 天之后趋于稳定，即在施加上覆水浓度与底泥的交换模拟 32 天后 NO_3 浓度趋于恒定，表明：底泥中的孔隙水溶质运动速率很慢，与上覆水体中的流体与溶质的输移速率不在一个量级上。

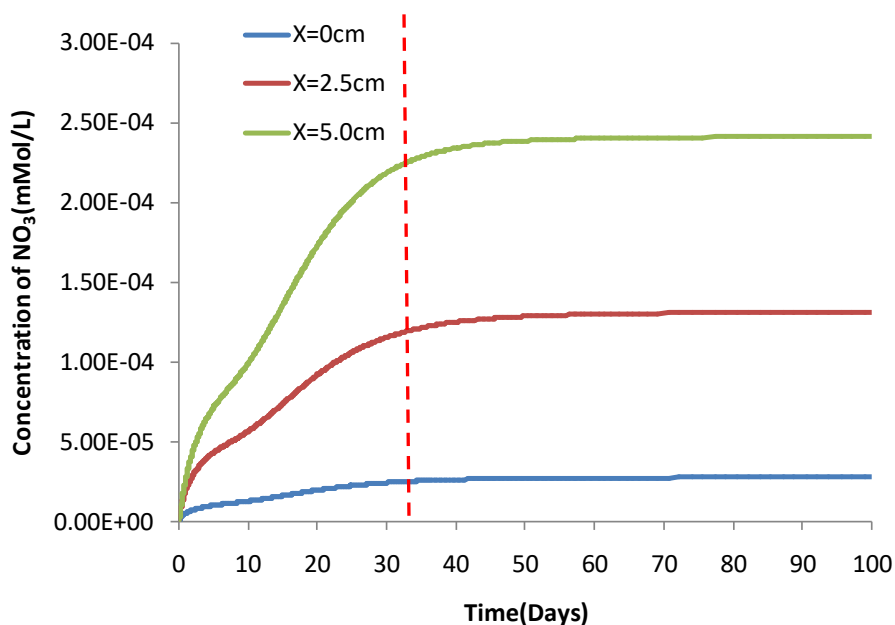
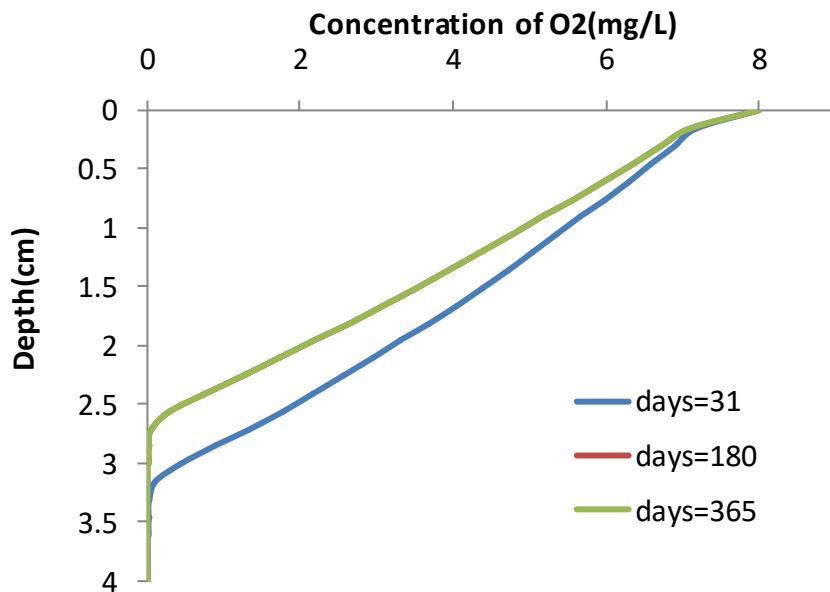
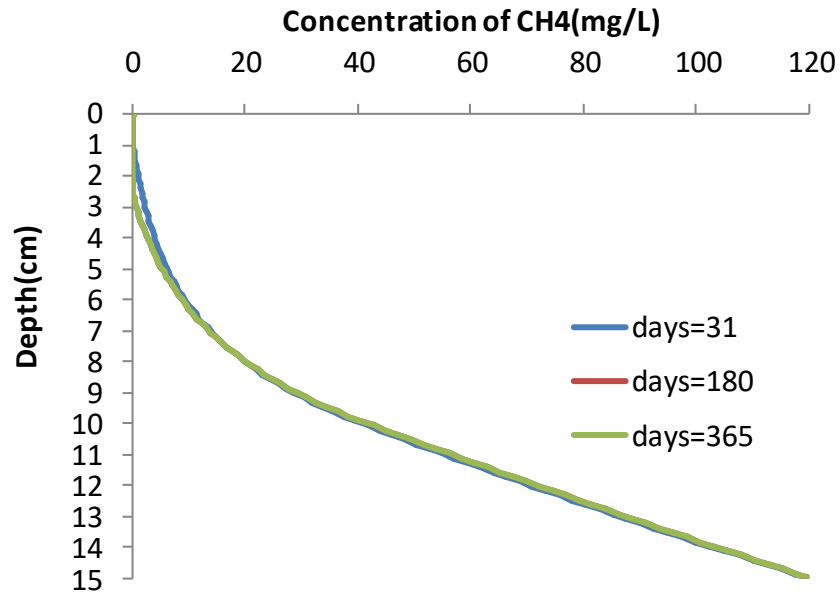


图 3.3 底泥中 NO₃ 浓度随时间变化

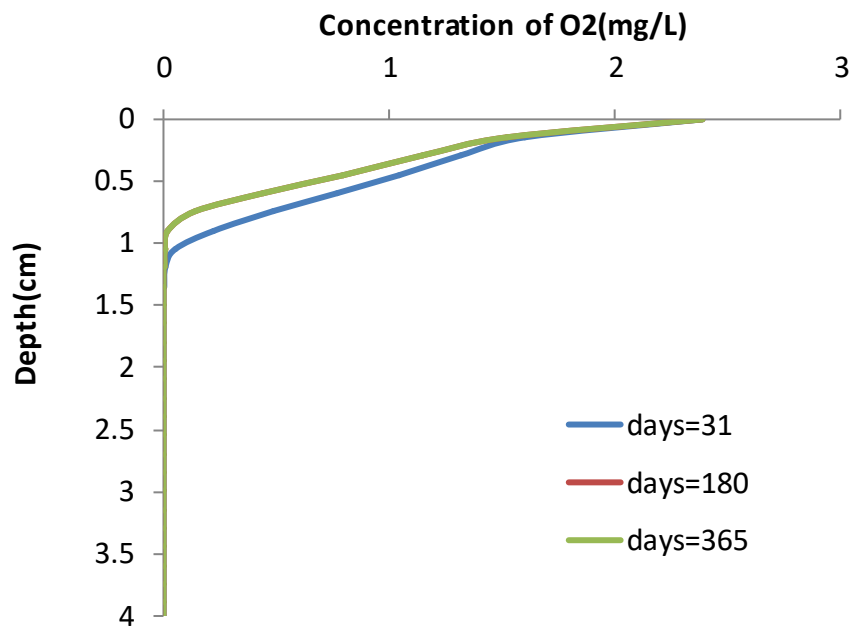
如图 3.4，当模拟不同天数后，底泥底层中的氧与甲烷的含量将趋于稳定（图 3.3），在不同的河道测点处，底泥中氧含量趋于零的深度不同，如在 CJ01 处约为 3cm，而在 CJ02 处约为 1cm，压强对孔隙水溶质输移和反应均产生影响。



(a) O₂ 浓度



(b) CJ01 的 CH₄ 浓度（不同模拟时间）



(c) CJ02 的 O₂ 浓度计算结果

图 3.4 垂向浓度分布随时间变化

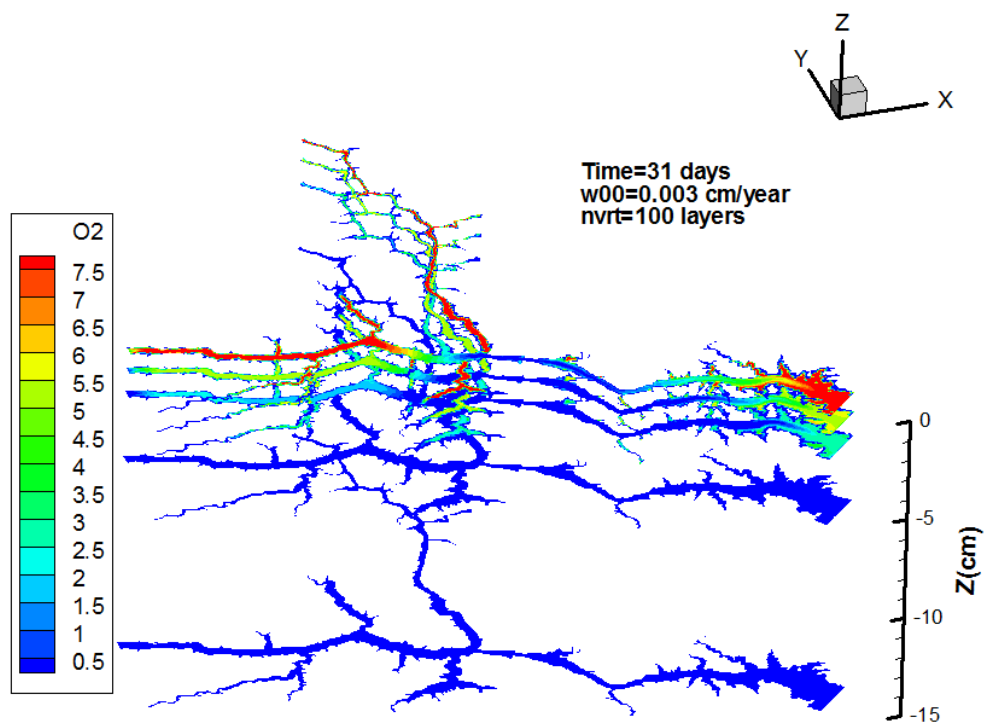


图 3.5 底泥中的孔隙水氧含量(单位: mg/L)

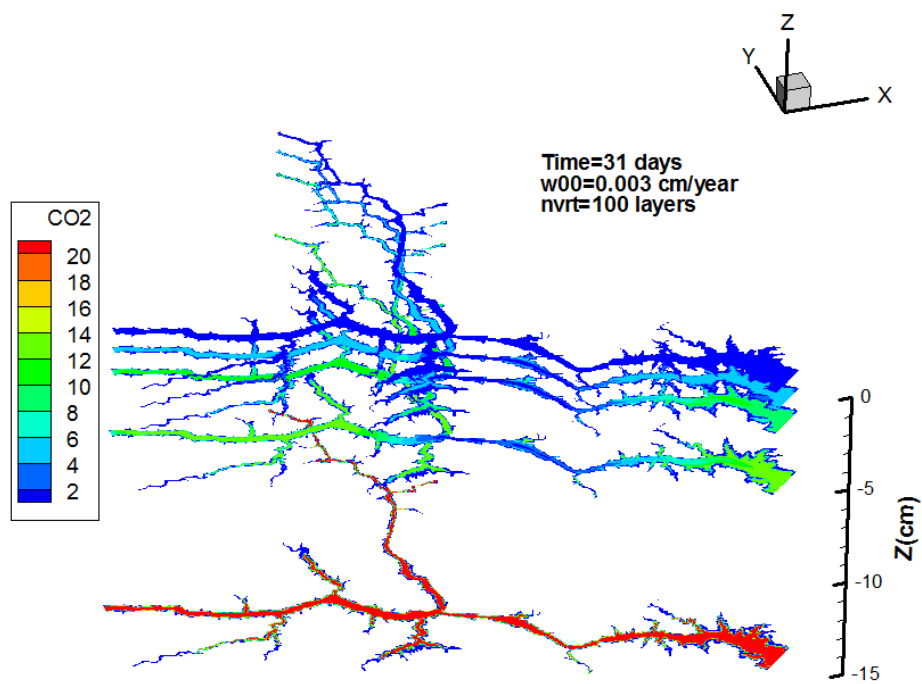


图 3.6 底泥中 CO₂ 的含量(单位: mg/L)

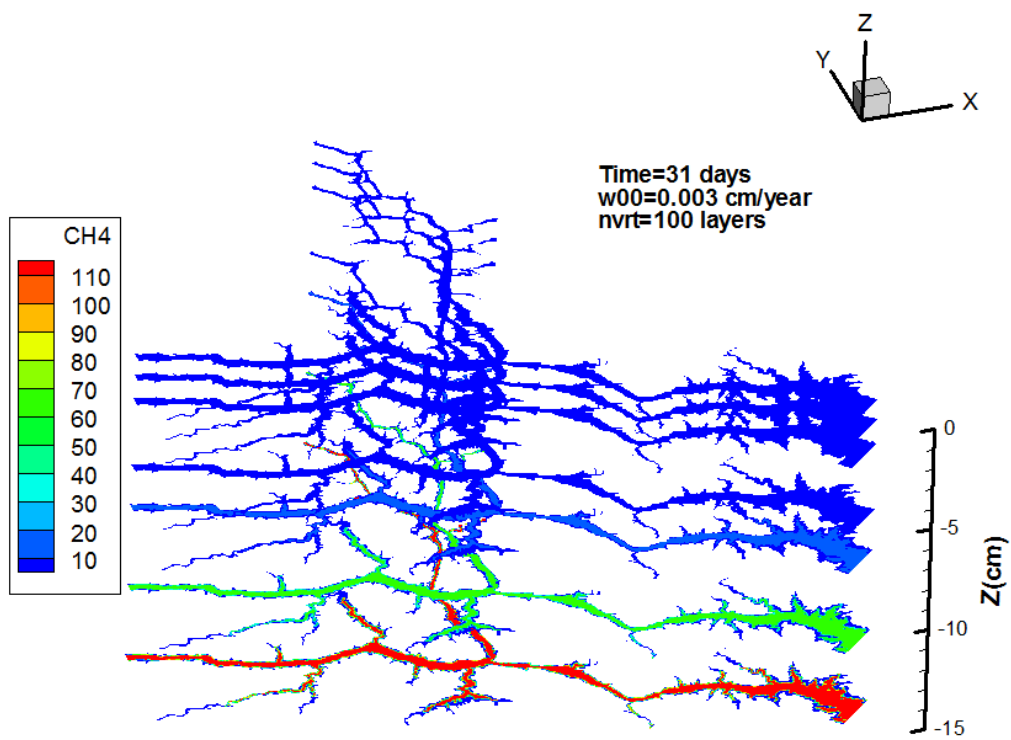
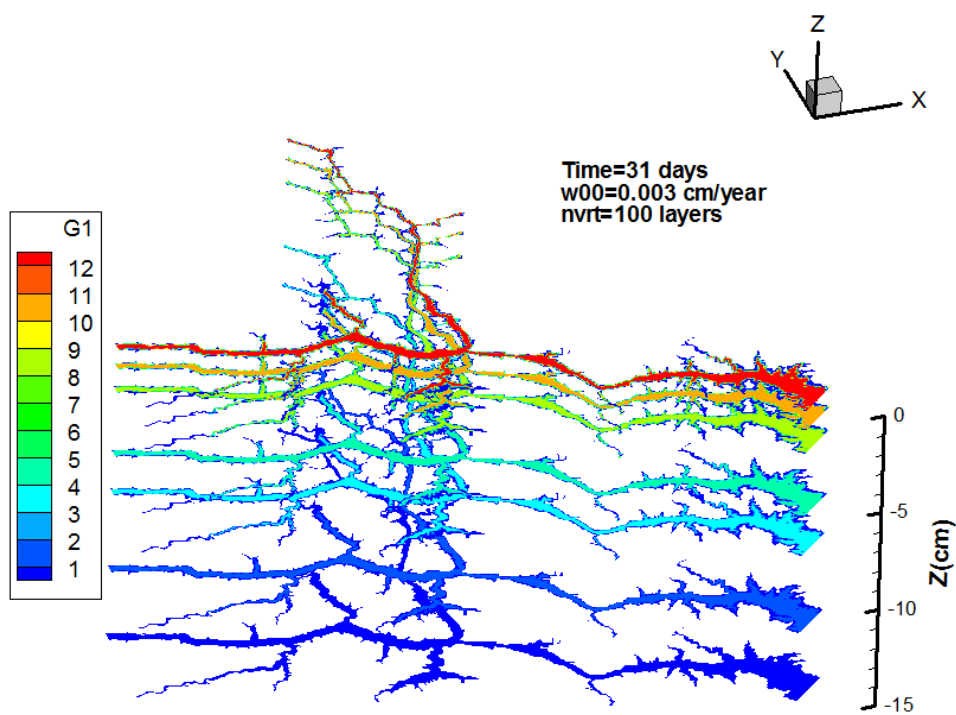
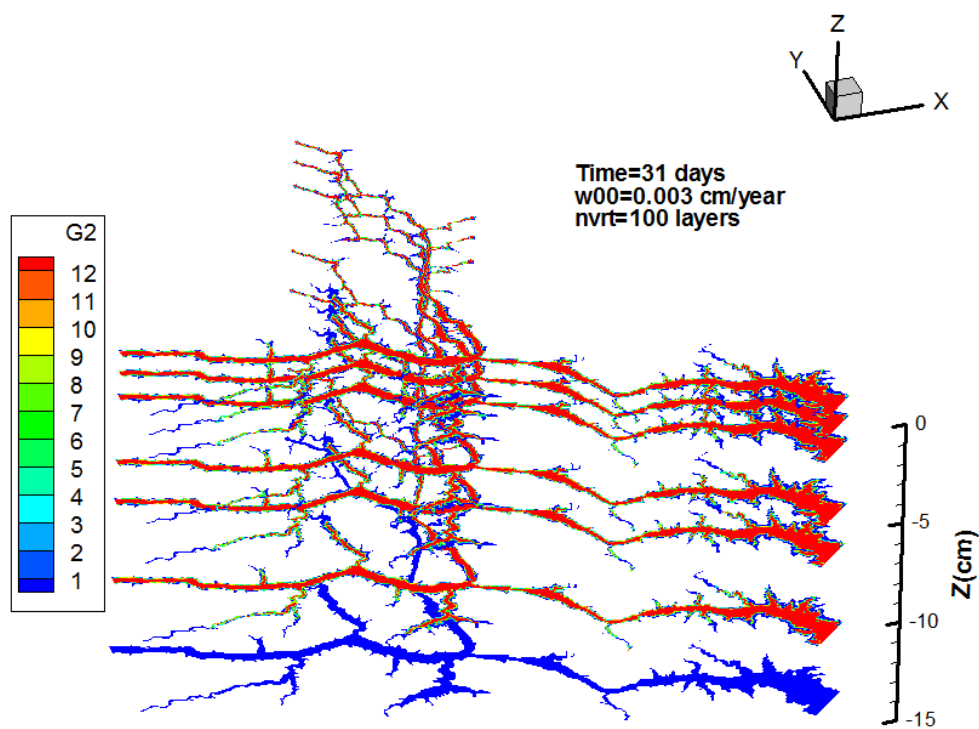


图 3.7 底泥孔隙水中 CH_4 的含量（单位：mg/L）



(a) 易降解有机质

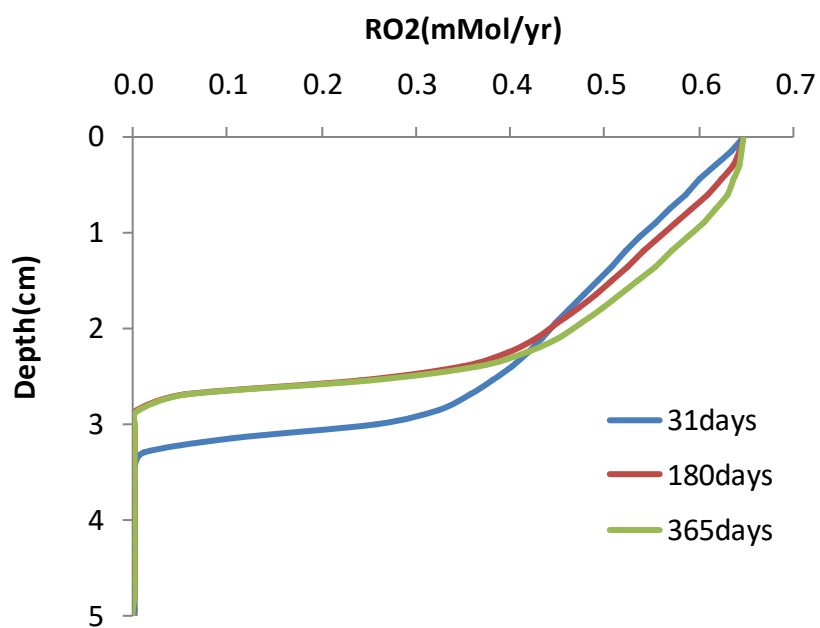


(b) 难降解有机质

图 3.8 有机质浓度分布（单位：mg/L）

3.2 底泥各层有机质氧化反应速率分布

如图 3.5，不同时间底泥中各层的碳氧化速率会有变化。



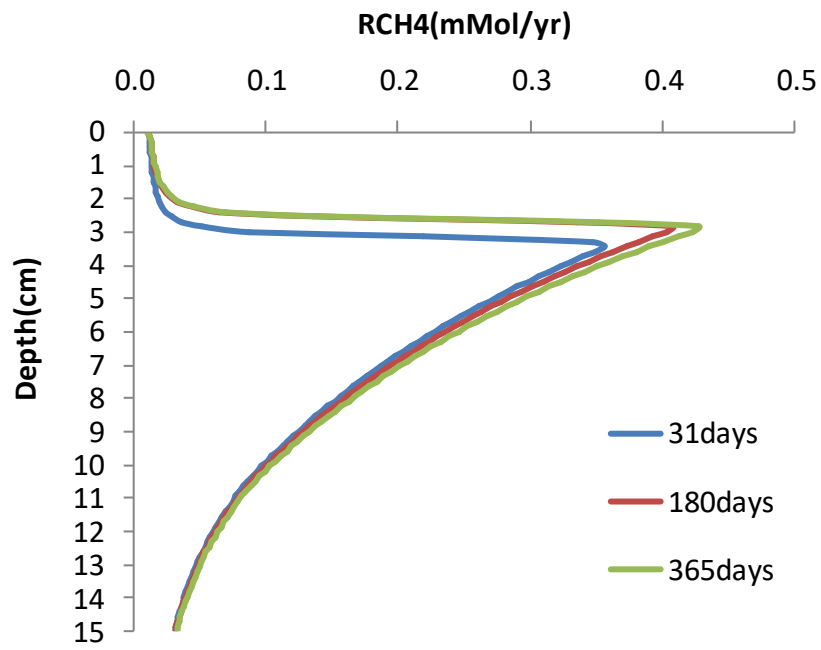
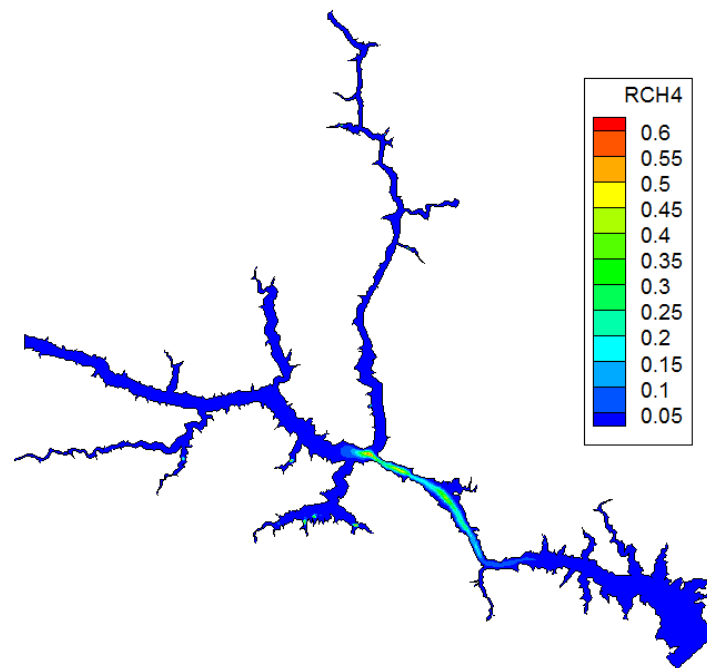
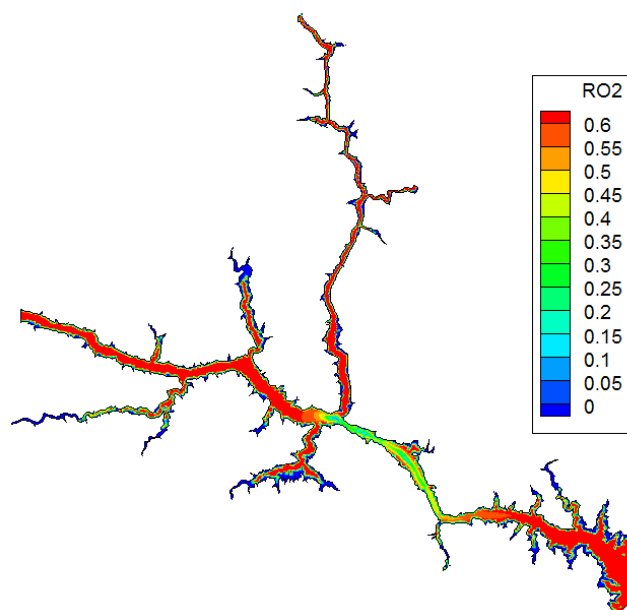


图 3.5 CJ01 测点底泥中氧和甲烷对碳的氧化速率分布

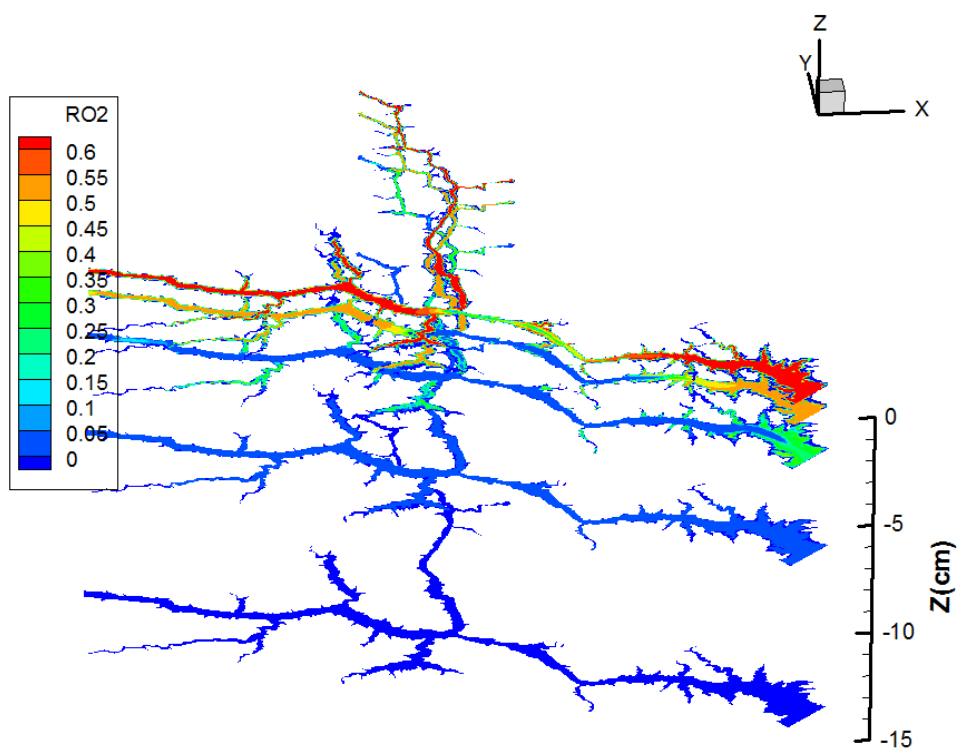


(a)底泥表层甲烷的氧化反应速率（单位：mMol/yr）

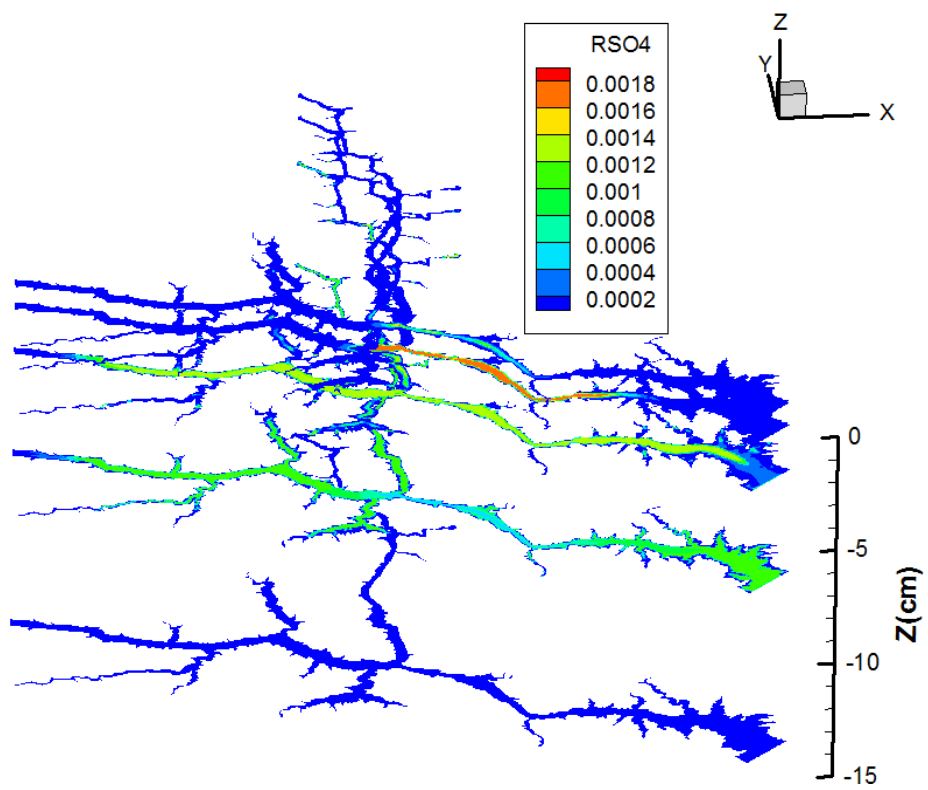


(b)底泥表层的 O_2 氧化碳的反应速率(单位: mMol/yr)

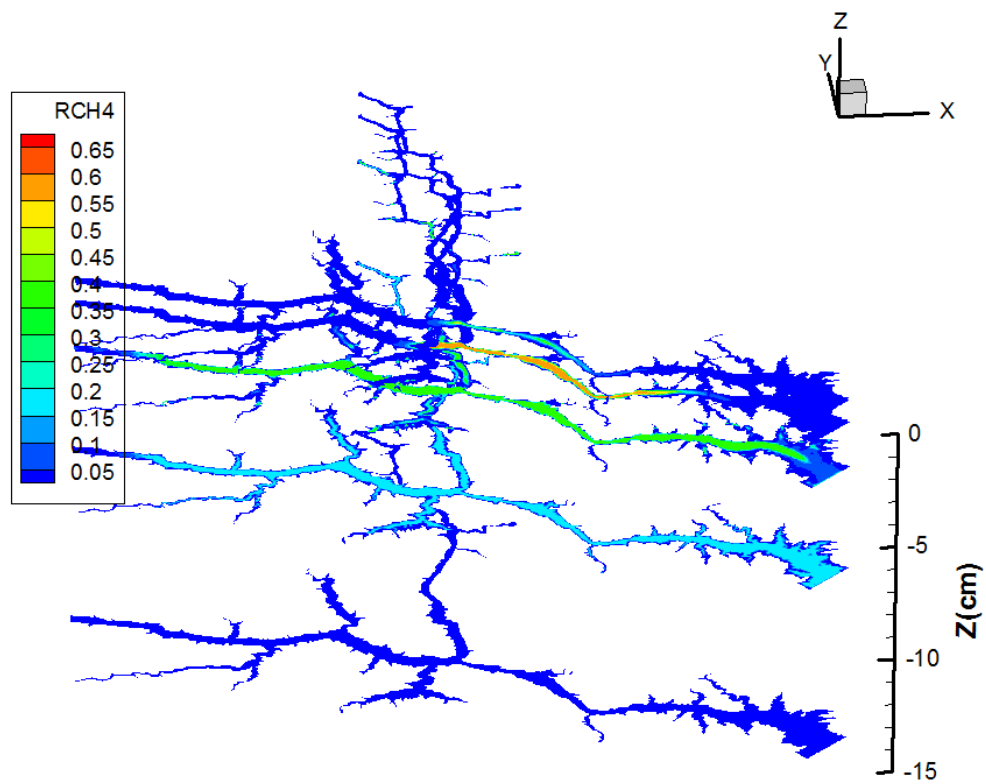
图 底泥表层的氧化反应速率



(a) O_2



(b) SO_4



(c) CH_4

图 底泥中化学反应速率（单位：mMol/yr；模拟时间：31days）

3.3 底泥各层碳被不同氧化剂氧化所占比例

下面分析一下底泥中有机质氧化反应中，由各部分氧化剂（包括： O_2 , CH_4 , SO_4 , NO_3 ）氧化以及底泥埋深的所占碳百分比平面分布。 $w=0.3\text{cm/yr}$ 180days

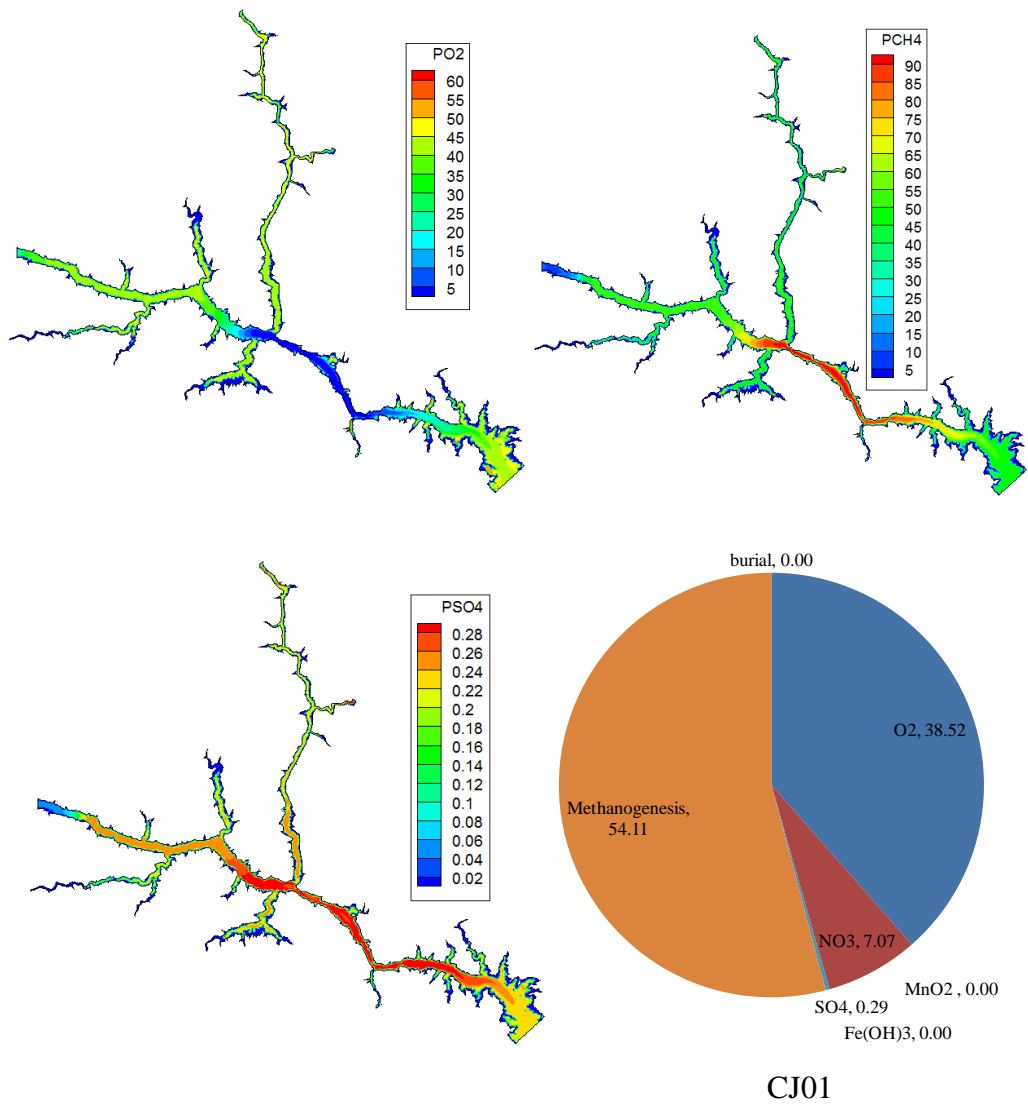
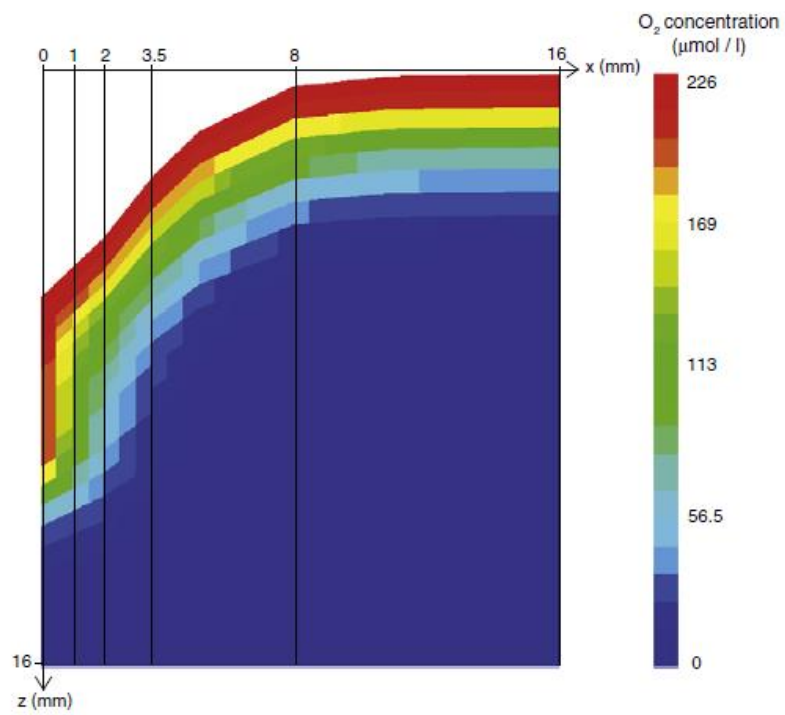


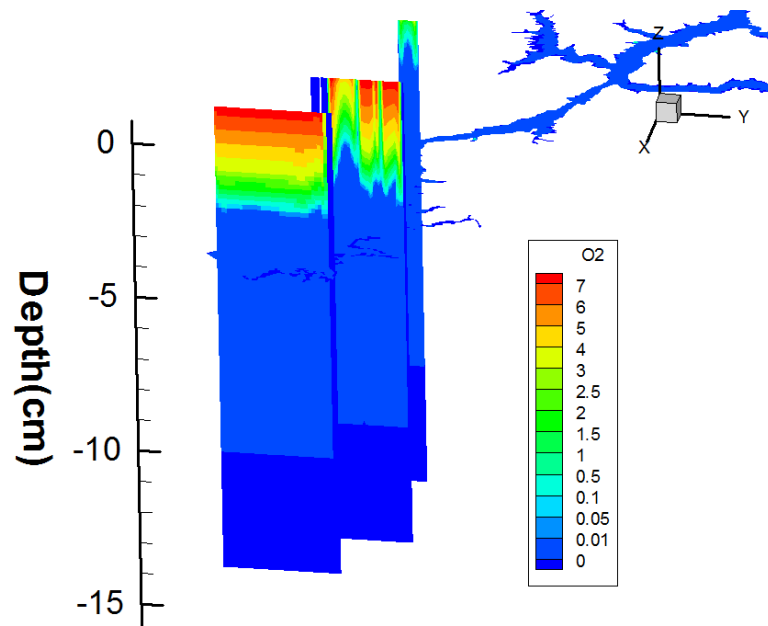
图 氧化碳所占总碳的百分比（单位：%）

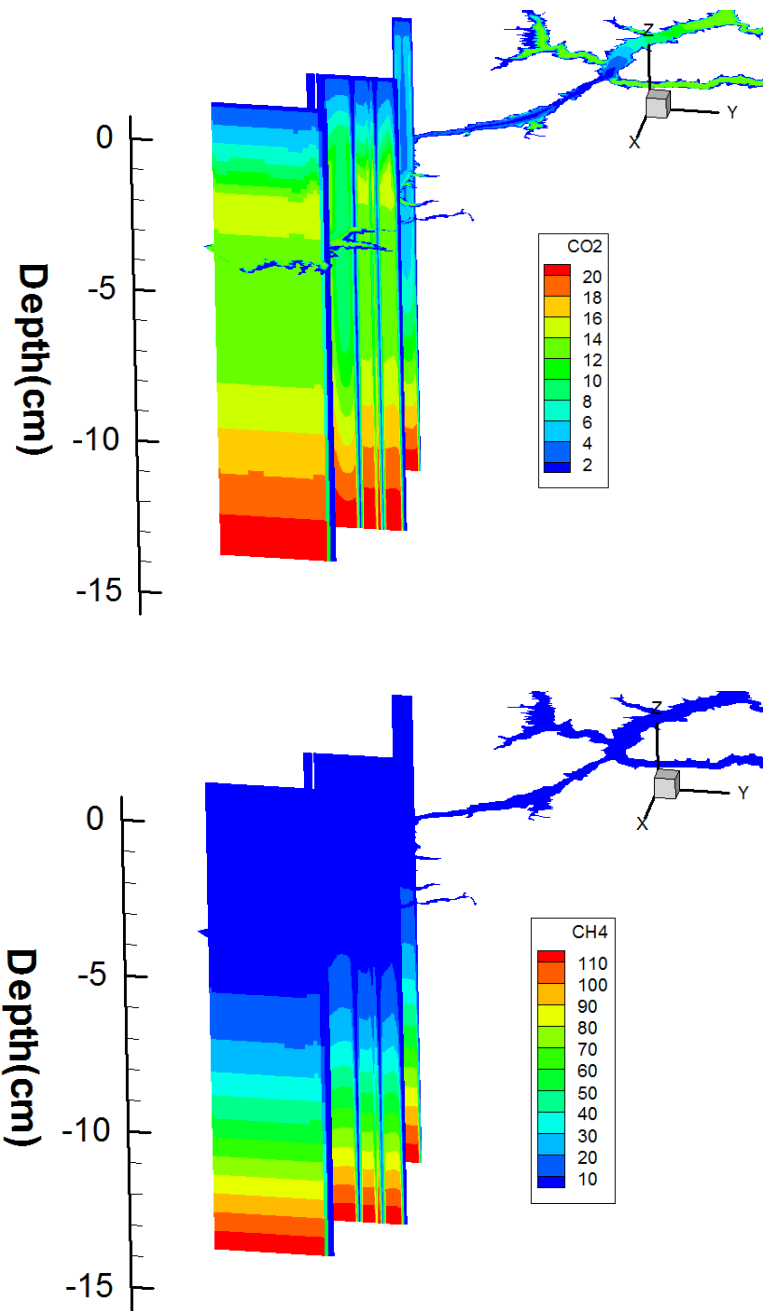
3.4 底泥横断面的化学物质浓度分布

如下图，可模拟处底泥下切断面的孔隙水溶质和固相颗粒中化学物质浓度的分布。本模型为垂向一维模型，没有如 ALLANCES 模型考虑溶质的侧向扩散转移。



ALLANCES 模型（二维模型）(Claude et al., 2012)





参考文献

- Bernard P. Boudreau. 1996. A method-of-lines code for carbon and nutrient diagenesis in aquatic sediments. *Computers & Geosciences*, 22(5): 479-496.
- Luff R., Wallmann K., Grandel S., Schlüter M., 2000. Numerical modelling of benthic processes in the deep Arabian Sea. *Deep-Sea Research Part II* 47: 3039-3072.

Roger Luff, Andreas Moll. 2004. Seasonal dynamics of the North Sea sediments using a three-dimensional coupled sediment-water model system. *Continental Shelf Research* 24: 1099-1127.