

基于 SZ 混合垂向坐标系的三维非结构网格水质水温数学模型

目前已开发了很多海洋动力学数学模型用于计算近海或海洋的水流、泥沙、温度营养物质浓度场等的时空演变,而海洋动力学模型较河流动力学模型需要考虑的因素更多,如科氏力、浓度场对水流的影响(斜压)、动水压力等,已有很多文献表明应用海洋动力学模型研究河流中的水流运动及物质输移(包括泥沙输移、水质、水生态等)取得了不少成果。

近年文献中公布的海洋动力学模型一般求解 3 维形式的 N-S 方程及物质输移方程(营养物质浓度、温度)。这些模型或者以结构网格的模式开发,如 POM、TRIM、ROM、NCOM 等,或者以非结构网格模式开发,如 ADCIRC、QUODDY、UnTRIM、ELCIRC、SEOM、FVCOM。采用的数值离散方法也有很大差异,如有限差分法(POM、TRIM、ROMS 和 NCOM),或有限单元法(SEOM、ADCIRC、QUODDY),或采用有限体积法和有限差分法的混合方法(UnTRIM、ELCIRC、FVCOM)。

ELCIRC 模型可以成功地模拟海峡中咸水入侵的现象,但计算结果低估了咸水入侵的范围,为此 SELFIE(Semi-implicit Eulerian-Lagrangian Finite Element)模型的研发目的是为了更精确地模拟复杂的水动力场和物质浓度场,并保持如 ELCIRC 模型相当的计算效率和健壮性。同时,SELFIE 模型也是采用非结构网格模式开发,回避了网格正交性对计算结果精度的影响的问题,垂向上采用 Z 坐标和 S 坐标相结合的混合坐标系统,使 SELFIE 模型跟踪复杂地形的能力更强。关于 SELFIE 模型的原理、特点及优势在下文介绍。

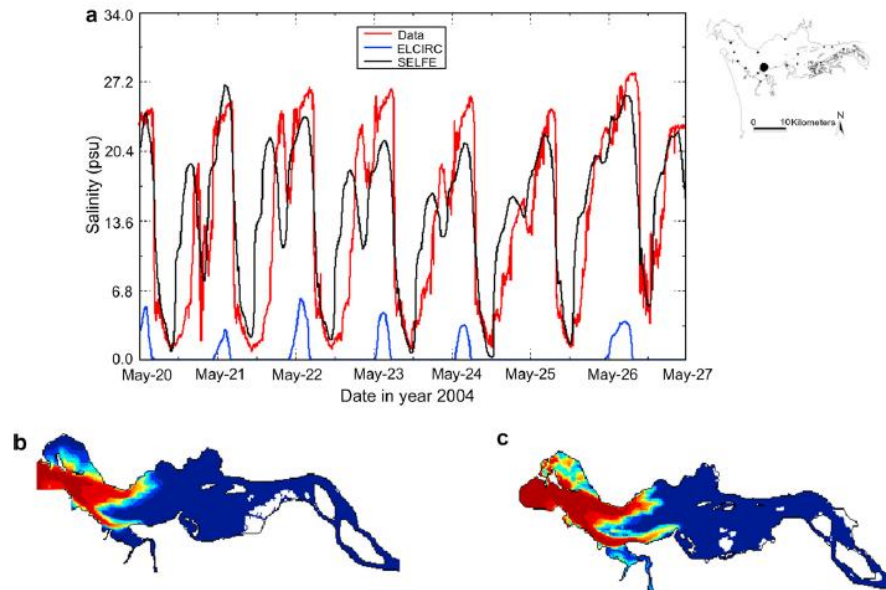


图 1 ELCIRC 和 SELFE 模型的计算结果对比(左: ELCIRC; 右: SELFE, 引自 Zhang et al., 2008)

1 ELCIRC 模型的缺陷

SELFE 模型的开发是为了解决 ELCIRC 模型的一些缺陷, 包括:

(1) ELCIRC 模型采用有限体积法, 在求解沿水深积分的连续方程的自由水位时采用的是常数的形状函数, 难以求解一阶导数项 (如科氏力项), 造成较大的数值计算误差(Zhang Yinlong et al., 2004);

(2) ELCIRC 模型中采用有限差分法对网格正交性要求较高, 而非结构网格难以保证网格的正交性, 很大程度上影响模拟计算精度 (计算不收敛);

(3) ELCIRC 模型在垂向上采用 Z 坐标系, 产生阶梯状底层网格, 不能精确模拟河床边界层的物理过程。

SELFE 模型采用一般形式的 Galerkin 有限单元法, 并采用线性形状函数最小化计算残差, 解决了上述的前两个问题, SELFE 模型采用垂向上的 S-Z 混合坐标系解决了上述的第三个问题, 可以模拟水深从米到数千米量级范围变化的复杂地形 (如比降大的山区河流和河口-海洋系统)。

2 SELFE 模型的控制方程

SELFE 模型采用静水压力(串行版)和 Boussinesq 假定求解 3 维 N-S 方程、物

质输移方程(包括营养物质浓度和温度)。求解的变量有：自由水位高程、流速、营养物质浓度和温度场。笛卡尔坐标系下的控制方程形式为：

$$\nabla \cdot \vec{u} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla \cdot \int_{-h}^{\eta} \vec{u} dz = 0 \quad (2)$$

$$\frac{D\vec{u}}{Dt} = \vec{f} - g\nabla\eta + \frac{\partial}{\partial z}(\nu \frac{\partial \vec{u}}{\partial z}) \quad (3)$$

$$\vec{f} = -f \times \vec{u} - \frac{1}{\rho_0} \nabla p_A - \frac{g}{\rho_0} \int_z^{\eta} \nabla \rho d\zeta + \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{u}) \quad (4)$$

$$\frac{DS}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z}(\kappa \frac{\partial S}{\partial z}) + F_s \quad (5)$$

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z}(\kappa \frac{\partial T}{\partial z}) + \Delta + F_h \quad (6)$$

式中， (x, y) 为水平向笛卡尔坐标(m)； z 为垂向坐标(向上为正，m)； ∇ 为散度

算子 $(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y})$ ， t 为时间(s)， η 为自由液面高程(m)； h 为水深(m)； \vec{u} 为水平流速

矢量，分量为 u, v (m/s)； w 为垂向流速(m/s)； f 为科氏力系数(s^{-1})； g 为重力加

速度(m/s^2)； ρ_0 为清水密度，标准密度为 $1025 kg/m^3$ ； p_A 为自由水面处的大气压

强(N/m^2)； S, T 为营养物质(总磷和总氮)的浓度(mg/L)和温度($^{\circ}C$)； ν 为垂向粘性

系数(m^2/s)， μ 为水平向粘性系数(m^2/s)； κ 为垂向扩散系数(m^2/s)， F_s 和 F_h 分别

为营养物质浓度与温度的水平向扩散项； Δ 为水体与大气热交换引起的温度变

化($^{\circ}C/h$)。

并行版的 SELFE 模型求解完整的 N-S 方程并考虑动水压力作用，动水压力部分的计算以静水压力计算结果为基础，其控制方程和计算步骤如后文介绍。

控制方程(1)~(5)需要进行封闭求解，封闭方法包括：(1) 与营养物质浓度和温度有关的状态方程；(2) 定义相关的驱动力，如科氏力等；(3) 采用紊流封闭模型计算水平向和垂向的紊动扩散系数等；(4) 施加初始和边界条件。状态方程和驱动力设置与 ELCIRC 模型相同(Zhang et al., 2004)，下面介绍 SELFE 模型中的紊流封闭模型和边界条件设置。

(1) 紊流封闭模型

SELFE 模型采用通用长度尺寸(GLS)紊流封闭模型(Umlauf and Burchard, 2003), GLS 紊流模型包括了大部分的双方程紊流模型, 如 $k-\varepsilon$ 模型、 $k-\omega$ 模型、Mellor-Yamada 模型等。GLS 紊流封闭模型中的紊动动能(K)的输运、产生和耗散和一个通用长度变量 ψ 的计算控制方程如下:

$$\frac{DK}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_k'' \frac{\partial K}{\partial z} \right) + \nu M^2 + \mu N^2 - \varepsilon \quad (6)$$

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\nu_\psi \frac{\partial \psi}{\partial z} \right) + \frac{\psi}{K} (c_{\psi 1} \nu M^2 + c_{\psi 3} \mu N^2 - c_{\psi 2} F_w \varepsilon) \quad (7)$$

式中, ν_k'' 和 ν_ψ 为垂向紊动扩散系数, $c_{\psi 1}$ 、 $c_{\psi 2}$ 和 $c_{\psi 3}$ 为模型中定义的常数(Umlauf and Burchard, 2003; Zhang et al., 2004), F_w 为近壁函数, M 和 N 分别为剪切频率和浮力频率, ε 为扩散率。

通用长度变量 ψ 可用下式定义:

$$\psi = (c_\mu^0) K^m l^n \quad (8)$$

式中, $c_\mu^0 = \sqrt{0.3}$ 和 l 为紊流混掺长度。

上式的 p , m 和 n 取值不同将生成不同的紊流封闭方程。式(3)和式(5)中将垂向粘性系数和扩散系数, 与 K, l 和稳定函数有关:

$$\nu = \sqrt{2} S_m K^{1/2} l, \quad \mu = \sqrt{2} S_h K^{1/2} l, \quad \nu_k'' = \frac{\nu}{\sigma_k''}, \quad \nu_\psi = \frac{\nu}{\sigma_\psi} \quad (9)$$

式中, Schmidt 数 σ_k'' 和 σ_ψ 为模型中定义的常数。稳定函数(s_m 和 s_h)由代数应力模型(Canuto et al., 2001)计算得到。

在河流的水面和河床处, 将紊动动能和混掺长度定义为 Dirchlet 类型的边界条件, 如下:

$$K = \frac{1}{2} B_1^{2/3} |\tau_b|^2 \quad (10)$$

$$l = \kappa_0 d_b \text{ 或者 } l = \kappa_0 d_s \quad (11)$$

式中, τ_b 为河床处的摩擦应力(式 14), κ_0 为 Von Karman 常数, 取值 0.4, B_1 为系数, d_b 和 d_s 分别为到达河床或自由水面的距离。

(2) 动量方程求解的垂向边界条件

动量方程的垂向边界条件（特别是河床或海床底部边界条件）在使用 SELFЕ 模型进行模拟时起到重要作用，因为其中包含有未知流速（见下节）。SELFЕ 模型求解微分方程组时采用底部边界条件非耦合求解自由水位方程式(2)和动量方程式(3)。

在水面处，水体内部 Reynolds 应力和施加的剪切应力达到平衡：

$$\nu \frac{\partial u}{\partial z} = \tau_w, \quad \text{当 } z = \eta \quad (12)$$

因为一般的海洋动力学模型都不能很好地求解底部边界层，通常在河床或海床处采用无滑移边界条件($u = w = 0$)，SELFЕ 模型采用内部 Reynolds 应力和底部摩阻应力相平衡的方式处理：

$$\nu \frac{\partial u}{\partial z} = \tau_b, \quad \text{当 } z = -h \quad (13)$$

底部应力 τ_b 的表达式形式取决于采用的边界层类型。而 SELFЕ 模型的数值方法(见下节介绍)可应用于其他类型的底部边界层(如层流边界层)(Blumberg and Mellor, 1987)，该种边界处理方法在海洋动力学模型中广泛应用。

式（13）中的底部应力 τ_b 为：

$$\tau_b = C_D \left| \vec{u}_b \right| \vec{u}_b \quad (14)$$

底部边界层顶部的流速与边界层外的流速相等。底部边界层内的水流流速符合对数型公式：

$$\vec{u} = \frac{\ln[(z+h)/z_0]}{\ln(\delta_b/z_0)} \vec{u}_b, \quad (z_0 - h \leq z \leq \delta_b - h) \quad (15)$$

式中， δ_b 为底部计算单元的厚度（假设 SELFЕ 模型中底层单元完全包含在边界层内）， z_0 为底部粗糙高度， \vec{u}_b 为底部计算单元顶层的实际流速。

由式（15）可得到底部边界层内部的 Reynolds 剪切应力：

$$\nu \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} = \frac{\nu}{(z+h) \ln(\delta_b/z_0)} \vec{u}_b \quad (16)$$

应用 2.1 节介绍的紊流封闭理论方程，即可得到稳定函数、紊动动能和混掺长度计算式：

$$S_m = g_2, \quad K = \frac{1}{2} B_1^{1/3} C_D \left| \vec{u}_b \right|^2, \quad l = \kappa_0 (z + h) \quad (17)$$

式中， g_2 和 B_1 为常数且 $g_2 B_1^{1/3} = 1$ 。

因此，边界层内的 Reynolds 剪切应力为：

$$\nu \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\kappa_0}{\ln(\delta_b / z_0)} C_D^{1/2} \left| \vec{u}_b \right| \vec{u}_b, \quad (z_0 - h \leq z \leq \delta_b - h) \quad (18)$$

拖拽系数由式（13）、式（14）和式（18）计算得到：

$$C_D = \left(\frac{1}{\kappa_0} \ln \frac{\delta_b}{z_0} \right)^{-2} \quad (19)$$

3 物质输移模块介绍

3.1 水温模块

3.2 营养物质循环模块

4 SELFE 模型的离散求解

SELFE 模型的数值计算方法考虑了数值求解的计算效率和精度。该模型采用有限单元法和有限体积法求解 N-S 方程组；采用半隐格式求解微分方程组；同时求解连续方程和动量方程（式 2 和式 3），该方法降低 CFL 稳定性条件的限制；SELFE 模型通过底部边界层采用非耦合方式求解连续方程和动量方程（式 2 和式 3）（见 3.2 节）；SELFE 模型采用欧拉-拉格朗日法（ELM）和有限体积法的迎风格式离散动量方程中的对流项，迎风格式可保证质量守恒。

4.1 计算区域离散

（1）垂向 S-Z 混合坐标系介绍

SELFE 模型水平向采用非结构三角网格离散，垂向上采用地形跟踪的 S 坐标和部分 Z 坐标的混合网格。具有地形跟踪功能的 S 坐标(Song and Haidvogel, 1994)位于 Z 坐标分层的上面（如图 3），S 坐标和 Z 坐标的分界线位于第 k^z 层

($z = -h_s$)。也就是说, 垂向的地形跟踪至最大水深 h_s 。自由水面在整个计算区域内(所有的湿节点)位于第 N_z 层(所有湿网格节点), 但底层网格标记 k^b 随空间变化, 因为底部的 Z 分层随地形变化产生阶梯状计算单元。一般情况下 $k^b \leq k^z$, 当局部水深 $h \leq h_s$ 时有 $k^b = k^z$ 。当 $k^b = k^z = 1$ 时并且 h_s 大于计算区域内的最大水深时, 为“纯 S 坐标”离散。

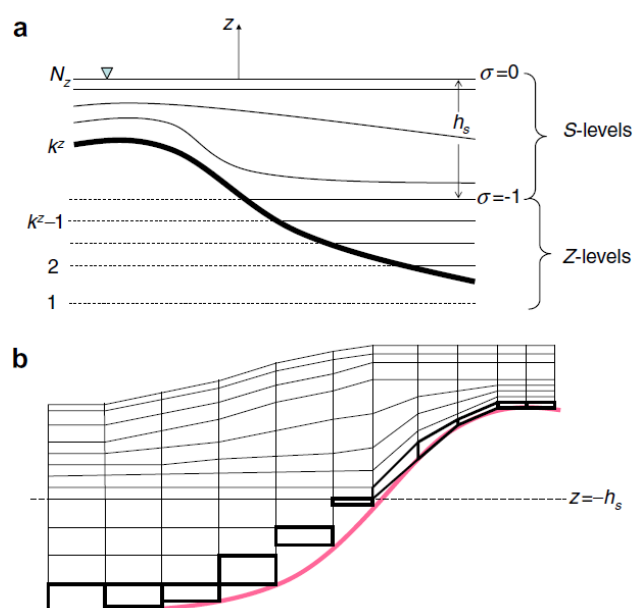


图 1 SZ 混合垂向网格坐标系统(Zhang et al., 2008)

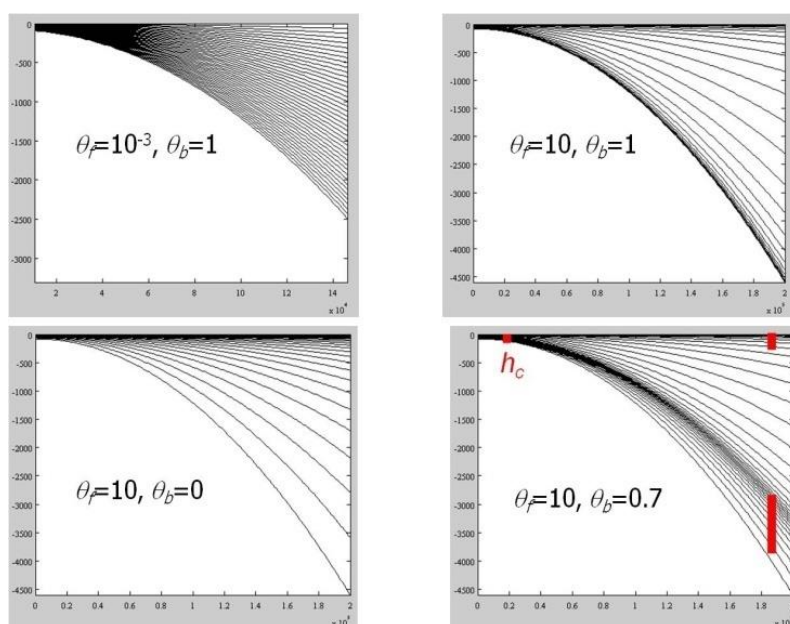


图 2 坐标转换示意图(Zhang et al., 2008)

地形跟踪的 S 坐标系统与笛卡尔 Z 坐标系统的相互转换如图 2，S 坐标和 Z 坐标之间的转化如下：

$$\begin{cases} z = \eta(1 + \sigma) + h_c \sigma + (h - h_c)C(\sigma) \\ (-1 \leq \sigma \leq 0) \\ C(\sigma) = (1 - \theta_b) \frac{\sinh(\theta_f \sigma)}{\sinh(\theta_f)} + \theta_b \frac{\tanh[\theta_f(\sigma + 1/2)] - \tanh(\theta_f/2)}{2 \tanh(\theta_f/2)} \\ (0 \leq \theta_b \leq 1; 0 < \theta_f \leq 20) \end{cases} \quad (1)$$

式中， $h = \min(h, h_s)$ 是一个限制水深， h_c 是一个正数，表示需要求解的底层或表层的厚度， θ_b 和 θ_f 是决定接近底层和表层的垂向网格分辨率的常数。当 $\theta_f \rightarrow 0$ ，S 坐标将退化为传统的 σ 坐标：

$$z = \bar{H}\sigma + \eta$$

式中， $\bar{H} = h + \eta$ 为限制总水深。

如图 2，当 $\theta_f \gg 1$ 时边界网格分辨率越高，坐标转换变得更加非线性。如果 $\theta_b \rightarrow 0$ 仅在表层加密垂向网格分辨率，底层网格分辨率不加密，而如果 $\theta_b \rightarrow 1$ 表层和底层附近的网格分辨率均加密。当表层和底层的物理过程都很重要的时候（例如海洋和河口的研究问题），需要选择后者，这是 S 坐标较 σ 坐标有优势的地方。但 S 坐标在潜水的区域将变的无效，从 $z'(\sigma) > 0$ 推导出有效 S 坐标转换的限制条件：

$$\begin{cases} \bar{H} > h_0 \\ h > h_c \\ \eta > -h_c - (h - h_c) \frac{\theta_f}{\sinh(\theta_f)} \end{cases}$$

限制式中第一个条件决定了计算节点必须是“湿”节点， h_0 为计算最小水深。

对于湿节点，当 $h \leq h_c$ （水深过浅）或 $\eta \leq -h_c - (h - h_c) \frac{\theta_f}{\sinh(\theta_f)}$ （水面降低至某一设定值时）S 坐标会退化为 Z 坐标。出现以上情况时，坐标转换公式（1）将

变成非单调函数。需要用 σ 坐标（所有水深上均有效）取代 S 坐标。需要从 S 坐标过渡到 σ 坐标，采用以下策略保证光滑过渡：

- 1、当 $h \leq h_c$ ，坐标转换公式（1）由 $z = \bar{H}\sigma + \eta$ 代替，当 $h \rightarrow h_c^+$ ， S 坐标接近 σ 坐标，因此从浅水至深水平滑过渡。
- 2、当 $h > h_c$ ，而 $\eta \leq -h_c - (h - h_c) \frac{\theta_f}{\sinh(\theta_f)}$ ，这种情况下将对距离河床和水面最近的网格进行坐标转换，即：

$$\begin{cases} \bar{\sigma} = \frac{\bar{z} - \bar{\eta}}{h + \eta} \\ \bar{\eta} = \beta [-h_c - (h - h_c) \frac{\theta_f}{\sinh(\theta_f)}] \\ \bar{z} = \bar{\eta}(1 + \sigma) + h_c \sigma + (h - h_c)C(\sigma) \end{cases}$$

式中， $\beta = 0.98$ 为安全系数。实际应用中，如果设定足够大的 h_c （ $h_c > 5m$ ）值将不会遇到该情况，因此计算应用时建议取较大的 h_c 值。

（2）垂向 SZ 混合坐标系统基本原理

采用垂向“纯 S 坐标”可以避免在河床或水面处形成的阶梯状计算单元，但由于需要进行 S - Z 坐标间的转换会降低求解精度，另外“纯 S 坐标”还会引起水压力的不一致（见 3.3.3 节的介绍），当模拟地形坡度较大或水流运动分层明显时将产生较大的误差。采用 Z 坐标能有效地减弱水压力计算的不一致性，能模拟出比较真实的浮力流或分层流现象（Zhang et al., 2004）。因此，采用垂向上 SZ 混合坐标将综合了 S 坐标和 Z 坐标的优点：在浅水区（ $h \leq h_s$ ）在 S 坐标下求解底部运动，而在深水区（ $h > h_s$ ）采用 Z 坐标求解，以避免水压力不一致的问题。在深水区底部的流速较小，因此计算单元阶梯状变化幅度较小，降低水压力不一致的问题还可以采用较大的 h_s 值的方法。

采用 S - Z 混合垂向坐标系的方法将造成控制方程在哪个坐标系中求解的问题。SELFE 模型中所有的方程均在未做转换的 Z 坐标上求解，只采用 S 坐标生成垂向网格和计算水平向导数（如水平粘度项），该方法也在其他的模型中采用

(Schepetkin and McWilliams, 2005)。

严格地说，当自由水面波动时上层的 S 分层（在原来的 Z 空间中）也随之变化，每一时间步的计算后，所有变量均需要重新插值到更新后的新的垂向网格上去。只要自由水面在一个计算时间步内的波动值远小于最小分层厚度，即可忽略 S 坐标分层在每一时间步内的位移影响。由于线性插值容易引起数值耗散而高阶插值容易引起数值扩散，SELFE 模型中不进行网格更新后的变量插值计算，在 Z 坐标模型(ELCIRC)中也做了这样的忽略，其中顶层也随时间而变化。

SELFE 模型中一些部分需要做任意点的三维空间插值计算，如特征线根部的插值（逆向跟踪），单元边上的流速向节点的转换。水平向插值一般在 Z 平面上进行（不是在 S 平面上）。这种方法带来在底部和自由水面处计算精度的问题（Fortunato and Baptista, 1996）。因此 SELFE 模型中可选择在转换后的 S 空间中（没有 Z 坐标分层，为“纯 S 坐标”区域，此时 $h \leq h_s$ ）进行插值计算，这种方法在地形变化较快的浅水区域计算精度较在 Z 空间中的插值精度更好。

（3）变量存储方式

在水平向上采用三角形的非结构网格（如图 3(a)），网格单元间的连接关系如下定义：单元 i 的三条边采用 $js(i,l)(l=1,2,3)$ 进行编码。节点 i 周围单元采用 $ine(i,l)(l=1,...,nne(i))$ 进行编码，其中 $nne(i)$ 为节点周围单元的总数。计算区域在水平和垂向上进行网格离散后，3 维的计算单元体即为三角形棱柱体，变量存储采用交错方式布置，动水压强模式的 SELFE 模型的变量存储位置与如图 3(b) (胡德超, 2009) 的变量存储相似。SELFE 模型的自由水位高程定义在单元节点处（与图 3(b) 中所示的定义位置不同），水平向流速 u, v 、紊流封闭方程的紊动动能 K 和通用长度尺寸变量 Ψ 定义在单元边的中点处，垂向流速 w 、动水压力 q 定义在单元的中心处。采用有限单元法（线性形状函数）求解自由水位高程和流速，求解流速时线性形状函数仅用于特征线根部的差值计算（见 3.3.1 节），采用有限体积法求解其他变量。物质输移方程中的营养物质浓度和温度变量的存储位置取决于采用的数值算法，当采用迎风格式（FVUM）时，营养物质浓度和温度变量存储在棱柱体的中心处，当采用 ELM 法时，在单元节点和边的中点处均可存储营养物质浓度和温度变量（见 3.3.1 节）。

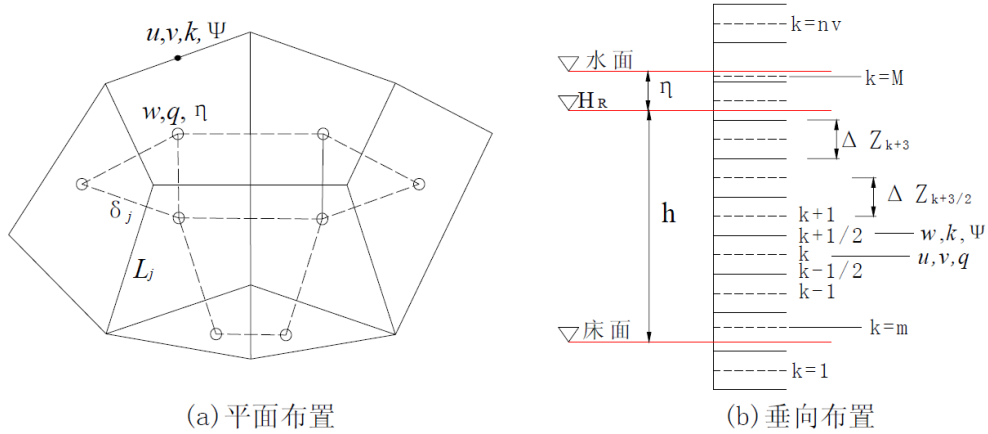


图3 变量存储位置示意图(胡德超, 2009)

4.2 正压模式

SELFE 模型首先求解正压模式下的方程组 (1) ~ (3), 在下一时间步求解物质输运方程和紊流封闭方程, 也就是说动量方程中的正压压力梯度项是采用显格式求解。物质输运方程和紊流封闭方程将在 3.4 节中介绍。当采用静水压力假设时, 垂向流速 w 是在由方程 (1) 求解得到水平向流速后根据棱柱体内的水量平衡求解, 详细原理如 ELCIRC 模型。对时间项采用半隐格式离散并结合垂向边界条件方程 (12) 和 (13) 离散求解自由波动方程 (式 2) 和动量方程 (式 3), 如下:

$$\frac{\eta^{n+1} - \eta^n}{\Delta t} + \theta \nabla \cdot \int_{-h}^{\eta} \mathbf{U}^{n+1} dz + (1-\theta) \nabla \cdot \int_{-h}^{\eta} \mathbf{U}^n dz = 0 \quad (20)$$

$$\frac{\vec{u}^{n+1} - \vec{u}^n}{\Delta t} = \vec{f}^n - g \theta \nabla \eta^{n+1} - g(1-\theta) \nabla \eta^n + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mathbf{v}^n \frac{\partial \vec{u}^{n+1}}{\partial z} \right) \quad (21)$$

$$\begin{cases} \mathbf{v}^n \frac{\partial \vec{u}^{n+1}}{\partial z} = \tau_w^{n+1}, & \text{at } z = \eta^n \\ \mathbf{v}^n \frac{\partial \vec{u}^{n+1}}{\partial z} = \chi^n U_b^{n+1}, & \text{at } z = -h \end{cases} \quad (22)$$

式中, 上标表示时间层, 隐格式因子 $1/2 \leq \theta < 1$, $\vec{u}_*(x, y, z, t^n)$ 为采用 ELM 法向后轨迹跟踪得到的流速值 (见 3.3.1 节), $\chi^n = C_D \left| \vec{u}_b^n \right|$ 。

方程式 (20) 中第二项和第三项的自由水位采用显格式求解, 式 (20) 的

Galerkin 加权余量离散的弱形式如下：

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} \phi_i \frac{\eta^{n+1} - \eta^n}{\Delta t} d\Omega + \theta [-\int_{\Omega} \nabla \phi_i U^{n+1} d\Omega \\
& + \int_{\Gamma_v} \phi_i \hat{U}_n^{n+1} d\Gamma_v + \int_{\bar{\Gamma}_v} \phi_i U_n^{n+1} d\bar{\Gamma}_v] \\
& + (1-\theta) [-\int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot U^n d\Omega + \int_{\Gamma} \phi_i U_n^n d\Gamma] = 0 \\
& (i = 1, \dots, N_p)
\end{aligned} \tag{23}$$

式中， N_p 为节点总数， $\Gamma \equiv \Gamma_v + \bar{\Gamma}_v$ 为求解域 Ω 的边界， Γ_v 对应于定义开边界条件的边界单元， $\bar{U} = \int_{-h}^{\eta} \bar{u} dz$ 为沿水深积分平均的流速矢量， \bar{U}_n 为沿边界处的法向流速分量， U_n 为边界条件。SELFIE 模型中使用线性形状函数，因此 ϕ_i 为传统的帽函数形式。

沿垂向对动量方程式（21）进行积分，有：

$$U^{n+1} = G^n - g\theta H^n \Delta t \nabla \eta^{n+1} - \chi^n \Delta t U_b^{n+1} \tag{24}$$

$$G^n = U_* + \Delta t [F^n + \tau_w^{n+1} - g(1-\theta) H^n \nabla \eta^n],$$

$$H^n = h + \eta^n, F^n = \int_{-h}^{\eta^n} f dz, U_* = \int_{-h}^{\eta^n} u_* dz \tag{25}$$

式（24）没有进行垂向的离散求解，仅为式（21）的解析积分式。

为消除式（24）中的未知量 \bar{u}_b^{n+1} ，需要在底部单元的顶层位置离散动量方程，

即在 $z = \delta_b - h$ 的位置：

$$\begin{aligned}
\frac{\bar{u}_b^{n+1} - \bar{u}_{*b}^n}{\Delta t} &= \vec{f}_b^n - g\theta \nabla \eta^{n+1} - g(1-\theta) \nabla \eta^n + \frac{\partial}{\partial z} (v^n \frac{\partial \bar{u}^{n+1}}{\partial z}), \\
& \text{at } z = \delta_b - h.
\end{aligned} \tag{26}$$

另外，因为底部边界层中没有粘性项（式 18），底层流速可采用下式求解：

$$\bar{u}_b^{n+1} = \hat{f}_b^n - g\theta \nabla \eta^{n+1} \tag{27}$$

其中，

$$\hat{f}_b^n = \vec{u}_{*b}^n + \vec{f}_b^n \Delta t - g\Delta t(1-\theta) \nabla \eta^n \tag{28}$$

尽管式（27）看起来没有垂向粘性项，但在 \bar{u}_{*b}^n 和科氏力项 \vec{f}_b^n 中存在粘性。

将式（27）代入式（24），可得：

$$\mathbf{U}^{n+1} = \hat{\mathbf{G}}^n - g\theta \hat{\mathbf{H}}^n \Delta t \nabla \eta^{n+1} \quad (29)$$

其中,

$$\hat{\mathbf{G}}^n = \mathbf{G}^n - \chi^n \Delta t \hat{\mathbf{f}}_b^n, \hat{\mathbf{H}}^n = \mathbf{H}^n - \chi^n \Delta t \quad (30)$$

从式 (30) 可以发现: 由于底部摩擦力作用, 总水深减小了 (数值意义上), 减小幅度与阻力系数和底层流速大小相关。

为了简化, SELFE 模型采用显格式求解科氏力项, Wicker and Skamarock(1998)指出: 显示求解科氏力项可引入阻尼现象(damping), 即好像阻力变大了。SELFE 模型也可以采用隐格式求解科氏力项, 在这种情况下, 式(29)中的水平流速分量 u 和 v 将存在耦合作用, 但采用式 (29) 也可同时求解水平流速分量。

由于 SELFE 模型采用线性形状函数求解自由水位高程和水平流速分量 u 和 v , 流速分量求解是在得到自由水位高程后, 根据动量方程分别独立求解 u 和 v 。这就意味着科氏力起到了比较重要的作用, 这与 ELCIRC 模型有很大的不同。

最后将式 (29) 代入式 (23) 即可得到仅含有自由水位高程 η 的方程式:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} [\phi_i \eta^{n+1} + g\theta^2 \Delta t^2 \hat{\mathbf{H}}^n \nabla \phi_i \cdot \nabla \eta^{n+1}] d\Omega - g\theta^2 \Delta t^2 \\ & \times \int_{\bar{\Gamma}_v} \phi_i \hat{\mathbf{H}}^n \frac{\partial \eta^{n+1}}{\partial n} d\bar{\Gamma}_v + \theta \Delta t \int_{\Gamma_v} \phi_i \hat{\mathbf{U}}_n^{n+1} d\Gamma_v = I^n \end{aligned} \quad (31)$$

式中, I^n 包含有一些显格式项:

$$\begin{aligned} I^n = & \int_{\Omega} [\phi_i \eta^n + (1-\theta)\Delta t \nabla \phi_i \cdot \mathbf{U}^n + \theta \Delta t \nabla \phi_i \cdot \hat{\mathbf{G}}^n] d\Omega \\ & - (1-\theta)\Delta t \int_{\Gamma} \phi_i \mathbf{U}_n^n d\Gamma - \theta \Delta t \int_{\Gamma_v} \phi_i \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{G}}^n d\bar{\Gamma}_v \end{aligned} \quad (32)$$

根据有限单元法的基本求解步骤, 首先需要采用合适的本质边界条件 (Dirichlet 边界) 和自然边界条件 (Riemann 边界) 在计算节点上求解式 (31) 得到自由水位高程。如果采用本质边界条件, 则不需要对 $\bar{\Gamma}$ 进行积分计算, 采用自然边界条件对式 (31) 左手边的 Γ_v 进行积分计算。由式 (31) 离散得到的系数矩阵为稀疏对称矩阵, 如果限定由摩阻引起的水深减小值 $\bar{H}^n \geq 0$, 则离散的系数矩阵为正定矩阵, 该矩阵可采用预处理的共轭梯度法进行有效率的求解 (Casulli and

Cattani, 1994)。

在求解得到自由水位高程后，SELFE 模型沿垂向水柱在单元边的中点处求解动量方程式 (3)。采用半隐格式的有限单元法求解，隐格式处理压力梯度项和垂向粘性项，其他各项采用显格式处理：

$$\begin{aligned} & \int_{-h}^{\eta} \gamma_k [\vec{u} - \Delta t \frac{\partial}{\partial z} (v \frac{\partial \vec{u}}{\partial z})]_{j,k}^{n+1} dz \\ &= \int_{-h}^{\eta} \gamma_k \{ \vec{u}_*^n + \Delta t [\vec{f}_{j,k}^n - g \theta \nabla \eta_j^{n+1} - g(1-\theta) \nabla \eta_j^n] \} dz \end{aligned} \quad (34)$$

式中， $\gamma_k(z)$ 为垂向的帽函数。

隐格式处理的两项（压力梯度项和垂向粘性项）需要施加最严格的稳定性限制条件。正压压力梯度项和水平粘性项采用显格式处理，只需要施加一般的稳定性限制条件（3.5 节）。

在求解得到所有单元边上的流速值后，ELM 法离散对流项还需要计算节点处的流速值：采用节点周围单元边的流速加权平均得到（水平向），垂向上采用合适的插值算法得到。ELM 法中采用加权平均或由最小二乘法拟合得到计算节点处流速的方法会引入数值扩散的问题（见 3.3.1 节），因为只有 ELM 法的逆向跟踪和插值需要用到节点处的流速，而其他部分的计算不需要节点处的流速值。加权平均计算得到节点流速在每个计算单元内由三条边上的流速采用线性形状函数计算得到，该方法又会产生数值震荡的问题，SELFE 模型采用 Shapiro 过滤法消除误差(Shapiro, 1970)，最大程度地降低数值求解对真实物理现象的扭曲。

在静水压力模式下垂向流速由三角形棱柱体内的水量质量平衡计算得到（与 ELCIRC 模型相同），垂向流速在河床或海床坡度较大时将是一个重要的物理量 (Zhang et al., 2004)，会产生动水压力的情况，此时需要采用动水压力模式进行求解。下面对 SELFE 模型中的静水压力模式和动水压力模式（并行版 SELFE 模型）进行介绍。

4.2.1 静水压力模式计算

静水压力模式下采用有限体积法对三角形棱柱体计算得到垂向流速 w （如图 4），假设垂向流速 w 在计算单元体 i 内为常值，有：

$$\begin{aligned}
& \hat{S}_{k+1} (\bar{u}_{k+1}^{n+1} n_{k+1}^x + \bar{v}_{k+1}^{n+1} n_{k+1}^y + w_{i,k+1}^{n+1} n_{k+1}^z) \\
& - \hat{S}_k (\bar{u}_k^{n+1} n_k^x + \bar{v}_k^{n+1} n_k^y + w_{i,k}^{n+1} n_k^z) \\
& + \sum_{m=1}^3 \hat{p}_{js(i,m)} (\hat{q}_{js(i,m),k}^{n+1} + \hat{q}_{js(i,m),k+1}^{n+1}) / 2 = 0 \\
& (k = k^b, \dots, N_z - 1)
\end{aligned} \tag{35}$$

式中, \bar{S} 和 \bar{P} 为三角形棱柱体上下两个面的面积和侧面三个面的面积, (n^x, n^y, n^z) 为法向向量 (方向向上), \bar{u} 和 \bar{v} 为顶部和底部两个面的平均水平向流速, \bar{q} 为每条边中点处的外方向法向流速。

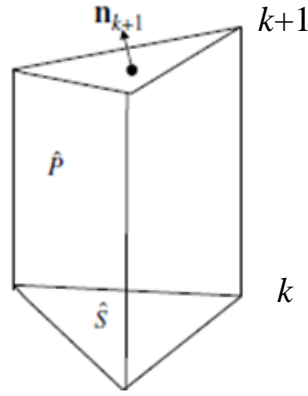


图 4 三角形棱柱体示意图(Zhang et al., 2008)

垂向流速将由河床底部向自由水面进行求解, 需要用到底部边界条件, 即底部的法向流速为零 ($\vec{n} \cdot (u, v, w) = 0$)。在自由水面处计算得到的垂向流速 w 与水面变化的边界条件之间的不一致造成局部控制体质量不守恒, 因为是在 Z 坐标下求解连续方程, 该误差可忽略不计。

SELFIE 模型在浅水区域随着水位波动需要采取干湿边界处理, 计算节点处的总水深 H 在设定的最小水深或虚拟水深 h_0 之上 (之下), 则认为该计算节点为湿 (干) 节点, 干湿处理方式与 ELCIRC 模型相似, 可参考 ELCIRC 模型的原理介绍内容。

4.2.2 动水压力模式计算

动量方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} + w \frac{\partial u}{\partial z} = fv - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} + K_{mh} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial u}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + w \frac{\partial v}{\partial z} = -fu - \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} + K_{mh} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial v}{\partial z} \right)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} + u \frac{\partial w}{\partial x} + v \frac{\partial w}{\partial y} + w \frac{\partial w}{\partial z} = -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} + K_{mh} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{\rho}{\rho_0} g$$

当不能忽略垂向水流运动情况时，动量方程中的压强将由静水压强、斜压项和动水压强三部分构成：

$$p = g \int_z^{Z_{mi}+\eta} \rho_0 dz + g \int_z^{Z_{mi}+\eta} (\rho - \rho_0) dz + \rho_0 q$$

式中， q 为动水压强（ m^2/s^2 ）。斜压项在海洋模型中由于咸水存在很明显的密度差而不可忽略，在河流计算中由于水体密度差异很小可以被忽略。

因此，三维动量方程中的压力梯度项可写为：

$$\begin{cases} -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial x} = -g \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^{Z_{mi}+\eta} \frac{\partial \rho}{\partial x} dz - \frac{\partial q}{\partial x} \\ -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial y} = -g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^{Z_{mi}+\eta} \frac{\partial \rho}{\partial y} dz - \frac{\partial q}{\partial y} \\ -\frac{1}{\rho_0} \frac{\partial p}{\partial z} = -\frac{g}{\rho_0} \int_z^{Z_{mi}+\eta} \frac{\partial \rho}{\partial z} dz - \frac{\partial q}{\partial z} = \frac{\rho}{\rho_0} g - \frac{\partial q}{\partial z} \end{cases}$$

将上式代入三维动量方程组，可得到考虑动水压强的新的动量方程：

$$\frac{du}{dt} = fv - g \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^{Z_{mi}+\eta} \frac{\partial \rho}{\partial x} dz + K_{mh} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial u}{\partial z} \right) - \frac{\partial q}{\partial x}$$

$$\frac{dv}{dt} = -fu - g \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{g}{\rho_0} \int_z^{Z_{mi}+\eta} \frac{\partial \rho}{\partial y} dz + K_{mh} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial v}{\partial z} \right) - \frac{\partial q}{\partial y}$$

$$\frac{dw}{dt} = K_{mh} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{mv} \frac{\partial w}{\partial z} \right) - \frac{\partial q}{\partial z}$$

考虑动水压强的情况下，动量方程的离散：

$$A_j^n U_j^{n+1} = G_j^n - \theta_1 g \frac{\Delta t}{\delta_j} [\eta_{is(j,2)}^{n+1} - \eta_{is(j,1)}^{n+1}] \Delta Z_j^n - \theta_2 \Delta t \frac{q_{is(j,2),k}^{n+1} - q_{is(j,1),k}^{n+1}}{\delta_j} \Delta Z_{j,k}^n \quad (1)$$

$$A_j^n V_j^{n+1} = F_j^n - \theta g \frac{\Delta t}{l_j} [\eta_{ip(j,2)}^{n+1} - \eta_{ip(j,1)}^{n+1}] \Delta Z_j^n - \theta_2 \Delta t \frac{q_{ip(j,2),k}^{n+1} - q_{ip(j,1),k}^{n+1}}{l_j} \Delta Z_{j,k}^n \quad (2)$$

$$B_i^n W_i^{n+1} = E_i^n - \theta_2 \Delta t (q_{i,k+1}^{n+1} - q_{i,k}^{n+1}) \quad (3)$$

其中， G_j^n 、 F_j^n 、 E_i^n 为所有显格式项的向量。

U_j^{n+1} 、 V_j^{n+1} 和 W_i^{n+1} 的形式如下：

$$U_j^{n+1} = \begin{bmatrix} u_{j,M_j}^{n+1} \\ \dots \\ u_{j,m_j}^{n+1} \end{bmatrix}, \quad V_j^{n+1} = \begin{bmatrix} v_{j,M_j}^{n+1} \\ \dots \\ v_{j,m_j}^{n+1} \end{bmatrix}, \quad W_j^{n+1} = \begin{bmatrix} w_{j,M_j+1/2}^{n+1} \\ \dots \\ w_{j,m_j-1/2}^{n+1} \end{bmatrix}, \quad \Delta Z_j^n = \begin{bmatrix} \Delta z_{j,M_j}^n \\ \dots \\ \Delta z_{j,m_j}^n \end{bmatrix}$$

水平向动量方程的系数矩阵相同为 A_j ，垂向动量方程的系数矩阵为 B_i 。

以上离散公式的系数矩阵为对称正定矩阵，可用雅克比共轭梯度法求解 Casulli and Zanolli (1998)。

由于 θ 隐式因子对模型计算的稳定性和计算精度有明显的影响，一般取值在 0.5-1.0 之间。SELFIE 模型中水位和动水压强的计算均采用相同的 θ 隐式因子，但水位 η 计算的隐式因子取决于静水压强步计算中的快速表面重力波影响的强弱，而动水压强 q 的隐式因子取决于垂向的水流运动尺度，胡德超(2009)对于水位 η 和动水压强 q 的计算采用不同的隐式因子，来缓解两者之间的矛盾。

静水压力步计算

与 ELCirc 模型计算相似，计算得到临时计算三维流速和水位：

$$\bar{U}_j^{n+1} = [A_j^n]^{-1} G_j^n - \theta g \frac{\Delta t}{\delta_j} [\bar{\eta}_{is(j,2)}^{n+1} - \bar{\eta}_{is(j,1)}^{n+1}] [A_j^n]^{-1} \Delta Z_j^n \quad (5)$$

$$\bar{V}_j^{n+1} = [A_j^n]^{-1} F_j^n - \theta_1 g \frac{\Delta t}{l_j} [\bar{\eta}_{is(j,2)}^{n+1} - \bar{\eta}_{is(j,1)}^{n+1}] [A_j^n]^{-1} \Delta Z_j^n \quad (6)$$

$$\bar{W}_i^{n+1} = [B_i^n]^{-1} E_i^n \quad (7)$$

水位波动方程也采用 θ 半隐式离散求解，离散形式如下：

$$\bar{\eta}_i^{n+1} = \eta_i^n - \frac{\theta_1 \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} [\Delta Z_{jsj}^n]^T \bar{U}_{jsj}^{n+1} - \frac{(1-\theta_1) \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} [\Delta Z_{jsj}^n]^T U_{jsj}^n \quad (17)$$

将水平向动量离散公式代入水位波动离散公式，可得水位波动求解的二维 Poisson 方程：

$$\begin{aligned} \bar{\eta}_i^{n+1} &= \frac{g \theta_1^2 \Delta t^2}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} \frac{s_{i,l} l_{jsj}}{\delta_{jsj}} [\Delta Z_{jsj}^n]^T [A_{jsj}^n]^{-1} \Delta Z_{jsj}^n [\eta_{is(jsj,2)}^{n+1} - \eta_{is(jsj,1)}^{n+1}] \\ &= \eta_i^n - \frac{(1-\theta_1) \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} [\Delta Z_{jsj}^n]^T \bar{U}_{jsj}^n - \frac{\theta_1 \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} [\Delta Z_{jsj}^n]^T [A_{jsj}^n]^{-1} G_{jsj}^n \end{aligned} \quad (18)$$

求得临时计算水位波动值 $\bar{\eta}_i^{n+1}$ 后, 代入动量方程式 (5)、(6), 计算得出临时流速 \bar{u}^{n+1} 、 \bar{v}^{n+1} 。

垂向流速 \bar{w}^{n+1} 通过连续性方程求出, 可保证整体的质量守恒, 计算公式如下:

$$\bar{w}_{i,k}^{n+1} = \bar{w}_{i,k-1}^{n+1} - \frac{1}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,k}^n \bar{u}_{jsj,k}^{n+1} \quad k=m_i^e, \dots, M_i^e \quad (19)$$

动水压力步计算

在表层和表层以下各层两部分分别进行动水压强值的计算, 表层动水压强记为 q_M 。假定表面符合静水压强假定, 然后利用计算得到的 q_M 对自由水面和各层的动水压强进行修正, 修正后的表层动水压强即转化为零, 这样计算的动水压强场的物理意义合理, 较传统的直接将表层动水压强值设置为零更合理。进行 q_M 修正前的临时计算动水压强记为 \bar{q} 。

在静水压强步计算得到 $n+1$ 时刻的临时计算流场 \bar{u}^{n+1} 、 \bar{v}^{n+1} 、 \bar{w}^{n+1} 的基础上, 利用三维流速与动水压强的隐式关系 (如式 20~式 22), 计算 $n+1$ 时刻的更新后的三维流速值 u^{n+1} 、 v^{n+1} 、 w^{n+1} :

$$u_{j,k}^{n+1} = \bar{u}_{j,k}^{n+1} - \theta_2 \Delta t \frac{\bar{q}_{is(j,2),k}^{n+1} - \bar{q}_{is(j,1),k}^{n+1}}{\delta_j} \quad (20)$$

$$v_{j,k}^{n+1} = \bar{v}_{j,k}^{n+1} - \theta_2 \Delta t \frac{\bar{q}_{ip(j,2),k}^{n+1} - \bar{q}_{ip(j,1),k}^{n+1}}{l_j} \quad (21)$$

$$w_{j,k}^{n+1} = \bar{w}_{j,k+1/2}^{n+1} - \theta_2 \Delta t \frac{\bar{q}_{i,k+1}^{n+1} - \bar{q}_{i,k}^{n+1}}{\Delta z_{i,k+1/2}^n} \quad (22)$$

动水压强计算步中, 自由水位波动方程的离散形式如下:

$$\begin{aligned} \eta_i^{n+1} = & \eta_i^n - \frac{\theta_1 \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \sum_{k=m_j}^{M_j} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^{n+1}] \\ & - \frac{(1-\theta_1) \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \sum_{k=m_j}^{M_j} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^n] \end{aligned} \quad (8)$$

除了自由水面以下的各分层, 连续性方程可离散为:

$$\sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^{n+1} + P_i (w_{i,k+1/2}^{n+1} - w_{i,k-1/2}^{n+1}) = 0, \quad k=m_j, \dots, M_j \quad (9)$$

令底层的垂向流速为零，即 $w_{i,m-1/2}^{n+1} = 0$ ，并将式（8）代入式（9），可得：

$$\begin{aligned} \eta_i^{n+1} = & \eta_i^n - \frac{\theta_1 \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,M_j}^n u_{jsj,M_j}^{n+1}] + \theta_1 \Delta t w_{i,M_j-1/2}^{n+1} \\ & - \frac{(1-\theta_1) \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \sum_{k=m_j}^{M_j} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^n] \end{aligned} \quad (10)$$

表层符合静水压强分布假定，则表层压强可由下式计算：

$$q_{i,M_j}^{n+1} = g(\eta_i^{n+1} - z_{M_j}) = g(\bar{\eta}_i^{n+1} - z_{M_j}) + \bar{q}_{i,M_j}^{n+1} \quad (11)$$

由式（11）可得：

$$g P_i \eta_i^{n+1} = P_i \bar{q}_{i,M_j}^{n+1} + g P_i \bar{\eta}_i^{n+1} \quad (12)$$

将式（12）代入式（10），可得：

$$\begin{aligned} \bar{q}_{i,M_j}^{n+1} = & g(\eta_i^n - \bar{\eta}_i^{n+1}) - \frac{g \theta_1 \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,M_j}^n u_{jsj,M_j}^{n+1}] + g \theta_1 \Delta t w_{i,M_j-1/2}^{n+1} \\ & - \frac{g(1-\theta_1) \Delta t}{P_i} \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \sum_{k=m_j}^{M_j} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^n] \end{aligned} \quad (13)$$

将式（20）和式（22）计算得到的 $u_{j,k}^{n+1}$ 、 $w_{j,k}^{n+1}$ 代入式（13）并联立连续性方程离散公式（9），可得到表层及表层以下各水层的动水压强计算方程式：

$$\begin{aligned} & \theta_1 \theta_2 \Delta t^2 \left[\sum_{l=1}^{i34(i)} l_{jsj} \Delta z_{jsj,M_j}^n \frac{\bar{q}_{is(j,2),k}^{n+1} - \bar{q}_{is(j,1),k}^{n+1}}{\delta_j} + P_i \frac{\bar{q}_{i,M_j}^{n+1} - \bar{q}_{i,M_j-1}^{n+1}}{\Delta z_{i,M_j-1/2}^n} \right] + \frac{P_i}{g} \bar{q}_{i,M_j}^{n+1} \\ & = \theta_1 \Delta t P_i w_{i,M_j-1/2}^{n+1} - \theta_1 \Delta t \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,M_j}^n \bar{u}_{jsj,k}^{n+1} + P_i (\eta_i^n - \bar{\eta}_i^{n+1}) \end{aligned} \quad (14)$$

$$-(1-\theta_1) \Delta t \sum_{l=1}^{i34(i)} [s_{i,l} l_{jsj} \sum_{k=m_j}^{M_j} \Delta z_{jsj,k}^n u_{jsj,k}^n] \quad k=M_j \text{ (表层)}$$

$$\begin{aligned} & \theta_1 \theta_2 \Delta t^2 \left[\sum_{l=1}^{i34(i)} l_{jsj} \Delta z_{jsj,k}^n \frac{\bar{q}_{is(j,2),k}^{n+1} - \bar{q}_{is(j,1),k}^{n+1}}{\delta_j} + P_i \left[\frac{\bar{q}_{i,k}^{n+1} - \bar{q}_{i,k+1}^{n+1}}{\Delta z_{i,k+1/2}^n} + \frac{\bar{q}_{i,k}^{n+1} - \bar{q}_{i,k-1}^{n+1}}{\Delta z_{i,k-1/2}^n} \right] \right] \\ & = \theta_1 \Delta t P_i (w_{i,k-1/2}^{n+1} - w_{i,k+1/2}^{n+1}) - \theta_1 \Delta t \sum_{l=1}^{i34(i)} s_{i,l} l_{jsj} \Delta z_{jsj,k}^n \bar{u}_{jsj,k}^{n+1} \quad k=m_j, \dots, M_j - 1 \end{aligned} \quad (15)$$

式(14)和式(15)即为求解动水压强的三维 Poisson 方程。比较静水压强计算步的二维 Poisson 方程和此处的三维 Poisson 方程，可发现：二维水位 Poisson 方程

描述的是平面上相邻单元间的水量交换关系，而三维 Poisson 方程描述的是相邻单元体间的动水压强通量的交换关系。二维和三维的 Poisson 方程的系数矩阵均为对称正定稀疏矩阵，严格满足对角占优，方程解唯一，可以用雅克比预处理共轭梯度法求解。

在采用式(13)求得 $n+1$ 时刻的临时计算动水压强 \bar{q}^{n+1} 后，代入式(20)、式(21)求得水平流速 u^{n+1} 、 v^{n+1} ，然后可选择式(19)或者式(22)计算垂向流速 w^{n+1} ，选择式(19)计算可严格保证质量守恒。

求得 $n+1$ 时刻的临时计算动水压强 \bar{q}^{n+1} 后，可采用下式对自由水位进行修正 (Casulli and Zanolli, 2002)：

$$\eta_i^{n+1} = \bar{\eta}_i^{n+1} + \bar{q}_{i,M_j}^{n+1} / g \quad (16)$$

表层以下的各水层的总压力可表示为： $q_{i,k}^{n+1} = g(\bar{\eta}_i^{n+1} - z_k) + \bar{q}_{i,k}^{n+1}$ 和 $q_{i,k}^{n+1} = g(\eta_i^{n+1} - z_k) + q_{i,k}^{n+1}$ ，联立可求得各层动水压强值：

$$q_{i,k}^{n+1} = \bar{q}_{i,k}^{n+1} - g(\eta_i^{n+1} - \bar{\eta}_i^{n+1}) \quad (17)$$

胡德超(2009)指出 Casulli 的这种计算方法有计算水量不守恒的问题，会引起计算精度下降或计算崩溃的问题，并采用了对表层计算动水压强的正值和负值的总和的比值为限制因子，对 Casulli 方法进行了修正。

动水压力模型的计算步骤

动水压力的求解是基于静水压力的基础上进行的，SELF 模型的计算大部分与 ELCirc 模型相似，具体计算步骤如下：

- (1) 读入网格及计算参数数据，初始化模型的一些计算变量；
- (2) 采用 ELM 法计算三维流速，采用紊流模型计算扩散系数；
- (3) 计算静水压力假设下的动量方程、连续性方程、水位波动方程，求解得出临时计算水位 $\bar{\eta}^{n+1}$ 和临时计算流速 \bar{u}^{n+1} 、 \bar{v}^{n+1} 和 \bar{w}^{n+1} ；

(4) 根据建立的流速与动水压强之间的关系式，联立连续性方程和自由水面方程求解动水压强的三维 Poisson 方程，获得各单元层的临时计算动水压强 \bar{q}^{n+1} ；

(5) 利用临时计算动水压强 \bar{q}^{-n+1} 计算得到修正后的 u^{n+1} 、 v^{n+1} 和 w^{n+1} ，并修正各单元层的动水压强得到新的 q^{n+1} ；

(6) 进一步利用表层动水压强 \bar{q}_M^{-n+1} 修正自由水位，计算得到新的水位值 η^{n+1} 。

4.3 显格式处理项

4.3.1 对流项

SELFE 模型采用欧拉-拉格朗日(ELM)法处理动量方程和物质输送方程中的对流项。ELM 法的基本原理是：采取在特征线根部插值的方法，在 $n+1$ 时层在时间和三维空间上向后跟踪流体质点（粒子）找到 n 时层的初始位置。在 SELFE 模型中，逆向跟踪算法可采用欧拉方法或计算精度更高但计算量较大的 5 阶龙格-库塔法(Press et al., 1992)。后一种方法对于物质质量守恒要求较高的情况，因为跟踪计算误差会影响质量守恒(Oliveria and Baptista, 1998)。

ELM 法中采用的插值算法的阶数决定了截断误差是扩散型的还是耗散型的(Oliveira and Baptista, 1995)，采用线性插值计算流速，插值计算是利用三角形单元三个节点处的流速在特征线根部进行。一维意义上，ELM 跟踪计算引起的扩散型截断误差(Baptista et al., 2005)，其主要项为：

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= \frac{V'_*}{2\Delta t}(x_{i+1} - x_*)(x_* - x_i) \\ &= \frac{\Delta x^2}{2\Delta t} V'_*[C_u](1 - [C_u])|\varepsilon_1| \leq \frac{\Delta x^2}{8\Delta t} |V''_*|,\end{aligned}\quad (36)$$

式中， v 为流速的解析解， $x = x_*$ 为特征线根部的位置， $[x_i, x_{i+1}]$ 为特征线根部的插值计算区间， $[C_u]$ 为 Courant 数 $C_u = v\Delta t / \Delta x$ 的小数部分。

因为在特征线根部插值计算区间内的两个计算节点上的流速是由加权平均计算得到（见 3.2 节介绍），因此也存在截断误差，其主要项为：

$$\varepsilon_2 = \frac{\Delta x^2}{8\Delta t} V''_* \quad (37)$$

以上两个截断误差 ε_1 和 ε_2 的量级相同。

式（36）中的数值扩散误差可由 Courant 数进行控制，当 $[C_u]=0$ 时，误差控

制失效，当 $C_u \geq 1$ 时数值计算精度达到最高，当 Courant 数较小时，数值扩散误差将变得非常大，该种情况下需要采用较大的计算时间步长和较小的网格尺寸。数值扩散误差也可以使用 Shapiro 过滤后的 ELM 计算得到不连续节点流速进行控制。

物质输移方程中的对流项也可以采用 ELM 法处理，但插值计算采用线性插值的话会引起过量的扩散误差，因此一般采用二次插值以减小扩散误差(Zhang et al., 2004)。

4.3.2 水平粘性项

许多环流模式依靠显格式处理水平粘性项和扩散项来消除数值振荡，也有学者利用滤波的方法来抑制次网格噪音。无论采用显格式还是隐格式来离散扩散项，目的都是为了消除数值振荡。

在 SELFE 中忽略了物质输移方程(4)和(5)中的水平扩散项，因为 ELM 法或迎风格式(FVUM)中本身的数值扩散足以消除高频的数值震荡(Zhang et al., 2004)。SELFE 模型也选择性地不计算水平粘性项，因为 ELM 法的数值扩散或 Shapiro 过滤均可有效减小数值震荡。也可采用下式计算水平粘性项，对应于 I^n 中的部分为：

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \nabla \phi_i \cdot \hat{G}' d\Omega &= \Delta t \nabla \phi_i \\ \cdot \int_{\Omega} [\int_{-h}^{\eta} \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{u}) dz - \chi \Delta t \nabla \cdot (\mu \nabla \vec{u}_b)] d\Omega &= \Delta t \nabla \phi_i \\ [\int_s \mu \vec{n} \cdot \nabla \vec{u} dS - \bar{\chi} \Delta t \int_{s'} \mu \vec{n} \cdot \nabla \vec{u}_b dS'] \end{aligned} \quad (38)$$

式中， $\bar{\chi}$ 表示 χ 的平均值， s' 为节点 i 周围插值计算区域的边界， S 为由河床到水面之间节点周围进行插值计算域的外表面面积。

在 Z 坐标平面内计算上式中 $\nabla \vec{u}$ 梯度项，可采用下式计算：

$$\left. \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} \right|_z = \left. \frac{\partial \vec{u}}{\partial x} \right|_{\sigma} - \frac{\partial \vec{u}}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial x} \quad (39)$$

水平粘性系数 μ 一般取常值或由 Smagorinsky 模型计算得到(可参考 ELCIRC 模型介绍)。但是由于式 (36) 中对流项的主要截断误差项，SELFE 模型采用下面的另一种方法计算水平粘性系数 μ ：

$$\mu = \gamma \frac{A}{\Delta t} \quad (40)$$

式中， A 为局部单元面积， γ 为无量纲参数，为了稳定性原因，一般取 $\gamma \leq 0.5$ 。

4.3.3 斜压梯度项

所有采用地形跟踪坐标的海洋动力学模型都会遇到静水压力不一致的问题，这是由于地形跟踪坐标不符合地球重力势造成的。一些研究者采用在 Z 坐标系下求解斜压力梯度项(Fortunato and Baptista,1996)或利用更高阶数的数值格式求解(Shchepetkin and McWilliams, 2003)，这些方法仅对一些理想算例有效，但算例中没有实际情况下的混掺现象，仅与一些解析解符合良好。**SELF**E 中在垂向上采用 **SZ** 混合坐标系可有效减小静水压力不一致的问题，因为深水区的垂向网格采用 Z 坐标，符合地球重力势，在很大一部分水深上（ Z 坐标系内）不会有静压不一致的问题，**SELF**E 模型在靠近水面附近的 S 坐标系内采用以下方法计算斜压力梯度：（1）垂向采用三次样条插值计算密度梯度；（2）在靠近河床和水面附近区域采用内插计算，而不是外推计算。以上两种方法可得到较理想的计算结果。

4.4 斜压模式

SELFE 模型的核心模块是斜压求解模块，除此以外还要求解物质输移方程和紊流封闭方程。物质输移方程中的对流项是最要物理过程，**SELF**E 模型采用 **ELM** 法或迎风格式处理物质输移方程中的对流项。采用 **ELM** 法时，则采用有限单元法在节点处和单元边的中点处求解物质输移方程，分块化离散后的系数矩阵减小数值求解扩散。3.3.1 节中已介绍了 **ELM** 法中插值算法的阶数非常重要，采用线性插值引起过度的数值扩散，为了减小数值扩散，**SELF**E 模型中的 **ELM** 法中采用了二次插值算法(Zhang et al., 2004)。

（1）采用 **ELM** 求解法，但不能保证质量守恒

浓度在节点和垂向分层的中间点上采用有限体积法求解，**ELM** 法中需要做插值运算，插值算法的阶数对计算精度影响很大，当采用线性插值时容易引起数值耗散，为减小数值耗散，**SELF**E 模型中采用二次方插值算法(Zhang et al., 2004)。

（2）迎风求解法(FVUM)

尽管 **ELM** 计算效率很好，但没有考虑质量守恒(Oliveira and Baptisa, 1998)。

而迎风格式可保证计算的质量守恒。迎风求解法中浓度变量在棱柱中心处定义 (i,k) ，三角形棱柱体有五个面，定义顶层和底层单元面的面积为 $\bar{S}_{i,k}$ 和 $\bar{S}_{i,k-1}$ ，其它三个侧面的面积为 $\bar{P}_{jsj,k}$ ，物质输移方程的离散形式为：

$$\begin{aligned} & T_{i,k}^{n+1} V_{i,k}^n + \Delta t (u_n)_{i,k}^{n+1} \bar{S}_{i,k} T_{up(i,k)}^{n+1} + \Delta t (u_n)_{i,k-1}^{n+1} \bar{S}_{i,k-1} T_{up(i,k-1)}^{n+1} \\ & = \Delta t A_i \left[\kappa_{i,k}^n \frac{T_{i,k+1}^{n+1} - T_{i,k}^{n+1}}{\Delta z_{i,k+1/2}^n} - \kappa_{i,k-1}^n \frac{T_{i,k}^{n+1} - T_{i,k-1}^{n+1}}{\Delta z_{i,k-1/2}^n} \right] \\ & + V_{i,k}^n (T_{i,k}^n + \Delta \cdot \Delta t) - \Delta t \sum_{l=1}^3 q_l^{n+1} T_{up(jsj,k)}^n \\ & (k = k^b + 1, \dots, N_z) \end{aligned} \quad (41)$$

式中， $up()$ 代表迎风格式项， $V_{i,k}$ 为棱柱体体积， u_n 为外法向流速， $jsj = js(i,l)$ 为三条边， $q_l^{n+1} = \bar{P}_{jsj,k} (u_n)_{jsj,k}^{n+1}$ 为三个水平对流通量。 κ 为物质输移方程的紊动扩散系数 (m^2/s)。

为保证迎风格式的稳定性，需要进行 Courant 数限制：

$$\Delta t \leq \frac{V_{i,k}}{\sum_{j \in S^+} |q_j|} \quad (42)$$

式中， S^+ 表示所有出流的棱柱体的水平方向面。方程 2 中的左手边的垂向对流通量采用显式计算，式 (3) 的分母包括顶层和底层的出流面 (Casulli and Zanolli, 2005)。但当在顶层和底层的出流面上的对流通量采用隐式求解时， S^+ 将不包括顶层和底层的面，这时可忽略对流通量计算的严格稳定限制。式 (3) 的稳定限制条件可能过于严格，因此在一个时间步 Δt 内进行进一步的分步计算 $\Delta t / nsub$ 。FVUM 可保证质量守恒和最大值原则（求解受到初始条件和边界条件的最大值和最小值的限制 (Casulli and Zanolli, 2005)，因此较 ELM 法有优势。为进一步减小数值扩散，SELFIE 模型中还采用了高阶的有限体积 TVD 格式。

SELFIE 模型采用有限单元法在节点处沿垂向求解紊流封闭方程 (式 6 和式 7)。采用隐格式求解封闭方程中的混掺项和耗散项，但紊动能产生项和浮力项可选择使用显格式或隐格式进行求解，这取决于各自的贡献率大小 (Zhang et al., 2004)。紊流封闭方程中的对流项相对其他各项较小，SELFIE 模型中忽略了对流项的作用。

4.5 数值稳定性

假设网格分布均匀可以得到理想的模型稳定性限制条件分析, 由于离散后的系数矩阵结构两个模型 (ELCIRC 模型和 SELFIE 模型) 相同, 因此稳定性限制条件也相同。研究表明当半隐格式因子 $1/2 \leq \theta < 1$ 时, SELFIE 模型的计算精度达到最高 (Casulli and Cattani, 1994)。斜压项和水平粘性项的显格式离散对计算时间步和网格尺寸产生稳定性限制。SELFIE 模型的斜压项稳定性条件如下 (Zhang et al., 2004):

$$\frac{\Delta t \sqrt{g' h}}{\Delta_{xy}} \leq 1 \quad (43)$$

$$g' = g \frac{\Delta \rho}{\rho_0} \quad (44)$$

式中, g' 为由于密度分层引起的重力加速度减小值。

水平粘性项的稳定性与局部扩散系数有关 (Casulli and Cheng, 1992):

$$\frac{\mu \Delta t}{\Delta_{xy}^2} \leq \frac{1}{2} \quad (45)$$

注意式 (43) 和式 (45) 的限制作用比 CFL 条件的限制作用要弱。式 (43) 中有内部波速项, 其幅度至少比表面波速要小一个量级, 因此 SELFIE 模型可以使用更大的计算时间步长值。

另外, 采用迎风格式求解物质输移方程 (式 42) 时需要施加额外的稳定性限制, 因此必须采用较小的时间步长值求解物质输移方程。

5 参考文献

Casulli V, Stelling G S. Numerical simulation of 3D quasi-hydrostatic, free-surface flows, ASCE J. Hydraul. Eng., 1998: 124(7):678-686.

Casulli V. A semi-implicit finite difference method for non-hydrostatic, free-surface flows[J]. International Journal for Numerical Methods in Fluids 1999, 30(4):425-440.

Song, Y., Haidvogel, D., 1994. A semi-implicit ocean circulation model using a generalized topography-following coordinate system. J. Comput. Phys. 115, 228-244.

