

DOI:10.19322/j.cnki.issn.1006-4710.2018.03.011

湿地污染物迁移扩散数值模拟

王丹丹¹, 冯民权¹, 孙小平², 焦 梦¹

(1. 西安理工大学 西北旱区生态水利工程国家重点实验室培育基地, 陕西 西安 710048;

2. 山西省水利水电科学研究院, 山西 太原 030002)

摘要: 为研究湿地对污染物的迁移降解效果,以汾河一坝人工湿地为研究区域进行研究。基于现有自然湿地,采用湿地生态动力学模型,分析了氨氮、总磷在湿地中的迁移降解情况。通过模拟,发现污染物随水流向出口推移其浓度逐渐降低,氮磷污染物的变化规律基本一致。模拟时间 3 h 污染物影响带到达出口,氨氮降解率为 43.3%,总磷降解率为 30.9%。该模型考虑了污染物的形态细致划分和转化途径,对认识污染物在湿地中的迁移规律有重要意义。

关键词: 湿地; 生态动力学模型; 数值模拟

中图分类号: X52 **文献标志码:** A **文章编号:** 1006-4710(2018)03-0314-07

Numerical simulation of migration and diffusion of pollutants in wetland

WANG Dandan¹, FENG Minquan¹, SUN Xiaoping², JIAO Meng¹

(1. State Key Laboratory Base of Eco-hydraulic Engineering in Arid Area, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China; 2. Shanxi Province Water Resources and Hydropower Research Institute, Taiyuan 030002, China)

Abstract: To study the migration and degradation of pollutants in wetlands, the artificial wetlands of Dam No. 1 of Fen River is studied. Based on the existing natural wetland conditions, the wetland ecological dynamics model is used to analyze the migration and degradation of ammonia nitrogen and total phosphorus in wetland. Through the simulation, it is found that the concentration of pollutants decreased gradually with the flow of water, and that the changes of nitrogen and phosphorus pollutants are basically the same. Pollutant influence ranges to the exit when the simulation time is 3 hours. The degradation rate of ammonia nitrogen is 43.3% and the degradation rate of total phosphorus 30.9%. The model takes into account the meticulous division and transformation of pollutants, which is of great significance to understand the migration laws of pollutants in wetlands.

Key words: wetland; ecological dynamics model; numerical simulation

近年来,湿地由于低投资、低耗能和美观等特点,广泛应用于不同水体的水质净化和水环境富营养化防治中,取得了良好的环境经济效益^[1-2],构建人工湿地已成为恢复生态水质的关键措施之一。各国学者对于湿地中污染物去除通常采用数学模型进行量化研究,常用的 4 种模型即衰减方程模型、一级动力学模型、Monod 模型以及生态动力学模型。西澳大学水环境研究中心构建了 CAEDYM 模型,确立了 C、N、DO 等的循环过程,为污染物转化提供了依据^[3];Vymazal^[4]通过生态动力学模型得到不同季节人工湿地中 TN、TP 等的去除率,作为人工

湿地运行的参考依据。国内学者李亚静等^[5]通过实验与 STELLA 系统动力学的结合得到了垂直流人工湿地脱氮效果,为废水出水浓度预测提供了依据基础;唐美珍等^[6]采用 Monod 动力学模型对复合垂直流人工湿地污染物的去除效果进行了模拟验证,得到了最优水力停留时间关系曲线;王子珏等^[7]建立了生态动力学模型对湿地中氮素的迁移转化进行模拟,确定了湿地除氮机制;付国楷等^[8]通过一级反应动力学研究不同人工湿地形式对城市污水厂二级出水中的污染指标的去除率,得到其最优负荷下的去除率及最优人工湿地形式。

收稿日期: 2017-04-08

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(51679191);山西省水利科学技术研究与推广资助项目(2014-6)

作者简介: 王丹丹,女,硕士生,研究方向为水环境模拟与预测。E-mail:810394144@qq.com

通讯作者: 冯民权,男,教授,博导,博士,研究方向为水环境模拟与污染控制。E-mail:mqfeng@xaut.edu.cn

脱氮、除磷效果是目前湿地研究的重点,但大多数研究没有全面掌握污染物去除的内在机制和氮磷污染物在湿地中的迁移分布规律。本研究基于对人工湿地中污染物形态的细致划分,同时考虑到湿地系统中的协调和拮抗作用,对每一个污染物的转化均采用独立的方程与相应参数进行描述,能够更为系统、准确的对氮、磷输运及其分布规律进行模拟预测。

1 理论与方法

1.1 模型控制方程

模型的控制方程由水动力和水质两个模块组成:其中水动力控制方程指水平尺度远大于垂直尺度时,水深、流速等水力参数沿垂直方向的变化很小。因此,三维流动的控制方程沿水深积分并取水深平均,得到二维质量和动量守恒控制方程组。

质量守恒方程为:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial q}{\partial y} = \frac{\partial d}{\partial t} \quad (1)$$

x 方向动量方程为:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{p^2}{h} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{pq}{h} \right) + gh \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{gp}{c^2 h^2} \sqrt{p^2 + q^2} - \Omega \cdot p - f(V) \cdot V \cdot V_x = 0 \quad (2)$$

y 方向动量方程为:

$$\frac{\partial q}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{q^2}{h} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{pq}{h} \right) + gh \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{gq}{c^2 h^2} \sqrt{p^2 + q^2} - \Omega \cdot q - f(V) \cdot V \cdot V_y = 0 \quad (3)$$

式中: $h(x, y, t)$ 为水深(m); d 为净水深(m); $\xi(x, y, t)$ 为自由水面水位(m); $p(x, y, t)$ 、 $q(x, y, t)$ 为 x 、 y 方向的单宽流量($\text{m}^3/(\text{s} \cdot \text{m})$); $C(x, y)$ 为Chezy阻力系数($\text{m}^{1/2}/\text{s}$); g 为重力加速度(m/s^2); $f(V)$ 为风摩擦因数; $\Omega(x, y)$ 为Coriolis系数 $\Omega = 3\omega \sin \Psi$, ω 为地球自转角速度, Ψ 为计算点所处的纬度; x, y 为空间坐标(m); t 为时间(s); V 为沿水深的平均流速(m/s); V_x, V_y 为 x, y 方向的速度分量(m/s)。

水质控制方程,基于过程描述与水动力模型集成,有独立的参数描述方程,其中氮、磷描述方程分别由式(4)、式(5)表示。

$$\frac{\partial \text{NH}_3}{\partial t} = Y_{\text{BOD}} \cdot K_3 \cdot \text{BOD} \cdot \theta_3^{(T-20)} \cdot$$

$$\frac{\text{DO}}{\text{DO} + \text{HS}_{\text{BOD}}} - K_4 \cdot \text{NH}_3 \cdot \theta_4^{(T-20)} -$$

$$\text{UN}_p \cdot (P - R_1 \cdot \theta_1^{(T-20)}) - \text{UN}_b \cdot K_3 \cdot \text{BOD} \cdot$$

$$\theta_3^{(T-20)} \cdot \frac{\text{NH}_3}{\text{NH}_3 + \text{HS}_{\text{NH}_3}} + \text{UN}_p \cdot R_2 \cdot \theta_2^{(T-20)} \quad (4)$$

$$\frac{\partial \text{PO}_4}{\partial t} = K_3 \cdot \text{BOD} \cdot Y_2 \cdot \theta_3^{(T-20)} \cdot$$

$$\frac{\text{PO}_4}{\text{PO}_4 + \text{HS}_{\text{PO}_4}} - \text{UP}_p \cdot (P - R_1 \cdot \theta_1^{(T-20)}) \cdot F(N, P) - \text{UP}_b \cdot K_3 \cdot \text{BOD} \cdot \theta_3^{(T-20)} \cdot \frac{\text{PO}_4}{\text{PO}_4 + \text{HS}_{\text{PO}_4}} - \text{UP}_p \cdot R_2 \cdot \theta_2^{(T-20)} \quad (5)$$

式(4)表示氨氮值等于有机物所释放的氨氮减去转化成亚硝酸盐的氨氮、植物所摄取的氨氮、细菌微生物分解的氨氮,再加上异养呼吸产生的氨氮的结果值。式(5)表示磷值等于有机物释放的磷减去植物所摄取的磷、细菌微生物分解的磷及异养呼吸消耗的磷的结果值。式中 Y_{BOD} 为有机物中的氮含量($\text{mgNH}_3\text{-N}/\text{mgBOD}$); K_3 为 20°C 有机质降解常数($1/\text{d}$); $\theta_3^{(T-20)}$ 为Arrhenius温度系数; K_4 为硝化速率($1/\text{d}$); $\theta_4^{(T-20)}$ 为硝化速率温度系数; UN_p 为植物吸收氨速率(mgN/mgO_2); P 为植物光合作用能量; R_1 为植物光合作用速率常数; $\theta_1^{(T-20)}$ 为光合作用温度系数; R_2 为异养呼吸速率常数; $\theta_2^{(T-20)}$ 为异养呼吸作用温度系数; UN_b 为细菌吸收氨速率(mgN/mgBOD); HS_{NH_3} 为细菌摄取 N 半饱和浓度(mgN/L); UP_p 为植物吸收磷速率(mgP/mgO_2); $F(N, P)$ 为营养限制对光合作用影响; UP_b 为细菌吸收磷速率(mgP/mgBOD); HS_{PO_4} 为细菌摄取 P 半饱和浓度(mgP/L)。

1.2 模型配置

汾河中下游是汾河流域的关键及典型区域,由于流域内生态和水环境失衡导致河流水质污染严重。汾河一坝人工湿地位于汾河中游,污水来源为生活污水,湿地主要污染物为氨氮和磷,设计污水量为 $300 \text{ m}^3/\text{d}$ 。研究区湿地面积 600 m^2 ,湿地采用砖砌墙分隔,系统由池内填料(砾石、砂土、种植土)、水深植物、配水系统和排水系统组成。湿地内种植芦苇 $9 \text{ 株}/\text{m}^2$,植物吸收污染物使水质得到净化。污水经湿地处理后最终流入汾河(见图1)。

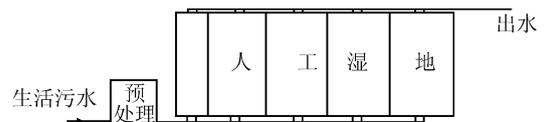


图1 湿地平面图

Fig.1 Wetland floor plan

本研究选取湿地单元为计算区域,采用非结构网格流场模拟,即将模拟区域划分为三角形网格进

行剖分,最终共划分网格 1 140 个,节点 621 个。根据地形高程数据内插网格节点高程,由 Crick 插值法得到详细的湿地地形图(见图 2)。

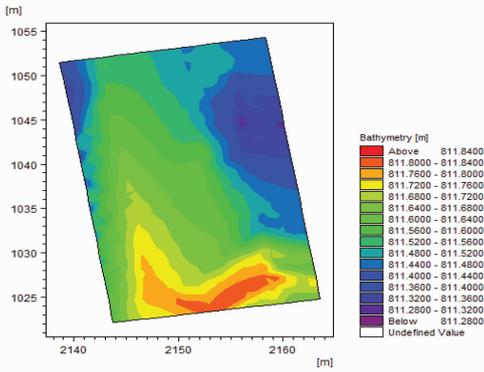


图 2 湿地地形图

Fig. 2 Wetland topographic map

输入网格文件后,进行模型参数设置。计算中涉及到的主要模型参数的设置情况如下。

1)本研究湿地在经度和纬度上跨度很小,因此主要考虑涡粘系数和糙率系数。涡粘系数可提高模型数值计算的稳定性,其计算采用 Smagorinsky 公

式。糙率系数通过模型率定、验证确定,并参照一定的经验,水动力学模型中可根据实际情况糙率取值。本次研究的人工湿地考虑湿地基质层对水动力的影响如下:经分析颗粒级配对湿地的影响主要体现在渗透性上,而基质渗透性、孔隙率与植物的根系生长、死亡有关^[9],又植物对湿地的影响最终反映为糙率和对污染物的吸收系数,故认为基质、植物最终反映为一个值即糙率系数。

2)边界条件:水动力中存在两种边界即陆地边界与开边界。本研究中将湿地东西面设置为陆地边界,并将湿地入水及湿地出水设置为开边界。

3)水质模型参数:研究区域氮磷超标严重,为实现水环境生态准确模拟,创建了氨氮、总磷 2 个状态变量。图 3 可以看出氮磷污染物在水中的生化反应,主要考虑硝化速率、植物吸收氨的速率、细菌吸收氨的速率、摄取 N 的半饱和浓度、植物吸收磷的速率、细菌吸收磷的速率、摄取 P 的半饱和浓度在模型中的影响,其余参数均取默认值。另外作用力包括温度、盐度、水深、当前流速,其中温度和盐度从外界输入,其余的均从水动力模块中获取。

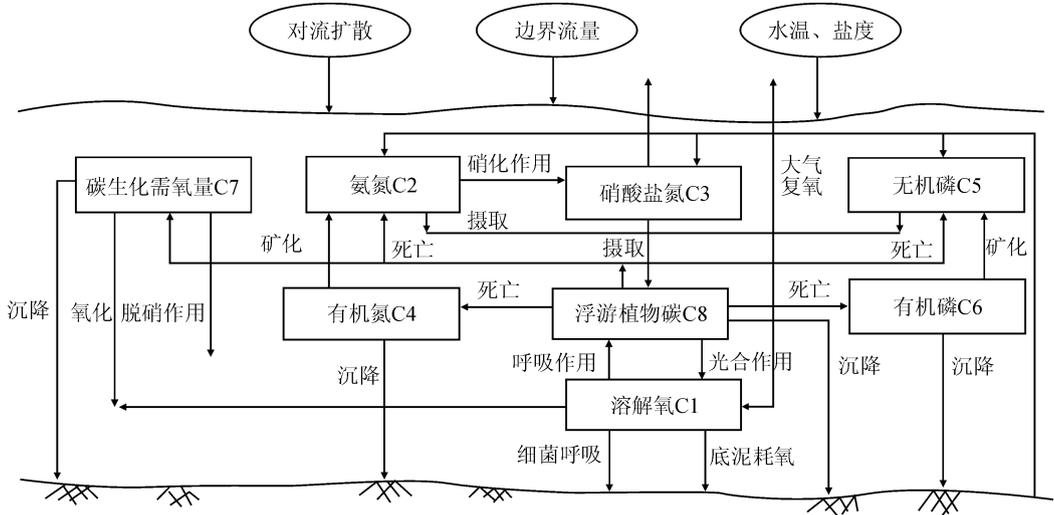


图 3 氮磷污染物转化

Fig. 3 Conversion of nitrogen and phosphorus pollutants

1.3 模型率定及验证

本研究采用 2016 年 5~6 月的水位、流量及湿地进出口浓度,对模型进行参数率定及验证。为确保模型计算的稳定性且结合一次性计算耗时,用较合理的时间步长 300 s 进行模拟。其中水动力模块上边界采用 5~6 月湿地进口流量过程,下边界采用湿地出口的水位过程。选取湿地进出口为源汇项,给定对应实测流量值。2016 年 5 月份水位的率定结果见图 4。

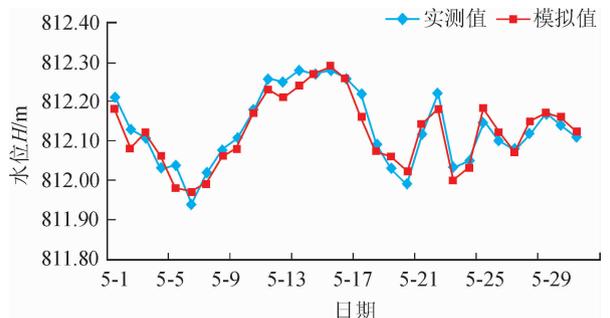


图 4 湿地出口水位率定成果

Fig. 4 Wetland outlet level calibration achievements

为确定参数的可靠性进一步选取6月份水位进行模型验证,水位模拟结果与实测数据对比见图5。最终得到水动力模块涡粘系数为 $0.28\text{ m}^2/\text{s}$,糙率为 0.036 。由图5可以看出,模型计算出的成果和实测成果的吻合度较高,经计算其均方根误差为 0.082 ,平方相关系数为 0.908 ,表明模型采用的参数合理可用,可以确定模型能够为后续水质模拟提供良好的水动力学基础。

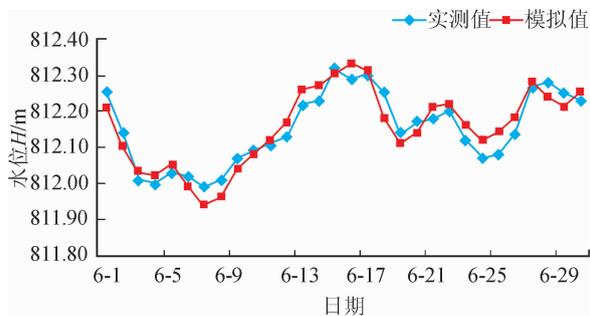


图5 湿地出口水位验证成果

Fig. 5 Wetland outlet level verification achievements

水质模块设置首先建立初始浓度分布场文件,其次输入5~6月实测湿地入口浓度作为上边界初始浓度,并输入相应水质模拟参数。利用二维水质模型对研究区域下边界出口浓度值进行模拟,将所得值与实际测得的浓度值进行对比,见图6~7。

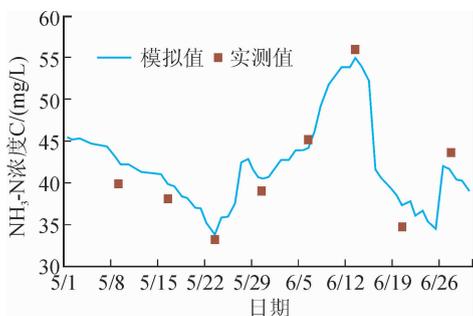


图6 湿地出口 $\text{NH}_3\text{-N}$ 模拟结果和实测值对比值

Fig. 6 Comparison of $\text{NH}_3\text{-N}$ in wetland outlet

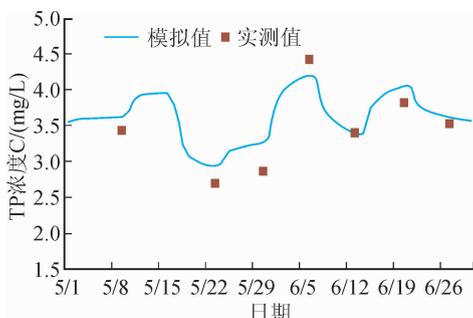


图7 湿地出口TP模拟结果和实测值对比值

Fig. 7 Comparison of TP in wetland outlet

由图6~7可以看出,6月份 $\text{NH}_3\text{-N}$ 和TP的相对浓度明显高于5月份,表明6月份用水相对集中,污染物浓度排放相对较高,进入湿地的污染物多。对比模拟值与实测值发现: $\text{NH}_3\text{-N}$ 模拟的相对误差范围为 $4.5\%\sim 11.7\%$,TP模拟的相对误差范围为 $5.1\%\sim 14.1\%$,其相对误差符合水质模型精度要求,模拟效果较为理想。误差原因可能是污染物受水流紊动影响的同时,受到各种环境因素影响较大导致。通过二维水质模型模拟验证,得到水质参数取值结果见表1。

表1 水质参数取值

Tab. 1 Values of water quality parameters

参数名称	数值	单位	范围
硝化速率	0.05	d	0~10
植物吸收 N	0.066	g N/g DO	0~0.2
细菌吸收 N	0.109	g N/g DO	0~1
摄取 N 的半饱和浓度	0.05	mg N/L	0~5
植物吸收 P	0.009 1	g P/g DO	0~0.1
细菌吸收 P	0.015	g P/g DO	0~0.1
摄取 P 的半饱和浓度	0.005	mg P/L	0~2

由率定结果可知,氨氮浓度与硝化速率、植物及细菌呼吸速率均有关,植物、细菌呼吸速率与底泥耗氧量均通过溶解氧影响氨氮浓度大小,率定过程中得出硝化作用的衰减作用>植物的呼吸作用>底泥耗氧量;总磷浓度与磷的释放速率、植物及细菌呼吸速率、底泥耗氧量有关。分析发现氮、磷污染物对植物、细菌的呼吸速率及底泥耗氧量均较为敏感。

2 结果与讨论

2.1 流场分布

选取湿地2016年5月的流场进行分析,具体流场分布实际情况见图8。

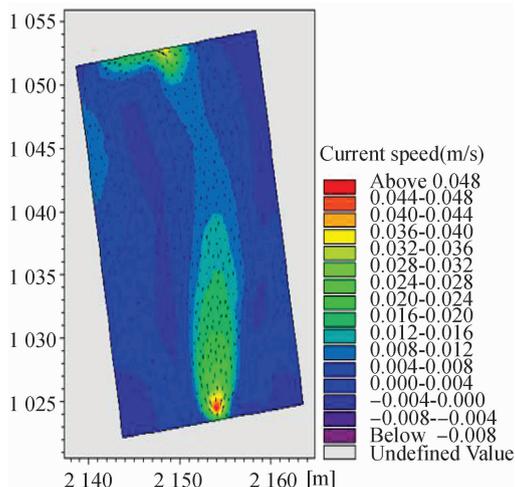


图8 湿地流场分布图

Fig. 8 Wetland flow field distribution

因缺少实际流速监测资料仅进行定性分析,由图8可知湿地单元水流缓慢,出口流速基本维持在0.040 m/s左右。出口流速略高于入口,主要是由于取水扰动了水流使得出口流速增大。图8中湿地四角流速明显低于湿地入口和主流区流速,且存在一块区域流速偏低,这是由湿地的高程不一致和水生植物存在导致,水体流速偏缓的区域,会影响污染物降解效果。

2.2 水质模拟分析

根据湿地实际资料设定正常水位下氮磷的背景值为0,污染物流入浓度选取污染较严重的5月份浓度值,模拟时长为10 h,通过模拟分别得到计算时长下氮、磷的降解情况。

由图9可以看出: $\text{NH}_3\text{-N}$ 初始浓度为41.1 mg/L,进入湿地后随水流方向向出口推移;影响带在3 h到达出口,此时 $\text{NH}_3\text{-N}$ 的浓度为23.3 mg/L,降解率为43.3%;进入湿地7 h后,污染物降解速率变缓; $\text{NH}_3\text{-N}$ 进入10 h,污染物浓度趋于稳定, $\text{NH}_3\text{-N}$ 出口的浓度为24.2 mg/L。

由图10可以看出: TP 初始浓度为3.91 mg/L,污染物进入湿地后随水流向出口推移。TP的影响带在3 h到达出口,此时 TP 的浓度为2.7 mg/L,降解率为30.9%。TP 进入湿地7 h后,污染物降解速率变缓;TP 进入10 h,污染物的浓度趋于稳定,湿地出口的浓度约为2.74 mg/L。

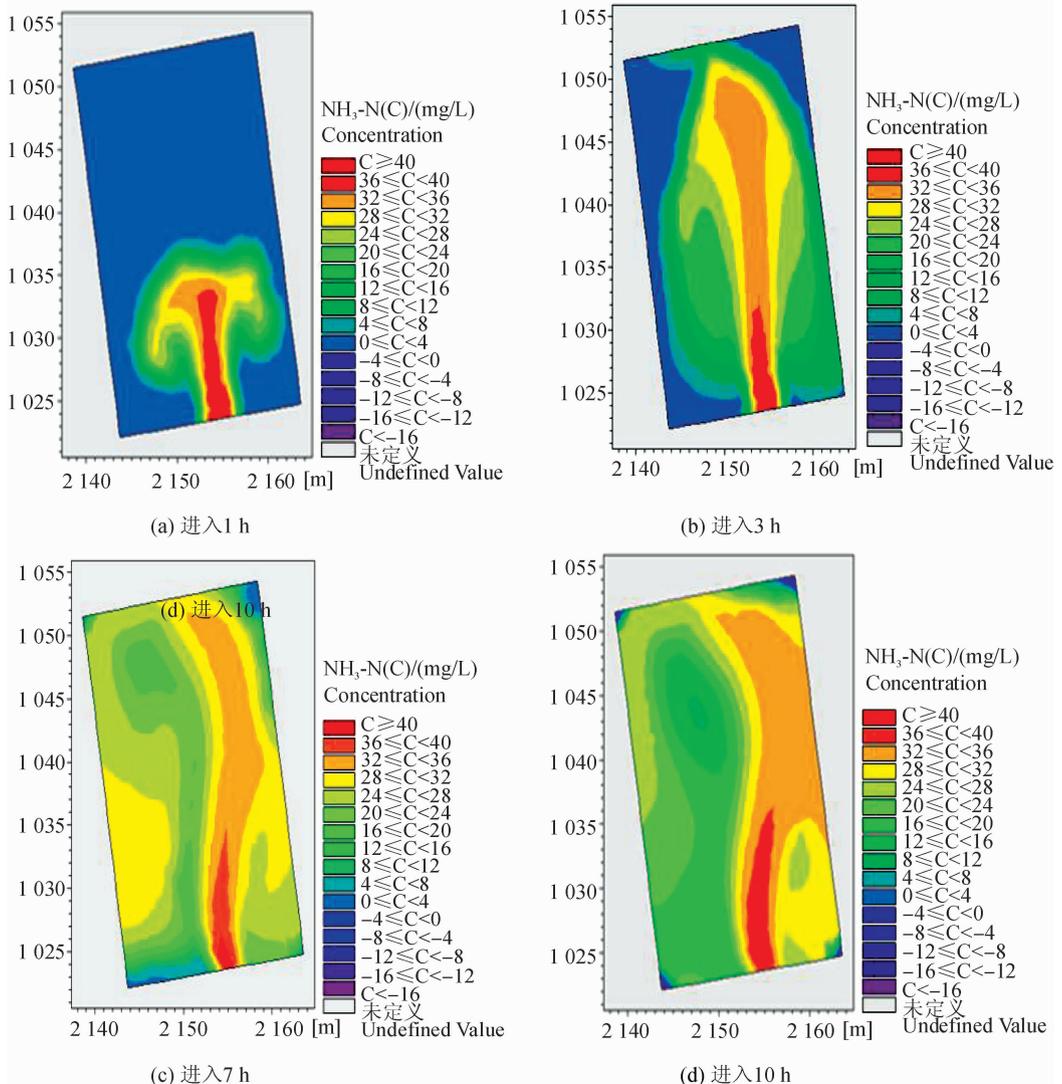


图9 $\text{NH}_3\text{-N}$ 浓度分布图

Fig. 9 $\text{NH}_3\text{-N}$ concentration distribution map

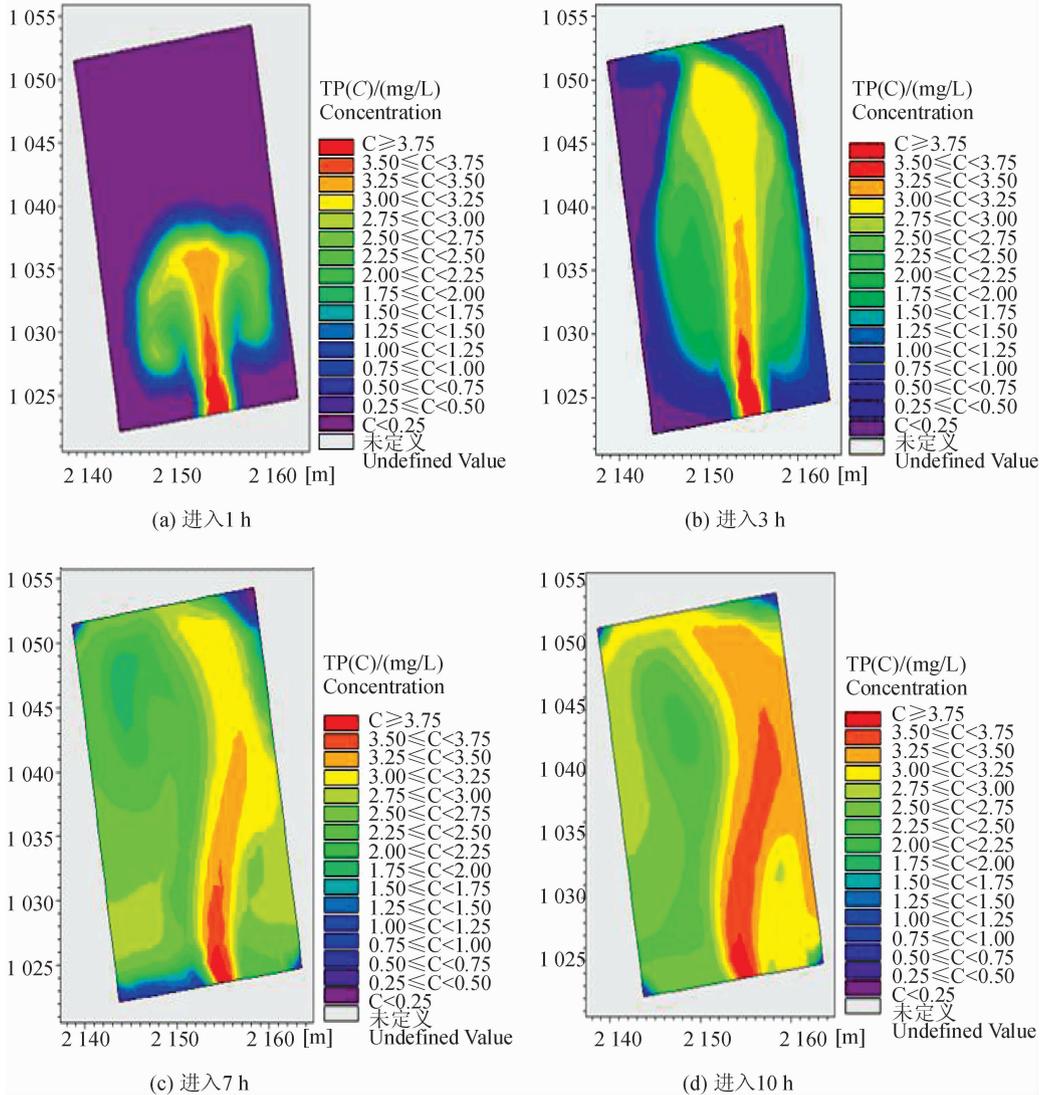


图10 TP浓度分布图

Fig. 10 TP concentration distribution map

由氮磷进入湿地后的迁移变化可知, $\text{NH}_3\text{-N}$ 和 TP 进入湿地其主流影响带不断地向出口推移, 浓度逐渐降低。湿地中由于湿地植物的存在, 水流易形成涡流^[10], 导致某些区域污染物浓度呈圈状分布。污染物进入湿地 3 h 时, 出入口污染物浓度变化较快, 7 h 时污染物浓度变化逐渐趋于平缓; 10 h 污染物浓度变化趋于稳定, 且区域整体浓度值明显降低。表明一定水力停留时间内, 湿地对污染物的降解效果明显, 可作为水质改善措施。由计算可知, $\text{NH}_3\text{-N}$ 的降解率为 43.3%, TP 的降解率为 30.9%。

总的来说氮磷污染物变化规律基本一致, 湿地对氮的降解效果好于磷是由于湿地植物芦苇在相同的水力停留时间内对磷的去除能力有限所致。研究发现湿地植物对水中氮磷污染物的去除起到了很好的促进作用, 根据水质参数取值可知氮在人工湿地

中的去除主要影响因素有植物吸收、硝化反硝化等, 其中植物吸收的去除可达氮总去除量的三分之一左右; 若同时能提供充足的溶解氧, 则可保障湿地系统脱氮途径的顺利进行。另一方面, 在湿地植物生长季节, 人工湿地中的植物、基质之间处于平衡状态, 可使基质与水间的交换吸附磷的能力不断恢复, 因此有植物湿地系统比无植物湿地系统的磷去除效果更高^[11]。相关研究发现磷的去除效果与湿地系统中植物的收获频率有很大关系, 在一定的收获频率下, 植物吸收的去除可达磷总去除率的 20%~30%^[12]。因此合理确定湿地植物的选择、种植及收获频率, 更能达到湿地水质高效净化的目的。

3 结论

湿地生态动力学模型研究有助于掌握湿地中污

染物的迁移规律及降解情况,通过研究得到以下结论:

1) 基于现有湿地,模拟得到的模型精度较高,表明该模型可以模拟预测湿地中污染物的迁移降解情况,为人工湿地的数值模拟方法手段提供参考;

2) 湿地植物对氮磷污染物的去除能力不容忽视,植物根系对污染物的吸收作用成为湿地水质净化高效能的主要驱动,因此对湿地植物的选择、种植及收获频率需确定合理;

3) 模拟结果表明氨氮和总磷在湿地的迁移降解情况基本一致,人工湿地对氨氮及总磷的降解率分别达到43.3%和30.9%。

参考文献:

- [1] FAULWETTER J L, BURR M D, PARKER A E, et al. Influence of season and plant species on the abundance and diversity of sulfate reducing bacteria and ammonia oxidizing bacteria in constructed wetland microcosms [J]. *Microbial Ecology*, 2013, 65(1): 111-127.
- [2] 张航, 冯民权, 王莉, 等. 基于生态调水清渭河水环境效应研究 [J]. *西安理工大学学报*, 2015, 31(1): 83-90.
- ZHANG Hang, FENG Minquan, WANG Li, et al. Research on water environmental effects of Qingyi River based on ecological water diversion [J]. *Journal of Xi'an University of Technology*, 2015, 31(1): 83-90.
- [3] HIPSEY M R, ROMERO J R, ANTENUCCI J P. Computational aquatic ecosystem dynamics model science manual [M]. Centre for Water Research, University of Western Australia, January 16, 2006.
- [4] VYMAZAL J. Plants used in constructed wetlands with horizontal subsurface flow: a review [J]. *Hydrobiologia*, 2011, 674(1): 133-156.
- [5] 李亚静, 朱文玲, 黄柱坚, 等. 垂直流人工湿地脱氮过程的生态动力学模拟与分析 [J]. *农业环境科学学报*, 2015, 34(4): 776-780.
- LI Yajing, ZHU Wenling, HUANG Zhujian, et al. Modeling analysis of denitrification dynamics in a vertical flow constructed wetland [J]. *Journal of Agricultural Environmental Science*, 2015, 34(4): 776-780.
- [6] 唐美珍, 姚淑敏, 张凤凤, 等. *Pseudomonas flava* WD-

3 对人工湿地污染物的去除及 Monod 模型模拟 [J]. *环境科学学报*, 2014, 34(12): 3050-3056.

TANG Meizhen, YAO Shumin, ZHANG Fengfeng, et al. Pollutants removal by *Pseudomonas flava* WD-3 and Monod model simulation in constructed wetland [J]. *Acta Scientiae Circumstantiae*, 2014, 34(12): 3050-3056.

- [7] 王子珏, 王欣泽, 林燕, 等. 处理低污染河水的湿地内氮迁移转化过程模拟 [J]. *环境科学研究*, 2014, 27(6): 602-607.
- WANG Zijue, WANG Xinze, LIN Yan, et al. Simulation of nitrogen transfer processes in a constructed wetland for a lightly contaminated [J]. *Research of Environmental Science*, 2014, 27(6): 602-607.
- [8] 付国楷, 王敏, 张智, 等. 人工湿地用于污水深度处理的反应动力学 [J]. *土木建筑与环境工程*, 2012, 34(4): 111-117.
- FU Guokai, WANG Min, ZHANG Zhi, et al. Reaction kinetics of three types of constructed wetland for advanced domestic wastewater treatment [J]. *Journal of Civil, Architectural and Environmental Engineering*, 2012, 34(4): 111-117.
- [9] 徐德福, 李映雪. 用于污水处理的人工湿地的基质、植物及其配置 [J]. *湿地科学*, 2007, 5(1): 32-38.
- XU Defu, LI Yingxue. Screen plants and substrates of the constructed wetland for treatment of wastewater [J]. *Wetland Science*, 2007, 5(1): 32-38.
- [10] 顾峰峰. 芦苇阻力系数物模及湿地水流数模研究 [D]. 大连: 大连理工大学, 2006.
- GU Fengfeng. Study on resistance coefficient of reeds and numerical simulation of flow in wetland [D]. Dalian; Dalian University of Technology, 2006.
- [11] GREENWAY M. Nutrient content of wetland plants in constructed wetlands receiving municipal effluent in tropical Australia [J]. *Water Science and Technology*, 1997, 35(5): 135-142.
- [12] REED S C, CRITES R W, MIDDLEBROOKS E J. Natural systems for waste management and treatment [M]. New York: McGraw Hill Inc., 1995.

(责任编辑 王绪迪)