

# EFDC+ 理论

DSI, LLC

Version 11

March 22, 2023



Edmonds, WA  
[www.eemodelingsystem.com](http://www.eemodelingsystem.com)

## 感谢

DSI, LLC感谢众多作者对Environmental Fluid Dynamics Code Plus (EFDC++) 理论文件的贡献。该理论文件的第一个版本由John Hamrick博士于1992年出版, 并发布了环境流体动力学代码 (EFDC)。加入Tetra Tech后, Hamrick博士添加了EFDC的几个增强功能以及文档。Kyeong Park与其他几位作者一起, 添加了富营养化的CE-QUAL-ICM (ICM) 动力学的初始版本, 并附上了相关文件。Craig Jones添加了Ziegler、Lick和Jones (SEDJLJ) 实现开发的初始SEDiment动力学算法, 以及单独的文档。Jeff Ji将Rooted Plant Epiphytes Module (RPEM) 添加到EFDC中, 并开发了单独的文档。最后, Scott James为许多其他代码和文档增强做出了贡献。当然, EFDC源代码从2000年代初就已经公开了, 因此还有许多其他贡献者, 从而产生了大量EFDC版本。

多年来, DSI对原始代码 (现在称为EFDC+) 进行了显著扩展, 提高了其速度、稳定性和准确性, 并将其集成到一个完整的流体动力学、沉积物传输、有毒物质传输和富营养化建模包中。DSI已经汇编了许多不同的理论文件, 并为EFDC++ 开发了一个更新的单一综合理论文件。

自2009年以来, DSI的工程师一直致力于本文档的更新和维护。在这项工作中, DSI的主要作者是Paul Craig、Thomas Mathis、Tran Duc Kien、Jeffrey Jung、Kester Scandrett和Anurag Mishra。为了所有EFDC++用户的利益, 这些作者将他们对EFDC++ 各个方面的深入了解和仔细的文档记录带到了本文档的准备和维护中。

我们还要向EFDC++用户社区表示感谢, 他们为我们提供了多种反馈, 帮助我们塑造了EFDC++。

缩写词表

<i>C</i>	<i>Carbon</i>	碳
<i>CH<sub>4</sub></i>	<i>Methane</i>	甲烷
<i>CO<sub>2</sub></i>	<i>Carbon dioxide</i>	二氧化碳
<i>Fe</i>	<i>Iron</i>	铁
<i>FeS</i>	<i>Iron monosulfide</i>	硫化亚铁
<i>Mn</i>	<i>Manganese</i>	锰
<i>N</i>	<i>Nitrogen</i>	氮
<i>NH<sub>4</sub><sup>+</sup></i>	<i>Ammonium</i>	氨氮
<i>NO<sub>2</sub><sup>-</sup></i>	<i>Nitrite</i>	亚硝态氮
<i>NO<sub>3</sub><sup>-</sup></i>	<i>Nitrate</i>	硝态氮
<i>O</i>	<i>Oxygen</i>	氧
<i>P</i>	<i>Phosphorus</i>	磷
<i>PO<sub>4</sub><sup>3-</sup></i>	<i>Phosphate</i>	磷酸盐
<i>R<sub>q</sub></i>	<i>Richardson Number</i>	理查逊数
<i>R<sub>w</sub></i>	<i>Wave Reynolds Number</i>	波浪雷诺数
<i>SO<sub>4</sub><sup>2-</sup></i>	<i>Sulfate</i>	硫酸盐
<i>S<sub>2</sub><sup>-</sup></i>	<i>Sulfide</i>	硫化物
<i>SiO<sub>2</sub></i>	<i>Silica</i>	二氧化硅
<i>2D</i>	<i>two-dimensional</i>	二维
<i>3D</i>	<i>three-dimensional</i>	三维
<i>BOD</i>	<i>Biological Oxygen Demand</i>	生物需氧量
<i>CFD</i>	<i>Computational Fluid Dynamics</i>	计算流体动力学
<i>chl a</i>	<i>Chlorophyll a</i>	叶绿素a
<i>COD</i>	<i>Chemical Oxygen Demand</i>	化学需氧量
<i>CSOD</i>	<i>Carbonaceous Sediment Oxygen Demand</i>	碳质沉积物需氧量
<i>DO</i>	<i>Dissolved Oxygen</i>	溶解氧
<i>DOC</i>	<i>Dissolved Organic Carbon</i>	溶解有机碳
<i>DON</i>	<i>Dissolved Organic Nitrogen</i>	溶解有机氮
<i>DOP</i>	<i>Dissolved Organic Phosphorus</i>	溶解有机磷
<i>DSI</i>	<i>DSI, LLC</i>	<i>DSI, LLC</i>
<i>EE</i>	<i>EFDC+ Explorer</i>	<i>EFDC+ Explorer</i>
<i>EEMS</i>	<i>EFDC+ Explorer Modeling System</i>	EFDC+资源管理器建模系统
<i>EFDC</i>	<i>Environmental Fluid Dynamics Code</i>	环境流体动力学代码
<i>EFDC+</i>	<i>Environmental Fluid Dynamics Code Plus</i>	环境流体动力学代码Plus
<i>EPA</i>	<i>Environmental Protection Agency</i>	环境保护局
<b>ferric oxide</b>	<i>Fe<sup>2+</sup>O<sup>3</sup>(s)</i>	
<b>ICM</b>	<i>CE-QUAL-ICM or ICM</i>	<i>CE-QUAL-ICM or ICM</i>
<i>LHS</i>	<i>Left Hand Side</i>	左侧
<i>LPOC</i>	<i>Labile Particulate Organic Carbon</i>	易溶解颗粒有机碳
<i>LPON</i>	<i>Labile Particulate Organic Nitrogen</i>	易溶解颗粒有机氮
<i>LPOP</i>	<i>Labile Particulate Organic Phosphorus</i>	易溶解颗粒有磷

<i>LPT</i>	<i>Lagrangian Particle Tracking</i>	拉格朗日粒子跟踪
<i>MHK</i>	<i>Marine and Hydro-Kinetic</i>	海洋和流体动力学
<i>MPDATA</i>	<i>Multidimensional Positive Definite Advection Transport Algorithm</i>	多维正定平流传输算法
<i>MPI</i>	<i>Message Passing Interface</i>	消息传递接口
<b>NetCDF</b>	Network Common Data Form	网络通用数据表
<b>NSOD</b>	Nitrogenous Sediment Oxygen Demand	含氮沉积物需氧量
<i>OC</i>	<i>Organic Carbon</i>	有机碳
<i>ON</i>	<i>Organic Nitrogen</i>	有机氮
<b>OpenMP</b>	Open Multi-Processing	打开多处理
<i>PO4d</i>	<i>Dissolved Phosphate as Phosphorus</i>	溶解磷酸盐 (磷)
<i>PO4p</i>	<i>Sorbed Phosphate as Phosphorus</i>	吸附磷酸盐 (磷)
<i>PO4t</i>	<i>Total Phosphate as Phosphorus</i>	总磷 (以磷计)
<i>POC</i>	<i>Particulate Organic Carbon</i>	颗粒有机碳
<i>POM</i>	<i>Particulate Organic Matter</i>	颗粒有机物
<i>PON</i>	<i>Particulate Organic Nitrogen</i>	颗粒有机氮
<i>POP</i>	<i>Particulate Organic Phosphorus</i>	颗粒有机磷
<i>RHS</i>	<i>Right Hand Side</i>	右侧
<i>RPEM</i>	<i>Rooted Plant and Epiphyte Model</i>	生根植物和附生植物模型
<i>RPOC</i>	<i>Refractory Particulate Organic Carbon</i>	难溶颗粒有机碳
<i>RPON</i>	<i>Refractory Particulate Organic Nitrogen</i>	难溶颗粒有机氮
<i>RPOP</i>	<i>Refractory Particulate Organic Phosphorus</i>	难溶颗粒有机磷
<i>SEDZLJ</i>	<i>SEDiment dynamics algorithms as developed by Ziegler, Lick, and Jones</i>	由齐格勒、里克和琼斯开发的感知动力学算法
<i>SGZ</i>	<i>Sigma Zed</i>	<i>Sigma Zed</i>
<i>SiA</i>	<i>Dissolved Available Silica</i>	溶解有效二氧化硅
<i>SIG</i>	<i>Standard Sigma</i>	标准西格玛
<i>SiP</i>	<i>Particulate Biogenic Silica</i>	微粒生物成因二氧化硅
<i>SNL-EFDC</i>	<i>Sandia National Laboratory version of EFDC</i>	桑迪亚国家实验室版本的EFDC
<i>SOD</i>	<i>Sediment Oxygen Demand</i>	沉积物需氧量
<i>TAM</i>	<i>Total Active Metals</i>	总活性金属
<i>TMDL</i>	<i>Total Maximum Daily Load</i>	总最大日负荷
<i>TSS</i>	<i>Total Inorganic Suspended Solids</i>	无机悬浮固体总量
<b>W2</b>	CE-QUAL-W2 or W2	CE-QUAL-W2 or W2



# 第1章

## 引言

Environmental Fluid Dynamics Code Plus (EFDC+) 是一个地表水建模系统，二维和/或三维流体力学和水柱成分输送。流体力学与多个模块（包括沉积物侵蚀/沉积、化学命运和运输、富营养化动力学、沉积物成岩作用、漏油、颗粒追踪和螺旋桨清洗），使用集成的单一源代码实现。EFDC+及其前身EFDC已被使用在全球范围内支持数百个的环境评估、管理和法规要求例如河流、湖泊、水库、湿地、河口和沿海海洋区域。

### 1.1.发展历史

EFDC+基于EFDC的公共领域开源版本（Hamrick, 1992），最初由John M.Hamrick博士于1988年在弗吉尼亚海洋科学研究所（VIMS）和威廉玛丽学院海洋科学学院开发。EFDC+的历史演变在很大程度上是由学术、政府和私营部门的各种建模人员推动的，如图1.1所示。

自2000年以来，DSI, LLC (DSI) 针对地表水、泥沙输送和水质项目为EFDC提供了持续的增强和发展。这包括基于本文中描述的理论添加多个新功能。DSI对EFDC代码的改进非常广泛，因此在2016年，EFDC的DSI版本更名为EFDC+。

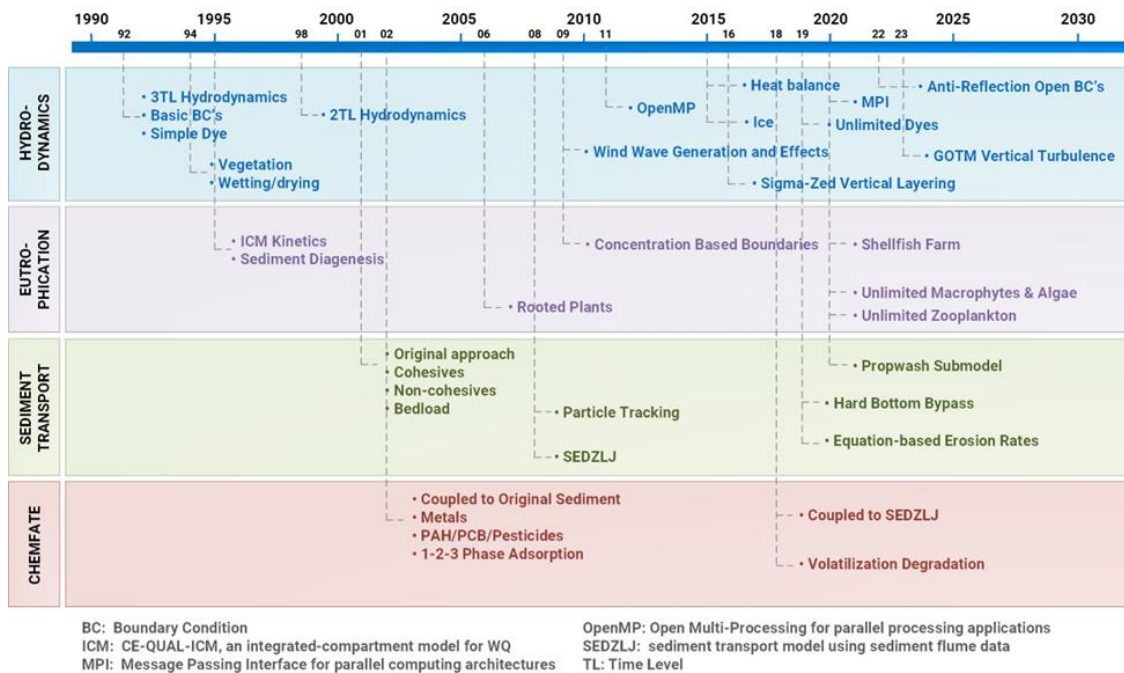


图1.1 EFDC+ 开发历史概述

## 1.2. EFDC+的改进

EFDC+针对EFDC反映了以下关键增强功能：

- 开放多处理（OpenMP）-多线程：将 OpenMP 集成到 EFDC+ 中可大大改进模型运行时间。Intel® OpenMP 运行时间库绑定 OpenMP 线程到物理处理单元。EFDC+通常在六核上的运行速度比传统的单线程 EFDC 模型快四倍。
- 动态内存分配：动态内存分配无需重新编译 EFDC 用于不同的应用。以前，由于 Fortran 77 的限制需要数组大小来指定计算网格域和时间序列输入数据集。动态分配也有助于减少数组索引错误，并为源提供更好的可追溯性代码开发。
- 域分解和消息传递接口（MPI）：EFDC+中的域分解可以显著增加模型执行时间。这是通过拆分域来实现的，将一个模型分成几个较小的子域（Fainchstein, 2014）。这些子域中的每一个都像传统的 EFDC+运行一样执行，只是每个子域在每个时间步骤中都有其相邻子域交换信息（Gropp 等人, 2014）。此信息交换是通过利用 Intel 版本的 MPI 在域之间进行通信来实现。
- Sigma Zed（SGZ）分层：EFDC+通过使用 SGZ 分层避免了在床层高度急剧变化的模型模拟中出现的压力梯度误差。与原始 EFDC 不同，EFDC 在垂直方向上使用 Sigma（SIG）坐标变换，对于域中的所有单元层数相同，EFDC+的 SGZ 模型允许在模型域的不同位置有不同的垂直层数量。该方法计算效率高，显著改善了模拟密度分层。
- 水工建筑物：EFDC+实现了方程组控制水工建筑物（如涵洞、堰、水闸和孔口），这与以前针对水工建筑物采取评级曲线的方法不同。此外，建模者可以指定依赖于模型流体力学的运行规则。
- 增强的热交换：EFDC+包括使用水和大气界面的平衡温度和空间变化的沉积物床温度的热交换选项。富营养化和沉积物输送模块中的水柱浓度现在是通过空间和时间变化的光消减与热模块耦合在一起的。
- 冰形成和融化：EFDC+包括热耦合冰形成和融化的方法来处理寒冷的气候。表面过程由动态计算的冰盖控制。

- 多种染料：EFDC+可以模拟无限数量的用户定义染料类，包括“水龄”。衰减和/或生长和沉降可以添加到任何染料类别中。
- 拉格朗日粒子跟踪（LPT）：EFDC+中添加了一个LPT模块，该模块允许模拟轨道释放/排放和混合研究。粒子沉降、衰变和其他过程是用户可配置的。LPT建模应用包括漏油和应急响应模拟等。
- SEDZLJ 实施：桑迪亚国家实验室（SNLEFDC）修改的EFDC版本包含SEDZLJ模型。DSI在EFDC+中进一步开发了此模型并实施了质量平衡、硬底旁通和计算效率的显著改进。这个SEDZLJ模型与EFDC+中的有毒物质模块相连。
- 螺旋桨清洗模块：EFDC+现在包括一个螺旋桨清洗模块，它使用拉格朗日函数速度/侵蚀场跟踪，以模拟船舶运动对水动力学和泥沙输送的影响。
- 内部风浪生成：EFDC+中添加了一个风浪生成模块能够计算风浪产生的床层切应力对沉积物再悬浮和波浪引起的水流的影响。
- 外部波浪模型联系：与SWAN（SWAN团队，2019）和其他外部波浪的联系EFDC+中简化和改进了模型。
- 根植物和表生植物模型（RPEM）模块：RPEM模块被纳入EFDC的版本，以更好地模拟水质与水下水生植被的相互作用，例如作为附生藻类和大型植物（Hamrick，2006）。这也随后被纳入EFDC+。
- 贝类养殖模块：EFDC+中添加了贝类养殖模块，以模拟动力学贝类的过滤、摄食、同化、呼吸、死亡和产卵等过程。
- 海洋和流体动力学（MHK）联动装置：EFDC+包括MHK模块，用来模拟在河流、潮汐中安装和运行涡轮机和波浪能转换器的潜在影响。此代码改编自SNL-EFDC+（Grace等人，2008）。
- 继续运行：如果模型崩溃或用户希望延长模拟时间，EFDC+模型可以配置为连续运行，其中模型输出是无缝的附加到上一次运行。
- 空间和时间变化场：压力场、测深和/或其他数据，如在EFDC+中运行模型期间，可以动态调整粗糙度和植被。这允许用于疏浚场景和季节性植被模式。此外，边界条件还可以作为空间和时间变化的场输入。这有助于将EFDC+与外部源或数值模型连接。

- 网络通用数据表 (NetCDF) 输出: EFDC+可以 NetCDF 文件格式输出结果。NetCDF 是共享科学数据的社区标准。
- 高频输出: 新的输出快照控件可用于标准输出频率内的高频输出。
- 代码精简: 代码已转换为 Fortran 90, 并进行了精简, 以缩短执行时间。
- 模型链接: 用户可以自定义模型结果的链接, 以便与基于 Windows 的 EFDC+Explorer (EE) 交互。

### 1.3 自EEMS10.3以来对EFDC+的增强

EFDC+的增强自EEMS10.3的版本。许多更改并不涉及对理论的更改, 而是提供了模块内改进的过程和增加了模块之间的交互。对螺旋桨清洗模块和射流和羽流模块进行了改进。一些重要的补充包括:

- ICM动力学已经被重写, 以允许无限的浮游植物、周围植物和大型植物类别。此外, 浮游动物已被添加, 作为藻类动力学的一个综合组成部分。
- 大型植物的生长能力被添加在层之间, 使大型植物的底部在任何层。这使得漂浮的大型植物可以从表面开始, 然后悬垂到水柱中。
- 在SEDZLJ输沙模块中添加了被螺旋冲刷侵蚀的内聚类的“快速沉降”。快速沉降类反映了由于旋流中湍流和高能流场造成的质量侵蚀过程。这些质量侵蚀沉积物在水柱中的表现与原始沉积物类别不同, 因为更大的块沉降比更均匀流型的离散颗粒侵蚀更快。添加此选项是为了解决被粘结床的质量或大块侵蚀 (即侵蚀块) 侵蚀的材料的不同沉降速率。
- “快速沉降”的方法也已完全集成到化学命运模块中已经补充了ChemFate分区选项。
- 这个新特性允许用户在逐个单元的基础上控制分区, 以更好地表示空间变化的站点条件。现在有了两个新的文件PARTITIONB.INP和PARTITIONW.INP被用来考虑到沉积物床和水柱中毒性分配系数的空间变化。
- 增加了一个热带气旋模块, 并提高了相关风场边界条件选项的性能。
- 已添加了用户定义的风拖动选项。
- 已经添加了两种新的开放边界条件类型。需要一个自由切向边界条件和一个零切向反射边界条件, 以改善波在模型域外的传播, 而不在开放边界上反射。

- 利用谐波来定义零切向和自由切向辐射边界条件的开放边界水位已经得到了改进，以处理非零平均潮位。
- 退出层仅限于活动层。需要这种检查，因为SigmaZed垂直分层方法可以对每个单元格使用不同的层数。
- 在开放边界上的大高宽比单元，水平涡流扩散率和粘度已经被禁用。
- NetCDF的输出已更新到最新的格式，UGRID。它还写了拉格朗日粒子跟踪输出，这现在是一个单独的文件。
- EFDC+现在与WASP8的水质模型相连。EFDC+现在写出了\*.HYD文件，允许WASP使用流体动力学来运行模型。

#### 1.4. EFDC+概述

EFDC+是EFDC的最新的增强版，它是最流行的三维（3D）水动力和水质模型之一。美国环境保护署（EPA）将最初的EFDC描述为“一种最先进的水动力模型，可以用于模拟一维、二维和三维的水生系统。”在过去的二十年里，它已经发展成为世界上使用最广泛、技术上最可靠的水动力模型之一。DSI通过采用EFDC的原始版本来创建了EFDC+，并极大地提高了它的速度、稳定性和准确性。自1998年以来，DSI不断升级了模型的流体动力学和稳定性，同时也减少了运行时间。EFDC+现在已经远远超过了原始代码的特性和性能。

EFDC+包含多个模块和特性，在图1.2中突出显示，并在后续章节中描述。

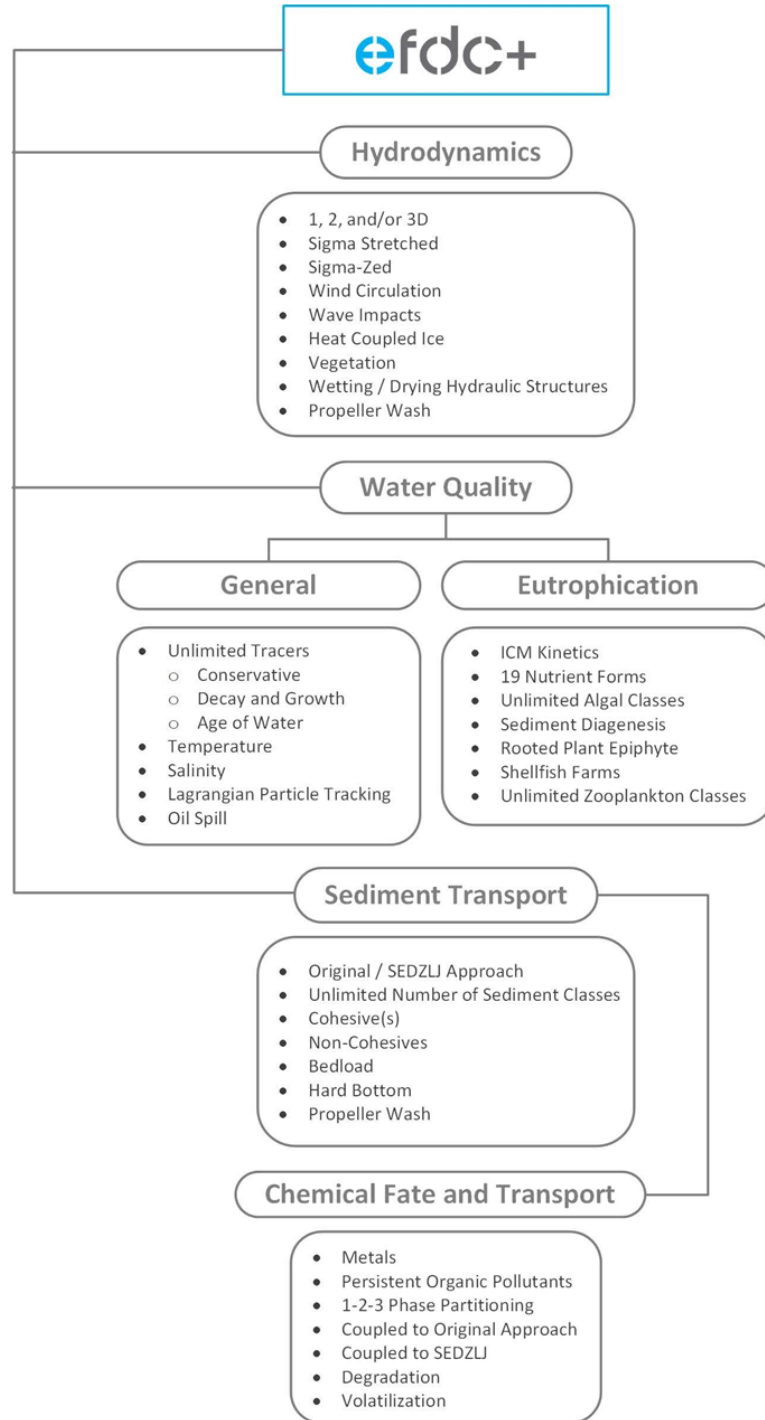


图1.2 EFDC+模型的主要模块

## 1.5. 结论

EFDC+是DSI开发的地表水建模系统，建立在Hamrick（1992）开发的原始EFDC软件之上。EFDC+包含了许多新特性和对原始EFDC代码的bug修复。本文档描述了在EFDC+中可用的所有模块的数学细节。

EFDC+可执行文件可作为通过DSI提供的EFDC+资源管理器建模系统（EEMS）软件包的一部分提供。有关EEMS的更多详细信息，请访问<https://www.eemodelingsystem.com/>。EFDC+的源代码是开源的，可以在我们的公共存储库（<https://github.com/dsi-llc/EFDCPlus>）上找到。我们鼓励并寻求来自用户社区的输入，并与研究社区合作，以改善EFDC+。

## 第2章 流体力学

EFDC+流体力学模块模拟近场羽流、风力和外部连接的波浪模型。在流体力学模块中，可以选择性地结合温度和盐度以解决密度效应。流体力学模块与其他模块相连，如水的染色/老化、沉积物、化学品、水质、LPT和螺旋桨清洗，如图1.2所示。EFDC+是一个耦合模型，它在集成代码中解决流体力学、传输和动力学问题，从而消除了流体力学和传输模块之间的外部耦合需求。

本节主要基于 Hamrick (1992) 和 Ji (2008) 以及 DSI 和其他公司的更新。给出并讨论了 EFDC+流体力学的基本控制方程。本文档使用的主要来源是：

1. 三维环境流体力学计算机代码：理论和计算方面 (Hamrick, 1992)。
2. 环境流体力学计算机代码用户手册 (EFDC) (Hamrick, 1996)。
3. 三维水动力学富营养化模型 (HEM3D)：水质和沉积物过程子模型的描述 (Park et al., 1995)。
4. EFDC 模型中沉积物和污染物传输的理论和计算方面 (Tetra Tech, 2002a)。
5. 桑迪亚(Sandia)国家实验室环境流体力学代码：沉积物输送用户手册 (Thanh et al., 2008)。

### 2.1 控制方程

EFDC+中流体力学模型的基本原理是流体的质量、动量和能量守恒定律。基本假设是，环境流体的特征是水平长度尺度比垂直长度尺度大几个数量级，因此，控制方程的公式从不可压缩、变密度流体的湍流运动方程的垂直静水边界层形式开始。EFDC+的控制方程包括流体流动的 Navier-Stokes 方程，盐度、温度、染料、毒物、富营养化成分和悬浮泥沙输移的平流扩散方程 (Hamrick 和 Wu, 1997; Hamrick, 1992, 1996)。在水平方向上，方程以曲线坐标系和垂直方向的 SIG 或 SGZ (Craig et al., 2014) 变换 (在河床和水面) 表示。它们是用基于显式格式的有限差分法离散化的。图 2.1 显示了 EFDC++模型域的基本概念。



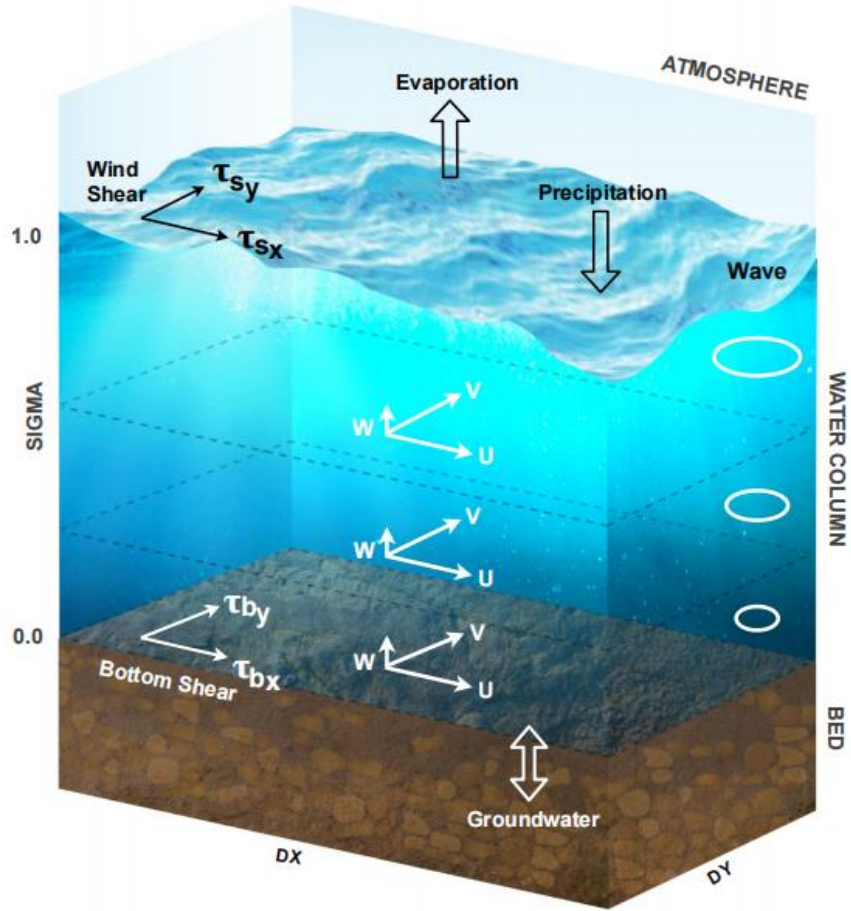


图 2.1 EFDC+模型的概念概述

### 2.1.1 水平和垂直坐标系

为了适应真实的水平边界，可以方便地将方程组表述为水平坐标  $x$  和  $y$  是曲线和正交的。

为了在垂直方向上提供一致的分辨率，与重力矢量对齐，并由底部地形和允许长波运动的自由表面限定，需要时间变量映射或伸展变换。映射或拉伸由

$$z = \frac{z^* + h}{\zeta + h} = \frac{z^* + h}{H} \quad (2.1)$$

其中，

$z$  是 sigma 坐标（无量纲），

$z^*$  是相对于垂直基准面（基准面）的垂直坐标（m），

$h$  为垂直基准面以下的水深（m），

$\zeta$  是垂直基准面以上的水面高程（m），以及

$H$  是水柱的总深度（m），定义为或  $\zeta + H$ 。

图 2.2 提供了左侧面板中物理空间中的垂直坐标系和右侧面板中 sigma 空间的示意图。

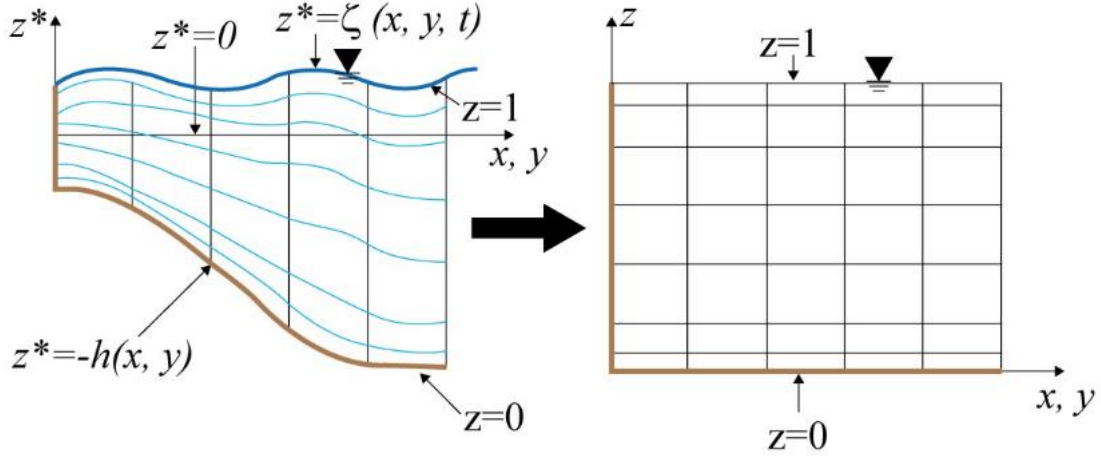


图 2.2. 伸展的垂直坐标系

EFDC+支持 SIG 拉伸网格和 SGZ 网格，用于水柱的垂直离散化。西格玛变换的细节可以在 Blumberg 和 Mellor (1987) 中找到；Hamrick (1986)；Vinokur (1974)。SGZ 垂直分层方案的详细信息见第 2.6.2 节

### 2.1.2 基本流体力学方程

转换湍流运动方程的垂直静水边界层形式，并利用 Boussinesq 近似值计算可变密度，得到动量和连续性方程以及盐度和温度的输运方程，如以下方程所示。

x 方向上的动量方程：

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H u) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u u) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v u) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w u) \\
 & - m_x m_y f H v - \left( v \frac{\partial m_y}{\partial x} - u \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v \\
 & = -m_y H \frac{\partial}{\partial x} (g \zeta + p + P_{atm}) - m_y \left( \frac{\partial h}{\partial x} - z \frac{\partial H}{\partial x} \right) \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_H \frac{\partial u}{\partial x} \right) \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_H \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y}{H} A_v \frac{\partial u}{\partial z} \right) - m_x m_y c_p D_p u \sqrt{u^2 + v^2} + S_u
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

y 方向的动量方程：

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H v) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u v) \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v v) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w v) + m_x m_y f H u + \left( v \frac{\partial m_y}{\partial x} - u \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u \\
 & = -m_x H \frac{\partial}{\partial y} (g \zeta + p + P_{atm}) - m_x \left( \frac{\partial h}{\partial y} - z \frac{\partial H}{\partial y} \right) \frac{\partial p}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_H \frac{\partial v}{\partial x} \right) \\
 & + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_H \frac{\partial v}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y}{H} A_v \frac{\partial v}{\partial z} \right) - m_x m_y c_p D_p v \sqrt{u^2 + v^2} + S_v
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

z 方向的动量方程：

$$\frac{\partial p}{\partial z} = -gH \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} = -gHb \quad (2.4)$$

连续性方程（内模和外模）：

$$\frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y \zeta) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v) + \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w) = S_h \quad (2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y \zeta) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H U) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H V) = S_h \quad (2.6)$$

其中  $u$  和  $v$  是深度积分的水平速度，

$$U = \int_0^1 u dz, \quad V = \int_0^1 v dz \quad (2.7)$$

水密度的状态方程：

$$\rho = \rho(p, S, T, C) \quad (2.8)$$

盐度  $S$  和温度  $T$  的连续性方程；

$$\frac{\partial}{\partial t}(mHS) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u S) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v S) + \frac{\partial}{\partial z}(m w S) = \frac{\partial}{\partial z}(m H^{-1} A_b \frac{\partial}{\partial z} S) + Q_S \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(mHT) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u T) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v T) + \frac{\partial}{\partial z}(m w T) = \frac{\partial}{\partial z}(m H^{-1} A_b \frac{\partial}{\partial z} T) + Q_T \quad (2.10)$$

$u$ 、 $v$  是曲线坐标 (m/s) 中的水平速度分量，

$x$ 、 $y$  是水平方向 (m) 上的正交曲线坐标，

$z$  是 sigma 坐标（无量纲），

$t$  是时间 (s)，

$m_x$ 、 $m_y$  是度量张量（无量纲）的对角线分量的平方根，

$m$  是度量张量行列式的雅可比行列式（无量纲）， $m = m_x m_y$ ，

$p$  是超过参考密度静水压力 ( $m^2/s^2$ ) 的物理压力，

$p_{atm}$  是通过参考水密度 ( $m^2/s^2$ ) 归一化的正压压力，

$\rho_0$  为参考水密度 ( $kg/m^3$ )，

$b$  是浮力，

$f$  是 Coriolis 参数 (1/s)，

$AH$  是水平动量和质量扩散率 ( $m^2/s$ )，

$A_v$  是垂直湍流涡流粘度 ( $m^2/s$ ) ,

$c_p$  是植被阻力系数 (无量纲) ,

$D_p$  是垂直于每单位水平面积流量的投影植被面积 (无量纲) ,

$S_u$ 、 $S_v$  分别是  $x$  和  $y$  方向上的水平动量的源/汇项 ( $m^2/s^2$ ) ,

$S_h$  是质量守恒方程的源/汇项 ( $m^3/s$ ) ,

$S$  是盐度 (ppt) ,

$T$  是温度( $^{\circ}C$ ) ,

$C$  为总无机悬浮固体 (TSS) ( $g/m^3$ ) , 以及

$U$ 、 $V$  分别是  $x$  方向和  $y$  方向上的深度平均速度分量 ( $m/s$ ) 。

在拉伸的、无量纲的垂直坐标  $Z$  中, 有物理单位的垂直速度为  $W$ , 并与物理垂直速度  $W^*$  相关:

$$w = w^* - z \left( \frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{u}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} + \frac{v}{m_y} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) + (1-z) \left( \frac{u}{m_x} \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{v}{m_y} \frac{\partial h}{\partial y} \right) \quad (2.11)$$

其中,

$W$  为 SIG 坐标下的垂直速度分量( $m/s$ ),

$W^*$ 为物理垂直速度 ( $m/s$ ) 。

压力  $p$  是超过参考密度静水压力  $\rho_0 g H (1-z)$  的物理压力除以参考密度  $\rho_0$ 。在动量方程 (2.2) 和 (2.3) 中, 动量源/汇项  $S_u$  和  $S_v$  后来被建模为亚网格尺度的水平扩散。对于水圈流, 密度  $\rho$  通常是温度  $T$  和盐度  $S$  的函数, 对于大气流, 密度是水蒸气的函数。密度可以是压力的弱函数, 但在滞弹性近似下, 水在连续性方程中被视为不可压缩流体 (Clark 和 Hall, 1991; Mellor, 1991) 。

方程 (2.4) 中定义的浮力  $b$  是密度与参考值的归一化偏差。连续性方程 (2.5) 已在区间  $(0,1)$  内相对于  $z$  进行积分, 以使用垂直边界条件  $w=0$ , 在  $z=(0,1)$ , 值得注意的是, 将自由表面位移约束为与时间无关且空间恒定, 产生了 Semtner Jr (1974) 使用的刚性盖海洋环流方程和类似于 Clark (1977) 使用的地形跟随方程的方程的等价物, 以模拟中尺度大气流。

### 2.1.3 状态方程

如果水密度取决于温度和盐度, 联合国教科文组织(UNESCO)的状态方程 (UNESCO,

1981) 如下

$$\begin{aligned} \rho = & 999.842594 + 6.793952 \times 10^{-2} T - 9.095290 \times 10^{-3} T^2 \\ & + 1.001685 \times 10^{-4} T^3 - 1.120083 \times 10^{-6} T^4 + 6.536332 \times 10^{-9} T^5 \\ & + \left( 0.824493 - 4.0899 \times 10^{-3} T + 7.6438 \times 10^{-5} T^2 \right. \\ & \quad \left. - 8.2467 \times 10^{-7} T^3 + 5.3875 \times 10^{-9} T^4 \right) S \\ & + \left( -5.72466 \times 10^{-3} + 1.0227 \times 10^{-4} T - 1.6546 \times 10^{-6} T^2 \right) S^{1.5} + 4.8314 \times 10^{-4} S^2 \end{aligned} \quad (2.12)$$

其中,

$\rho$  为水密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),

$T$  是水温( $^{\circ}\text{C}$ ), 以及

$S$  是水的盐度 (ppt)。

在水柱中存在沉积物的情况下, 使用校正因子来校正水密度和浮力。根据 Tetra Tech (2007a), 水密度的校正系数为

$$C_{TSS} = 1 - \sum_j^N \rho_{s,j} C_j + \sum_j^N (s_j - 1) \rho_{s,j} C_j \quad (2.13)$$

其中,

$C_{TSS}$  是考虑沉积物对水密度影响的校正因子 (无量纲),

$\rho_{s,j}$  为  $j$  类沉积物的沉积物密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ),

$C_j$  是  $j$  类沉积物的浓度 ( $\text{g}/\text{m}^3$ ),

$s_j$  是  $j$  类沉积物的比重 (无量纲), 以及

$N$  是沉积物类别的数量。

#### 2.1.4 垂直紊流闭合

从方程 (2.2) 到 (2.11) 的八个方程组为变量  $u$ 、 $v$ 、 $w$ 、 $p$ 、 $\zeta$ 、 $q$  和  $C$  提供了一个封闭系统, 前提是指定了垂直湍流粘度和扩散率以及源项和汇项。为了提供垂直湍流粘度和扩散率, 可以使用由 Mellor 和 Yamada (1982) 开发并由 Galperin 等人 (1988) 修改的二阶矩湍流闭合模型。该模型将垂直湍流粘度和扩散率与湍流强度 ( $q^2$ )、湍流长度尺度 ( $l$ ) 和理查森 (Richardson) 数 ( $Rq$ ) 联系起来, 如以下方程所示。

垂直湍流动量扩散系数为:

$$A_v = \phi_A A_0 q l, \quad (2.14)$$

其中,  $\phi_A$  是稳定性粘度系数, 可定义为:

$$\phi_A = \frac{(1 + R_q/R_1)}{(1 + R_q/R_2)(1 + R_q/R_3)} \quad (2.15)$$

此外, 方程式 (2.14) 和 (2.15) 中的变量定义如下:

$$A_0 = A_1 \left( 1 - 3C_1 - \frac{6A_1}{B_1} \right) = \frac{1}{B_1^{1/3}} \quad (2.16)$$

$$\frac{1}{R_1} = 3A_2 \frac{(B_2 - 3A_2) \left( 1 - \frac{6A_1}{B_1} \right) - 3C_1 (B_2 + 6A_1)}{1 - 3C_1 - \frac{6A_1}{B_1}} \quad (2.17)$$

$$\frac{1}{R_2} = 9A_1 A_2 \quad (2.18)$$

$$\frac{1}{R_3} = 3A_2 [6A_1 + B_2(1 - C_3)]. \quad (2.19)$$

垂直质量扩散系数定义为:

$$A_b = \rho_K K_0 q l \quad (2.20)$$

式中,  $\phi_K$  是由下式给出的稳定扩散系数:

$$\phi_K = \frac{1}{(1 + R_q/R_3)} \quad (2.21)$$

$K_0$  为无量纲系数:

$$K_0 = A_2 \left( 1 - \frac{6A_1}{B_1} \right) \quad (2.22)$$

Richardson 数可以计算为:

$$R_q = \frac{gH}{q^2} \frac{l^2}{H^2} \frac{\partial b}{\partial z} \quad (2.23)$$

其中,

$q^2$  是湍流强度 ( $\text{m}^2/\text{s}^2$ )

$l$  湍流长度标度 (m), 以及

$R_q$  是理查德森(Richardson)数。

Mellor 和 Yamada (1982) 规定了常数  $A_1=0.92$ ;  $B_1=16.6$ ;  $C_1=0.08$ ;  $A_2=0.74$ ; 并且  $B_2=$

10.1; 然而, 由Galperin等人 (1988) 和Kantha和Clayson (1994) 计算的R1; R2; R3的值与Mellor和Yamada (1982) 不同, 如表2.1所示。

表2.1不同湍流模型的参数

Formulation	$K_0$	$R_1^{-1}$	$R_2^{-1}$	$R_3^{-1}$
Mellor and Yamada (1982)	0.493928	7.846436	34.676400	6.127200
Galperin et al. (1988)	0.493928	7.760050	34.676440	6.127200
Kantha and Clayson (1994)	0.493928	8.679790	30.192000	6.127200
Kantha (2003)	0.490025	14.509100	24.388300	3.236400

所谓的稳定性函数 $\phi_A$ 和 $\phi_K$ 解释了减少和增强的垂直混合或输送, 分别在稳定和不稳定的垂直密度分层环境中。湍流强度和湍流长度尺度由一对Mellor和Yamada (1982) 方程确定:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (mHq^2) + \frac{\partial}{\partial x} (Pq^2) + \frac{\partial}{\partial y} (Qq^2) + \frac{\partial}{\partial z} (mwq^2) \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_q}{H} \frac{\partial q^2}{\partial z} \right) 2m \frac{A_v}{H} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] + 2mgA_b \frac{\partial b}{\partial z} - 2m \frac{Hq^3}{B_1 l} + S_b \end{aligned} \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (mHq^2 l) + \frac{\partial}{\partial x} (Pq^2 l) + \frac{\partial}{\partial y} (Qq^2 l) + \frac{\partial}{\partial z} (mwq^2 l) \\ &= \frac{\partial}{\partial z} \left[ m \frac{A_{ql}}{H} \frac{\partial}{\partial z} (q^2 l) \right] + mlE_1 \left\{ \frac{A_v}{H} \left[ \left( \frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + \left( \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right] + E_3 g A_b \frac{\partial b}{\partial z} \right\} \\ & \quad - mE_2 \frac{Hq^3}{B_1} \left[ 1 + E_4 \left( \frac{l}{\kappa H z} \right)^2 + E_5 \left( \frac{l}{\kappa H (1-z)} \right)^2 \right] + S_l \end{aligned} \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{L} = \frac{1}{H} \left( \frac{1}{z} + \frac{1}{1-z} \right), \quad (2.26)$$

其中,

$E_1=1.8$ ;  $E_2=1.0$ ;  $E_3=1.8$ ;  $E_4=1.33$ ;  $E_5=0.25$ , 是经验常数,

$S_q$  是湍流强度方程的源-汇项,

$S_l$  是湍流长度尺度方程的源-汇项,

$A_q$  湍流强度方程的垂直湍流扩散率, 以及

$A_{ql}$  是湍流长度尺度方程的垂直湍流扩散率

在 Mellor 和 Yamada(1982)之后, 湍流强度的垂直扩散系数  $A_q$  被设定为  $0.2q_l$ 。对于稳定分层, Galperin 等 (1988) 建议限制长度尺度, 使  $R_q$  的平方根小于 0.53。

### 2.1.5 水平湍流闭合

当水平湍流粘度、 $A_H$  和扩散率被包括在动量和输运方程中时，它们是使用 Smagorinsky 的亚网格尺度闭合公式独立确定的 (Smagorinsky, 1963)：

$$A_H = C_s \Delta x \Delta y \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x}\right)^2}, \quad (2.27)$$

其中  $C_s$  是称为 Smagorinsky 系数的水平混合常数， $\Delta x$  和  $\Delta y$  分别是  $x$  和  $y$  方向上的网格尺寸。 $C_s$  的值在 0.1 到 0.2 之间，具有决定亚网格尺度耗散强度的作用 (Xiao 和 Cinnella, 2019)。

Canuto 和 Cheng (1997) 建议使用 0.11 的常数值。然而，Canuto 和 Cheng (1997) 也反对这是一种普遍价值观的观点。相反， $C_s$  反映了不同流量的物理过程的组合。事实上， $C_s$  是一个动态变量，它可以根据每一种流量进行调整。Meyers 和 Sagaut (2006) 推导了  $C_s$  的精确表达式，证明  $C_s$  取决于特定流量和网格大小，表明它应该被视为一个不确定的量。

### 2.2 边界条件和外力

动量方程 (2.2) 和 (2.3) 求解的垂直边界条件基于自由水面和河床处的运动剪切应力规范。

湍流动能和长度尺度方程的垂直边界条件为：

$$q^2 = B_1^{2/3} \sqrt{t_{sx}^2 + t_{sy}^2}, \quad l = 0, \text{ at } z = 1 \quad (2.28)$$

$$q^2 = B_1^{2/3} \sqrt{t_{bx}^2 + t_{by}^2}, \quad l = 0, \text{ at } z = 0 \quad (2.29)$$

在与高近底沉积物浓度和/或高频表面波活动有关的几种情况下，方程 (2.29) 可能变得不合适。

#### 2.2.1 底部摩擦

在床层，应力分量通过二次方程式阻力公式与近床层或底层速度分量相关，：

$$\frac{1}{\rho_w} \begin{bmatrix} \tau_{bx} \\ \tau_{by} \end{bmatrix} = C_b \sqrt{u_1^2 + v_1^2} \begin{bmatrix} u_1 \\ v_1 \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

其中，

$\rho_w$  是水的密度；

$\tau_{bx}$  和  $\tau_{by}$  分别是由于  $x$  和  $y$  方向上的摩擦而产生的底部阻力，以及

$u_1$  和  $v_1$  分别是第 1 层在  $x$  和  $y$  方向上的水流速度。

其中下标 1 表示底层值。假设近底流速剖面在任何时刻都是对数的，底部应力系数由 Nezu



(1993) 给出。

$$C_b = \left[ \frac{\kappa}{\ln(\Delta_1/2z_0) + (\Pi - 1)} \right]^2 \quad (2.31)$$

其中，

$\kappa$  是冯·卡曼(von Karman)常数，

$\Delta_1$  是底层的无量纲厚度，

$z_0 = z_o^*/H$  为无量纲粗糙度高度，以及

$\Pi$  是尾流强度参数。 $\Pi$  从低雷诺数时的0变化到完全湍流时的0.2。 $\Pi$  假设为0.0。

## 2.2.2 植被

### 2.2.2.1 水动力反馈

植物施加的阻力降低了植被区域内的平均流量。植被影响平均速度，以及湍流强度及其扩散。EFDC+中植被的概念框架如图 2.3 所示。

为了捕捉植被对流动动力学的影响，动量方程 (2.2) 和 (2.3) 中包含了一个额外的阻力项  $D_p$ ，以表示流动的物理障碍。植被对湍流强度和湍流长度尺度的影响通过在方程 (2.24) 和 (2.25) 中添加额外的与冠层相关的湍流项表示为：

$$\begin{aligned} & \partial_t(m_x m_y H q^2) + \partial_x(m_y H u q^2) + \partial_y(m_x H v q^2) + \partial_z(m_x m_y w q^2) \\ & = \partial_z(m_x m_y \frac{A_q}{H} \partial_z q^2) - 2m_x m_y \frac{H q^3}{B_1 l} \\ & + 2m_x m_y \left( \frac{A_v}{H} \left( (\partial_z u)^2 + (\partial_z v)^2 \right) + g K_v \partial_z b + \partial_p c_p D_p (u^2 + v^2)^{3/2} \right) + Q_q \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\begin{aligned} & \partial_t(m_x m_y H q^2 l) + \partial_x(m_y H u q^2 l) + \partial_y(m_x H v q^2 l) + \partial_z(m_x m_y w q^2 l) \\ & = \partial_z \left( m_x m_y \frac{A_{ql}}{H} \partial_z (q^2 l) \right) - m_x m_y E_2 \frac{H l q^3}{l B_1} \left( 1 + E_4 \left( \frac{l}{\kappa K_z} \right)^2 + E_5 \left( \frac{l}{\kappa H (1-z)} \right)^2 \right) \\ & + m_x m_y l \left( E_1 \frac{A_v}{H} \left( (\partial_z u)^2 + (\partial_z v)^2 \right) + E_3 g K_v \partial_z b + E_1 \eta_p c_p D_p (u^2 + v^2)^{3/2} \right) + Q_l \end{aligned} \quad (2.33)$$

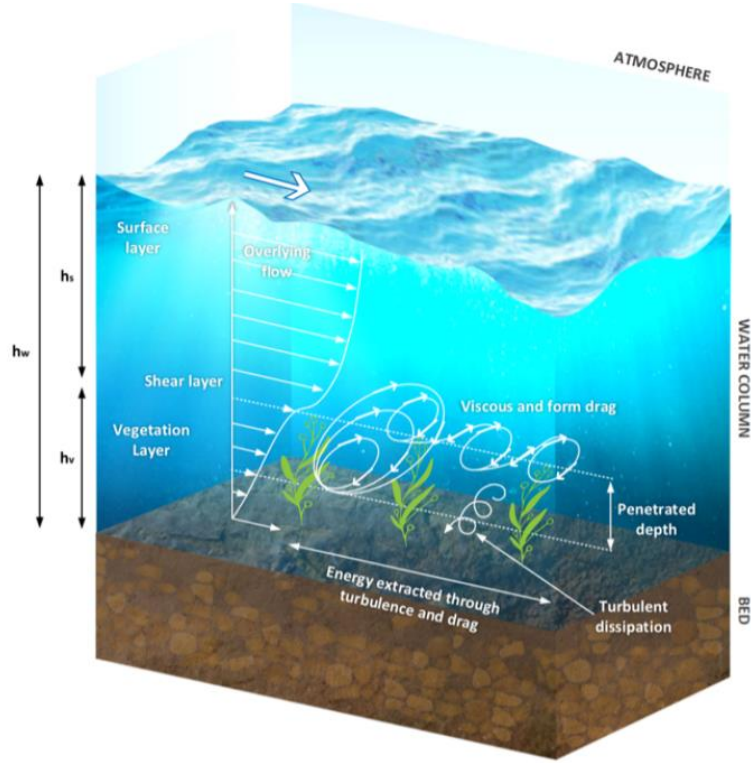


图 2.3. 植被概念框架

在方程 (2.32) 和 (2.33) 中，最后一行的第二项表示植被阻力产生的净湍流能量，其中  $c_p$  是一个生产效率因子，其值小于 1。

#### 2.2.2.2 阻力系数估算

阻力系数的规定对于描述冠层的行为至关重要。影响阻力系数表征的因素包括流量条件、冠层密度和冠层元件的形状 (Ghisalberti & Nepf, 2004)。对于浸没式和悬挂式雨棚，有限圆柱体对阻力系数有影响。另一方面，Wu 等人 and O'Donncha 等人报道了在紧急遮篷的深度平均模型中，阻力系数随着遮篷密度的增加而增加。

体积阻力系数作为无量纲水产养殖冠层密度的函数的表达式可以通过拟合 (Plew, 2011) 和 (Scott 和 O'Donncha, 2019) 的实验数据得出：

$$\bar{C}_D = 2.0 - 67ad \quad (2.34)$$

其中  $ad$  是无量纲的冠层密度。

沿雨棚圆柱体归一化长度的深度变化阻力系数可以表示为

$$C_D(\zeta) = \bar{C}_D (1.2 + 0.8\zeta - 0.5\zeta^2) \quad (2.35)$$

其中  $\zeta$  是距水面的距离，通过树冠长度的露出部分进行归一化。

### 2.2.3 风力

风对流体力学的影响是由于施加在水面上的风切变应力。在自由表面，应力的x和y分量由风应力指定：

$$\frac{1}{\rho_w} \begin{bmatrix} \tau_{sx} \\ \tau_{sy} \end{bmatrix} = C_D \frac{\rho_a}{\rho_w} W_s \begin{bmatrix} W_{sx} \\ W_{sy} \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

$$W_s = \sqrt{W_{sx}^2 + W_{sy}^2} \quad (2.37)$$

其中，

$W_s$ 、 $W_{sx}$ 和 $W_{sy}$ 分别是高于水面10米的风速、x和y方向的风速。

$\tau_{sx}$ 和 $\tau_{sy}$ 分别是由x和y方向的风引起的表面阻力，

$C_D$ 是风阻系数，且

$\rho_a$ 和 $\rho_w$ 分别为空气密度和水密度。

EFDC+提供了四种计算风阻系数的选项。

1. 在有很大遮蔽和无定向遮蔽的情况下，原始风阻系数可以计算为：

$$C_D = \begin{cases} 3.83111 \times 10^{-5} W_s^{-3} - 0.000308715 W_s^{-2} \\ \quad + 0.00116012 W_s^{-1} + 0.000899602, & W_s < 5m/s \\ -5.37642 \times 10^{-6} W_s^3 + 0.000112556 W_s^2 \\ \quad - 0.000721203 W_s + 0.00259657, & 5m/s \leq W_s < 7m/s \\ -3.99677 \times 10^{-7} W_s^2 + 7.32937 \times 10^{-5} W_s \\ \quad + 0.000726716, & W_s \geq 7m/s \end{cases} \quad (2.38)$$

2. 第二个选项是对原始EFDC风阻（选项1）的修改，其中风速相对于水流速度计算。

$$W_{sx} = W_{sx} - u_s \quad (2.39)$$

$$W_{sy} = W_{sy} - v_s \quad (2.40)$$

式中， $u_s$ 和 $v_s$ 分别为x和y方向上的地表水速度。

3. 第三种选择来自欧洲中期天气预报中心（ECMWF），基于其耦合大气波模型（Hersbach, 2011）计算的粗糙度，根据波浪年龄相关表面确定了风速相关阻力系数。

风速依赖公式如下：

$$C_D = [c_1 + c_2 (W_s)^{p_1}] / (W_s)^{p_2} \quad (2.41)$$

其中， $c_1 = 1.03 \times 10^{-3}$ ； $c_2 = 0.04 \times 10^{-3}$ ； $p_1 = 1.48$ ； $p_2 = 0.21$ 。

4. 第四种选择是COARE3.6，基于体积动量和热量的简化方法，这种方法由Fairall等人（1996年）、Fairall等（2003年）和Edson等人（2013年）描述。这个方法在EFDC+中实施是通过在模拟过程中假设在中性大气条件下。Edson等人（2013）将该假设下使用的基本方程描述为如下。

基于维度论证，预计水面动量交换将达到一定规模作为风速的平方：

$$\tau = \rho_a C_D U_r^2 \quad (2.42)$$

其中， $\tau$ 是动量通量或表面应力； $\rho_a$ 是空气密度； $C_D$ 是动量的传递系数（即阻力系数）； $U_r$ 是相对于水的流速（即空气-水的速度差）。

在中性大气条件下， $C_D$ 作为测量高度（ $z$ ）和表面粗糙度（ $z_0$ ）的函数进行计算：

$$C_D = \left[ \frac{\kappa}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)} \right]^2 \quad (2.43)$$

COARE算法通过将表面粗糙度分成两项来参数化表面粗糙度：

$$z_0 = z_0^{\text{smooth}} + z_0^{\text{rough}} = \gamma \frac{\nu}{u_*} + \alpha \frac{u_*^2}{g} \quad (2.44)$$

其中 $z_0^{\text{smooth}}$ 表示海洋在空气动力学平滑时的“粗糙度”，表面应力由粘性剪切支撑。第二项 $z_0^{\text{rough}}$ 表示实际粗糙度，由表面重力波形式的风应力驱动的元素（Fairall等人，1996）。 $\gamma$ 是光滑流动的粗糙雷诺数，实验室测定值为0.11； $\nu$ 是动力学粘度； $\alpha$ 是查诺克系数； $u_*$ 是摩擦速度。

5. EFDC+10.4版中有一个新选项，允许以下形式的用户自定义的风阻关系：

$$C_D = \begin{cases} C_1, & W_s \leq W_1 \\ C_1 + \frac{C_2 - C_1}{W_2 - W_1} (W_s - W_1), & W_1 < W_s < W_2 \\ C_2, & W_s \geq W_2 \end{cases} \quad (2.45)$$

其中，

$W_1$ 和 $W_2$ 分别是线性风阻关系的下限风速和上限风速，以及 $C_1$ 和 $C_2$ 分别表示线性风阻关系的下限和上限风阻系数。

一些线性风阻关系的值可在表2.2中找到。

表2.2 不同线性风阻关系的值

方程	W1(m=s)	W2(m=s)	C1(10 <sup>-3</sup> )	C2(10 <sup>-3</sup> )
Francis (1951)	1	25	1.3	32.5
Sheppard (1958)	1	20	0.914	3.08
Wilson (1960)	2.8	20	1.1	2.6
Deacon and Webb (1962)	1	14	1.07	1.98
Heaps (1965)	5	19.2	0.565	2.513
Smith and Banke (1975)	6	21	1.06	2.185
Garratt (1977)	4	21	1.018	2.157
Large and Pond (1981)	10	26	1.14	2.18
Wu (1982)	1	80	0.865	6.0
Anderson (1993)	4.5	21	0.81	1.98
Yelland and Taylor (1996)	6	26	1.02	2.42
Yelland et al. (1998)	6	26	0.926	2.346

### 2.2.3 风压力

风对流体动力学的影响是由于施加在水面上的风切应力。在自由表面，应力的 x 和 y 分量由风应力指定：

$$\frac{1}{\rho_w} \begin{bmatrix} \tau_{sx} \\ \tau_{sy} \end{bmatrix} = C_D \frac{\rho_a}{\rho_w} W_s \begin{bmatrix} W_{sx} \\ W_{sy} \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

$$W_s = \sqrt{W_{sx}^2 + W_{sy}^2} \quad (2.37)$$

其中，

Ws、Wsx 和 Wsy 分别是水面以上 10 米处的风速以及风速 (m/s) 的 x-和 y-分量，

τsx 和 τsy 分别是由于 x 和 y 方向上的风引起的表面阻力，

CD 为风阻力系数

ρa 和 ρw 分别为空气密度和水密度。

EFDC+ 提供了四种计算风阻系数的选项。

1.在有量级遮挡和无定向遮挡的情况下，原风阻系数可计算为

$$C_D = \begin{cases} 3.83111 \times 10^{-5} W_s^{-3} - 0.000308715 W_s^{-2} \\ \quad + 0.00116012 W_s^{-1} + 0.000899602, & W_s < 5m/s \\ -5.37642 \times 10^{-6} W_s^3 + 0.000112556 W_s^2 \\ \quad - 0.000721203 W_s + 0.00259657, & 5m/s \leq W_s < 7m/s \\ -3.99677 \times 10^{-7} W_s^2 + 7.32937 \times 10^{-5} W_s \\ \quad + 0.000726716, & W_s \geq 7m/s \end{cases} \quad (2.38)$$

2.第二个选项是对原始 EFDC 风阻力（选项 1）的修改，其中风速是相对于水的速度计算的。

$$W_{sx} = W_{sx} - u_s \quad (2.39)$$

$$W_{sy} = W_{sy} - v_s \quad (2.40)$$

其中， $u_s$  和  $v_s$  分别是 x 方向和 y 方向上的地表水速度。

3.第三种选择来自欧洲中期天气预报中心（ECMWF），该中心根据其耦合大气波浪模型计算的波浪年龄相关表面粗糙度，确定了风速相关阻力系数（Hersbach, 2011）。风速相关公式由下式给出

$$C_D = [c_1 + c_2 (W_s)^{p_1}] / (W_s)^{p_2} \quad (2.41)$$

where,  $c_1 = 1.03 \times 10^{-3}$ ,  $c_2 = 0.04 \times 10^{-3}$ ,  $p_1 = 1.48$ , and  $p_2 = 0.21$ .

4.第四种选择是 COARE3.6 简化方法，该方法基于 Fairall 等人描述的整体动量和热通量算法。（1996）、Fairall 等人（2003）和 Edson 等人（2013）。EFDC+中实现的方法通过在模拟过程中假设中性大气条件而得到简化。Edson 等人（2013）描述了在这种假设下使用的基本方程如下。

根据量纲论证，水面上的动量交换预计将按风速的平方缩放：

$$\tau = \rho_a C_D U_r^2 \quad (2.42)$$

式中， $\tau$ 为动量通量或表面应力； $\rho_a$  是空气的密度； $C_D$  是动量的传递系数（即阻力系数）； $U_r$  是相对于水的风速（即空气-水速度差）。

在中性大气条件的假设下， $C_D$  被计算为测量高度（ $z$ ）和表面粗糙度（ $z_0$ ）的函数：

$$C_D = \left[ \frac{\kappa}{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)} \right]^2 \quad (2.43)$$

COARE 算法通过将表面粗糙度分为两项来参数化表面粗糙度：

$$z_0 = z_0^{\text{smooth}} + z_0^{\text{rough}} = \gamma \frac{V}{u_*} + \alpha \frac{u_*^2}{g} \quad (2.44)$$

其中，当海洋是空气动力学光滑的，表面应力由粘性剪切支撑时， $Z_0^{\text{smooth}}$  表示海洋的“粗糙度”。第二项  $Z_0^{\text{smooth}}$  以表面重力波的形式说明了由风应力驱动的实际粗糙度元素 (Fairall 等人, 1996)。 $\gamma$  是光滑流动的粗糙雷诺数，根据实验室实验确定为 0.11； $\eta$  是运动粘度； $\alpha$  是夏诺克系数； $u^*$  是摩擦速度。

6. EFDC+10.4 版中有一个新选项，允许用户定义的风阻关系，其形式为：

$$C_D = \begin{cases} C_1, & W_s \leq W_1 \\ C_1 + \frac{C_2 - C_1}{W_2 - W_1} (W_s - W_1), & W_1 < W_s < W_2 \\ C_2, & W_s \geq W_2 \end{cases} \quad (2.45)$$

其中，

$W_1$  和  $W_2$  分别是线性风阻关系的下限风速和上限风速，以及

$C_1$  和  $C_2$  分别是线性风阻关系的下限风阻系数和上限风阻系数。

一些线性风阻关系的值可在表 2.2 中找到。

表 2.2 不同线性风阻关系的数值

Formulation	$W_1(m/s)$	$W_2(m/s)$	$C_1(10^{-3})$	$C_2(10^{-3})$
Francis (1951)	1	25	1.3	32.5
Sheppard (1958)	1	20	0.914	3.08
Wilson (1960)	2.8	20	1.1	2.6
Deacon and Webb (1962)	1	14	1.07	1.98
Heaps (1965)	5	19.2	0.565	2.513
Smith and Banke (1975)	6	21	1.06	2.185
Garratt (1977)	4	21	1.018	2.157
Large and Pond (1981)	10	26	1.14	2.18
Wu (1982)	1	80	0.865	6.0
Anderson (1993)	4.5	21	0.81	1.98
Yelland and Taylor (1996)	6	26	1.02	2.42
Yelland et al. (1998)	6	26	0.926	2.346

## 2.2.4 波浪作用

短波对大型水体中流场速度的影响可能是一个重要方面，这一点不容忽视，尤其是在河口和沿海地区。众所周知沿岸海流和暗流是由波浪产生的。波速在其轨道平面上的不对称性为质量运输的原因之一，如沉积物。波浪可能由当地风或由时间较长的远距离风暴引起。在本文件中，风致波理论应用于EFDC+。在EFDC+中，有两个选项可以包括波浪效果；1) 通过

EFDC+内部的Sverdrup、Munk和Bretschneider (SMB) 风浪模块，以及2) 通过外部模拟WAves近岸 (SWAN) 波浪模型 (SWAN团队, 2019)。

在波浪的情况下，除了来自水流的力外，还需要将来自波浪的力相加到整个水柱上，例如辐射应力或由于破碎波中的辊子引起的应力 (Mengguo and Chongren, 2003)。然而，内部EFDC+波模块只考虑辐射应力，这个辐射应力是施加在流场上的附加波浪诱导动量 (Longuet-Higgins和Stewart, 1964)：

$$S_{xx} = n \cos^2 \theta + n - \frac{1}{2} E \quad (2.46)$$

$$S_{xy} = S_{yx} = (n \cos \theta \sin \theta) E \quad (2.47)$$

$$S_{yy} = n \sin^2 \theta + n - \frac{1}{2} E \quad (2.48)$$

其中，

$S_{xx}$ ;  $S_{xy}$ ;  $S_{yx}$ ;  $S_{yy}$ 是波辐射应力的分量，

$E$ 是波浪能 ( $\text{kg/s}^2$ )，

$$E = \frac{1}{8} \rho g H_s^2 \quad (2.49)$$

其中，

$H_s$ 是有效波高 (m)，

$\theta$ 是相对于x轴 (逆时针) 的波方向角的弧度度量，

$k$ 是波数

$$k = \frac{2\pi}{L} \quad (2.50)$$

其中，

$L$ 是波长， $n$ 是群速度与波速之比

$$n = \frac{C_g}{C} = \frac{1}{2} \left[ 1 + \frac{2kh}{\sinh(2kh)} \right] \quad (2.51)$$

其中， $h$ 是水深 (m)。

通常，波长 $L$  (m) 可以通过求解色散关系的非线性方程来计算，如方程 (2.49) 所示。

$$L = \frac{gT^2}{2\pi} \tanh(kh) \quad (2.52)$$

可以使用近似或迭代方法来求解波长的色散关系，例如，EFDC+通过使用近似公式计算波



长 (Hunt, 1979) :

$$L \approx T \sqrt{\frac{1}{d} g h}, \quad (2.53)$$

其中,

$$d = \gamma + \frac{1}{(1 + 0.6522\gamma + 0.4622\gamma^2 + 0.0864\gamma^4 + 0.0675\gamma^5)}, \quad (2.54)$$

$$\gamma = \omega^2 \frac{h}{g} \quad (2.55)$$

其中 $\omega$ 是波角频率 (1/s)

$$\omega = \frac{2\pi}{T}. \quad (2.56)$$

通过波浪雷诺数 ( $R_w$ ) 和相对床层粗糙度  $r$  来确定流态:

$$R_w = \frac{U_b A}{\nu}, \quad r = \frac{A}{k_s} \quad (2.57)$$

其中  $A$  是半轨道偏移,  $k_s$  是 Nikuradse 等效砂粒粗糙度,  $U_b$  是靠近海床的波最大轨道速度。

$$A = \frac{H_s}{2 \sinh(kh)} \quad (2.58)$$

$$U_b = A\omega = \frac{\omega H_s}{2 \sinh(kh)} \quad (2.59)$$

在波浪作用的情况下, 底部摩擦、床层形式 (如波纹) 和床层材料的特性是强烈相互依赖的。根据 Swart (1974), 波浪引起的摩擦系数在方程 (2.60) 中给出。

$$f_w = \begin{cases} e^{(5.21r^{-0.19} - 6.0)} & r > 1.57 \\ 0.3r & r = 1.57 \end{cases} \quad (2.60)$$

## 2.2.5 局部风力产生的波浪

风力是推动湖泊、河口和沿海地区水动力过程和泥沙输移的重要机制。风效应不仅会通过水面的垂直边界条件诱导水流, 还会产生波高为数米的表面波。因此, 总床剪切应力的计算应考虑波浪因素。EFDC+中风力发电波浪的概念框架如图 2.4 所示。

周期为 3 到 25 秒的波浪主要是由风引起的。因此, 风力产生的波浪在流体动力学建模中发挥着重要作用。这种风浪子模型的优点是, 它可以很容易地纳入水动力学模型的源代码中, 而不是运行单独的波浪模型。这意味着水动力学参数的变化在波浪计算中会立即更新。此外, 与其他波浪模型相比, 计算时间缩短。

本节详细介绍了 EFDC++ 中包含的风浪模块的理论基础和测试。数学公式是称为 SMB (Sverdrup, Munk 和 Bretschneider) 模型的经验方程 (Ji, 2008)。

SMB 模型对风力产生的波浪的基本假设是：a) 沿着一个方向吹的风的持续时间足够长，足以达到平衡条件，b) 风速和水深在提取过程中在空间上是均匀的。可以确定主要的波浪参数，包括波高、波浪方向和波浪周期，c) 波浪方向与风向相同，d) 不考虑折射、衍射和反射的影响。波浪高度和周期可以在 SMB 模型中定义为：

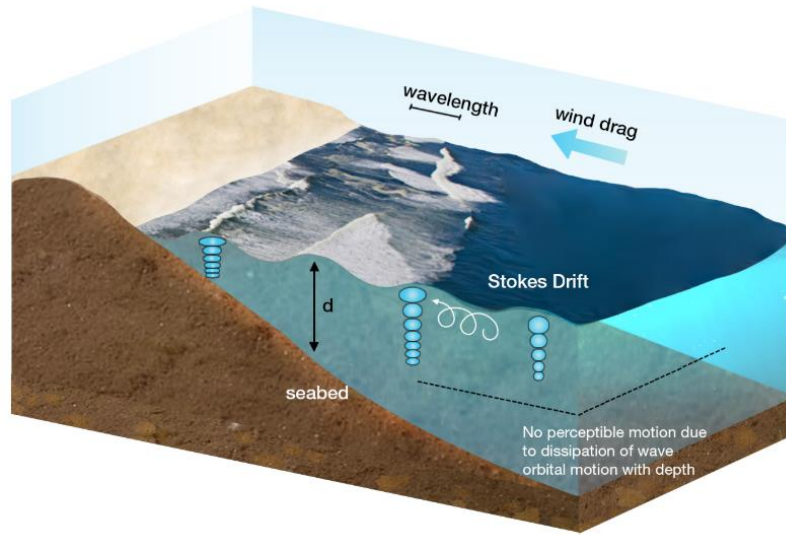


图 2.4 风浪的概念框架。

$$H_s = 0.283a \frac{W_s^2}{g} \tanh \left( \frac{0.0125}{\alpha} \left( \frac{gF}{W_s^2} \right)^{0.42} \right) \quad (2.61)$$

$$T_p = 7.54\beta \frac{W_s}{g} \tanh \left( \frac{0.077}{\beta} \left( \frac{gF}{W_s^2} \right)^{0.25} \right) \quad (2.62)$$

其中，

$$\alpha = \tanh \left\{ 0.53 \left( \frac{gH}{W_s^2} \right)^{0.75} \right\}, \text{ and} \quad (2.63)$$

$$\beta = \tanh \left\{ 0.833 \left( \frac{gH}{W_s^2} \right)^{0.375} \right\} \quad (2.64)$$

其中，

$H_s$  是波浪高度 (m) ，

$T_p$  是波动周期 (s) ，

$H$  为水深 (m) ，

$W_s$  是风速 (m/s) ， 以及

F 是在逆风方向上从陆地边界到小区的提取长度 (m) , 并且是针对 16 个方向计算的。

### 2.2.6 谐波强迫

EFDC+中的开放边界条件支持定义为时间序列的强迫和调和强迫的组合。这允许用户对河口或沿海地区可能发生潮汐、河流流量或风暴潮影响的情况进行建模。

时间序列 $\zeta(t)$ 的谐波表示可以近似为正弦函数和余弦函数的组合:

$$\zeta(t) = \zeta_0(t) + a_0 + \sum_{k=1}^N [a_k \cos(\omega_k t) + b_k \sin(\omega_k t)] \quad (2.65)$$

其中,

t 是时间 (s)

$\zeta_0(t)$  是除周期分量 (m) 之外的剩余信号,

$a_0$  是周期分量的平均值 (m)

N 是谐波成分的数量

$a_k, b_k$  是成分 k (m) 的谐波常数, 以及

$\omega_k$  是成分 k 的角速度 (弧度/秒)。

成分k的角速度可以计算为

$$\omega_k = \frac{2\pi}{T_k} \quad (2.66)$$

其中,  $T_k$  是周期成分k (s)。

方程 (2.62) 也可以用另一种常见形式改写:

$$\zeta(t) = \zeta_0(t) + a_0 + \sum_{k=1}^N A_k \cos(\omega_k t - \phi_k) \quad (2.67)$$

其中,  $A_k$  是谐波分量k (m) 的振幅:

$$A_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2} \quad (2.68)$$

其中,  $\phi_k$  是谐波成分k (弧度) 的相位滞后:

$$f_k = \arctan\left(\frac{b_k}{a_k}\right) \quad (2.69)$$

### 2.2.7 水工建筑物

水工建筑物可以在EFDC+中通过额定曲线或水力方程进行建模。额定曲线为查找表，其显示通过结构的流速和水头之间的关系。根据结构在某一时间步长的实际水头，使用查找表确定流速。EFDC+允许使用各种额定曲线来确定流量，a)上游水深；b)水头差（上游和下游之间），c)水头差值和水流加速度，d)上游和下游水面高程，e)上游低弦结构的水深，f)低弦结构的水头差。

最后两种额定曲线使用低弦结构，如桥梁。对于低弦结构，当水流低于桥面时，水流可能是双向的，即水可以从上游流向下游，反之亦然。然而，一旦大桥漫顶，水流只能从上游流向下游。

### 2.2.7.1 额定曲线

如果通过结构的流动是单向的，即流动方向仅仅是从上游到下游。额定曲线是一个查找表，由一系列水头和一系列对应的流量组成。

如果通过结构的流量是双向的，则额定曲线是二维查找表，其中可以基于上游和下游水面高程来确定流速。

除了使用查找表，EFDC+还可以模拟内部不同类型的水工结构。这允许用户在EFDC+中快速轻松地模拟水力结构。水工建筑物的内置建模代码包括涵洞、堰、水闸和孔口。

### 2.2.7.2 涵洞

通过涵洞或水闸的流量在EFDC+中根据结构物两侧的水位进行计算。在潮汐区，建筑物两侧的水位变动会导致双向流动。通过涵洞的水流特性是复杂的，由入口几何形状、坡度、形状、尺寸、粗糙度、接近度、水头和尾水条件决定。Dill (2011) 根据涵洞内控制断面的位置、水头和尾水的相对高程，以及涵洞仰拱和拱顶高程描述了六种类型的涵洞流量。通过涵洞的流量可表示为：

$$Q = AV = AC\sqrt{RS} = K\sqrt{S} \quad (2.70)$$

其中Q是流量（m<sup>3</sup>/s），A是横截面流动面积（m<sup>2</sup>），R是水力半径（m），S是涵洞坡度（分数），k是输水量（m<sup>3</sup>/S），C是Chezy系数（m<sup>0.5</sup>/s）可以使用曼宁公式计算：

$$C = \frac{1}{n}R^{\frac{1}{6}} \quad (2.71)$$

式中，n为曼宁粗糙系数。

出现四种不同的情况，取决于尾水和水头的高程与涵洞的高度的比较。

以下情况“a”至“d”描述了这些条件的处理：

a) 如果尾水大于涵洞高度或水头大于涵洞的 1.5 倍高度，涵洞出口淹没，假设涵洞满流。

坡度估计为上游和尾水高程差除以涵洞长度  $L$  (m)，确定整个涵洞的输水量，并通过方程式 (2.70) 计算流量。

b) 如果入口和出口均未浸没，则计算临界深度 ( $y_c$ )，假设自由流通过涵洞入口。在这种情况下，假设进场速度可以忽略不计，因此涵洞入口处的总能量等于水头。因此

$$H_{HW} = y_c + \frac{V_c^2}{2g} \quad (2.72)$$

其中，

$H_{HW}$  是水头 (m)

$V_c$  是临界流速 (m/s)

$y_c$  是临界水深 (m)

$g$  是重力加速度

对于通过涵洞的临界流量：

$$\frac{V_c^2}{2g} = \frac{D}{2} \quad (2.73)$$

其中  $D$  为水力深度 (m)：

$$D = \frac{A}{T} \quad (2.74)$$

$T$  是流顶宽度 (m)。将方程 (2.72) 和 (2.73) 组合得出临界深度，

$$y_c = H_{HW} - \frac{D}{2} \quad (2.75)$$

其中  $H_{TW}$  是尾水 (m)。

一旦确定了临界深度，临界速度  $V_c$ ；临界流量  $Q_{cr}$  和临界坡度  $S_{cr}$  也计算出来了。临界流量代表通过给定水头的涵洞的最大可能流量，如等式 (2.76) 所示，

$$Q_{cr} = V_c A \quad (2.76)$$

如果涵洞坡度大于临界坡度，则涵洞将输送的流量比入口允许的流量更多。因此，入口控制流量，假设流量等于临界流量 $Q_{cr}$ ，根据方程 (2.76) 计算。

c) 如果涵洞坡度小于临界坡度，则控制段可位于涵洞出口处或涵洞下游。然后将临界深度与尾水进行比较，如果尾水为大于临界深度时，尾水高程用于确定水流面积和水力半径，使用方程 (2.70) 计算通过涵洞的流量。

d) 如果尾水深度小于临界深度，但坡度小于临界坡度，则为假设涵洞内会出现均匀流动。在这种情况下，势能由涵洞内摩擦引起的水头损失平衡，控制段和进水口之间的能量守恒可表示为：

$$H_{HW} = y_n + \frac{V^2}{2g} \quad (2.77)$$

其中， $y_n$ 是涵洞的正常深度 (m)， $V$ 是控制断面的平均速度。还假设进场速度可忽略不计，且坡度较小，深度近似等于垂直深度。

方程式 (2.70) 可改写为控制段的速度头表达式：

$$V = \frac{1}{n} R^{\frac{2}{3}} \sqrt{S} \quad (2.78)$$

结合方程 (2.77) 和 (2.78) 得出正常深度的方程

$$y_n = H_{HW} - \frac{1}{2g} \frac{1}{n^2} R^{\frac{4}{3}} S \quad (2.79)$$

因为  $R$  是深度的函数，所以采用自适应程序来确定正常深度。在双向流动的涵洞中，坡度可能是负数或为零。无论哪种情况，均匀流假设都是有问题的，因为水面坡度不能等于涵洞坡度。在这种情况下，根据水头和尾水的高程差确定的水面坡度在方程 (2.79) 中使用。

### 2.2.7.3 堰

通过堰的自由流的一般公式可以表示为

$$Q = C_d W \sqrt{2g H_{HW}^3} \quad (2.80)$$

式中， $W$ 为堰宽 (m)， $C_d$ 为堰流量系数。该系数取决于堰的类型（宽顶或尖顶/窄顶，卵形）、开口形状（矩形、三角形、梯形）和其他堰参数。

对于通过堰的淹没流，调整系数应用于方程 (2.80)，以说明淹没，在方程 (2.81) 中

给出 (Villmonte, 1947)。

$$Q = \left(1 - \frac{H_{TW}}{H_{HW}}\right)^{0.385} C_d W \sqrt{2gH_{HW}^3} \quad (2.81)$$

#### 2.2.7.4 水闸门

通过水闸的水流可以由两个基本参数表征：水流的平静（即亚临界或超临界流）和水深（即闸门是否浸没）。

对超临界堰流，使用以下方程式：

$$Q = C_1 W \sqrt{g \left(\frac{2}{3} H_{HW}\right)^3} \quad (2.82)$$

对次临界堰流：

$$Q = C_2 W H_{TW} \sqrt{2g(H_{HW} - H_{TW})} \quad (2.83)$$

其中，

$C_1$  是超临界流量系数，

$C_2$  是亚临界流量系数，

$H_{HW}$  为源头 (m)，

$H_{TW}$  为尾水 (m)，

$W$  是闸门的宽度 (m)，以及

$g$  是重力加速度。

当确定水面低于闸门顶部时，闸门被建模为宽顶堰，使用方程 (2.80)。当闸门浸没时，自由闸流（超临界）或淹没孔口流（亚临界）的任意一个适当的方程可以被应用。要确定在给定的模型时间步长下通过闸门的流量，将源水与尾水进行比较。

对于自由闸流量，使用方程 (2.84)：

$$Q = C_3 A \sqrt{2gH_{HW}} \quad (2.84)$$

类似地，对于浸没式孔板，使用方程 (2.85)。

$$Q = C_4 A \sqrt{2g(H_{HW} - H_{TW})} \quad (2.85)$$

其中，

$C_3$  是自由闸流量的流量系数，

$C_4$  是淹没孔板流量的流量系数，以及

$A$  是闸门开口面积 ( $m^2$ )

如果尾水与源水之比小于0.64，则采用超临界流方程 (2.81)。如果尾水与源水之比大于0.68时，采用亚临界流的方程 (2.82)。这是用于超临界流的自由闸门，或用于亚临界流的淹没孔口。如果尾水与源水之比在0.64和0.68之间，这两个流量都计算得出来，使用两者的加权平均值。

### 2.2.7.5 孔口

如果源头低于孔口的开口，则通过孔口的流量被视为堰流，并且使用方程 (2.80)。如果尾水高于孔口开口，则方程 (2.85)，通过孔口的浸没流将应用。如果源头高于孔口开口，但尾水低于孔口的开口，通过孔口的自由射流计算如下

$$Q = C_2 A \sqrt{2g(H_{HW} + 0.5B)} \quad (2.86)$$

式中， $B$  为孔口开口高度 ( $m$ )， $H_{HW}$  根据孔口中心线计算。

### 2.2.7.6 掩模

在EFDC+中，“掩模”被实现为跨网格流动面的屏障，以完全或部分阻断模型域中网格之间的流动。在带有遮罩的单元格的U或V面上，“*Draft Depth*”和“*Bottom Sill Height*”分别定义为水面上浮动或固定物体的厚度和底床上结构的高度。如果“*Draft*”和“*Bottom Sill*”之间的间距等于0，则单元格面部完全堵塞，否则部分堵塞。

阻挡掩模可用于局部模拟结构障碍物，如防波堤和堤道与模型网格对齐，但在一个方向上具有远小于单元大小或网格间距的宽度。

### 2.2.8 螺旋桨清洗

EFDC+螺旋桨清洗模块模拟船舶交通造成的沉积物再悬浮和运输过程，具有流体动力学、沉积物运输和螺旋桨清洗效应的完全耦合表示。利用船舶交通数据，该模块基于独立的子网格计算每艘船的螺旋桨冲刷效应（例如，流速、剪切应力、沉积物侵蚀率），该子网格代表船舶后面的螺旋桨冲刷射流区域。在模拟过程中，还计算了螺旋桨旋转引起的船舶位置的动量通量。



然后，将螺旋桨冲洗结果与模型模拟中流体动力学和泥沙输移计算的每个时间步长的模型网格单元相关联。有关 EFDC+螺旋桨清洗模块的理论基础和算法结构的详细信息，请参阅 DSI (2021)。

螺旋桨冲洗可能会对水柱中成分的流体动力学和运输过程产生重大影响，尤其是在船舶流量大的区域。EFDC+螺旋桨清洗模块可以选择将与螺旋桨流出速度相关的动量添加到 3D 流体动力学流场中作为源项。如果激活此选项，EFDC+流体动力学模型在计算下一时间步长的 3D 流体动力学流场时会包括螺旋桨冲洗动量效应。由此产生的流速会影响 EFDC+模型网格水层中悬浮沉积物和其他成分的运动。

图 2.5 (a) 显示了船舶通过 EFDC+模型网格单元的速度矢量分量的二维 (2D) 概念图。基于船舶航向和 EFDC+模型网格旋转之间的角度，EFDC+螺旋桨清洗模块将螺旋桨流出速度  $V_0$  矢量划分为计算网格空间 (在  $i$  和  $j$  方向上)，如下所示：

$$V_i = V_0 \times \cos(\theta_3 - \theta_1) \quad (2.87)$$

$$V_j = V_0 \times \sin(\theta_3 - \theta_1) \quad (2.88)$$

$$\theta_3 = \theta_2 - \frac{\pi}{2} \quad (2.89)$$

其中，

$V_0$  是螺旋桨从螺旋桨平面流出的速度 (m/s)

$V_i$  是  $i$  方向上的网格定向射流速度分量 (m/s)

$V_j$  是沿  $j$  方向的网格定向射流速度分量 (m/s)

$\theta_1$  是 EFDC+模型网格单元旋转 (弧度)

$\theta_2$  是船舶在罗盘方向上的航向 (弧度)

$\theta_3$  为螺旋桨冲洗流出角 (弧度)

给定速度分量  $V_i$  和  $V_j$ ，EFDC+螺旋桨清洗模块计算每个方向的螺旋桨清洗产生的比动量通量，如下所示：

$$M_{pi} = |V_i \times A_p| \times V_i \times f_p \quad (2.90)$$

$$M_{pj} = |V_j \times A_p| \times V_j \times f_p \quad (2.91)$$

其中，

$M_{p_i}$  是由于螺旋桨在  $i$  方向上的冲刷而产生的比动量通量 ( $m^4/s^2$ )

$M_{p_j}$  是由于螺旋桨在  $j$  方向上的冲刷而产生的比动量通量 ( $m^4/s^2$ )

$A_p$  是流出区中螺旋桨冲洗面的面积 ( $m^2$ )

$f_p$  是动量效应因子 (无量纲)

EFDC+螺旋桨清洗模块将由此产生的动量通量  $M_{p_i}$  和  $M_{p_j}$  作为源项纳入 EFDC+水动力模型计算的动量方程中。EFDC+螺旋桨清洗模块还应用系数  $f_p$  来调整螺旋桨清洗引起的动量通量，以考虑未直接模拟的损失和湍流。该系数是 EFDC+螺旋桨清洗模块的用户定义输入参数，根据 Kee 等人 (2006) 以及 Hamill 和 Kee (2016) 的观察结果，其范围可以在 0.3 到 0.7 之间，即流出速度平面的实际横截面积可以小于螺旋桨表面面积  $A_p$ 。

在垂直方向上，EFDC+螺旋桨清洗模块将螺旋桨清洗引起的动量效应按比例分布在与螺旋桨相交的 EFDC+模型网格水层上。动量变化率  $M_{p_i}$  和  $M_{p_j}$  的垂直分裂过程是相对于船舶吃水深度、螺旋桨直径、水深和螺旋桨所在的模型网格水层的数量来实现的。图 2.5 (b) 显示了 EFDC+模型网格水层上螺旋桨冲洗引起的动量变化率的垂直分数 (%) 示例。

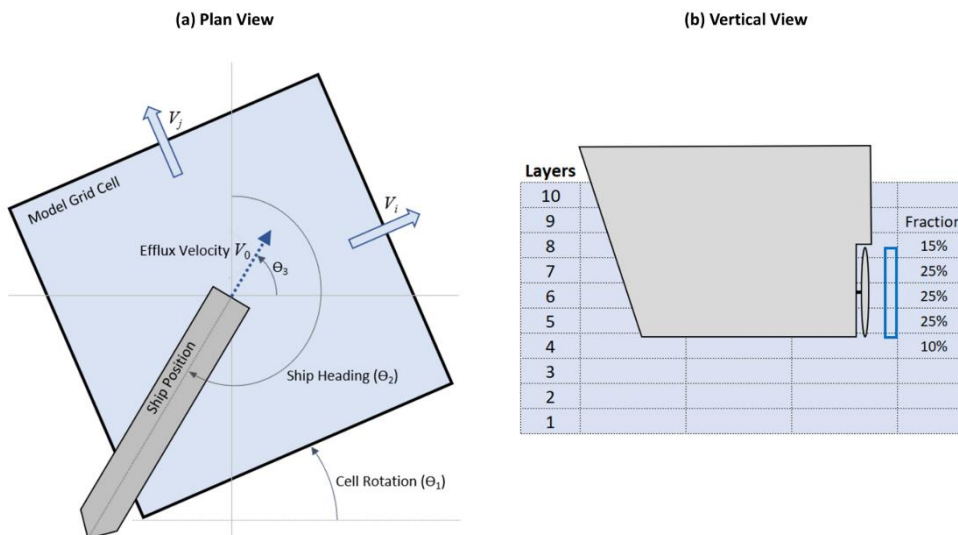


图 2.5 螺旋桨冲刷引起的动量图 (a) 与 EFDC+模型网格单元耦合，(b) 在垂直水层上分裂。

### 2.3 运动方程的数值解

前面在方程 (2.2) 和 (2.3) 中所示的运动方程在细分为六个面单元的区域中求解。垂直单元边界到水平平面的投影在正交坐标系 (x, y) 中形成曲线正交网格。在垂直 (x, z) 或 (y, z) 平面中, 由相同的恒定 z 表面界定的单元被称为单元层。使用有限体积和有限差分技术的组合来求解方程, 可变位置如图 2.6 所示。

变量的交错网格位置通常被称为 Arakawa C 网格 (Arakawa 和 Lamb, 1977) 或 MAC 网格 (Peyret 和 Taylor, 1983)。为了继续, 可以方便地通过使用方程 (2.4) 消除垂直压力梯度来修改方程 (2.2) 和 (2.3)。经过一些操作, 方程 (2.92) 和 (2.93) 中给出了水平动量方程。

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H u) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u u) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v u) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w u) \\ & - \left( v \frac{\partial m_y}{\partial x} - u \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v - m_x m_y f H v \\ & = -m_y H \frac{\partial p}{\partial x} - m_y H g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + m_y H g b \frac{\partial h}{\partial x} - m_y H g b z \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y A_v}{H} \frac{\partial u}{\partial z} \right) + S_u \end{aligned} \quad (2.92)$$

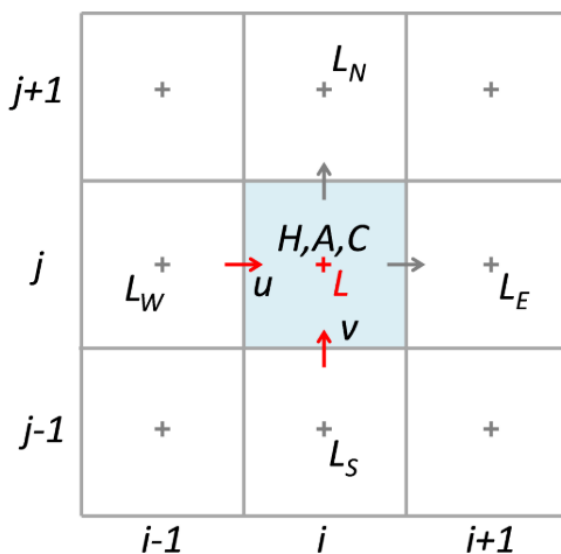


图 2.6 自由曲面置换中心水平栅格

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H v) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u v) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v v) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w v) \\ & + \left( v \frac{\partial m_y}{\partial x} - u \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u + m_x m_y f H u \\ & = -m_x H \frac{\partial p}{\partial y} - m_x H g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + m_x H g b \frac{\partial h}{\partial y} - m_x H g b z \frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y A_v}{H} \frac{\partial v}{\partial z} \right) + S_v \end{aligned} \quad (2.93)$$

首先, 对方程 (2.92) 和 (2.93) 进行垂直离散化。假设垂直定义的变量 (在单元或层中心) 是常数, 则方程在单元层上相对于 z 积分。此外, 这些变量必须在细胞层界面或边界处垂直定义。使用质量通量的符号,

$$P_k = m_y H u_k, Q_k = m_x H v_k \quad (2.94)$$

方程 (2.92) 和 (2.93) 重新定义为;

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_x P_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial x} (P_k u_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k u_k \Delta_k) + m [(wu)_k - (wu)_{k-1}] \\ & - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k \Delta_k - m_y f Q_k \Delta_k \\ = & -\frac{1}{2} m_y H \Delta_k \frac{\partial}{\partial x} (p_k + p_{k-1}) - m_y H \Delta_k g \frac{\partial \zeta}{\partial x} + m_y H \Delta_k g b_k \frac{\partial h}{\partial x} \\ & - 0.5 m_y H \Delta_k g b_k (z_k + z_{k-1}) \frac{\partial H}{\partial x} + m [(\tau_{xz})_k - (\tau_{xz})_{k-1}] + (S_u \Delta)_k \end{aligned} \quad (2.95)$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_y Q_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial x} (P_k v_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k v_k \Delta_k) \\ & + m [(wv)_k - (wv)_{k-1}] + \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k \Delta_k + m_x f P_k \Delta_k \\ = & -\frac{1}{2} m_x H \Delta_k \frac{\partial}{\partial y} (p_k + p_{k-1}) - m_x H \Delta_k g \frac{\partial \zeta}{\partial y} + m_x H \Delta_k g b_k \frac{\partial h}{\partial y} \\ & - 0.5 m_x H \Delta_k g b_k (z_k + z_{k-1}) \frac{\partial H}{\partial y} + m [(t_{yz})_k - m(t_{yz})_{k-1}] + (S_v \Delta)_k \end{aligned} \quad (2.96)$$

式中,  $\Delta_k$  为垂直单元或层厚度, 单元-层界面处的湍流剪切应力定义为:

$$(\tau_{xz})_k = \frac{2}{H} (A_v)_k \frac{u_{k+1} - u_k}{\Delta_{k+1} + \Delta_k} \quad (2.97)$$

$$(t_{yz})_k = \frac{2}{H} (A_v)_k \frac{v_{k+1} - v_k}{\Delta_{k+1} + \Delta_k} \quad (2.98)$$

如果在  $z$  方向上有  $K$  个单元, 则可以从单元层界面到表面对流体静力方程进行积分, 得出:

$$p_k = gH \left( \sum_{j=k}^K b_j \Delta_j - b_k \Delta_k \right) + p_s \quad (2.99)$$

其中,  $p_s$  是自由表面或刚性盖下的物理压力除以参考密度。连续性方程 (2.5) 也相对于单元或层上的  $z$  进行积分, 以给出:

$$\frac{\partial}{\partial t} (m \zeta \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial x} (P_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k \Delta_k) + m (w_k + w_{k-1}) = S_h \quad (2.100)$$

垂直离散动量方程 (2.92) 和 (2.93) 的数值解通过将外部深度积分模式 (与外部长表面重力波相关) 与内部模式 (与垂直电流结构相关) 分离来进行。

外模方程是通过利用方程 (2.99) 对垂直方向上的 K 个单元或层上的方程 (2.92) 和 (2.93) 求和而获得的, 并且由下式给出:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_x \hat{P}) + \sum_{k=1}^K \left[ \frac{\partial}{\partial x} (P_k u_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k u_k \Delta_k) - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k \Delta_k - m_y f Q_k \Delta_k \right] \\ &= -m_y H g \frac{\partial \zeta}{\partial x} - m_y H \frac{\partial p_s}{\partial x} + m_y H g \hat{b} \frac{\partial h}{\partial x} - m_y H g \left[ \sum_{k=1}^K \left( \beta_k \Delta_k + \frac{1}{2} (z_k + z_{k-1}) b_k \Delta_k \right) \right] \frac{\partial H}{\partial x} \quad (2.101) \\ & - m_y g H^2 \frac{\partial}{\partial x} \left( \sum_{k=1}^K \beta_k \Delta_k \right) + m [(\tau_{xz})_K - (\tau_{xz})_0] + \hat{S}_u \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} (m_x \hat{Q}) + \sum_{k=1}^K \left[ \frac{\partial}{\partial x} (P_k v_k \Delta_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k v_k \Delta_k) - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k \Delta_k - m_x f P_k \Delta_k \right] \\ &= -m_x H g \frac{\partial \zeta}{\partial y} - m_x H \frac{\partial p_s}{\partial y} + m_x H g \hat{b} \frac{\partial h}{\partial y} - m_x H g \left[ \sum_{k=1}^K \left( \beta_k \Delta_k + \frac{1}{2} (z_k + z_{k-1}) b_k \Delta_k \right) \right] \frac{\partial H}{\partial y} \quad (2.102) \\ & - m_x g H^2 \frac{\partial}{\partial y} \left( \sum_{k=1}^K \beta_k \Delta_k \right) + m [(\tau_{yz})_K - (\tau_{yz})_0] + \hat{S}_u \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (m \zeta) + \frac{\partial}{\partial x} \bar{P} + \frac{\partial}{\partial y} \bar{Q} = S_h \quad (2.103)$$

其中, 上条表示方程 (2.104) 中重申的整个深度的平均值。此外, 引入方程 (2.105) 来简化方程 (2.101) 和 (2.102)。

$$\hat{P} = m_y H \hat{u}, \hat{Q} = m_x H \hat{v} \quad (2.104)$$

$$\beta_k = \sum_{j=k}^K b_j \Delta_j - \frac{1}{2} b_k \Delta_k \quad (2.105)$$

深度积分连续性方程, 方程 (2.103), 源自方程 (2.6), 并提供了外部模式的连续性约束。与方程 (2.103) 的形式一致, 外模变量被选择为自由表面位移  $\zeta$  和体积输运  $P = m_y H u$  和  $Q = m_x H v$ 。第 2.4 节介绍了外模方程 (2.101) 至 (2.103) 的解的细节。

对于内模方程, 有几种公式是可能的。方程 (2.92) 和 (2.93) 对于每个水平速度分量具有 K 个自由度。然而, 这些方程在垂直方向上的 K 个单元或层上求和以形成外模方程 (2.101) 和 (2.102) 有效地去除了自由度, 因为必须满足约束。内部模式的一种方法是使用自由表面斜率或刚性盖情况下的表面压力梯度从外部解中求解方程 (2.92) 和 (2.93), 并分布误差, 使得方程 (2.106) 和 (2.107) 得到满足。第二种方法是通过从层积分方程 (2.92) 和 (2.93) 中减去外部方程 (2.101) 和 (2.102) 来形成速度分量与其垂直平均值的偏差方程。然而, 仍然需要满

足约束条件 (2.106) 和 (2.107)。本文提出的方法是将 K 层平均方程组 (2.95) 和 (2.96) 简化为 K-1 方程组，并使用方程组 (2.10.6) 和 (2.10.7) 提供与实际自由度一致的第 K 个方程。

$$\sum_{k=1}^K u_k \Delta_k = \hat{u}, \text{ and} \quad (2.106)$$

$$\sum_{k=1}^K v_k \Delta_k = \hat{v} \quad (2.107)$$

内部模式方程是通过将方程 (2.95) 和 (2.96) 首先除以单元层厚度 ( $\Delta_k$ ) 而形成的。接下来，从用于单元层 k+1 的方程中减去用于单元层 k 的方程。将这两种操作得出的方程除以两个电池层的平均厚度 ( $\Delta_{k+1, k}$ )，得出：

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( m_x \frac{P_{k+1} - P_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{P_{k+1} u_{k+1} - P_k u_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{Q_{k+1} u_{k+1} - Q_k u_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) \\ & + \frac{m}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \frac{(wu)_{k+1} - (wu)_k}{\Delta_{k+1}} - \frac{(wu)_k - (wu)_{k-1}}{\Delta_k} \right] - m_y f \frac{Q_{k+1} - Q_k}{\Delta_{k+1, k}} \\ & - \frac{1}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \left( v_{k+1} \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_{k+1} \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_{k+1} - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k \right] \quad (2.108) \\ & = m_y H \frac{b_{k+1} - b_k}{\Delta_{k+1, k}} g \left( \frac{\partial h}{\partial x} - z_k \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{1}{2} \frac{m_y H^2}{\Delta_{k+1, k}} g \left( \Delta_{k+1} \frac{\partial b_{k+1}}{\partial x} + \Delta_k \frac{\partial b_k}{\partial x} \right) \\ & + \frac{m}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \frac{(\tau_{xz})_{k+1} - (\tau_{xz})_k}{\Delta_{k+1}} - \frac{(\tau_{xz})_k - (\tau_{xz})_{k-1}}{\Delta_k} \right] + \frac{(S_u)_{k+1} - (S_u)_k}{\Delta_{k+1, k}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left( m_y \frac{Q_{k+1} - Q_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{P_{k+1} v_{k+1} - P_k v_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{Q_{k+1} v_{k+1} - Q_k v_k}{\Delta_{k+1, k}} \right) \\ & + \frac{m}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \frac{(wv)_{k+1} - (wv)_k}{\Delta_{k+1}} - \frac{(wv)_k - (wv)_{k-1}}{\Delta_k} \right] + m_x f \frac{P_{k+1} - P_k}{\Delta_{k+1, k}} \\ & + \frac{1}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \left( v_{k+1} \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_{k+1} \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_{k+1} - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k \right] \quad (2.109) \\ & = m_x H \frac{b_{k+1} - b_k}{\Delta_{k+1, k}} g \left( \frac{\partial h}{\partial y} - z_k \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{1}{2} \frac{m_x H^2}{\Delta_{k+1, k}} g \left( \Delta_{k+1} \frac{\partial b_{k+1}}{\partial y} + \Delta_k \frac{\partial b_k}{\partial y} \right) \\ & + \frac{m}{\Delta_{k+1, k}} \left[ \frac{(\tau_{yz})_{k+1} - (\tau_{yz})_k}{\Delta_{k+1}} - \frac{(\tau_{yz})_k - (\tau_{yz})_{k-1}}{\Delta_k} \right] + \frac{(S_v)_{k+1} - (S_v)_k}{\Delta_{k+1, k}} \end{aligned}$$

$$\Delta_{k+1, k} = \frac{1}{2} (\Delta_{k+1} + \Delta_k) \quad (2.110)$$

对方程 (2.108) 和 (2.109) 的检验表明，它们也可以通过关于 z 的水平动量方程 (2.92) 和 (2.93) 进行微分并在 z 中引入有限差分自由度来获得。使用方程 (2.97) 和 (2.98) 将剪切应力与内部界面上的速度差联系起来，表明方程 (2.108) 和 (2.109) 可以解释为 K-1 界面速

度差或 K-1 内部界面剪切应力的 K-1 方程组。内模方程 (2.108) 和 (2.109) 的求解细节见第 2.5 节。

垂直速度  $w$  的解采用连续性方程。将方程 (2.100) 除以  $\Delta k$ ，再减去方程 (2.102)，得出

$$w_k = w_{k-1} - \frac{\Delta_k}{m} \left[ \frac{\partial}{\partial x} (P_k - \hat{P}) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k - \hat{Q}) \right]. \quad (2.111)$$

由于  $w_0 = 0$ ，溶液从第一个细胞层进入表面。如果满足约束条件（方程 (2.106) 和 (2.107)）， $k=k$  时的表面速度将为零，并满足边界条件。

#### 2.4. 三时能级外模解的计算问题

用于外模方程 (2.101) 至 (2.103) 的数值解的计算算法的公式化开始于引入修改的变量并重新组织方程以给出：

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{P}}{\partial t} = & -\frac{m_y}{m_x} Hg \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{m_y}{m_x} H \frac{\partial p_s}{\partial x} + \frac{m_y}{m_x} Hg \left( \hat{b} \frac{\partial h}{\partial x} - \hat{B} \frac{\partial H}{\partial x} - H \frac{\partial \hat{\beta}}{\partial x} \right) \\ & - \frac{1}{m_x} \sum_{k=1}^K \Delta_k \left( \frac{\partial}{\partial x} (P_k u_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k u_k) \right) + \frac{1}{m_x} \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k + m_y f Q_k \right] \\ & + \frac{1}{m_x} \sum_{k=1}^K \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_{Hk} \Delta_k \frac{\partial u_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_{Hk} \Delta_k \frac{\partial u_k}{\partial y} \right) \right] \\ & + m_y (\tau_{xz})_K - m_y (\tau_{xz})_0 + \frac{1}{m_x} \hat{S}_u \end{aligned} \quad (2.112)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{Q}}{\partial t} = & -\frac{m_x}{m_y} Hg \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \frac{m_x}{m_y} H \frac{\partial p_s}{\partial y} + \frac{m_x}{m_y} Hg \left( \hat{b} \frac{\partial h}{\partial y} - \hat{B} \frac{\partial H}{\partial y} - H \frac{\partial \hat{\beta}}{\partial y} \right) \\ & - \frac{1}{m_y} \sum_{k=1}^K \Delta_k \left( \frac{\partial}{\partial x} (P_k v_k) + \frac{\partial}{\partial y} (Q_k v_k) \right) + \frac{1}{m_y} \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k + m_x f P_k \right] \\ & + \frac{1}{m_y} \sum_{k=1}^K \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_{Hk} \Delta_k \frac{\partial v_k}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_{Hk} \Delta_k \frac{\partial v_k}{\partial y} \right) \right] \\ & + m_x (\tau_{yz})_K - m_x (\tau_{yz})_0 + \frac{1}{m_y} \hat{S}_v \end{aligned} \quad (2.113)$$

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{1}{m} \left( \frac{\partial \hat{P}}{\partial x} + \frac{\partial \hat{Q}}{\partial y} \right) = S_h \quad (2.114)$$

其中，

$$\hat{\beta} = \sum_{k=1}^K \beta_k \Delta_k, \text{ and} \quad (2.115)$$

$$\hat{\beta} = \sum_{k=1}^K \left[ \beta_k \Delta_k + \frac{1}{2} (z_k + z_{k-1}) b_k \Delta_k \right]. \quad (2.116)$$

方程 (2.112) 和 (2.113) 现在将外部或深度综合体积输运的时间变化率等同于与自由表面斜率、大气压力和浮力、平流加速度、科里奥利(Coriolis)和曲率加速度、自由表面和底部切向应力以及一般源、汇项相关的压力辐射。变量在计算网格上的交错位置 (图 2.6) 允许方程 (2.112) 至 (2.114) 中的大多数水平空间导数由二阶精确的中心差表示, 并导致方程在时间上精确积分的极限下的体积、质量、动量和能量守恒 (Haltiner 和 Williams, 1980; Simons 等人, 1973)。当变量不位于实现中心差分算子所需的点时, 在任一或两个空间方向上进行平均是合适的。使用 Arakawa 和 Lamb (1977) 的空间平均方案来表示科里奥利(Coriolis)和曲率加速度也保证了能量守恒。

在引入离散有限差分 and 空间平均表示之后, 对于  $L$  个单元的水平网格, 方程 (2.112) 至 (2.114) 可以被视为体积输运和自由表面位移的  $3L$  个时间常微分方程组。可用于求解这些方程的许多技术通常属于显式和半隐式两类。最常用的显式方案是三时间级蛙跳方案, 其中时间导数在时间级  $n+1$  和  $n-1$  之间近似, 其余项在时间级  $n$  进行评估。尽管计算简单, 但最大时间步长受到基于重力波相速度的 Courant-Fredrick-Levy 条件的限制。允许更大时间步长的另一种方法是半隐式三时间级方案 (Madala 和 Piacsek, 1977), 当对方程 (2.112) 至 (2.114) 执行时

$$\begin{aligned}
\hat{p}^{n+1} = & \hat{p}^{n-1} - \Delta t \left( \frac{m_y}{m_x} H \right)^u g d_x^u (\zeta^{n+1} + \zeta^{n-1}) - 2\Delta t \left( \frac{m_y}{m_x} H \right)^u d_x^u p_s \\
& + 2\Delta t \left( \frac{m_y}{m_x} H \right)^u g \left( \hat{b}^u d_x^u h - \hat{B}^u d_x^u H - H^u d_x^u \hat{\beta} \right) \\
& - 2\Delta t \left( \frac{1}{m_x} \right)^u \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ d_x^u (P_k u_k) + d_y^u (Q_k u_k) \right] \\
& + 2\Delta t \left( \frac{1}{m_x} \right)^u \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k + m_y f Q_k \right]^u \\
& + 2\Delta t m_y^u \left[ (t_{xz}^{n-1})_K - (t_{xz}^{n-1})_0 \right]^u \\
& + 2\Delta t \left( \frac{1}{m_x} \right)^u \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \frac{\partial}{\partial x} (m_y H t_{xx}^{n-1}) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H t_{xy}^{n-1}) \right. \\
& \left. + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H t_{xy}^{n-1}) - \frac{\partial}{\partial x} (m_y H t_{yy}^{n-1}) \right]^u
\end{aligned} \tag{2.117}$$



$$\begin{aligned}
\hat{Q}^{n+1} = & \hat{Q}^{n-1} - \Delta t \left( \frac{m_x}{m_y} H \right)^v g \delta_y^u (\zeta^{n+1} + \zeta^{n-1}) - 2\Delta t \left( \frac{m_x}{m_y} H \right)^v \delta_y^u p_s \\
& + 2\Delta t \left( \frac{m_x}{m_y} H \right)^v g \left( \hat{b}^v d_y^v h - \hat{B}^v \delta_y^v H - H^v \delta_y^v \hat{\beta} \right) \\
& - 2\Delta t \left( \frac{1}{m_y} \right)^u \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ d_x^v (P_k v_k) + d_y^v (Q_k v_k) \right] \\
& - 2\Delta t \left( \frac{1}{m_y} \right)^v \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k + m_x f P_k \right]^v \\
& + 2\Delta t m_x^v \left[ (\tau_{yz}^{n-1})_K - (\tau_{yz}^{n-1})_0 \right]^v \\
& + 2\Delta t \left( \frac{1}{m_y} \right)^v \sum_{k=1}^K \Delta_k \left[ \frac{\partial}{\partial x} (m_y H t_{yx}^{n-1}) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H t_{yy}^{n-1}) \right. \\
& \quad \left. \frac{\partial}{\partial y} (m_x H t_{xx}^{n-1}) - \frac{\partial}{\partial x} (m_y H t_{yx}^{n-1}) \right]^v
\end{aligned} \tag{2.118}$$

$$\zeta^{n+1} - \zeta^{n-1} + \Delta t \left( \frac{1}{m} \right)^\zeta \left[ \delta_x^\zeta (\hat{P}^{n+1} + \hat{P}^{n-1}) + \delta_y^\zeta (\hat{Q}^{n+1} + \hat{Q}^{n-1}) \right] = S_h \Delta t \tag{2.119}$$

其中， $\Delta t$  表示时间步长。方程 (2.117) 至 (2.119) 中的所有项都被理解为在中心时间级别  $n$  处进行评估，但在前向和后向时间级别  $n+1$  和  $n-1$  处进行评估的项除外，它们由上标表示。u、v 和  $\zeta$  上标表示变量被评估，或者空间导数以相应的空间点为中心。

空间中心差分算子  $\delta$  的下标表示方向。假定网格单元在水平方向上由无量纲正交坐标  $x$  和  $y$  的恒定整数值线界定，从而产生具有方程 (2.120) 和 (2.121) 中给出的形式的中心空间差。

$$\delta_x (\phi_{i,j,k}) = \frac{1}{\Delta x} \left( \phi_{i+\frac{1}{2},j,k} - \phi_{i-\frac{1}{2},j,k} \right) \tag{2.120}$$

$$\delta_y (\phi_{i,j,k}) = \frac{1}{\Delta y} \left( \phi_{i,j+\frac{1}{2},k} - \phi_{i,j-\frac{1}{2},k} \right) \tag{2.121}$$

这些有限差分算子在平流加速度中的应用说明如下，

$$\delta_x^u (P_{i,j,k} u_{i,j,k}) = \frac{1}{\Delta x} \left( P_{i+\frac{1}{2},j,k} u_{i+\frac{1}{2},j,k} - P_{i-\frac{1}{2},j,k} u_{i-\frac{1}{2},j,k} \right), \tag{2.122}$$

其中隐含了变量的常数  $y$  依赖性。由于  $u$  型变量位于  $x$  的整数值处，因此需要进行平均以获得半间隔的值。平均传输和速度产量，

$$\delta_x^u (P_{i,j,k} u_{i,j,k}) = \frac{1}{\Delta x} \left( \frac{P_{i+1,j,k} + P_{i,j,k}}{2} \frac{u_{i+1,j,k} + u_{i,j,k}}{2} - \frac{P_{i,j,k} + P_{i-1,j,k}}{2} \frac{u_{i,j,k} + u_{i-1,j,k}}{2} \right), \tag{2.123}$$

这与平流加速度的该部分的非保守形式的中心差分近似值一致。对传输进行平均并允许速度从逆风方向进行平流，

$$\delta_x^u(P_{i,j,k}u_{i,j,k}) = \frac{1}{\Delta x} \left[ \max\left(\frac{P_{i+1,j,k}+P_{i,j,k}}{2}, 0\right) u_{i,j,k}^{n-1} - \max\left(\frac{P_{i,j,k}+P_{i-1,j,k}}{2}, 0\right) u_{i-1,j,k}^{n-1} \right] + \frac{1}{\Delta x} \left[ \min\left(\frac{P_{i+1,j,k}+P_{i,j,k}}{2}, 0\right) u_{i+1,j,k}^{n-1} - \min\left(\frac{P_{i,j,k}+P_{i-1,j,k}}{2}, 0\right) u_{i,j,k}^{n-1} \right] \quad (2.124)$$

这与平流加速度的该部分的非保守形式的逆风或后向差分近似一致。在方程 (2.124) 中，为了稳定性和准确性，传输仍处于时间水平 n，而速度处于时间水平 n-1 (Smolarkiewicz 和 Clark, 1986)。使用方程 (2.123) 或方程 (2.124) 的偏好通常取决于所模拟的物理情况。中心差分形式不引入数值扩散，但可能产生表现出细胞间空间振荡的解场。这些振荡可以通过在动量方程中添加水平扩散项来消除。水平扩散率的规范允许控制空间平滑的程度。逆风差分形式引入了数值扩散，并且在解场中不产生空间振荡。方程 (2.117) 和 (2.118) 中的科里奥利项(Coriolis)和曲率项使用节能空间平均和差分进行离散化 (Arakawa 和 Lamb, 1977; Haltiner 和 Williams, 1980 年)。例如，方程 (2.117) 中的科里奥利(Coriolis)和曲率项由下式给出：

$$\left[ m_y f Q_k + \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H v_k \right]^u = \frac{1}{2} \left[ (RH)_{i+\frac{1}{2},j}^\zeta v_{i+\frac{1}{2},j,k}^\zeta + (RH)_{i-\frac{1}{2},j}^\zeta v_{i-\frac{1}{2},j,k}^\zeta \right] \quad (2.125)$$

$$R_{i+\frac{1}{2},j}^\zeta = (mf)_{i+\frac{1}{2},j} + \frac{(m_y)_{i+1,j} - (m_y)_{i,j}}{\Delta x} v_{i+\frac{1}{2},j,k}^\zeta - \frac{(m_x)_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2}} - (m_x)_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2}}}{\Delta y} u_{i+\frac{1}{2},j,k}^\zeta \quad (2.126)$$

$$v_{i+\frac{1}{2},j,k}^\zeta = \frac{1}{2} \left( v_{i+\frac{1}{2},j+\frac{1}{2},k} + v_{i+\frac{1}{2},j-\frac{1}{2},k} \right) \quad (2.127)$$

$$u_{i+\frac{1}{2},j,k}^\zeta = \frac{1}{2} \left( u_{i+1,j,k} + u_{i,j,k} \right) \quad (2.128)$$

其中变量位置如图 2.7 所示。

由于方程 (2.117) 和 (2.118) 中的底部切向应力必须由跟随外部解的内部模式解提供，因此它在向后的时间水平上是滞后的。一般的源、汇项已被具有 Mellor 和 Blumberg (1985) 提出的形式的水平扩散项所取代。水平应力张量如方程 (2.129) 至 (2.131) 所示。

$$(\tau_{xx})_k = 2A_H \frac{1}{m_x} \frac{\partial u_k}{\partial x} \quad (2.129)$$

$$(\tau_{xy})_k = (t_{yx})_k = 2A_H \left( \frac{1}{m_x} \frac{\partial v_k}{\partial x} + \frac{1}{m_y} \frac{\partial u_k}{\partial y} \right) \quad (2.130)$$

$$(t_{yy})_k = 2A_H \frac{1}{m_y} \frac{\partial v_k}{\partial y}. \quad (2.131)$$

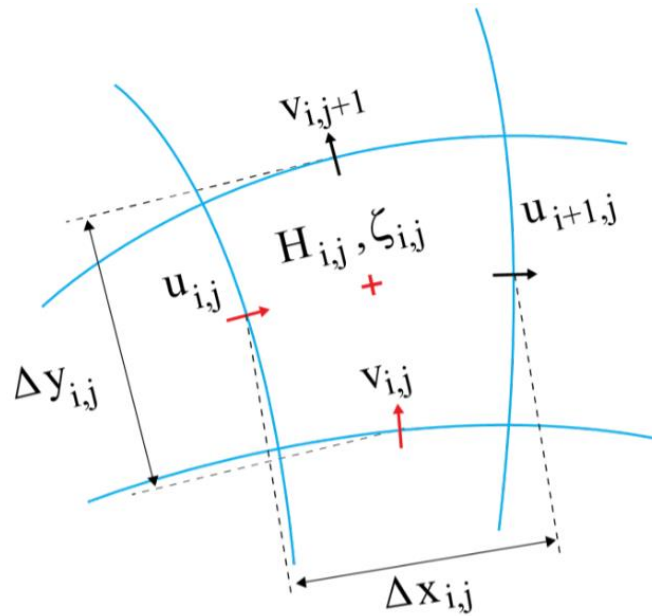


图 2.7 在水平(x, y)平面上的 U 中心网格

当使用平流加速度的中心差分形式，方程 (2.123) 时，水平扩散系数  $A_H$  通常被指定为平滑解场中单元间空间振荡所需的最小常数值。当水平湍流扩散用于表示亚网格尺度的混合时， $A_H$  可以根据 (Smagorinsky, 1963) 的建议来确定。

方程 (2.117) 至 (2.119) 的求解方案首先需要在时间水平  $n$  和  $n-1$  评估三个方程中的所有项。在指定输运的边界上，将时间级  $n+1$  的指定值插入到方程 (2.119) 中。然后使用方程 (2.117) 和 (2.118) 从方程 (2.119) 中消除时间级  $n+1$  的未知输运。结果是时间级  $n+1$  自由表面位移的离散亥姆霍兹(Helmholtz)型椭圆方程，具有一般形式

$$\zeta^{n+1} - g\Delta t^2 \left(\frac{1}{m}\right)^\zeta \left[ \delta_x^\zeta \left(H \frac{m_y}{m_x}\right)^u \delta_x^u \zeta^{n+1} + \delta_x^\zeta \left(H \frac{m_x}{m_y}\right)^v \delta_y^v \zeta^{n+1} \right] - \phi = 0 \quad (2.132)$$

其中项  $\phi$  包含所有先前评估的项和传输边界条件。对于指定了自由表面位移的单元，将方程 (2.132) 替换为在时间级别  $n+1$  强制执行指定边界条件的方程。对于自由表面位移在时间和空间上恒定的刚性盖情况，通过消除第一项，将离散椭圆算子中的  $g\zeta$  替换为  $p_s$ ，并适当修改最后一项，对方程 (2.132) 进行了修改，以给出未知表面压力  $p_s$  的方程。在计算机代码中，对应于方程 (2.132) 的方程组通过具有多色或红黑排列的细胞的简化系统共轭梯度方案来求解 (Hageman 和 Young, 1981)。共轭梯度迭代继续进行，直到残差的平方和小于指定值。然后



$$\begin{aligned}
(Q_{k+1} - Q_k)^{**} &= (Q_{k+1} - Q_k)^{n-1} \\
&- 2\Delta t \left(\frac{1}{m_y}\right)^v [\delta_y^v (P_{k+1}v_{k+1} - P_k v_k) + \delta_y^v (Q_{k+1}v_{k+1} - Q_k v_k)] \\
&- 2\Delta t \left(\frac{1}{m_y}\right)^v \left[ \frac{(Wv)_{k+1} - (Wv)_k}{\Delta_{k+1}} - \frac{(Wv)_k - (Wv)_{k-1}}{\Delta_k} \right]^v \\
&- 2\Delta t \left(\frac{1}{m_y}\right)^v [m_x f P_{k+1} - m_x f P_k]^v \\
&- 2\Delta t \left(\frac{1}{m_y}\right)^v \left[ \left( v_{k+1} \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_{k+1} \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_{k+1} - \left( v_k \frac{\partial m_y}{\partial x} - u_k \frac{\partial m_x}{\partial y} \right) H u_k \right]^v \\
&+ 2\Delta t \left(\frac{m_x}{m_y} H\right)^v g \left[ (b_{k+1} - b_k)^v \delta_y^v (h - z_k H) + \frac{1}{2} H^v \delta_y^v (\Delta_{k+1} b_{k+1} + \Delta_k b_k) \right] \\
&+ 2\Delta t \left(\frac{1}{m_y}\right)^v [(S_v)_{k+1} - (S_v)_k]^v
\end{aligned} \tag{2.134}$$

$$W = m_x m_y w = mw, \tag{2.135}$$

其中上标\*\*表示临时解决方案 (*provisional solution*)，并且所有没有指定时间级别的术语都处于中心时间级别n。水平体积输运P和Q由方程 (2.94) 定义，W为垂直体积输运。水平平流项上的水平差运算与第2.3节方程 (2.122) 至 (2.124) 中给出的相同。垂直动量通量项可以用与中心差分或迎风差分一致的形式表示，如方程 (2.136) 和 (2.137) 所示。

$$(Wu)_{i,j,k}^u = \frac{W_{i-\frac{1}{2},j,k} + W_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2} \frac{u_{i,j,k} + u_{i,j,k+1}}{2} \tag{2.136}$$

$$(Wu)_{i,j,k}^u = \max \left( \frac{W_{i-\frac{1}{2},j,k} + W_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2}, 0 \right) u_{i,j,k}^{n-1} + \min \left( \frac{W_{i-\frac{1}{2},j,k} + W_{i+\frac{1}{2},j,k}}{2}, 0 \right) u_{i,j,k+1}^{n-1} \tag{2.137}$$

当正向速度为迎风形式时，为了稳定性，方程 (2.137) 在时间水平n-1处进行评估。浮力、平均深度和总深度的水平差运算是由方程 (2.120) 和 (2.121) 定义的中心差算子。方程 (2.133) 和 (2.134) 中的源项和汇项中的水平扩散将从方程 (2.117) 和 (2.118) 中的包容性开始。科里奥利(Coriolis)和曲率项通过第2.3节的方程 (2.125) 至 (2.128) 中的能量守恒格式进行平均和差分。显式分数阶跃 (方程 (2.133) 和 (2.134)) 的稳定性取决于水平和垂直平流加速度离散化的稳定性，这将在第2.5节中讨论，以及科里奥利(Coriolis)和曲率项的离散化。关于科里奥利(Coriolis)加速度的外模方案的傅里叶稳定性分析结果也可以应用于内模方案。

三时间级方案第二步的计算公式如下：

$$\frac{(P_{k+1} - P_k)^{n+1}}{m_y^u \Delta_{k+1,k}} = \frac{(P_{k+1} - P_k)^{**}}{m_y^u \Delta_{k+1,k}} + 2\Delta t \left[ \frac{(\tau_{xz})_{k+1} - (\tau_{xz})_k}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} - \frac{(\tau_{xz})_k - (\tau_{xz})_{k-1}}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} \right]^{n+1} \quad (2.138)$$

$$\frac{(Q_{k+1} - Q_k)^{n+1}}{m_x^v \Delta_{k+1,k}} = \frac{(Q_{k+1} - Q_k)^{**}}{m_x^v \Delta_{k+1,k}} + 2\Delta t \left[ \frac{(t_{yz})_{k+1} - (t_{yz})_k}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} - \frac{(t_{yz})_k - (t_{yz})_{k-1}}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} \right]^{n+1} \quad (2.139)$$

使用方程 (2.97) 和 (2.98) , 湍流剪切应力与水平输送相关:

$$(\tau_{xz})_k^{n+1} = \left( \frac{A_v^u}{H^u} \right)_k^n \left( \frac{1}{m_y^u H^u} \frac{P_{k+1} - P_k}{\Delta_{k+1,k}} \right)^{n+1} \quad (2.140)$$

$$(t_{yz})_k^{n+1} = \left( \frac{A_v^v}{H^v} \right)_k^n \left( \frac{1}{m_x^v H^v} \frac{Q_{k+1} - Q_k}{\Delta_{k+1,k}} \right)^{n+1} \quad (2.141)$$

方程 (2.140) 和 (2.141) 可用于从方程 (2.138) 和 (2.139) 中消除湍流剪切应力, 从而得到一对K-1层之间传输差异的方程组, 然而, 得到的方程条件较差。相反, 方程 (2.140) 和 (2.141) 用于从方程 (2.138) 和 (2.139) 中消除时间水平n+1处的水平输运差异, 从而为湍流剪切应力得到一对K-1方程。

$$-\frac{1}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} (\tau_{xz})_{k-1}^{n+1} + \left[ \frac{1}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} + \frac{(H^u)^{n+1}}{2\Delta t} \left( \frac{H^u}{A_v^u} \right)_k^n + \frac{1}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} \right] (\tau_{xz})_k^{n+1} - \frac{1}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} (\tau_{xz})_{k+1}^{n+1} = \frac{1}{2\Delta t m_y^u} \frac{(P_{k+1} - P_k)^{**}}{\Delta_{k+1,k}} \quad (2.142)$$

$$-\frac{1}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} (t_{yz})_{k-1}^{n+1} + \left[ \frac{1}{\Delta_k \Delta_{k+1,k}} + \frac{(H^v)^{n+1}}{2\Delta t} \left( \frac{H^v}{A_v^v} \right)_k^n + \frac{1}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} \right] (t_{yz})_k^{n+1} - \frac{1}{\Delta_{k+1} \Delta_{k+1,k}} (t_{yz})_{k+1}^{n+1} = \frac{1}{2\Delta t m_x^v} \frac{(Q_{k+1} - Q_k)^{**}}{\Delta_{k+1,k}} \quad (2.143)$$

这些方程对角占优, 条件良好, 可以在每个水平速度位置独立求解。因为式(2.142)和式(2.143)表示完全隐式, 反向时间差分, 一维抛物扩散方程的格式, 解是无条件稳定的(Fletcher, 1988)。在方程(2.142)和式(2.143)的解下, 剪切应力, K-1输运差,  $P_{k+1}-P_k$ 和 $Q_{k+1}-Q_k$ 由式(2.140)和(2.141)确定, 结合连续性约束, 方程(2.106)和(2.107), 得到各单元层水平输运的一对K方程。为了说明这一点, 我们用解析法确定了表面网格层的水平输运, 并给出如下

$$P_k = \hat{P} + \sum_{k=1}^{K-1} \left( \sum_{j=1}^k \Delta_j \right) (P_{k+1} - P_k). \quad (2.144)$$

$Q_k$  也可以得到类似的表达式。利用  $K-1$  输运差异从表面向下工作，可以确定其余的输运。应注意的是，对于以后的使用，底层单元层传输可以用深度积分传输和传输差异来

$$P_1 = \hat{P} - \sum_{k=1}^{K-1} \left( 1 - \sum_{j=1}^k \Delta_j \right) (P_{k+1} - P_k), \quad (2.145)$$

Q1使用相同的方程式。

方程 (2.142) 和 (2.143) 的解需要分别说明  $k=0$  和  $k=K$  时的底部和表面应力。在自由表面上 ( $k=K$ ) 规定了表面风应力分量。在底部流体-固体边界上 ( $k=0$ ) 必须指定底部应力。确定底部应力分量的最简单方法是利用底部单元层中的速度分量和方程式 (2.146) 和 (2.146) 中所示的二次摩擦关系。

$$(\tau_{xz})_0^{n+1} = C_b \left( \sqrt{(u_1^u)^2 + (v_1^u)^2} \right)^n \left( \frac{P_1}{m_y^u H^u} \right)^{n+1} \quad (2.146)$$

$$(t_{yz})_0^{n+1} = C_b \left( \sqrt{(u_1^v)^2 + (v_1^v)^2} \right)^n \left( \frac{Q_1}{m_x^v H^v} \right)^{n+1} \quad (2.147)$$

假设固体底部和底部网格层中间之间的对数速度分布给出底部应力系数：

$$C_b = \frac{\kappa^2}{\left[ \ln \left( \frac{\Delta_1 H}{2z_0^*} \right) \right]^2} \quad (2.148)$$

其中  $z_0^*$  是无量纲的底部粗糙度高度。将方程 (2.145) 和 Q1 的相应方程分别插入方程 (2.146) 和 (2.147) 中，可以根据外模解中已知的深度积分输运分量和时间水平  $n+1$  处的未知输运差来表示时间水平  $n+1$  处的底部应力。然而，时间水平  $n+1$  处的输运差异与剪切应力分量通过方程 (2.140) 和 (2.141) 相关，从而允许底部应力以深度积分运输和内部剪切应力表示，具体如下：

$$(\tau_{xz})_0^{n+1} = C_b \left( \sqrt{(u_1^u)^2 + (v_1^u)^2} \right)^n \left[ \left( \frac{\hat{P}}{m_y^u H^u} \right)^{n+1} - \sum_{k=1}^{K-1} \left( 1 - \sum_{j=1}^k \Delta_j \right) \frac{\Delta_{k+1,k} (\tau_{xz})_k^{n+1}}{\left( \frac{A_v^u}{H^u} \right)_k^n} \right], \quad (2.149)$$

$y$  分量也是类似的表达式。将方程 (2.149) 和底部应力分量的相应  $y$  分量方程插入到  $k=1$  对方程 (2.142) 和 (2.143) 中，得到了一个几乎三对角的系统，第一行完全填充。使用三对角方程求解器和 Sherman Morrison 公式 (Press 等人, 1986) 仍然可以有效地求解方程组。通过使

用以下公式确定垂直速度来完成内模解：

$$w_k = w_{k-1} - \frac{\Delta_k}{m\zeta} \left[ \delta_x^\zeta (P_k - \hat{P}) + \delta_y^\zeta (Q_k - \hat{Q}) \right] \quad (2.150)$$

这从方程 (2.111) 得出。方程 (2.150) 的解，其中所有变量都处于时间水平  $n+1$ ，从  $k=1$  开始，因为  $w_0=0$ 。在与外部模式校正相同的时间步长上，还周期性地将两时间级校正步长插入内部模式时间积分。使用第 2.4 节中给出的外部模式细节，计算方程直接遵循三个时间级方程。

## 2.6 垂直分层选项

本节总结EFDC+中的垂直坐标选项。它补充了基本EFDC+流体动力学和运输模型组件的理论和计算描述。EFDC+模型最初是用SIG拉伸的垂直坐标表示的。后来，已经实施了更有效的垂直分层选项，即SGZ选项，以减少由于水平压力梯度引起的误差并减少计算单元的数量。

### 2.6.1 标准西格玛 (SIG) 方法

SIG方法是一种地形共形 (topographically conformal) 垂直坐标系，广泛应用于三维水动力模型。在该垂直坐标系中，无论水柱的深度如何，该区域的任何地方的水柱垂直层数都是相同的 (图2.9 (a))。这可以在计算域的浅水区和深水区同时同样好地、同样有效地解决水柱问题，并且适用于具有复杂几何形状和底部高程变化较大的水体。第2.1节描述了在垂直方向上使用西格玛坐标(sigma-coordinate)变换控制方程。

在 SIG 坐标公式中，垂直层的数量在模型网格中的所有水平位置都是相同的。尽管这种公式被广泛接受，在概念上很有吸引力，并且适合广泛的应用，但有许多应用类别需要传统的  $z$  或物理垂直网格，例如具有快速和大的横向水深变化的深层储层。也存在这样的应用，其中在水平域的不同区域中使用 SIG 和物理  $z$  垂直分层的组合的能力将是合乎需要的。一个例子是在一个原本很浅的河口建造一条深航道。SIG 拉伸的垂直网格公式也可能受到内部压力梯度误差的影响 (Mellor 等人, 1994)，这为西格玛公式的替代选择提供了另一个动机。



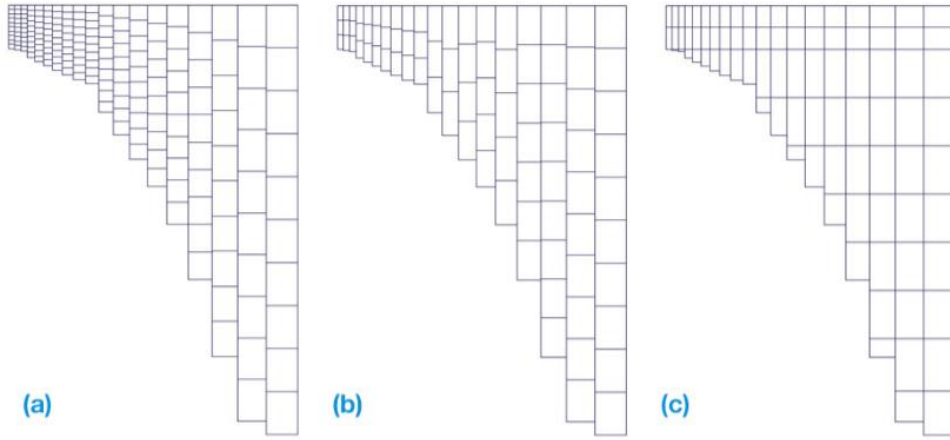


图 2.9 对于 K=10 的模型，EFDC+分层选项的说明。(a)SIG，(b)SGZ-指定底部，(c)SGZ-均匀分层。

### 2.6.2 Sigma Zed方法 (SGZ)

用于垂直坐标转换的 SIG 网格在包括浓度、速度和压力在内的水平梯度项中引入了众所周知的误差 (Mellor 等人, 1994)。一般来说，这一误差只有在水深急剧变化的地区才显著。为了克服这一弱点，开发了两种计算效率高的新的垂直分层方法，并将其应用于 EFDC+模型 (Craig et al., 2014)。对垂直分层方案进行了修改，允许层数在模型域内根据水深变化。因此，每个单元可以具有不同数量的层。z 坐标系对于每个细胞表面都是不同的，使活性层的数量与相邻细胞相匹配 (分层的表面匹配是 GVC 方法的基本区别)。这种变换被称为 SGZ 坐标。两种可选 SGZ 方法中的差异与为每个单元计算的 SIG 层厚度有关。图 2.9 显示了分层选项的示意图。面板 (a) 表示具有 10 层的 SIG 拉伸网格。面板 (b) 表示指定的底部方法，该方法允许用户在每个水平单元格中指定层数。图 2.9 (c) 显示了具有均匀分层的 SGZ 选项，其中每个垂直层的底部在水平方向上对齐。应该注意的是，在 SGZ 坐标中，垂直层的数量可以非常大，但与类似配置的 SIG 坐标模型相比，计算时间更短。

对于 SGZ 变换，方程仍然与 SIG 变换相同，然而，每个单元的层数基于基于床层高程和最小高程之间的比率确定的因子而不同。此外，每个单元的层厚度必须满足  $KC$  是最大层数， $n$  是底层指数， $\Delta z_k$  是层  $k$  的厚度。

$$\sum_{k=n}^{KC} \Delta z_k = 1, \quad (2.151)$$

对于原始 SIG，床层的指数总是等于  $n=1$ ，而在 SGZ 中，该值可以在  $1 \leq n \leq K$  的范围内变化，这取决于由于重新缩放而导致的层数。这一要求提高了在层  $k$  处的单元  $L(i, j)$  的变量  $C_i, j, k$  的水平梯度计算的精度：

$$pd[C_{i,j,k}]_x = \frac{C_{i,j,k} - C_{i-1,j,k}}{\Delta x}. \quad (2.152)$$

当模拟泥沙输移并考虑河床形态时，应在每个时间步长确定新的底层指标。这是因为与之前的时间步长相比，目前水深和最大值之间的比率由于侵蚀或沉积而发生变化。因此，对 SGZ 来说，更新整个域的分层是重要和必要的。然而，重新分层只是一种可选的方法。

SGZ 坐标系的另一个必要修改是，当单元  $L(i-1, j)$  的层数小于单元  $L(i, j)$  时，在水平梯度的三维计算中对湿/干进行处理。应该注意的是，SIG 坐标不会出现这个问题，因为每个单元的层数都是相同的。这意味着 SIG 模型比采用 SGZ 方法的模型需要更多的计算时间。

## 2.7 近场排放稀释和混合区分析

射流/羽流 (*jet/plume*) 子模型的计算程序主要基于 Lee 和 Cheung (1990)。使用拉格朗日公式及时追踪一组羽流粒子的轨迹。随着周围流体被夹带并在其中混合，羽烟团 (*plume puff*) 增加了质量，但一旦被夹带，新的质量就变成了羽烟团无法区分的一部分。在最简单的版本中，假设羽流基本上是圆柱段 (*cylindrical segment*)，其半径随着质量的夹带而增大。初始羽流质量被确定为从半径为  $b_0$  的扩散器发出的质量：

$$M_0 = \rho_0 \pi b_0^2 h_0, \quad (2.153)$$

式中， $M_0$  是初始质量， $\rho_0$  是初始密度， $b_0$  是扩散器半径， $h_0$  是羽流质量的长度，选择为与  $b_0$  相当。例如， $h_0=r$  和  $b_0=r$ ；其中  $r$  是扩散器的半径。可以根据初始羽流速度  $V_0$  和时间  $\Delta t$  估算羽流的初始长度：

$$h_0 = V_0 \Delta t \quad (2.154)$$

第  $n$  时间步长时羽流质量的增量被评估为剪切诱导夹带 (*shear-induced entrainment*) 和强制夹带 (*forced entrainment*) 导致的羽流质量增量之和。

$$\Delta M_n = \Delta M_s + \Delta M_f \quad (2.155)$$

在方程 (2.155) 中， $\Delta M_s$  是由于剪切夹带而导致的质量增加， $\Delta M_f$  是由于强制夹带而导致质量

增加。排放到水体中的上升羽流示意图如图所示2.10。

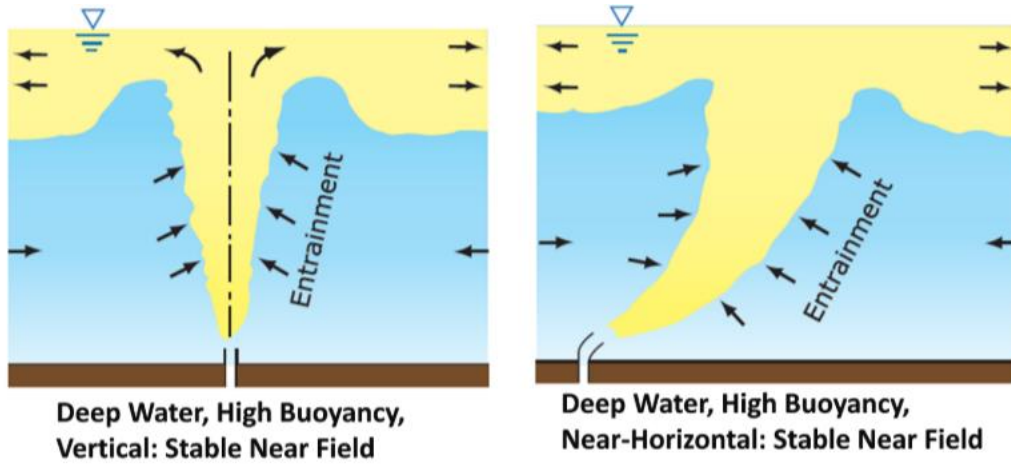


图 2.10 近场喷流羽流混合

### 2.7.1 剪切诱导夹带

羽流元件的质量增加是由于环境流的湍流夹带。在放电点附近，或在非常弱的电流中，剪切诱导的夹带占主导地位。然而，一般来说，除了非常靠近源的地方外，横流的强制夹带占主导地位。在该模型中，假设总夹带量是水平气流和羽流相对于气流的剪切作用的函数，则剪切夹带引起的质量增加 $\Delta M_s$ 可写成

$$\Delta M_s = \rho_a 2\pi b_n h_n E |V_n - u_a \cos \phi_n \cos \theta_n| \Delta t. \quad (2.156)$$

其中，射流轴与水平面成 $\phi_n$ 的角度， $\theta_n$ 是x轴与射流轴在水平面上的投影之间的角度。 $\rho_a$ 是环境密度， $u_a$ 是环境电流。下标n表示计算第n步的羽流元素值，下标a表示局部环境值，E是夹带系数，该系数取决于局部密度弗劳德数 $F_1$ 和射流方向

$$E = \sqrt{2} \frac{0.057 - 0.554 \frac{\sin \theta_n}{F_1^2}}{1 + 5 \frac{u_a \cos \phi_n \cos \theta_n}{|V_n - u_a \cos \phi_n \cos \theta_n|}}, \quad (2.157)$$

其中， $f_1$ 是局部密度弗劳德数，由

$$F_1 = \alpha \frac{|V_n - u_a \cos \phi_n \cos \theta_n|}{\sqrt{g \frac{\Delta \rho_n}{\rho_a} b_n}}, \quad (2.158)$$

$\alpha$ 是比例常数。

### 2.7.2 强制夹带 (forced entrainment)

Chu 和 Goldberg (1984) 以及 Stuart Churchill (1975) 的实验观测表明, 水平动量的转移在几个射流直径之外是完全的。我们假设羽流下漂移侧的所有环境流都被夹带到羽流元素中。环境流被强制夹带到任意倾斜的羽流元件中, 可以公式化为

$$\Delta M_f = \rho_a u_a \left[ 2b \Delta s \sqrt{1 - \cos^2 \phi \cos^2 \theta} + \pi b \Delta b \cos \phi \cos \theta + \frac{1}{2} \pi b^2 \Delta (\cos \phi \cos \theta) \right] \quad (2.159)$$

在方程 2.159 中, 第一项表示由于垂直于横流的投影羽流面积而产生的强制夹带; 第二项是由于羽流半径的增长而进行的校正; 第三项是由于轨迹的曲率引起的校正。 $\Delta s$  是羽流元件中心线轴线的弧长, 在曲率中心对角度  $\Delta \varphi$ 。

初始估计的  $\Delta M_f$  可以作为

$$\Delta M_f = \rho_a u_a h_n b_n \left[ 2 \sqrt{(\sin^2 \phi + \sin^2 \theta - \sin^2 \phi \sin^2 \theta)_n} + \pi \left( \frac{\Delta b}{\Delta s} \cos \phi \cos \theta \right)_n + \frac{\pi b_n (\cos \phi \cos \theta)_n - (\cos \phi \cos \theta)_{n-1}}{\Delta s_n} \right] \Delta t \quad (2.160)$$

### 2.7.3 模型实现

在第  $n$  步, 考虑位于  $(x_n, y_n, z_n)$  的羽流元素, 其速度  $(u_n, v_n, w_n)$  及其大小  $V_n$ 。喷射轴与水平面成  $\phi_n$  角,  $\theta_n$  是  $x$  轴与喷射轴在水平面上的投影之间的角度。羽流元素的半宽度或半径为  $b_n$ ;  $h_n$  是厚度, 定义为与局部射流速度的大小成比例,  $h_n = V_n \Delta t$ 。羽流元素的质量由下式给出,

$$M_n = \rho_n \pi b_n^2 h_n \quad (2.161)$$

考虑到湍流夹带导致的质量增加,  $\Delta M_n$ —通过将质量守恒、水平和垂直动量守恒、能量守恒和示踪剂质量守恒应用于离散单元, 获得下一步的羽流单元特性。为了完整性, 广义拉格朗日模型的自解释方程, 本质上类似于其原始的二维对应方程 (Winiarski 和 Frick, 1976), 总结如下:

质量守恒:

$$M_{n+1} = M_n + \Delta M_n \quad (2.162)$$

$$M_{n+1} = \rho_{n+1} \pi b_{n+1}^2 h_{n+1} \quad (2.163)$$

示踪剂浓度、盐度、温度和水密度:

$$C_{n+1} = \frac{M_n C_n + \Delta M_n C_a}{M_{n+1}} \quad (2.164)$$

$$S_{n+1} = \frac{M_n S_n + \Delta M_n S_a}{M_{n+1}} \quad (2.165)$$

$$T_{n+1} = \frac{M_n T_n + \Delta M_n T_a}{M_{n+1}} \quad (2.166)$$

$$\rho_{n+1} = \rho(S_{n+1}, T_{n+1}) \quad (2.167)$$

水平动量：

$$u_{n+1} = \frac{M_n u_n + \Delta M_n u_a}{M_{n+1}} \quad (2.168)$$

$$v_{n+1} = \frac{M_n v_n}{M_{n+1}} \quad (2.169)$$

垂直动量

$$w_{n+1} = \frac{M_n w_n + \Delta M_{n+1} \left( \frac{\Delta \rho}{\rho} \right)_{n+1} g \Delta t}{M_{n+1}} \quad (2.170)$$

$$(Mw)_{n+1} = (Mw)_n + (\Delta \rho V)_{n+1} g \Delta t \quad (2.171)$$

其中，

$$V_{n+1} = \sqrt{u_{n+1}^2 + v_{n+1}^2 + w_{n+1}^2}, \text{ and} \quad (2.172)$$

$$U_{n+1} = \sqrt{u_{n+1}^2 + v_{n+1}^2} \quad (2.173)$$

羽流元素的新厚度和半径：

$$h_{n+1} = \frac{V_{n+1}}{V_n} h_n \quad (2.174)$$

$$b_{n+1} = \sqrt{\frac{M_{n+1}}{\pi \rho_{n+1} h_{n+1}}} \quad (2.175)$$

射流方向：

$$\phi_{n+1} = \arctan\left(\frac{w_{n+1}}{U_{n+1}}\right) \quad (2.176)$$

$$\theta_{n+1} = \arctan\left(\frac{v_{n+1}}{u_{n+1}}\right) \quad (2.177)$$

羽流元素的新位置:

$$x_{n+1} = x_n + u_{n+1}\Delta t \quad (2.178)$$

$$y_{n+1} = y_n + v_{n+1}\Delta t \quad (2.179)$$

$$z_{n+1} = z_n + w_{n+1}\Delta t \quad (2.180)$$

沿着轨迹的距离:

$$\Delta s_{n+1} = V_{n+1}\Delta t \quad (2.181)$$

时间步长 $\Delta t$  可以是固定的, 也可以是可变的; 它是通过“预测校正”程序选择的, 以在每个步骤获得规定的质量分数变化 (通常为 1% 的数量级)。

## 2.8 结论

在本章中, 介绍了EFDC+流体力学基础的理论方面, 包括控制方程、垂直分层选项、近场排放和外部强制选项, 例如波浪模型。以下章节描述了如何将温度和盐度的密度效应纳入水动力模块, 以及与组成运输模块的联系。

## 第3章 保守成分运输

### 3.1. 简介

本节总结了EFDC+中使用的被动标量传输 (*passive scalar transport*) 的传输公式 (*transport formulations*) 的理论和计算方面。EFDC通用传输模型部分的理论和计算方面, 在Hamrick (1992) 中介绍。

### 3.2. 平流扩散运输的基本方程

溶解或悬浮物质的一般传输方程如方程 (3.1) 所示:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y H C) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u C) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v C) + \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w C) - \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w_{sc} C) \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_H \frac{dC}{dx} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_H \frac{dC}{dy} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y}{H} A_b \frac{dC}{dz} \right) + S_C \end{aligned} \quad (3.1)$$

其中,

$x, y$  是水平方向 (m) 上的正交曲线坐标,

$z$  是 sigma 坐标 (无量纲),

$t$  是时间(s),

$m_x, m_y$  是度量张量的对角分量的平方根 (无量纲),

$m$  是度量张量行列式 (无量纲) 的雅可比矩阵(Jacobian),  $m = m_x m_y$ ,

$C$  是运输成分的浓度或强度 (对于溶解/悬浮物质的浓度,  $\text{g}/\text{m}^3$ ,  $^{\circ}\text{C}$  表示温度, ppt 表示盐度),

$H$  为总水深 (m),

$u, v$  是曲线坐标中的水平速度分量 (m/s),

$w$  是垂直速度分量 (m/s),

$A_H$  是水平湍流涡流扩散率 ( $\text{m}^2/\text{s}$ ),

$A_b$  是垂直湍流涡流扩散率 ( $\text{m}^2/\text{s}$ ),

$w_{sc}$  当  $C$  表示悬浮物质时, 为正沉降速度, 以及

$S_C$  是成分的源/汇项, 包括亚网格尺度水平扩散和热源和汇。

### 3.3. 传输方程的数值解

本节介绍了盐度、温度、湍流强度和湍流长度尺度的输运方程的求解技术。还讨论了输运

方程和外部和内部水平动量方程所共有的平流方案的稳定性和精度问题。

盐度输送方程 (3.2) 用作通用示例，变量位置如图3.1所示。

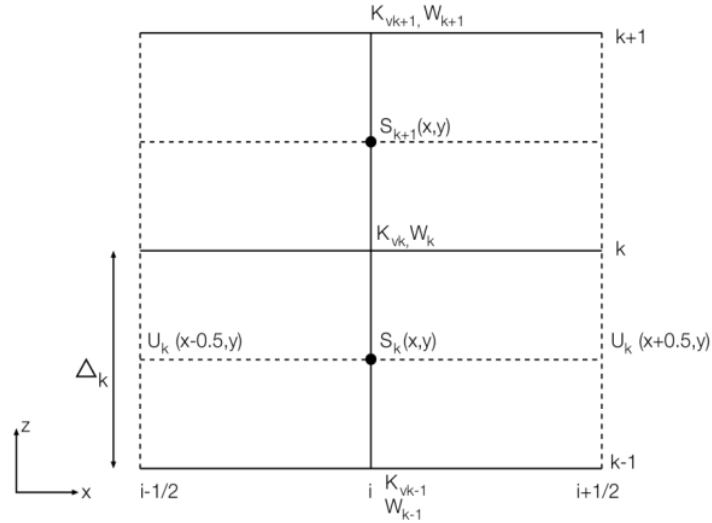


图3.1 垂直 (x, z) 平面中以S为中心的网格

在网格层上对盐度传输方程 (3.2) 进行积分，得到：

$$\frac{\partial}{\partial t}(mHC_k) + \frac{\partial}{\partial x}(P_k C_k) + \frac{\partial}{\partial y}(Q_k C_k) + \frac{(WC)_k - (WC)_{k-1}}{d_k} - \frac{m}{d_k} \left[ \left( \frac{A_b}{H} \frac{dC}{dz} \right)_k - \left( \frac{A_b}{H} \frac{dC}{dz} \right)_{k-1} \right] - (S_C)_k = 0 \quad (3.2)$$

其中， $P_k$ 、 $Q_k$ 和 $W_k$ 由方程 (2.94) 和 (2.135) 定义。方程 (3.2) 的源、汇、平流和垂直扩散部分以单独的分步处理 (*separate fractional steps*)，正如第2.4节中的内模动量方程所做的那样。



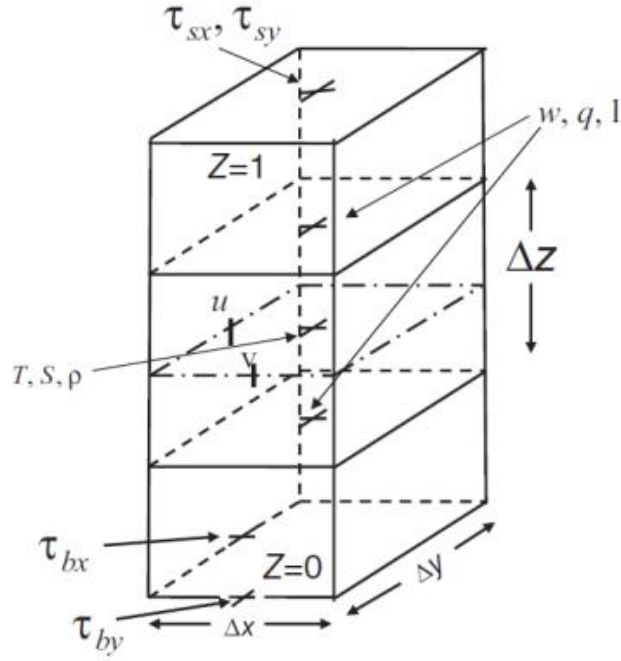


图3.2 西格玛(Sigma)坐标和变量中心 (Ji, 2008)

三时间级分步序列 (*fractional step sequence*) 由下式给出:

$$C_k^* = C_k^{n-1} + \frac{2dt}{mH^{n-1}} (Sc)_k^{n-1} \quad (3.3)$$

$$(mH)^{n+1} C_k^{**} = (mH)^{n-1} C_k^* - 2dt \left[ d_x^d (P_k C_k) + d_y^d (Q_k C_k) + \frac{(WC)_k - (WC)_{k-1}}{d_k} \right] \quad (3.4)$$

$$(HC_k)^{n+1} - 2dt \left\{ \left[ \left( \frac{A_b}{H} \right)_k^n \frac{(C_{k+1} - C_k)^{n+1}}{d_k d_{k+1,k}} \right] - \left[ \left( \frac{A_b}{H} \right)_{k-1}^n \frac{(C_k - C_{k-1})^{n+1}}{d_k d_{k,k-1}} \right] \right\} = H^{n+1} C_k^{**} \quad (3.5)$$

源、汇步骤 (见方程 (3.3)) 是明确的, 不涉及网格体积的变化。当源汇项表示水平湍流扩散时, 在时间水平  $n-1$  处进行稳定性评估 (Fletcher, 1988)。平流步骤 (方程式 (3.4)) 是明确的, 涉及网格体积的变化。垂直扩散步骤, 方程式 (3.5), 不涉及网格体积的变化, 是完全隐式和无条件稳定的 (Fletcher, 1988)。

重排方程 (3.5), 垂直扩散步骤, 给出:

$$-\frac{2dt}{d_k d_{k,k-1}} \left( \frac{A_b}{H} \right)_{k-1}^n C_{k-1}^{n+1} + \left[ \frac{2dt}{d_k d_{k,k-1}} \left( \frac{A_b}{H} \right)_{k-1}^n + H^{n+1} + \frac{2dt}{d_k d_{k+1,k}} \left( \frac{A_b}{H} \right)_k^n \right] C_k^{n+1} - \frac{2dt}{d_k d_{k+1,k}} \left( \frac{A_b}{H} \right)_k^n C_{k+1}^{n+1} = H^{n+1} C_k^{**} \quad (3.6)$$

对于盐度、温度和悬浮泥沙浓度, 通用变量  $C$  在网格层中心垂直定义, 扩散率在网格层界面定

义。然后方程 (3.6) 表示K方程组，边界条件通常为指定的通量类型。指定的表面和底部通量边界条件最方便地结合在表面和底部单元层源和汇项中，允许底部边界 ( $k=0$ ) 和表面边界处 ( $k=k+1$ ) 的  $A_b$  设置为零，使得方程 (3.6) 三对角。对于湍流强度和湍流长度尺度，方程 (2.24) 和 (2.25)，通用变量C在单元层界面垂直定义，并且扩散率定义在网格层中心。方程 (3.6) 表示K-1系统方程用于内部界面处的变量，自由表面和底部的变量值作为边界条件提供。对于湍流强度和长度尺度，边界条件为：

$$q_0^2 = B_1^{2/3} \sqrt{t_{bx}^2 + t_{by}^2}, l_0 = 0, \text{ at } z = 0 \quad (3.7)$$

$$q_k^2 = B_1^{2/3} \sqrt{t_{sx}^2 + t_{sy}^2}, l_k = 0, \text{ at } z = 1 \quad (3.8)$$

其中， $\tau_b$ 和 $\tau_s$ 分别为底部和表面应力矢量。插入这些边界条件导致方程 (3.6) 表示湍流强度和长度尺度的K-1方程的三对角系统 (*tri-diagonal systems*)。

在不失一般性的情况下，通过将双星号和单星号中间时间水平指示器 (*intermediate time level indicators*) 替换为  $n+1$  和  $n-1$ ，简化了用于分析三时间水平平流步骤 (*advection step*) (方程式 (3.4)) 的符号，分别给出：

$$(mHC_k)^{n+1} = (mHC_k)^{n-1} - 2 \frac{dt}{dx} [(PC)_{i+\frac{1}{2},j,k} - (PC)_{i-\frac{1}{2},j,k}] - 2 \frac{dt}{dy} [(QC)_{i,j+\frac{1}{2},k} - (QC)_{i,j-\frac{1}{2},k}] - 2 \frac{dt}{dk} [(WC)_k - (WC)_{k-1}] \quad (3.9)$$

根据方程 (2.120) 和 (2.121)，其中水平中心差算子已经围绕网格体积形心 ( $x; y$ ) 展开。

如方程 (2.122)、(2.123) 和 (2.136) 所示，单元面通量可表示为与时间和空间差分中心一致，或如方程 (2.124) 和 (2.137) 所示的x动量通量，表示为时间向前和空间向后或逆风。对于以时间和空间为中心的形式，方程 (3.9) 变为：

$$(mHC_k)^{n+1} = (mHC_k)^{n-1} - \frac{dt}{dx} [\tilde{P}_{i+\frac{1}{2},j,k} (C_{i+1,j,k} + C_{i,j,k}) - \tilde{P}_{i-\frac{1}{2},j,k} (C_{i,j,k} + C_{i-1,j,k})] - \frac{dt}{dy} [\tilde{Q}_{i,j+\frac{1}{2},k} (C_{i,j+1,k} + C_{i,j,k}) - \tilde{Q}_{i,j-\frac{1}{2},k} (C_{i,j,k} + C_{i,j-1,k})] - \frac{dt}{dk} [\tilde{W}_{i,j,k} (C_{i,j,k+1} + C_{i,j,k}) - \tilde{W}_{i,j,k-1} (C_{i,j,k} + C_{i,j,k-1})] \quad (3.10)$$

当用于外部和内部动量方程时，方程 (3.10) 中的输运在中心时间水平上进行评估，并且平均到中心时间水平，使用：

$$\tilde{P}_k = \frac{1}{2} (P_k^{n+1} + P_k^{n-1}) \quad (3.11)$$

当用于标量变量的传输方程时。

## 第4章 染料模组

EFDC+中的染料成分表示水柱中的溶解物质，不会影响流体动力学（即不会影响热物理性质，如密度和粘度）或任何其他水柱过程（如消光）。该组分可用作示踪剂，或者它也可以用来计算以天为单位的水的年龄。

染料在水柱中传输，如方程（4.1）所确定。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y H C) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u C) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v C) + \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w C) - \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w_{sc} C) \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{m_y}{m_x} H A_H \frac{dC}{dx} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{m_x}{m_y} H A_H \frac{dC}{dy} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y}{H} A_b \frac{dC}{dz} \right) + \frac{dC}{dt} + S_c \end{aligned} \quad (4.1)$$

### 4.1. 衰变

染料组分可以被配置为以零阶或一阶方法衰减，如分别在方程（4.2）和（4.3）中所示。

$$\frac{dC}{dt} = -K \quad (4.2)$$

$$\frac{dC}{dt} = -KC \quad (4.3)$$

在方程4.2和4.3中，C是染料浓度，单位为 $\text{g/m}^3$ ，K是一级衰减率，单位为 $1/\text{s}$ ，t是时间，单位为秒。

此外，染料衰减率可以是水温的函数，使用方程（4.4）。

$$\frac{dC}{dt} = -K\theta^{(T-T_{ref})} C \quad (4.4)$$

### 4.2. 水龄

如上所述，染料成分可用于计算水的年龄（以天为单位）。对于该选项，使用零阶动力学速率方法：

$$\frac{dC}{dt} = -K \quad (4.5)$$

其中C是以天为单位的“年龄”，t是以天计的时间，K是以 $1/\text{天}$ 为单位。通过在模型域的全部或部分上平均网格年龄，可以计算停留时间。如果模型运行足够长时间以达到动态稳定状态，则可以计算水力停留时间。

## 第 5 章 温度和传热模块

本章概述了EFDC+中实现的传热，包括能量方程和传热选项。关于水柱温度、表面和床层热交换以及冰形成和融化的过程，给出了更多细节。系统中的热源包括表面热交换、短波辐射吸收、底部热交换以及任何流入或流出（例如边界条件）。温度的概念框架如图5.1所示。

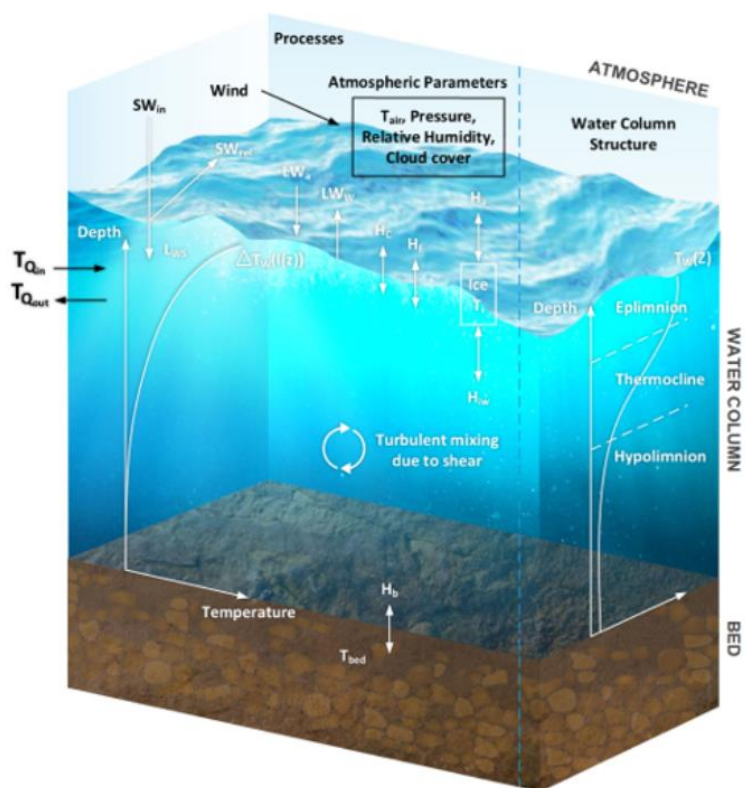


图5.1温度概念框架

曲线坐标系和西格马(sigma)坐标系中的热传递基本方程为一般传输方程 (3.1)。

为了求解热传输方程，流体动力学模块提供了流体动力学传输、湍流混合和水平扩散。

### 5.1 表面热交换

在水面 ( $z=1$ )，热交换的边界条件可计算为

$$-\frac{\rho c_p A_b}{H} \frac{\partial T}{\partial z} = H_L + H_E + H_C \quad (5.1)$$

其中

$\rho$  是水密度 ( $\text{kg/m}^3$ )，

$c_p$  是水的比热 ( $\text{J/kg}^\circ\text{C}$ )，

$A_b$  是垂直涡流扩散率 ( $\text{m}^2/\text{s}$ )，

$H$  为水深 (m) ,

$H_L$  是长波反射引起的表面热交换通量 ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) ,

$H_E$  是潜热引起的表面热交换通量 ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) , 以及

$H_C$  是由显热引起的表面热交换通量 ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) 。

使用两种方法计算表面热交换:

## 1.完全热平衡

## 2.平衡温度

### 5.1.1全热平衡

在全热平衡方法中, 基于Rosati和Miyakoda (1988) 和Hamrick (1992) 提出的方法, 计算了长波反辐射、潜热和显热引起的热交换通量。

$$H_L = \varepsilon\sigma(T_s + 273.15)^4(0.39 - 0.05\sqrt{e_a})(1 + B_cC) + 4\varepsilon\sigma(T_s + 273.15)^3(T_s - T_a) \quad (5.2)$$

$$H_E = c_e\rho_aL_EW_s(e_s - e_a)\frac{0.622}{P_a} \quad (5.3)$$

$$H_C = c_h\rho_a c_{pa}W_s(T_s - T_a) \quad (5.4)$$

其中,

$\varepsilon$  是水体的发射率 ( $\varepsilon=0.97$ ) ,

$\sigma$  是Stefan-Boltzmann常数 ( $\sigma=5.67\times 10^{-8}\text{W}/\text{m}^2/\text{K}^4$ ) ,

$C$  是云分数 ( $C=0$ : 无云,  $C=1$ : 全云覆盖) ,

$B_c$  是经验常数 ( $B_c=0.8$ ) ,

$T_s$  是水面温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_a$  是空气温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$C_e, C_h$  是湍流交换系数,

$\rho_a$  是大气密度 ( $\rho_a=1.2\text{ kg}/\text{m}^3$ ) ,

$c_{pa}$  是空气的比热 ( $c_{pa}/1005\text{ J}/\text{kg}/\text{K}$ ) ,

$L_E$  为蒸发潜热 ( $L_E=2.501\times 10^6\text{ J}/\text{kg}$ ) ,

$W_s$  是风速 ( $\text{m}/\text{s}$ ) ,

$e_s$  是表层水温下的饱和蒸汽压 ( $\text{mb}$ ) ,

$e_a$  是实际蒸汽压 (mb) , 以及

$P_a$  是大气压力 (mb) 。

EFDC+ (非传统选项) 中的完全热平衡方法与包含冰生长和融化过程的冰模块完全关联。

### 5.1.2 平衡温度

计算出的平衡温度可用于 EFDC+ 中的表面热交换。这里使用的方法基于 CE-QUAL-W2 或 W2 (W2) 中的平衡温度计算方法 (Wells 和 Cole, 2000) 。平衡温度模块与结合了冰生长和冰融化过程的冰模块完全相连。

由于逐项热平衡方程中的一些项与表面温度相关, 而其他项是可测量或可计算的输入变量, 因此简化计算的最直接途径是将平衡温度  $T_e$  定义为表面热交换净速率为零的温度。

逐项热平衡的线性化以及平衡温度的定义允许将表面热交换的净速率  $H_n$  表示为:

$$H_n = -K_{aw} (T_s - T_e) \quad (5.5)$$

其中,

$H_n$  是表面热交换率 ( $W/m^2$ ) ,

$K_{aw}$  是表面热交换系数 ( $W/m^2/^\circ C$ ) ,

$T_s$  是水面温度( $^\circ C$ ) ,

$T_e$  是平衡温度( $^\circ C$ )

在表面热交换系数和平衡温度中总结了 7 个单独的热交换过程。在 EFDC+ 中,  $T_e$  和  $K_{aw}$  根据热通量方程计算, 其中  $H_n=0$  或近似技术 (Brady 等人, 1969) 。

$$T_e = \frac{I_{sw}}{23 + f(W)(\beta + 0.255)} + T_d \quad (5.6)$$

$T_e$  是平衡温度, $^\circ F$

$I_{sw}$  是水面的太阳辐射 ( $Btu/ft^2/day$ ) ,

$\beta = 0.255 - 0.0085 T^* + 0.000204 T^{*2}$ ,

$T^* = 0.5(T_s + T_d)$ ,

$T_s$  是水的表面温度,  $^\circ F$

$T_d$  是露点温度,  $^\circ F$

$W_2$  在 2m 处的风速，单位为 m/小时，( the wind speed at 2m in mph)

$K$  是根据净通量与温度的斜率计算或使用近似公式计算，单位为  $Btu/ft^2/day/^\circ F$ 。

$$K = 23 + (\beta_w + 0.225) 17W_2 \quad (5.7)$$

其中，

$$\beta_w = 0.255 - 0.0085T_w - 0.000204T_w^2 \quad (5.8)$$

必须注意，该方法中的热通量方程为英制单位。EFDC+在内部将SI单位转换为英制单位，然后在计算后将其转换为SI单位。

## 5.2.短波辐射吸收

消光系数（也称为光衰减系数）是水柱内光强度降低（吸收）的量度。表面 $I_{sw}$ 的太阳辐射是位置、一年中的时间、白天的时间、气象条件以及地形和植被造成的阴影的函数。入射太阳辐射 $I_0$ 是位置、一年中的时间、一天中的时间和气象条件的函数。水面处的光强度 $I_{sw}$ ，由以下给出：

$$I_{sw} = I_0 S_f \min \{ \exp[-K_{e,me}(H_{rps} - H)], 1 \} \min \{ \exp[-K_{e,ice}H_{ice}], 1 \} \quad (5.9)$$

其中，

$I_0$  是地球表面测得的太阳辐射 ( $W/m^2$ )

$S_f$  是树冠和/或地形遮蔽因子 (无量纲) ，

$H_{ice}$  是冰厚度 (m) ，

$K_{e,ice}$  是冰层的消光系数 (1/m) ，

$K_{e,me}$  是出射芽的消光系数 (1/m) ，

$H_{rps}$  是生根植物的茎高 (m) ，以及

$H$  为水柱深度 (m) 。

### 5.2.1 单波段光衰减模型

穿透水面的太阳辐射被水吸收。吸收加热水色谱柱和辐射穿透力取决于消光系数  $\zeta$ 。在水柱中，短波辐射的深度分布呈指数，可以表示为比尔定律：

$$I(z) = I_{sw} \exp(-\zeta z) \quad (5.10)$$



其中，

$I(z)$  地表以下Z深度的太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ，

$I_{sw}$  是水面处的太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ，

$z$  是水面以下的深度 (m) ，

$\zeta$  光消光系数 ( $1/\text{m}$ ) 。

### 5.2.2 双波段光衰减模型

在此方法中，消光系数在空间和时间上是恒定的，此方法可用于EFDC 的旧版本。太阳辐射加热的深度分布是一个指数函数使用两个衰减系数，表示为：

$$I(z) = I_{sw} [R \exp(z\zeta_f) + (1 - R) \exp(z\zeta_s)] \quad (5.11)$$

其中，

$I(z)$  地表以下Z深度的太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ，

$I_{sw}$  是水面处的太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ，

$\zeta_f$  是快速衰减系数 ( $1/\text{m}$ ) ，

$\zeta_s$  是慢衰减系数 ( $1/\text{m}$ ) ，

$R$  太阳辐射快速衰减的比例，并在 0 到 1 之间变化。

在方程 (5.11) 中，第一个指数项表征了由于以下原因导致的上部5米的快速衰减吸收光谱的红色端；第二个指数表示蓝绿的衰减。 $R$ 、 $\zeta_f$ 、 $\zeta_s$  做为常量值的选择在很大程度上取决于所模拟的水体的特征光学特性。一些作者根据观察到的条件推导出了这些参数 (表5.1) 。

表 5.1通过拟合两个指数的和到向下辐照度的观测值而确定的参数值。表格改编自 Paulson 和Simpson (1977)。

Author	Water Type	R	$\zeta_f$ (1/m)	$\zeta_s$ (1/m)
Paulson and Simpson (1977)	Run 1	0.74	0.588	0.063
	Composite	0.62	0.667	0.050
Kraus and Businger (1994)	Very Clear Water	0.4	0.200	0.025
Jerlov (1968)	Type I	0.58	2.857	0.043
	Type I (upper 50 m)	0.68	0.833	0.036
	Type IA	0.62	1.667	0.050
	Type IB	0.67	1.000	0.059
	Type II	0.77	0.667	0.071
	Type III	0.78	0.714	0.127

### 5.2.3 水质关联光衰减

该方法是用全热交换和平衡温度选项下的光衰减。在平衡温度热交换选项中，太阳辐射的一定比例总是被顶层吸收，而不管它有多厚或消光系数是多少。这是由 Beer 定律描述的附加术语 $\beta$ ：

$$I(z) = (1 - \beta) I_{sw} \exp(-K_e z) \quad (5.12)$$

其中，

$I(z)$  地表以下Z深度的太阳辐射 ( $W/m^2$ ) ，

$\beta$  在水面吸收的分数 (无量纲) ，

$K_e$  消光系数 ( $1/m$ ) ，

$I_{sw}$  是水面处的太阳辐射 ( $W/m^2$ ) 。

#### 5.2.3.1 消光因子

标准 EFDC+ 逐项完全热平衡表面热交换过程与完全热平衡 (传统) 选项相同。这两个选项之间的主要区别是标准 EFDC+ 完全热平衡使用可变的消光系数。模型中包括有根水生植物在内的总消光的一般公式如下：

$$K_{ess} = K_{e,b} + K_{e,TSS} TSS + K_{e,POC} POC + K_{e,DOC} DOC + K_{e,Chl} \sum Chl + K_{e,MAC} MAC \quad (5.13)$$

其中，

$K_{ess}$  是总消光系数 ( $1/m$ ) ，

$K_{e,TSS}$  是 TSS 的消光系数 ( $1/m/g/m^3$ ) ，

$K_{e,b}$  是背景光消减 (1/m) ,

$TSS$  是泥沙输送模块提供的 TSS 浓度 ( $g/m^3$ ) ,

$POC$  是由水质模块提供的总颗粒有机碳 (POC) 浓度 (易降解和难降解) ( $g/m^3$ ) ,

$K_{e,POC}$  是作为 POC 浓度的函数的消光系数 ( $1/m/g/m^3$ ) ,

$DOC$  是由水质模块提供的溶解有机碳 (DOC) 浓度 (易降解和难降解) ( $g/m^3$ ) ,

$K_{e,DOC}$  是作为 DOC 浓度的函数的消光系数 ( $1/m/g/m^3$ ) ,

$K_{e,Chl}$  是浮游藻类叶绿素 a (chl a) 的消光系数 ( $1/m/mg\ chl/m^2$ ) ,

$Chl$  是浮游藻类群 m 的 Chl a 浓度,

$Bm$  是藻类群 m 的浓度 ( $g\ C/ml$ ) ,

$CChlm$  是藻类群 m 中碳与叶绿素的比率 ( $g\ C/mg\ Chl$ ) ,

$K_{e,MAC}$  是固定生物区系或生根植物嫩枝的消光系数 ( $1/m/gm\ C/m^2$ ) , 以及

$MAC$  是固定生物群或植物枝条的浓度 ( $g\ C/m^2$ ) 。

如果 EFDC+模型中仅模拟流体动力学和温度, 则将使用背景光消光系数。如果模拟流体动力学、温度和 TSS, 则总消光系数是背景消光系数和 TSS 引起的消光系数的函数。如果用 TSS 模拟全水质模型, 则总消光系数为背景消光、TSS、POC、DOC 和 chl a 的函数。

具有可变消光选项的完全热平衡与冰子模型完全耦合, 并说明了冰融化和冰增长。最后, 潜热和显热交换的表面热交换系数可以在空间上变化。

### 5.3 床热交换

与表面热交换相比, 沉积物-水界面与水的交换通常很小, 经常被忽略。然而, 包括沉积物床热交换可以改善深湖和水库的温度模拟。沉积床层与底层水柱之间的热交换可以描述为

$$H_b = -(K_{b,v}U + K_{b,c})(T_w - T_b) \quad (5.14)$$

$$U = \sqrt{u_1^2 + v_1^2} \quad (5.15)$$

其中,

$H_b$  是沉积物床水热交换 ( $W/m^2$ ) ,

$K_{b,v}$  是对流热交换系数 ( $W-s/m^3-^{\circ}C$ ) ,

$K_{b,c}$  是传导热交换系数 ( $W/m^2-^{\circ}C$ ) ,

$u_1$  是层 1 中的 u 分量水流速度 (m/s) ,

$v_1$  是层 1 中的  $v$  分量水流速度 (m/s) ,

$T_w$  是第 1 层的水温( $^{\circ}\text{C}$ ) , 和

$T_b$  是沉积床温度( $^{\circ}\text{C}$ )

在 EFDC+ 代码实现中, 两边按水密度和水的比热来划分, 因此  $K_{b,c}$  的单位是 m/s 和  $K_{b,v}$  是无量纲。  $K_{b,c}$  典型应用使用的值为  $0.3 \text{ W/m}^2\text{-}^{\circ}\text{C}$ , 其大约比表面热交换系数小两个数量级。  $K_{b,c}$  通常不使用 (即等于零) , 但可以在 0 到 10 的范围内变化。 年平均气温是  $T_b$  的良好初始估计值。

可选地, 由于热交换, 床温度 ( $T_b$ ) 可以随时间变化。

$$\frac{\delta(D_b T_b)}{\delta t} = -(K_{b,v} U + K_{b,c})(T_b - T_w) \quad (5.16)$$

其中,  $D_b$  为沉积床热厚度 (m) 。 热厚度的选择取决于初始近似值和随后的校准。 热厚度越大, 床层温度变化越慢。

## 5.4. 冰的形成和融化

在基于 W2 (Wells 和 Cole, 2000) 冰模块的 EFDC+ 中实现了一个强大的冰模块。 在本模块中, EFDC+ 使用耦合热方法模拟冰的形成和融化。 然而, 冰动力学 (即冰块的运动) 尚未实施。

### 5.4.1 热平衡

水-冰-空气系统的热平衡由下式给出:

$$\rho_i L_f \frac{dh}{dt} = h_{ai}(T_i - T_e) - h_{wi}(T_w - T_m) \quad (5.17)$$

其中,

$\rho_i$  是冰的密度 ( $\text{kg/m}^3$ ) ,

$L_f$  是冰的熔化潜热 (J/kg) ,

$dh/dt$  是冰厚度 (h) 随时间 (t) 的变化 (m/s) ,

$h_{ai}$  是冰与空气的热交换系数 ( $\text{W/m}^2\text{/}^{\circ}\text{C}$ ) ,

$h_{wi}$  是通过融化层的水-冰热交换系数 ( $\text{W/m}^2\text{/}^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_i$  是冰的温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_e$  是冰与空气热交换的平衡温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_w$  是冰下的水温( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_m$  是融化温度( $^{\circ}\text{C}$ ) 。

冰的形成需要通过正常的表面热交换过程将表面水温度降低到冰点。随着热量的进一步释放,水面上开始结冰。这由负的水面温度表示。然后将负水面温度转换为等效冰厚度,等效热量被添加到水的热源和汇项中。冰层厚度计算如下:

$$\theta_0 = -\frac{T_{wn}\rho_w c_{pw} h}{\rho_i L_f} \quad (5.18)$$

其中,

$\theta_0$  是在一个时间步长内初始冰形成的厚度 (m) ,

$T_{wn}$  是当地临时负水温( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$h$  是水层厚度 (m) ,

$\rho_w$  是水的密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ,

$\rho_i$  是冰的密度 ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ) ,

$L_f$  是融化潜热 ( $\text{J}/\text{kg}$ ) 。

#### 5.4.2 冰面温度

冰面温度由以下方程给出:

$$T_s^n = \frac{\theta^{n-1}}{K_i} [H_{sn}^n + H_{an}^n - H_{br}(T_s^n) - H_c(T_s^n)] \quad (5.19)$$

$$H_{sn} + H_{an} - H_{br} - H_e - H_c + q_i = \rho_i L_f \frac{d\theta_{ai}}{dt}, \quad \text{for } T_s = 0^{\circ}\text{C} \quad (5.20)$$

$$q_i = K_i \frac{T_f - T_s(t)}{\theta(t)} \quad (5.21)$$

其中,

$K_i$  是冰的导热系数 ( $\text{W}/\text{m}/^{\circ}\text{C}$ ) ,

$T_f$  是冰点温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$n$  是时间水平,

$q_i$  是通过冰的热通量 ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) ,

$H_n$  是穿过水面的净热交换率 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_s$  是入射短波太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_a$  是入射长波辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_{sr}$  是反射的短波太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_{ar}$  是反射的长波辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_{br}$  是来自水面的反射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_e$  是蒸发热损失 ( $\text{W/m}^2$ ) , 以及

$H_c$  是热传导 ( $\text{W/m}^2$ ) 。

### 5.4.3 冻结温度

冻结温度关系描述如下:

$$T_f = \begin{cases} -0.0545 TDS, & TDS < 35 \text{ ppt} \\ -0.3146 - 0.0417 TDS - 0.000166 TDS^2, & TDS > 35 \text{ ppt} \end{cases} \quad (5.22)$$

其中,

$T_f$  是冰点温度( $^{\circ}\text{C}$ ) ,

$TDS$  是总溶解固体 (ppt) 。

### 5.4.4 空气/水界面处的冰融化

空气/水界面处的冰融化由以下方程描述:

$$\rho_i c_{pi} \frac{T_s(t)}{2} \theta(t) = \rho_i L_f \Delta \theta_{ai} \quad (5.23)$$

其中,

$c_{pi}$  是冰的比热 ( $\text{J/kg/}^{\circ}\text{C}$ ) , 和

$\theta_{ai}$  是空气-冰界面处的冰融化 ( $1/\text{m}$ ) 。

### 5.4.5 冰底部的冰生长/融化

冰底部的冰生长/融化由以下方程描述:

$$q_i - q_{iw} = \rho_i L_f \frac{d\theta_{iw}}{dt} \quad (5.24)$$

其中,

$q_i$ 是通过冰的热通量 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$q_{iw}$ 是冰/水界面处的热通量 ( $\text{W/m}^2$ ) , 以及

$q_{iw}$ 是冰水界面处的冰生长/融化。

$$\Delta\theta_{iw}^n = \frac{1}{\rho_i L_f} \left[ K_i \frac{T_f - T_s^n}{\theta^{n-1}} - h_{wi} (T_w^n - T_f) \right] \quad (5.25)$$

#### 5.4.6 冰底太阳辐射

冰层底部的太阳辐射由下式给出:

$$H_{ps} = H_s (1 - \alpha_i) (1 - \beta_i) \exp[-\gamma_i \theta(t)] \quad (5.26)$$

其中,

$H_{ps}$  是冰层下水吸收的太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$H_s$  是入射太阳辐射 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$\alpha_i$  是冰的反照率,

$\beta_i$  是冰面吸收的入射太阳辐射的一部分, 以及

$\gamma_i$  是冰消光系数 ( $1/\text{m}$ )

#### 5.5.水量蒸发损失

尽管全热和平衡温度 (W2) 选项中包含了因蒸发产生的热通量, 但它并未计算因蒸发过程而从水体中损失的水量。用户可以选择计算蒸发损失或使用输入的蒸发数据来计算这些损失。

用户可以选择其他选项, 包括EFDC原始方法, 其中使用全热平衡估算的潜热来计算蒸发量, 从而计算蒸发造成的水量损失。然而, EFDC+允许用户具有不同的蒸发湍流交换系数。蒸发引起的水深变化可计算为:

$$\Delta z = E \Delta t = \frac{H_E}{\rho L_E} \Delta t \quad (5.27)$$

其中,

$H_E$ 是由于蒸发产生的潜热通量 ( $\text{W/m}^2$ ) ,

$\rho$ 是水密度 ( $\text{kg/m}^3$ ) ,

$L_E$ 是水的潜热 ( $\text{J/kg}$ ) ,

$E$  是蒸发速率 (m/s) ,

$\Delta t$  是时间间隔(s), 并且

$\Delta z$  是 $\Delta t$  期间的水深变化

对于蒸发, 潜热通量也可以使用Edinger等人 (1974) 提出的经验公式进行估算, 如下:

$$H_E = f(W)(e_s - e_a) \quad (5.28)$$

其中,

$f(W)$  是风速函数,

$e_s$  是水面温度下的饱和蒸汽压 (mbar) , 以及

$e_a$  是上覆空气中的实际蒸汽压力。

风速函数具有一般形式,

$$f(W) = a + bW + cW^2 \quad (5.29)$$

其中,

$a, b, c$  是风系数 (表5.2) ,

$W$  是风速 (m/s) , 以及

系数值是蒸发损失所选方法的函数 (表5.2) 。

表5.2蒸发计算方法列表

IEAVAP	蒸发法	一般用途	a	b	c
0	不包括蒸发				
1	使用ASER蒸发	测量或外部估计			
2	原始EFDC				
3	Ward (1980)	冷却湖 (Cooling Lake)	0.0	0.354	0.0
4	Harbeck Jr (1964)	冷却湖 (Cooling Lake)	0.0	3.818	0.0
5	Brady et al.(1969)	冷却湖 (Cooling Lake)	6.442	0.0	0.322
6	Anderson et al.(1954)	大型湖泊	0.0	2.403	0.0
7	Webster and Sherman (1995)	湖泊	2.717	2.743	0.0



8	Fulford and Sturm (1984)	河流	8.359	2.090	0.0
9	Gulliver and Stefan (1984)	溪流	7.732	1.672	0.0
10	Edinger et al. (1974)	湖泊/河流	6.9	0.0	0.345

## 第 6 章 沉积物运输模块

### 6.1.介绍

EFDC+支持两个单独的输沙计算选项：

1.EFDC 沉积物传输模块，基于 Hamrick 的工作 (Tetra Tech, 2007b) 。

2.来自 SNL-EFDC 的 SEDJLJ 沉积物传输模块 (Jones 和 Lick, 2000; Thanh 等人, 2008 年; Ziegler 和 Lick 等人, 1988/1986) 。

这两种方法都以相同的方式计算水柱中的悬浮泥沙输移。尽管如此，它们在 (1) 如何处理粘性沉积物和非粘性沉积物以及 (2) 如何计算水柱和沉积物床之间的沉积物质量交换方面存在明显差异。EFDC 沉积物传输模块对粘性沉积物和非粘性沉积物分别应用计算过程 (见图 6.1)；该方法使用每个沉积物类别的用户定义的恒定侵蚀率参数来模拟侵蚀过程。SEDJLJ 泥沙运输模块对多种泥沙类别使用统一处理，而不考虑凝聚力 (见图 6.2)；该方法可以通过使用从 SED 云设备获得的特定场地侵蚀率数据来应用空间变化的侵蚀财产。两个泥沙输送模块都与流体动力学模块动态连接。因此，EFDC+可以在模拟中实现流场和沉积物床变化之间的直接地貌反馈。本章介绍了 EFDC++中泥沙输移计算的理论基础。

### 6.2 悬浮泥沙输移

#### 6.2.1悬浮泥沙输运控制方程

水柱中悬浮沉积物的传输方程遵循溶解或悬浮物质的通用传输方程 (3.1)。对于 EFDC+ 实现，由于遇到较小的固有数值扩散，方程 (3.1) 中的物理水平扩散项被省略。由此得出以下形式的悬移质输运方程：

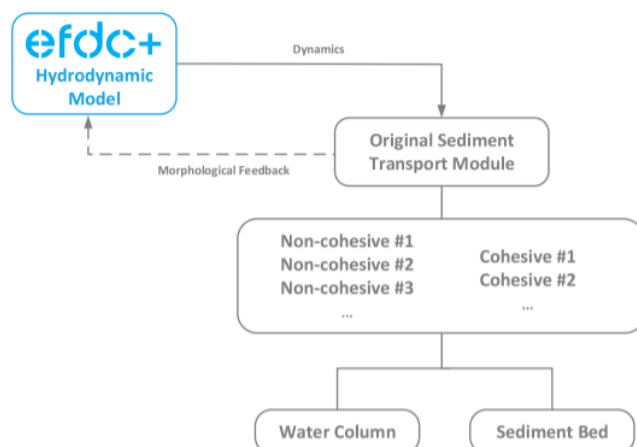


图 6.1 EFDC 泥沙输移模型的结构。

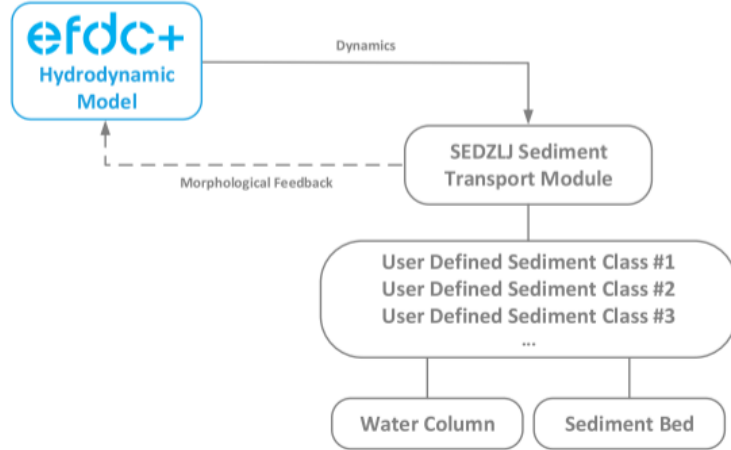


图 6.2.SEDZLJ 泥沙运输模型的结构

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H C_j) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u C_j) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v C_j) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w C_j) - \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y w_{s,j} C_j) \\ = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{m_x m_y}{H} A_b \frac{\partial}{\partial z} C_j \right) + S_{s,j}^E + S_{s,j}^I \quad (6.1) \end{aligned}$$

其中，

$x, y$  是水平方向 (m) 上的正交曲线坐标，

$z$  是sigma坐标 (无量纲)，

$t$  是时间(s)，

$m_x, m_y$  是度量张量的对角分量的平方根 (无量纲)，

$C_j$  是水柱中第  $j$  类沉积物的浓度 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )，

$H$  为总水柱深度 (m)，

$u, v$  是曲线坐标中的水平速度分量 (m/s)，

$w$  是垂直速度分量 (m/s)，

$A_b$  是垂直湍流涡流扩散率 ( $\text{m}^2/\text{s}$ )，

$S_{s,j}^E$  是  $j$  类沉积物的外部源汇项 ( $\text{g}/\text{m}^2/\text{s}$ )，以及

$S_{s,j}^I$  是  $j$  类沉积物的内部源汇项 ( $\text{g}/\text{m}^2/\text{s}$ )。

源-汇项分为两个项：外部项包括点源和非点源负荷，内部项可能包括有机沉积物的反应衰变或模拟絮凝物形成和破坏时沉积物类别之间的质量交换。

方程 (6.1) 在垂直方向上的边界条件为：

$$-\frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} C_j - w_{s,j} C_j = J_{o,j} \quad \text{at } z = 0 \quad (6.2)$$

$$-\frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} C_j - w_{s,j} C_j = 0 \quad \text{at } z = 1 \quad (6.3)$$

其中  $J_{o,j}$  是水柱-沉积物床之间  $j$  类沉积物的净交换通量 ( $\text{g/m}^2/\text{s}$ )，定义进入水柱为正。

## 6.2.2 数值解

一般程序遵循 Hamrick (1992) 中描述的盐度输送方程，该方程对平流项使用高阶迎风差分离散方案。方程 (6.1) 的数值解采用了分步法。

第一步通过对流和具有相应体积通量的外部源和汇将浓度提高。

$$H^{n+1} C^* = H^n C^n + \frac{\Delta t}{m_x m_y} (S_s^E)^{n+\frac{1}{2}} - \frac{\Delta t}{m_x m_y} \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( m_y (Hu)^{n+\frac{1}{2}} C^n \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( m_x (Hv)^{n+\frac{1}{2}} C^n \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( m_x m_y w^{n+\frac{1}{2}} C^n \right) \right] \quad (6.4)$$

其中上标  $n$  和  $n+1$  表示新旧时间级别，上标  $*$  表示中间分步结果。注意，为了清楚起见，已删除了沉积物类别下标  $j$ 。与体积源和汇相关的源和汇项部分包含在平流步骤中，以与连续性约束保持一致。该源汇项以及平流场 ( $u, v, w$ ) 定义为与连续性方程的时间离散化一致的新旧时间水平之间的时间中间。平流步骤使用反扩散多维正定平流传输算法 (MPDATA) 方案 (Smolarkiewicz 和 Clark, 1986) 和可选通量校正传输 (Smolarkiewicz 和 Grabowski, 1990)。

第二个分步或沉降步骤由下式给出：

$$C^{**} = C^* + \frac{\Delta t}{H^{n+1}} \frac{\partial}{\partial z} (w_s C^{**}) \quad (6.5)$$

方程 (6.5) 通过完全隐式迎风差分格式求解。

$$C_{KC}^{**} = C_{KC}^* + \frac{\Delta t}{\Delta_z H^{n+1}} (w_s C^{**})_{KC} \quad (6.6)$$

$$C_k^{**} = C_k^* + \frac{\Delta t}{\Delta_1 H^{n+1}} (w_s C^{**})_{k+1} - \frac{\Delta t}{\Delta_k H^{n+1}} (w_s C^{**})_k \quad \text{for } 2 \leq k \leq KC - 1 \quad (6.7)$$

$$C_1^{**} = C_1^* + \frac{\Delta t}{\Delta_z H^{n+1}} (w_s C^{**})_2 \quad (6.8)$$

其中，

$k$  是水柱层指数，

$K_C$  是水柱层的最大数量，

$C_{KC}$  为顶层浓度 ( $\text{g/m}^3$ )，

$C_k$  是每层  $k$  中的浓度 ( $\text{g/m}^3$ )，以及

$C_1$  为底层浓度 ( $\text{g/m}^3$ )。

解决方案从  $k=KC$  (顶层) 开始，向下行进至底层。隐式解决方案包括跨内部水柱层界面的可选反扩散校正。

第三部分步骤说明了通过再悬浮和沉积通过以下步骤进行的水柱-床交换，

$$C_1^{***} = C_1^{**} + \frac{\Delta t}{\Delta_z H^{n+1}} L_o J_o^{***} \quad (6.9)$$

其中， $L_o$  是通量限制器 (无量纲)，使得只有床的当前顶层可以在单个时间步骤中完全再悬浮。

对于悬浮非粘性沉积物的再悬浮和沉积，床通量由下式给出

$$J_0^{***} = w_s (C_{eq} - C_1^{***}) \quad (6.10)$$

其中， $C_{eq}$  是关于水动力和沉积物物理参数的平衡浓度 ( $\text{g/m}^3$ )，这将在下一节中进一步讨论。

对于粘性沉积物再悬浮，床通量被指定为床剪切应力和床地质力学性质的函数。对于粘性沉积物沉积，床通量通常由下式给出

$$J_0^{***} = -P_d w_s C_1^{***} \quad (6.11)$$

其中， $P_d$  是沉积的概率。通过不同的分数步骤 (fractional step) 表示水柱-沉积物-床交换相当于底部边界条件方程 (6.2) 的分裂，从而在沉降和垂直扩散之间的中间步骤 (fractional step) 施加床通量。

剩余步骤是隐式垂直湍流扩散步骤，

$$C^{n+1} = C^{***} + \Delta t \frac{\partial}{\partial z} \left[ \left( \frac{A_b}{H^2} \right)^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} C^{n+1} \right] \quad (6.12)$$

床和水面的扩散通量为零。

### 6.3 EFDC沉积物传输模块

EFDC 沉积物传输模块的实施对非粘性沉积物和粘性沉积物应用了单独的计算过程。泥沙输移过程的概念框架如图 6.3 所示。

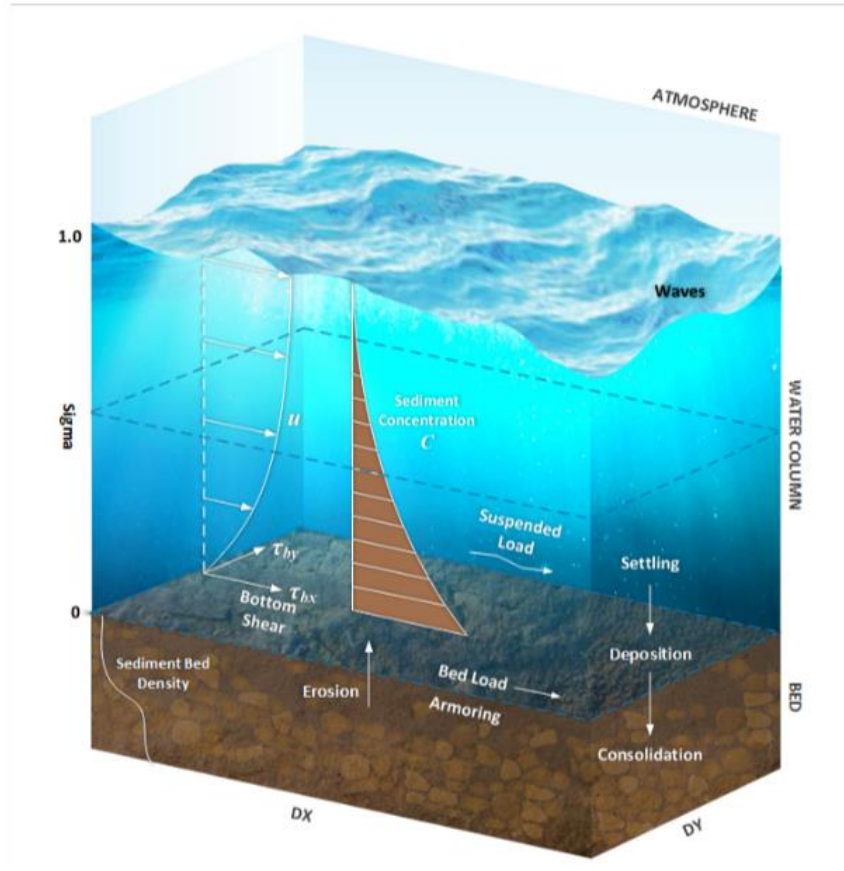


图 6.3.EFDC 沉积物输运模块的概念框架

### 6.3.1 非粘性沉积物

#### 6.3.1.1 沉降速度

非粘性无机沉积物在低沉积物浓度条件下以离散颗粒的形式沉降，在靠近海床的高沉积物浓度区域，阻碍沉降和多相相互作用变得重要。在低沉积物浓度下，j 类非粘性沉积物的沉降速度对应于离散颗粒的沉降速度，如下所示：

$$w_{sj} = w_{soj} \quad (6.13)$$

其中， $w_{soj}$  是离散颗粒沉降速度 (m/s)，取决于沉积物密度、有效粒径和流体运动粘度。

van Rijn (1984) 对  $w_{soj}$  的分段关系如下，

$$w_{soj} = \sqrt{g'd_j} \begin{cases} \frac{R_{dj}}{18}, & d \leq 100 \mu\text{m} \\ \frac{10}{R_{dj}} \left( \sqrt{1 + 0.01R_{dj}^2} - 1 \right), & 100\mu\text{m} < d_j \leq 1000 \mu\text{m} \\ 1.1, & d_j > 1000\mu\text{m} \end{cases} \quad (6.14)$$

其中  $g'$  是减小的重力加速度，

$$g' = g \left( \frac{\rho_{sj}}{\rho_w} - 1 \right) \quad (6.15)$$

$R_{dj}$ 是沉积物颗粒密度雷诺数，计算如下

$$R_{dj} = \frac{d_j \sqrt{g' d_j}}{\nu} \quad (6.16)$$

在较高浓度和阻碍沉降条件下，沉降速度小于离散速度，

$$w_{sj} = \left( 1 - \sum_i \frac{C_i}{\rho_{si}} \right)^n w_{soj} \quad (6.17)$$

其中 $\rho_s$ 是泥沙颗粒密度，n值范围为2至4（van Rijn, 1984）。对总泥沙浓度高达200,000毫克/升，表达式（6.14）近似于5%以内，通过

$$w_{sj} = \left( 1 - n \sum_i \frac{C_i}{\rho_{si}} \right) w_{soj} \quad (6.18)$$

总沉积物浓度高达 200000 毫克/升。对于总沉积物浓度小于 25000mg/l 的情况，忽略阻碍沉降校正会导致沉降速度误差小于 5%，这在用于估计离散颗粒沉降速度的参数的不确定性范围内。

### 6.3.1.2 运输和侵蚀的临界阈值

在 EFDC 沉积物传输模块中，前面的一组规则用于确定多种尺寸类别的非粘性沉积物的传输模式。非粘性沉积物以推移质和悬移质的形式运输。当床层应力 $\tau_b$  超过临界应力（称为屏蔽应力 $\tau_{cs}$ ）时，两种传输模式的启动都始于沉积物从床层的侵蚀或再悬浮。屏蔽应力 $\tau_{cs}$  取决于沉积物颗粒的密度和直径以及流体的运动粘度，可以用以下形式的经验无量纲关系表示：

$$\theta_{csj} = \frac{\tau_{csj}}{g' d_j} = \frac{u_{*csj}^2}{g' d_j} = f(R_{dj}) \quad (6.19)$$

van Rijn（1984）提供的方程（6.19）关系的有用数值表达式为：

$$\theta_{csj} = \begin{cases} 0.24 \left(R_{dj}^{2/3}\right)^{-1} & \text{for } R_{dj}^{2/3} < 4 \\ 0.14 \left(R_{dj}^{2/3}\right)^{-0.64} & \text{for } 4 \leq R_{dj}^{2/3} < 10 \\ 0.04 \left(R_{dj}^{2/3}\right)^{-0.1} & \text{for } 10 \leq R_{dj}^{2/3} < 20 \\ 0.013 \left(R_{dj}^{2/3}\right)^{0.29} & \text{for } 20 \leq R_{dj}^{2/3} < 150 \\ 0.055 & \text{for } 150 \leq R_{dj}^{2/3} \end{cases} \quad (6.20)$$

在以河床剪切速度  $u^*$  为特征的特定局部水流条件下，已经使用了几种方法来区分特定泥沙尺寸类别是作为推移质还是悬移质运输：

$$u_* = \sqrt{\tau_b} \quad (6.21)$$

van Rijn (1984) 提出的方法用于 EFDC 沉积物传输模块，如下所示。当河床剪切速度小于  $j$  类沉积物的临界剪切速度  $u^*_{csj}$  时：

$$u^*_{csj} = \sqrt{\tau_{csj}} = \sqrt{g'd_j\theta_{csj}} \quad (6.22)$$

没有发生侵蚀或再悬浮，也没有推移质输送。在这种情况下，悬浮在水柱中的沉积物会沉积到沉积物床上。

当床层剪切速度超过临界剪切速度但仍小于沉降速度时：

$$u^*_{csj} < u_* < W_{soj} \quad (6.23)$$

沉积物将被从海床上侵蚀并作为推移质运输。在这种情况下，悬浮在水柱中的沉积物会沉积到河床上。当床层剪切速度超过临界剪切速度和沉降速度时，推移质输送停止，侵蚀或再悬浮的沉积物将作为悬移质输送。参考图 6.4 进一步说明了这些不同的运输模式，图 6.4 显示了沉降速度关系方程 (6.14) 和临界屏蔽剪切速度方程 (6.22) 的尺寸形式，该方程使用方程 (6.20) 确定，适用于比重为 2.65 的沉积物。

对于粒径小于  $1.3 \times 10^{-4} \text{ m}$  ( $130\mu\text{m}$ ) 的颗粒，沉降速度小于临界剪切速度。因此，当床层剪切速度超过临界剪切速度时，沉积物将从床层重新悬浮，并完全作为悬浮荷载运输。对于粒径大于  $1.3 \times 10^{-4} \text{ m}$  的颗粒，侵蚀沉积物可以通过与方程 (6.23) 相对应的区域内的推移质输送，然后在推移质剪切速度超过沉降速度时作为悬移质输送。



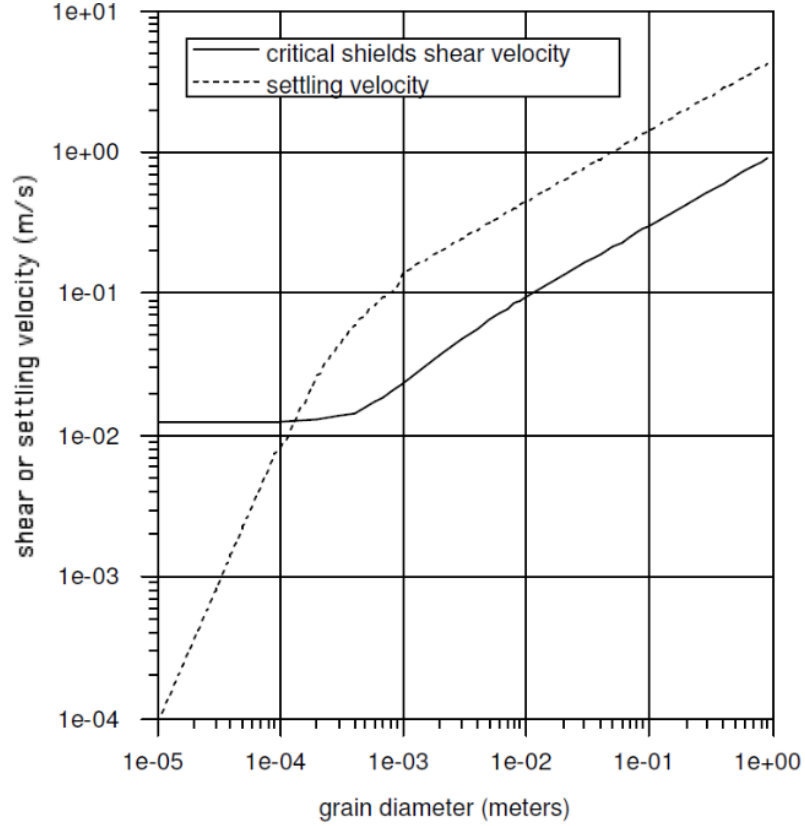


图 6.4 临界屏蔽的剪切速度和沉降速度是沉积物粒度的函数

### 6.3.1.3 推移质

推移质输运采用一般推移质输移速率公式确定：

$$\frac{q_B}{\rho_s d \sqrt{g' d}} = \Phi(\theta, \theta_{cs}) \quad (6.24)$$

其中  $q_B$  是近底部水平流速矢量方向上的推移质传输速率（单位时间每单位宽度的质量）。函数  $\Phi$  取决于屏蔽的参数  $\theta$ ：

$$\theta = \frac{\tau_b}{g' d_j} = \frac{u_*^2}{g' d_j} \quad (6.25)$$

以及由方程 (6.19) 和 (6.20) 定义的临界屏蔽参数  $\theta_{cs}$ 。

在 EFDC+ 中，推移质运输配方案具有一般形式，符合方程 (6.25)：

$$\Phi(\theta, \theta_{cs}) = \phi (\theta - \theta_{cs})^\alpha \left( \sqrt{\theta} - \gamma \sqrt{\theta_{cs}} \right)^\beta \quad (6.26)$$

根据 van Rijn (1984) 公式，推移质输运参数  $\phi$  被指定为临界屏蔽参数  $\theta_{cs}$  和/或颗粒密度雷诺(Reynolds)数  $R_d$  的函数：

$$\phi = \frac{0.053}{R_d^{1/5} \theta_{cs}^{2.1}} \quad (6.27)$$

推移质常数 $\alpha$ 、 $\beta$ 和 $\gamma$ 被视为用户定义的参数，可以根据下面列出的文献进行指定。

van Rijn (1984) 公式：

$$\Phi = \phi (\theta - \theta_{cs})^{2.1} \quad (6.28)$$

Engelund 和 Hansen (1967) 公式：

$$\Phi = \phi (\theta)^{2.1} (\sqrt{\theta})^\beta \quad (6.29)$$

Meyer-Peter 和 Müüller (1948) 公式：

$$\Phi = \phi (\theta - \theta_{cs})^{1.5} \quad (6.30)$$

Bagnold (1956) 公式：

$$\Phi = \phi (\theta - \theta_{cs}) (\sqrt{\theta}) \quad (6.31)$$

Wu 等人 (2000) 公式：

$$\Phi = \phi (\theta - \theta_{cs})^{2.2} \quad (6.32)$$

此外，还有其他用于河流预测的推移质公式 (Ackers 和 White, 1973; Laursen, 1958; Yang, 1973 年; Yang 和 Molinas, 1982) ; 然而，它们不容易符合方程 (6.25) ，因此 EFDC+ 模型中没有包含这些方法。

EFDC+模型中推移质输运与泥沙床耦合的过程如下。首先，根据方程 (6.25) 计算水平模型单元中心处单位宽度推移质质量通量的大小，用下标 C 表示。然后，使用以下公式将单元中心通量转换为单元中心矢量分量：

$$\begin{aligned} q_{bcx} &= \frac{u}{\sqrt{u^2 + v^2}} q_{bc} \\ q_{bcy} &= \frac{v}{\sqrt{u^2 + v^2}} q_{bc} \end{aligned} \quad (6.33)$$

其中  $u$  和  $v$  是靠近床的细胞中心水平速度。细胞表面质量通量由细胞中心通量的顺风投影确定

$$\begin{aligned} q_{bfx} &= (q_{bcx})_{upwind} \\ q_{bfy} &= (q_{bcy})_{upwind} \end{aligned} \quad (6.34)$$

其中下标逆风表示 x 法线和 y 法线单元面的逆风单元中心。然后，从水电池下方的沉积床中沉积物物质的净去除率或累积率由下式给出：

$$m_x m_y J_b = (m_y q_{bfx})_e - (m_y q_{bfx})_w + (m_x q_{bfy})_n - (m_x q_{bfy})_s \quad (6.35)$$

其中，

$J_b$  是床的净去除率 ( $\text{gm}/\text{m}^2\text{-sec}$ )

$m_x$  和  $m_y$  是单元格的 x 和 y 维度

e、w、n、s 表示罗盘方向下标，用于定义四个单元面。

EFDC+ 中方程 (6.33) 至 (6.35) 的实施包括在一个时间步长上限制输出通量方程 (6.34) 的逻辑，使得来自床的时间积分质量通量不超过可用于侵蚀或再悬浮的床沉积物。

#### 6.3.1.4 悬浮荷载

在床层剪切速度超过沉降速度和临界屏蔽层剪切速度的条件下，非粘性沉积物将作为悬浮物在水柱中重新悬浮和运输。当床层剪切速率低于沉降速度和关键屏蔽层剪切速率时，水柱中的悬浮沉积物将沉积到床层中。

利用近床平衡泥沙浓度的概念，开发了这些过程的一致公式。在稳定、均匀的流量和含沙量条件下，沉积物在水柱中的平衡分布趋于建立，再悬浮通量和沉积通量相互抵消。使用一些简化的假设，水柱中的平衡含沙量分布可以根据近床参考或平衡浓度、沉降速度和垂直湍流扩散率进行解析表达。对于非稳定或空间变化的水流条件，水柱含沙量分布在空间和时间上变化，以响应沙量变化、水动力传输的变化以及穿过水柱-沉积物-床界面的相关非零通量。床层应力和垂直湍流混合强度的增加或减少将分别在特定位置或时间导致净侵蚀或沉积。

为了说明如何建立适当的悬浮非粘性泥沙床通量边界条件，考虑近似于几乎均匀水平条件下的泥沙输移方程 (6.1)：

$$\frac{\partial}{\partial t}(HC) = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_s C \right) \quad (6.36)$$

底部流体动力学模型层深度上的积分方程 (6.36) 得出：

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Delta H \bar{C}) = J_0 - J_\Delta \quad (6.37)$$

其中， $\bar{\phantom{x}}$  表示无量纲层厚度  $\Delta$  上的平均值。从方程 (6.36) 中减去方程 (6.37) 得出：

$$\frac{\partial}{\partial t} (HC') = \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_z C \right) - \left( \frac{J_0 - J_\Delta}{\Delta} \right) \quad (6.38)$$

通过假设沉积物浓度与平均值的偏差的变化率很小，

$$\frac{\partial}{\partial t} (HC') \ll \frac{\partial}{\partial t} (H \bar{C}) \quad (6.39)$$

方程 (6.38) 可以近似为：

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_z C \right) = \left( \frac{J_0 - J_\Delta}{\Delta} \right) \quad (6.40)$$

积分方程 (6.40) 一次得出：

$$\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_z C = (J_0 - J_\Delta) \frac{z}{\Delta} - J_0 \quad (6.41)$$

非常接近床，方程 (6.41) 可以近似为：

$$\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_z C = -J_0 \quad (6.42)$$

忽略分层效应并使用第 5.1.1 节的结果，近床扩散率约为：

$$\frac{A_b}{H} = K_o q \frac{l}{H} \cong u_* \kappa z \quad (6.43)$$

将方程 (6.43) 积分到 (6.42) 中得出：

$$\frac{\partial C}{\partial z} + \frac{R}{z} C = -\frac{R J_0}{z w_s} \quad (6.44)$$

其中 R 是 Rouse 参数，计算公式为：

$$R = \frac{w_s}{u_* \kappa} \quad (6.45)$$

方程 (6.44) 的解为:

$$C = -\frac{J_o}{w_s} + \frac{C_0}{z^R} \quad (6.46)$$

通过将近床泥沙浓度设置为平衡值来评估积分常数, 该平衡值在无净流量条件下仅在床上方定义为:

$$C = C_{eq} \quad \text{at} \quad z = z_{eq} \quad \text{and} \quad J_o = 0 \quad (6.47)$$

使用方程 (6.47), 方程 (6.46) 变为

$$C = \left(\frac{z_{eq}}{z}\right)^R C_{eq} - \frac{J_o}{w_s} \quad (6.48)$$

对于非平衡条件, 通过在平衡水平上评估方程 (6.48) 来给出净通量

$$J_o = w_s (C_{eq} - C_{ne}) \quad (6.49)$$

其中  $C_{ne}$  是在参考平衡水平下的实际浓度。方程 (6.49) 清楚地表明, 当近床含沙量小于平衡值时, 会出现从床进入水柱的净流量。同样, 当浓度超过平衡时, 会出现流向床层的净流量。当  $C_{ne}$  大于  $C_e$  时, 方程 (6.49) 可以改写为:

$$J_o = -w_s C_{ne} \left(1 - \frac{C_{eq}}{C_{ne}}\right) \quad (6.50)$$

并且方程 (6.50) 中括号内的项可以被认为是不超过 1 的沉积因子。

为了使关系方程 (6.49) 在三维数值模型中 useful, 床通量必须用模型层平均浓度表示为:

$$J_o = w_s (\bar{C}_{eq} - \bar{C}) \quad (6.51)$$

其中,

$$\begin{aligned} \bar{C}_{eq} &= \frac{\ln(\Delta z_{eq}^{-1})}{(\Delta z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, \quad R = 1 \\ \bar{C}_{eq} &= \frac{(\Delta z_{eq}^{-1})^{1-R} - 1}{(1-R)(\Delta z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, \quad R \neq 1 \end{aligned} \quad (6.52)$$

其根据近床平衡浓度来定义等效层的平均平衡浓度。底部边界条件方程 (6.9) 的数值解中的相应量为:

$$\begin{aligned} w_r C_r &= w_s \bar{C}_{eq} \\ P_d w_s &= w_s \end{aligned} \quad (6.53)$$

如果无量纲平衡高程  $z_{eq}$  超过无量纲层厚度, 则方程 (6.33) 可以修改为:

$$\begin{aligned} \bar{C}_{eq} &= \frac{\ln(M\Delta z_{eq}^{-1})}{(M\Delta z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, \quad R = 1 \\ \bar{C}_{eq} &= \frac{(M\Delta z_{eq}^{-1})^{1-R} - 1}{(1-R)(M\Delta z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, \quad R \neq 1 \end{aligned} \quad (6.54)$$

其中方程 (6.51) 和 (6.53) 中的上条意味着床上方的前 M 层的浓度平均值。

对于二维深度平均模型的应用, 需要考虑一些额外的因素。对于深度平均建模, 方程 (6.41) 的等效值为:

$$\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} + w_s C = -J_o (1-z) \quad (6.55)$$

忽略分层效应并使用沉积物边界层的结果, 扩散率为:

$$\frac{A_b}{H} = K_o q \frac{1}{H} \cong u_* \kappa z (1-z)^\lambda \quad (6.56)$$

将方程 (6.56) 积分到方程 (6.55) 中得出:

$$\frac{\partial C}{\partial z} + \frac{R}{z(1-z)^\lambda} C = -\frac{R(1-z)^{1-\lambda}}{z} \frac{J_o}{w_s} \quad (6.57)$$

当  $\lambda$  等于零时, 方程 (6.57) 的闭合形式解是可能的。尽管所得扩散率不如  $\lambda$  等于 1 的选择合理, 但所得沉积物的垂直分布对近床扩散率分布比对水柱上部的分布更敏感。当  $\lambda$  等于零时, 方程 (6.57) 的解为:

$$C = -\left(1 - \frac{Rz}{(1+R)}\right) \frac{J_o}{w_s} + \frac{C_0}{z^R} \quad (6.58)$$

使用方程 (6.56) 评估积分常数得出:

$$C = \left(\frac{z_{eq}}{z}\right)^R C_{eq} - \left(1 - \frac{Rz}{(1+R)}\right) \frac{J_o}{w_s} \quad (6.59)$$

对于非平衡条件，通过在平衡水平上评估方程 (6.59) 来给出净通量：

$$J_o = w_s \left(\frac{1+R}{1+R(1-z_{eq})}\right) (C_{eq} - C_{ne}) \quad (6.60)$$

其中  $C_{ne}$  是在参考平衡水平下的实际浓度。由于  $z_{eq}$  是沉积物粒径除以水柱深度的数量级，因此方程 (6.60) 基本上等同于方程 (6.49)。为了获得以深度平均含沙量表示的床流量表达式，方程 (6.59) 在深度上进行积分，得出

$$J_o = w_s \left(\frac{2(1+R)}{2+R(1-z_{eq})}\right) (\bar{C}_{eq} - \bar{C}) \quad (6.61)$$

其中，

$$\begin{aligned} \bar{C}_{eq} &= \frac{\ln(z_{eq}^{-1})}{(z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, & R = 1 \\ \bar{C}_{eq} &= \frac{(z_{eq}^{R-1} - 1)}{(1-R)(z_{eq}^{-1} - 1)} C_{eq}, & R \neq 1 \end{aligned} \quad (6.62)$$

数值解底部边界条件方程 (6.9) 中的相应量为

$$\begin{aligned} w_r s_r &= w_s \left(\frac{2(1+R)}{2+R(1-z_{eq})}\right) \bar{C}_{eq} \\ P_d w_s &= \left(\frac{2(1+R)}{2+R(1-z_{eq})}\right) w_s \end{aligned} \quad (6.63)$$

当模拟多个沉积物尺寸等级时，方程 (6.52)、(6.54) 和 (6.62) 给出的平衡浓度通过乘以它们在床表层中各自的沉积物体积分数来调整。

非粘性沉积物水柱床通量的规范已降至近床平衡浓度及其相应的床上参考距离的规范。

Garcia 和 Parker (1991) 通过分析和实验相关性的结合得出了七种关系，用于确定近床平衡浓度，并提出一个新的关系式。所有的关系式基本上都规定了水动力和沉积物物理参数方面的平衡浓度

$$C_{eq} = C_{eq}(d, \rho_s, \rho_w, w_s, u_*, \nu) \quad (6.64)$$

包括泥沙粒径、泥沙和水密度、泥沙沉降速度、贝氏剪切速度和水的运动分子粘度。Garcia 和 Parker 得出结论，Smith 和 McLean (1977) 以及 van Rijn (1984) 的表示，以及他们自己提出的表示，在与实验和现场观测进行测试时，表现是可以接受的。

Smith 和 McLean (1977) 的平衡浓度公式，要求为每种沉积物尺寸等级指定临界希尔兹应力，如下所示：

$$C_{eq} = \rho_s \frac{0.65\gamma_o T}{1 + \gamma_o T} \quad (6.65)$$

其中  $\gamma_o$  是一个常数，等于  $2.4 \times 10^{-3}$ ， $T$  由下式给出

$$T = \frac{\tau_b - \tau_{cs}}{\tau_{cs}} = \frac{u_*^2 - u_{*cs}^2}{u_{*cs}^2} \quad (6.66)$$

其中，

$\tau_b$  是床层应力，以及

$\tau_{cs}$  是希尔兹 (Shields) 的临界应力。

Van Rijn (1984) 公式为

$$C_{eq} = 0.015 \rho_s \frac{d}{z_{eq}^*} T^{3/2} R_d^{-1/5} \quad (6.67)$$

其中，

$z_{eq}^* = H z_{eq}$  是尺寸参考高度 (dimensional reference height)，以及

$R_d$  是泥沙颗粒雷诺数 (Reynoldsz)

当选择 van-Rijn 公式用于 EFDC+ 时，临界希尔兹应力是使用 van-Rijn (1984) 的关系进行内部计算的，该关系建议将尺寸参考高度设置为三晶粒直径。在 EFDC++ 模型中，用户将参考高度指定为最大非粘性沉积物尺寸类直径的倍数。

Garcia 和 Parker (1991) 关于多个沉积物尺寸等级的一般公式为



$$C_{jeq} = \rho_s \frac{A(\lambda Z_j)^5}{(1 + 3.33A(\lambda Z)^5)} \quad (6.68)$$

$$Z_j = \frac{u_*}{w_{sj}} R_{dj}^{3/5} F_H \quad (6.69)$$

$$F_H = \left( \frac{d_j}{d_{50}} \right)^{1/5} \quad (6.70)$$

$$\lambda = 1 + \frac{\sigma_\phi}{\sigma_{\phi_0}} (\lambda_0 - 1) \quad (6.71)$$

其中，

$A$  是等于  $1.3 \times 10^{-7}$  的常数。

$d_{50}$  是基于所有沉积物类别的中值粒径，

$\lambda$  是一个紧张因素 (a straining factor)

$F_H$  是隐藏因素，并且

$\sigma_\phi$  是沉积物粒度分布的沉积学 phi 尺度的标准差。

Garcia 和 Parker (1991) 公式的独特之处在于，当模拟多个沉积物类别时，它可以解释铠装效应。对于单个非内聚尺寸类的模拟，应变因子和隐藏因子设置为一。EFDC+可以选择使用 Garcia 和 Parker 的公式来模拟装甲。对于铠装模拟，沉积物床的当前表层被限制为等于尺寸参考高度的厚度。

## 6.3.2 粘性沉积物

### 6.3.2.1 沉降速度

粘性无机沉积物和有机颗粒物质的沉降是一个极其复杂的过程。重力沉降过程中固有的是絮凝过程，其中单个粘性沉积物颗粒和有机颗粒聚集形成更大的群体（或絮凝体），其沉降特性与组分颗粒的沉降特性显著不同（Burban 等人，1989；1990；吉布斯，1985；Mehta 等人，1989）。絮凝物的形成取决于悬浮物质的类型和浓度、环境的离子特性以及流动环境的流体剪切和湍流强度。在强流剪切作用下絮凝物形成或聚集和分解的第一性原理数学建模方面取得了进展（Lick 和 Lick，1988；Tsai 等人，1987）。然而，这种方法的计算成本阻碍了在操作粘性泥沙输移模型中直接模拟絮凝。

另一种已经应用并取得了合理成功的方法是，根据粘性和有机材料的基本粒径  $d$ 、浓度  $C$  和流动特性，如水平速度的垂直剪切  $du/dz$ 、剪切应力  $\tau$  或水柱或沉积物床  $q$  附近的湍流强度，对絮凝物的沉降速度进行参数化。该实现允许使用函数形式的半经验表达式：

$$w_{se} = w_{se} \left( d, C, \frac{du}{dz}, q \right) \quad (6.72)$$

以表示有效沉降速度。在 EFDC+ 中，每个粘性沉积物类别的沉降速度由用户定义的常数或下面描述的方法之一确定。

### 6.3.2.3.1 选项1

Hwang 和 Mehta (1989) 提出了以下建议：

$$w_s = \frac{aC^n}{(C^2 + b^2)^m} \quad (6.73)$$

基于对奥基乔比湖(Lake Okeechobee)六个地点的沉降观测。该方程具有一般的抛物面形状，在低浓度下沉降速度随着浓度的降低而降低，在高浓度下沉降速率随着浓度的增加而降低。方程 (6.73) 中参数  $a$ 、 $m$ 、 $n$  的最小二乘分析与观测数据吻合良好。方程 (6.73) 不依赖于流动特性，而是基于具有电流和高频表面波的能量场条件的数据。

### 6.3.2.3.2 选项2

Shrestha 和 Orlob (1996) 给出的配方以及随后由 Mehta 等人 (1989) 修改的配方具有以下形式：

$$cw_s = C^\alpha \exp(-4.21 + 0.147G) \quad (6.74)$$

$$\alpha = 1.11075 + 0.0386G \quad (6.75)$$

其中，

$$G = \sqrt{\left(\frac{\partial u}{\partial z}\right)^2 + \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)^2} \quad (6.76)$$

是水平速度的垂直剪切的大小。值得注意的是，所有这些公式都是基于输入参数和预测沉降速度的特定尺寸单位，并且在 EFDC+ 模型的实现过程中进行了适当的单位转换。

### 6.3.2.1.3 选项3

Ziegler和Nisbet(1994,1995)提出了一个公式来表示有效沉降是絮凝体直径 $d_f$ 的函数

$$w_s = ad_f^b \quad (6.77)$$

絮凝体直径为:

$$d_f = \sqrt{\frac{\alpha_f}{C\sqrt{\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2}}} \quad (6.78)$$

其中,

$C$  是含沙量

$a_j$  是实验确定的常数, 和

$\tau_{xz}$  和  $\tau_{yz}$  是水柱中给定位置的湍流剪应力的x分量和y分量。

方程 (6.77) 中的其他量已通过实验确定, 以符合以下关系:

$$a = B_1 \left( C\sqrt{\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2} \right)^{-0.85} \quad (6.79)$$

$$b = -0.8 - 0.5 \log \left( C\sqrt{\tau_{xz}^2 + \tau_{yz}^2} - B_2 \right) \quad (6.80)$$

其中 $B_1$ 和 $B_2$ 为实验常数。

#### 6.3.2.1.4 选项4

基于剪应力计算沉降速度的一般方法如下:

$$w_s = \begin{cases} 1.510 \times 10^{-5} (C')^{0.45}, & C' < 40 \\ 8 \times 10^{-5}, & 40 \leq C' \leq 400 \\ 0.893 \times 10^{-6} (C')^{0.75}, & C' > 400 \end{cases} \quad (6.81)$$

$$C' = \tau C \quad (6.82)$$

其中 $\tau$ 是剪切应力 ( $\text{cm}^2/\text{s}^2$ ), 并且 $C$ 是总内聚浓度 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )。

#### 6.3.2.2 沉积

粘性沉积物和有机固体的水柱-沉积床交换受近床流动环境和沉积床的地质力学控制。随着流动引起的床面应力的减小, 床层发生净沉积。最广泛使用的沉积通量表达式是:

$$J_o^d = \begin{cases} -w_s C_d \left( \frac{\tau_{cd} - \tau_b}{\tau_{cd}} \right) = -w_s P_d C_d, & \tau_b < \tau_{cd} \\ 0, & \tau_b \geq \tau_{cd} \end{cases} \quad (6.83)$$

其中，

$\tau_b$  是流动施加在床上的应力，

$\tau_{cd}$  是沉积的临界应力，取决于沉积物材料和絮凝物的物理化学性质（Mehta 等人，1989），以及

$C_d$  是近床沉积物的浓度。

沉积概率  $P_d$  基于线性项  $(\tau_{cd} - \tau_b) / \tau_{cd}$ 。临界沉积应力通常由实验室或现场观测确定，文献中已经报道了 0.06 至 1.1N/m<sup>2</sup> 的值。鉴于报告值的范围如此之广，在缺乏特定地点数据的情况下，沉积应力通常被视为校准参数。沉积临界应力为 EFDC+ 中每个粘性沉积物类别的输入参数。

### 6.3.2.3 侵蚀

粘性床侵蚀有两种不同的模式，即集体侵蚀和表面侵蚀。当水流施加的床层应力超过床面以下深度  $H_{me}$  处床层的深度变化剪切强度  $\tau_s$  时，质量侵蚀迅速发生。当水流施加的床层应力小于表面附近的床层剪切强度但大于临界侵蚀应力  $\tau_{ce}$  时，表面侵蚀逐渐发生，这取决于床层的剪切强度和密度。在水流加速和床层应力增加的条件下，典型的情况是首先发生逐渐的表面侵蚀，然后是快速的大规模侵蚀，然后再发生另一次表面侵蚀。或者，如果河床固结良好，具有足够高的抗剪强度剖面，则只会发生逐渐的表面侵蚀。

表面侵蚀通常由以下形式的关系表示：

$$J_o^r = w_r C_r = \frac{dm_e}{dt} \left( \frac{\tau_b - \tau_{ce}}{\tau_{ce}} \right)^\alpha, \quad \tau_b \geq \tau_{ce} \quad (6.84)$$

或，

$$J_o^r = w_r C_r = \frac{dm_e}{dt} \exp \left( -\beta \left( \frac{\tau_b - \tau_{ce}}{\tau_{ce}} \right)^\gamma \right), \quad \tau_b \geq \tau_{ce} \quad (6.85)$$

其中，

$\frac{dm_e}{dt}$  是床的每单位表面积的表面侵蚀率，

$\tau_{ce}$  是表面侵蚀或再悬浮的临界应力。

临界侵蚀速率和应力以及参数 $\alpha$ 、 $\beta$ 和 $\gamma$ 通常由实验室或现场实验观测确定。公式 (6.84) 更适用于固结床，而 (6.85) 适用于部分固结的软质床。基本侵蚀速率和侵蚀临界应力取决于沉积物类型、床水含量、总盐含量、水中离子物种、pH 值和温度 (Mehta et al., 1989)，可以在实验室和海床水槽中测量。

文献中报道了  $0.005$  至  $0.1 \text{ gs}^{-1}\text{m}^{-2}$  的表面侵蚀率，通常认为表面侵蚀率随着体积密度的增加而降低。临界侵蚀应力与河床的抗剪强度有关，但通常小于抗剪强度，而抗剪强度又取决于沉积物类型和河床的固结状态。实验确定的临界表面侵蚀应力与模板床层干密度之间的关系

$$\tau_{ce} = c\rho_s^d \quad (6.86)$$

(Mehta 等人, 1989 年)。

EFDC+ 允许用户定义表面侵蚀的恒定临界应力，或使用基于以下选项之一的计算 $\tau_{ce}$ 。

#### 6.3.2.3.1 选项1

Hwang和Mehta (1989) 提出了这种关系

$$\tau_{ce} = \begin{cases} a(\rho_b - \rho_l)^b + c, & \rho_b > 1.065 \\ 0, & \rho_b \leq 1.065 \end{cases} \quad (6.96)$$

临界表面侵蚀应力与床层堆积密度之间的关系， $a=0.883$ ； $b=0.2$ ； $c=0.05$ ； $\rho_l=1.065$ ；对于应力用 $\text{N/m}^2$ 和体积密度用 $\text{g/cm}^3$ 。

#### 6.3.2.3.2 选项2和选项3

Sanford和Maa (2001) 提出了这种关系

$$\tau_{ce} = \tau_{ci} \frac{(1 + \epsilon_r)}{(1 + \epsilon_b)} \quad (6.88)$$

其中，

$\tau_{ci}$ 是通过水密度归一化的临界剪切应力 ( $\text{m}^2/\text{s}^2$ )，

$\epsilon_r$ 是参考孔隙比 (无量纲)，以及

$\epsilon_b$ 是沉积物床的孔隙比 (无量纲)。

空隙比， $\epsilon$  被定义为空隙率的体积比值， $\phi$  为沉积物总体积 (无量纲)。

$$\varepsilon = \frac{\phi}{1 - \phi} \quad (6.89)$$

对于选项2,  $\varepsilon_b$  可使用顶部沉积物床层的空隙比来指定。选项三为计算具有粘性沉积物分数的顶部沉积物床层的空隙比  $\varepsilon_b$ 。

#### 6.3.2.3.2 选项4

此选项受此关系的控制:

$$\tau_{ce} = \tau_{ci} \quad (6.90)$$

其中,  $\tau_{ci}$  水密度归一化的临界剪应力( $m^2/s^2$ )。

#### 6.3.3 混合粘性和非粘性沉淀层的固结

本节介绍了一种表示包含粘性和非粘性沉积物的沉积物层固结的方法。该方法允许在任何床层中使用粘性和非粘性沉积物, 并基于以下假设。首先, 假设在固结步骤中, 单位水平面积的床孔隙水量的一部分与每种沉积物类型

$$\left( \frac{\varepsilon H_{bed}}{1 + \varepsilon} \right) = (\Psi_{wc} + \Psi_{wn}) H_{bed} \quad (6.91)$$

其中:

$\varepsilon$  是沉积物床的孔隙度 (无量纲)

$H_{bed}$  为床层厚度(m)

$\Psi$  带有下标水的体积分数

$Wc$  和  $wn$  分别表示内聚沉积物和非内聚沉积物

同样, 单位水平区域的沉积物体积可以在粘性和非粘性之间进行分段划分,

$$\left( \frac{H_{bed}}{1 + \varepsilon} \right) = (\Psi_{sc} + \Psi_{sn}) H_{bed} \quad (6.92)$$

其中:  $sc$ 和 $sn$  分别表示体积分数的粘性和非粘性沉积物。

根据上一节的拉格朗日公式, 在固结步骤中, 河床中的总泥沙体积和分数沉积物体积保持不变。

$$\frac{\partial}{\partial t} (H_{bed} \Psi_{sc}) = \frac{\partial}{\partial t} (H_{bed} \Psi_{sn}) = 0 \quad (6.93)$$

空隙率分数也可以被定义:

$$\varepsilon_c = \frac{\psi_{wc}}{\psi_{sc}} \quad (6.94)$$

$$\varepsilon_n = \frac{\psi_{wn}}{\psi_{sn}} \quad (6.95)$$

使用方程式 (6.91) 和 (6.92) , 混合物的空隙比:

$$\varepsilon = \frac{\psi_{sc}\varepsilon_c + \psi_{sn}\varepsilon_n}{\psi_{sc} + \psi_{sn}} \quad (6.96)$$

是两种泥沙类型的空隙比的泥沙量加权平均值。

第二个假设是, 在固结时间步长中, 与非粘性沉积物相关的水的比例保持不变, 分数空隙比也保持不变。这相当于假设与非粘性沉积物相关的床层部分是不可压缩的, 并且与非粘性沉积物相关的孔隙水由  $\varepsilon_n$  规定。

与上述假设一致, 床层厚度可分为粘性和非粘性部分  $H_{bed,c}$  和  $H_{bed,n}$ 。

$$\begin{aligned} H_{bed,c} &= (\psi_{wc} + \psi_{sc}) H_{bed} = (1 + \varepsilon_c) \psi_{sc} H_{bed} \\ H_{bed,n} &= (\psi_{wn} + \psi_{sn}) H_{bed} = (1 + \varepsilon_n) \psi_{sn} H_{bed} \end{aligned} \quad (6.97)$$

该层的水力传导率可以用

$$K = \frac{(H_{bed,c} + H_{bed,n})}{\left(\frac{H_{bed,c}}{K_c} + \frac{H_{bed,n}}{K_n}\right)} \quad (6.98)$$

这相当于无限数量的交替的粘性子层组成混合床层。等式 (6.98) 可以写成:

$$\frac{K}{(1 + \varepsilon)} = \frac{1}{\left(f_{sc} \frac{(1 + \varepsilon_c)}{K_c} + f_{sn} \frac{(1 + \varepsilon_n)}{K_n}\right)} \quad (6.99)$$

其中:

$$\begin{aligned} f_{sc} &= \frac{\psi_{sc}}{(\psi_{sc} + \psi_{sn})}, \text{ and} \\ f_{sn} &= \frac{\psi_{sn}}{(\psi_{sc} + \psi_{sn})} \end{aligned} \quad (6.100)$$

是床层中时间不变的总粘性和非粘性沉积物分数, 同样, 等式 (6.96) 也可以写成:

$$\varepsilon = f_{sc}\varepsilon_c + f_{sn}\varepsilon_n \quad (6.101)$$

混合材料固结配方的最终假设是: 有效应力的变化完全是由于粘性空隙比的变化。在这个假设下, 具体放电可以写成:

$$q = - \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{k+\frac{1}{2}} \frac{2\lambda_{k+\frac{1}{2}}}{(\Delta_{k+1}+\Delta_k)} [(f_{sc}\varepsilon_c)_{k+1} - (f_{sc}\varepsilon_c)_k] + \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{k+\frac{1}{2}} \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\rho_w} - 1 \right)_{k+\frac{1}{2}} \quad (6.102)$$

and

$$\lambda_{k+\frac{1}{2}} = - \frac{1}{g\rho_w} \left( \frac{\sigma_{e,k+1} - \sigma_{e,k}}{(f_{sc}\varepsilon_c)_{k+1} - (f_{sc}\varepsilon_c)_k} \right) \quad (6.103)$$

当为表层指定沉积空隙比时，那么特定放电将会变为：

$$q_{w:kt+} = - \left( \frac{2\lambda_{kt+}}{\Delta_{kt}} \right) \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{kt+} [(\varepsilon_c)_{dep} - (\varepsilon_c)_k] + \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\rho_w} - 1 \right)_{kt+} \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{kt+} \quad (6.104)$$

当使用床表面的零过量空隙压力边界条件时：

$$q_{w:kt+} = \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{Kt} \frac{2}{\Delta_{Kt}} (\lambda^* f_{sc} \varepsilon_c^{n+1})_{Kt} + \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{Kt} \left( \frac{\bar{\rho}_s}{\rho_w} - 1 \right)_{Kt} - \left( \frac{K}{1+\varepsilon} \right)_{Kt} \frac{2}{\Delta_{Kt}} \left( \frac{\sigma_e^n}{g\rho_w} + \lambda^* f_{sc} \varepsilon^* \right)_{Kt} \quad (6.105)$$

利用公式 (6.101) 对空隙比的更新公式进行了修正：

$$(f_{sc}\varepsilon_c)_k^{**} = (f_{sc}\varepsilon_c)_k^* + \frac{\Delta t}{2} \left( \frac{1+\varepsilon}{H_{bed}} \right)_k^{**} (q_{w:k-} - q_{w:k+}) \quad (6.106)$$

因此，混合床层固结公式本质上解决了  $\lambda$  的连续本构关系下  $f_{sc}\varepsilon_c$  的时空演化：

$$\lambda = - \frac{1}{f_{sc}} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left( \frac{\sigma}{g\rho_w} \right) \quad (6.107)$$

该公式具有理想的特性，即在非粘性材料的情况下还原为成熟的粘性公式。 $f_{sc}\varepsilon_c$  的解通过将方程 (6.92) 和 (6.94) 或 (6.95) 引入 (6.96)，并求解得到的三对角方程组来进行。然后使用方程 (6.92) 和 (6.94) 或 (6.95) 直接计算新的特定放电，并用于更新图层的厚度。

$$H_{bed,k}^{n+1} = H_{bed,k}^* + \Delta t (q_{w:k-} - q_{w:k+}) \quad (6.108)$$

然后，可以更新  $H_{bed}/(1+\varepsilon)$  的比率：

$$\left( \frac{H_{bed}}{1+\varepsilon} \right)_k^{n+1} = \left( \frac{H_{bed}}{1+\varepsilon} \right)_k^* \quad (6.109)$$

然后是内聚空隙比的方程 (6.110) 的解：

$$\varepsilon_c = \frac{\varepsilon - f_{sn}\varepsilon_n}{f_{sc}} \quad (6.110)$$

#### 6.4. SEDZLJ 输沙模块



统一处理侵蚀、沉积和推移质运输的数学框架被称为 SEDJLJ 模型 (Jones 和 Lick, 2000; Ziegler 和 Lick (1988,1986) ) , 该模型结合了由称为 SEDLume 的侵蚀率测量设备测量的沉积物床的物理和侵蚀特性 (Jones 和 Lick, 2001) 。EFDC+集成了用于泥沙输移计算的 SEDJLJ 模块, 显著增强了质量平衡、硬底旁通和计算效率。EFDC+理论文件的这一部分提供了 SEDJLJ 理论的总结 (James 等人, 2010; Jones 和 Lick, 2001 年; Thanh 等人, 2008 年) 。

#### 6.4.1 背景

大多数模型都是使用后铸技术进行校准的, 当将模拟扩展到未来条件时, 后铸技术可能会有局限性。在水生系统中测量的最典型的可用泥沙输移指标是悬浮泥沙浓度。不幸的是, 侵蚀和沉积速率的许多不同组合可以用来达到相同的悬浮泥沙浓度。这可以说明如下。

在稳定状态下, 侵蚀和沉积之间存在平衡。沉积通常被描述为  $D=Pw_sC$ , 其中  $P$  是沉积的概率,  $w_s$  是沉积物颗粒的沉积速度,  $C$  是水中的沉积物浓度。然后平衡给出

$$E - Pw_sC = 0 \quad (6.111)$$

这可以通过泥沙浓度来解决

$$C = \frac{E}{Pw_s} \quad (6.112)$$

从这个方程中可以看出, 任何悬浮泥沙浓度都可以通过相应调整与无限数量的侵蚀率和沉积参数相匹配。例如, 可以通过  $E$  的高值和  $Pw_s$  的高值或者通过  $E$  的低值和  $Pw_s$  的低值来获得观察到的  $C$  值。换句话说, 悬浮泥沙浓度的测量不足以确定侵蚀和/或沉积。从历史上看, 侵蚀受到剪切应力和晶粒尺寸之间的理论关系的限制, 然而, 仍有一系列参数会产生相同的悬浮浓度。为了准确预测侵蚀和沉积, 应通过实验或基于实验的理论将这些数量确定为沉积物特征和水动力变量的函数。

SEDJLJ 方法 (Jones 和 Lick, 2000 年; Ziegler 和 Lick (1988 年、1986 年) 结合了使用 SEDLume 仪器从沉积物岩芯样本中直接测量的侵蚀率 (Jones 和 Lick, 2001 年) 。SEDFlume 由一个底部开口的直水槽组成, 通过该水槽可以插入一个含有沉积物的矩形横截面芯管。水槽的主要部件是核心管和沉积物、试验段、均匀、充分发展的湍流的入口段、出流段、储水箱和泵 (迫使水通过系统) 。SED 内腔的示意图如图 6.5 所示。这些测试产生的数据产生了岩心中的侵蚀率、临界剪切应力和体积密度。

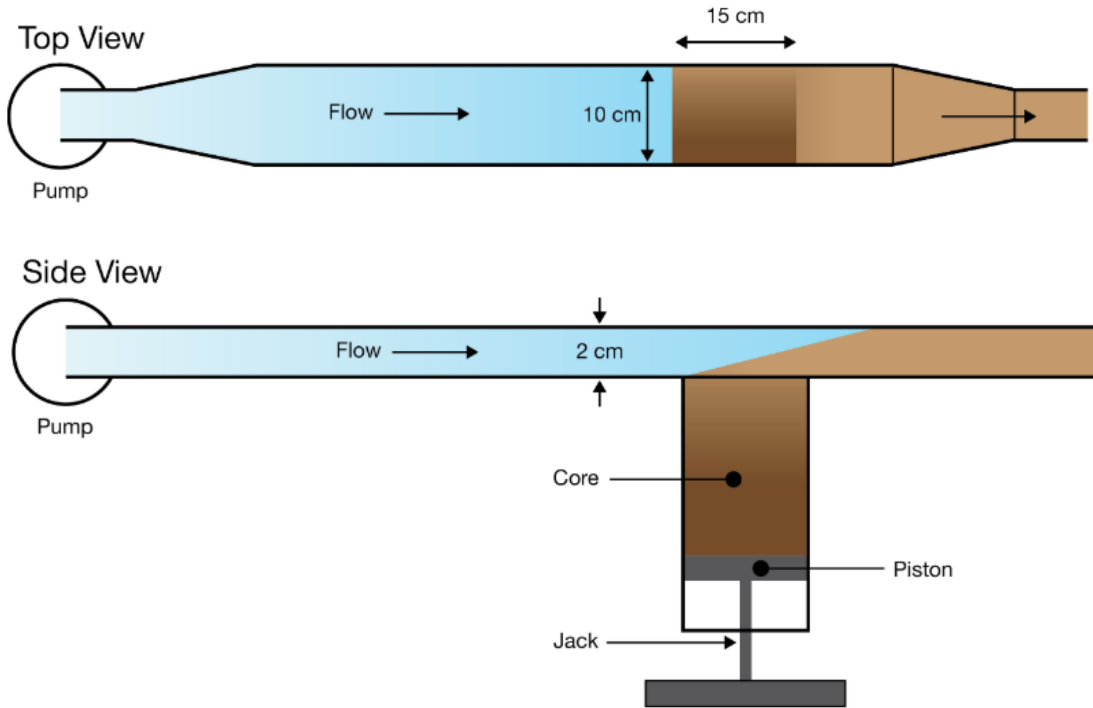


图 6.5.SEDFlume 装置的示意图

#### 6.4.2河床剪切应力

在 EFDC 中，SEDJLJ 模块将床剪切应力 $\tau_b$ （达因/cm<sup>2</sup>）计算为：

$$\tau_b = \rho_w c_f V^2 \quad (6.113)$$

其中 $\rho_w$  是水的密度（g/cm<sup>3</sup>）， $V$  是流速大小（cm/s）。底部剪切应力摩擦系数 $c_f$ （无量纲）使用速度的对数层分布计算，如下所示：

$$c_f = \begin{cases} \frac{\kappa^2}{\left(\ln \frac{11H}{2z_b}\right)^2} & \text{for } H \geq H_{min} \\ 0.0 & \text{for } H < H_{min} \end{cases} \quad (6.114)$$

其中，

$\kappa$  是 von Karman 常数（ $\kappa=0.42$ ），

$z_b$  是基于沉积物表面（m）处的  $d_{50}$  的底面摩擦，以及

$H_{min}$  是允许进行剪切计算的最小深度（m）。

假设底面摩擦等于任何给定位置的沉积物床表面的平均粒径。因此，底部剪切应力摩擦系数 $c_f$ 随着沉积物床表面颗粒尺寸的增加或随着水深的减小而增加。

#### 6.4.3侵蚀速率

SED 流明的典型应用结果如图 6.6 所示，其中以 cm/s 为单位的侵蚀率 E 被绘制为床层深度 (cm) 和剪切应力  $\tau$  (N/m<sup>2</sup>) 的函数。侵蚀率通常在地表最高，并随着深度的增加而降低；它们也随着剪切应力的增加而增加。总的来说，整个系统中这种类型的沉积物信息对于沉积物传输的准确预测是必要的 (Jones 和 Lick, 2000)。这类数据的可用性是假设的，并在 SEDJLJ 中使用。

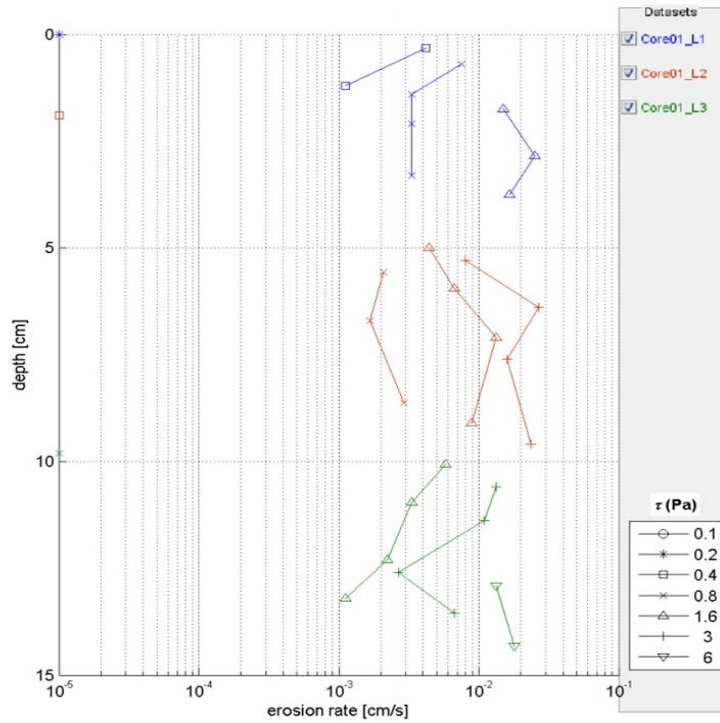


图 6.6 Conowingo 水库的 SEDLume 数据 (马里兰州 DNR)

关于侵蚀率的信息通常以厘米/秒为单位进行报告。为了将其转换为建模所需的以 g/cm<sup>2</sup>/s 为单位的质量通量，需要沉积物体积内的固体质量。对于仅由固体和水组成的沉积物 (即无气体)，该量可根据沉积物的堆积密度  $\rho$  确定，如下所示：

$$\rho = \rho_s x_s + \rho_w x_w = \rho_s x_s + \rho_w (1 - x_s) \quad (6.115)$$

其中，

$\rho_s$  是固体的密度 (g/cm<sup>3</sup>)，

$x_s$  是固体的体积分数，

$\rho_w$  是水的密度 (g/cm<sup>3</sup>)，以及

$x_w$  是水的体积分数。

由于  $x_w=1-x_s$ ，每单位体积的固体质量为  $x_s\rho_s$ ，可由上述方程确定为：

$$x_s\rho_s = \frac{\rho_s(\rho - \rho_w)}{\rho_s - \rho_w} = \frac{2.6}{1.6}(\rho - 1) \quad (6.116)$$

其中假设  $\rho_s=2.6\text{g/cm}^3$ ， $\rho_w=1.0\text{g/cm}^3$ 。一旦已知沉积物的堆积密度，以  $\text{g/cm}^2/\text{s}$  为单位的侵蚀率可以通过以  $\text{cm/s}$  为单位乘以  $x_s\rho_s$  来确定。

如上所述，侵蚀率随河床深度的变化而变化。这种变化通过离散分层系统被纳入沉积物床模型，其中在每个层界面处定义侵蚀率，颗粒尺寸分布和堆积密度被定义为整个层的常数。根据现场数据的需要，可以引入任何数量和厚度的层来近似沉积物性质随深度的变化。

SEDJLJ 泥沙输移模型可以结合现场收集的侵蚀率数据，这些数据通常是空间离散的，在特定深度，但也可以在没有直接数据的情况下进行插值。总侵蚀率是在沉积物层厚度和剪切应力之间进行插值的。线性插值用于计算指定剪切应力  $\tau$  下的侵蚀率，如下所示：

$$E(\tau) = \left( \frac{\tau_{i+1} - \tau}{\tau_{i+1} - \tau_i} \right) E_i + \left( \frac{\tau - \tau_i}{\tau_{i+1} - \tau_i} \right) E_{i+1} \quad (6.117)$$

其中下标  $i$  表示小于  $\tau$  的剪切应力的数据， $i+1$  表示大于  $\tau$  的剪应力的测量数据，其中  $\tau_i < \tau < \tau_{i+1}$ 。

由于  $E$  通常随深度快速变化，数据点之间的对数插值最能代表侵蚀率随深度的变化：

$$\ln[E(T)] = \left( \frac{T_0 - T}{T_0} \right) \ln(E^j) + \frac{T}{T_0} \ln(E^{j+1}) \quad (6.118)$$

其中， $T$  是实际沉积床层厚度， $T_0$  是初始床层厚度。上标  $j$  和  $j+1$  分别表示需要侵蚀率的特定层顶部和底部界面的数据。将方程 (6.117) 和 (6.118) 组合在一起，从而可以将侵蚀率计算为剪切应力和深度的函数。

#### 6.4.3.1 侵蚀临界剪切应力

除了侵蚀率，建模中另一个重要参数是侵蚀的临界应力  $\tau_{ce}$ 。考虑沉积物床上的水流。当流速从静止开始增加时，存在一个速度范围（或剪切应力），在该范围内，最容易移动的颗粒（通常是最小的）的运动首先被观察者注意到。然后，这些被侵蚀的颗粒会移动相对较短的距离，直到它们停在一个新的位置。这种初始运动往往只发生在几个孤立的点上。随着流速和剪

切应力的进一步增加，更多的颗粒参与到侵蚀、传输和沉积的过程中，颗粒的运动变得更加持续。

由于泥沙侵蚀随着剪切应力的增加而逐渐增加，因此很难精确定义泥沙侵蚀首次开始的临界速度或临界剪切应力。侵蚀的临界剪切应力可以更定量地定义为发生小但准确测量的侵蚀速率时的剪切应力，模糊性更小。Roberts 等人 (1998) 将该速率定义为 10<sup>-6</sup> m/s，即 15 分钟内约 1 mm 的侵蚀，尽管使用了不同的速率来定义  $\tau_{ce}$ 。

作为颗粒直径  $d$  函数的侵蚀临界剪切应力如图 6.7 所示。对于  $d \sim 200\mu\text{m}$ ，沉积物以非粘性的方式表现，即它们迅速固结，并逐粒侵蚀。对于  $d \sim 200\mu\text{m}$ ，颗粒之间的内聚效应变得显著。沉积物随着时间的推移固结相对较慢，临界应力不仅取决于颗粒直径，还取决于沉积物的堆积密度。对于这些粘性沉积物， $\tau_{ce}$  随着  $d$  的减少和堆积密度的增加而增加。

对于非粘性沉积物床，Shields (1936) 的曲线或其任何近似值 van Rijn (1984) 可用于定义侵蚀的临界剪切应力。Soulsby 等人 (1997) 将侵蚀的临界剪切近似为：

$$\tau_{ce} = \rho g d \theta = \rho g d \left\{ \frac{0.3}{1 + 1.2d_*} + 0.055 [1 - \exp(-0.02d_*)] \right\} \quad (6.119)$$

$$d_* = d [(\rho_{sd}/\rho_w - 1) g / \nu^2]^{1/3} \quad (6.120)$$

其中，

$g$  是由于重力引起的加速度，

$d$  为沉积物颗粒直径，

$d_*$  是无量纲颗粒直径，

$\nu$  是运动流体粘度，以及

$\theta$  是临界希尔兹参数，由方程 (6.119) 括号中所示的代数拟合表示

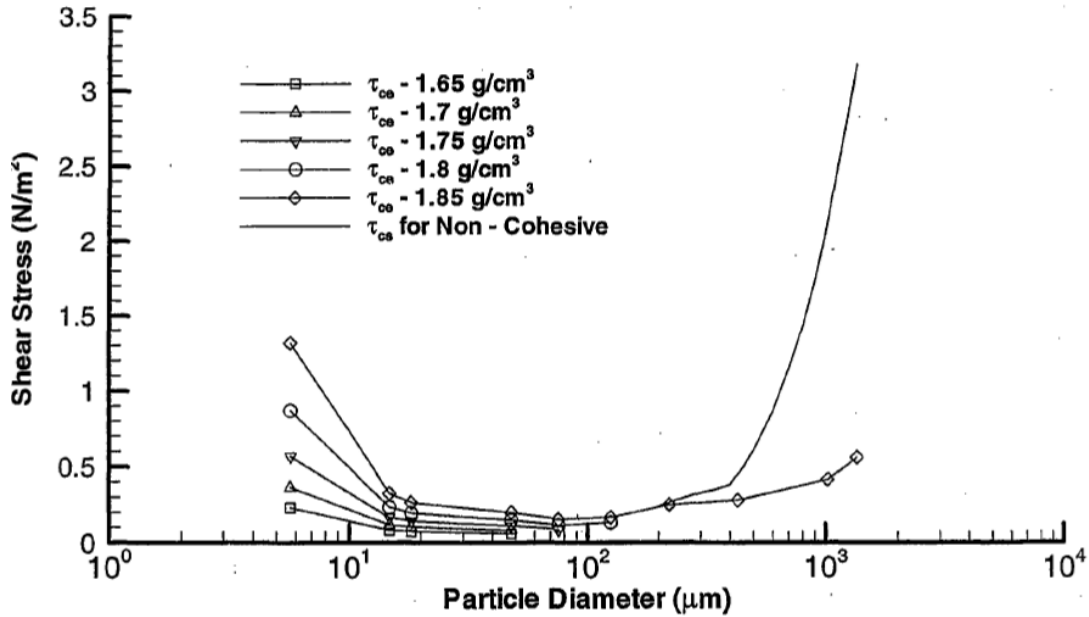


图 6.7.石英颗粒侵蚀和悬浮的临界剪切应力

#### 6.4.3.2 悬移质与推移质的侵蚀

随着底部的沉积物被侵蚀，一部分沉积物悬浮在上覆的水中，并作为悬浮载荷运输；其余被侵蚀的沉积物通过滚动和/或在床附近的薄层中滑动来移动，称为床荷载。每种运输模式的比例取决于粒径和剪应力。

对于细粒度颗粒（通常具有粘结性），侵蚀既以单个颗粒的形式发生，也以块或小颗粒聚集的形式发生。单个粒子作为悬浮载荷移动。聚集体倾向于在床附近的下游移动，但在下游移动时，似乎在床附近的高应力边界层分解成小颗粒。这些分解的粒子然后以悬浮的载荷移动。因此，这里假设小于约 200 $\mu\text{m}$  的细粒沉积物作为悬浮载荷完全运输。

较粗、非粘性颗粒（这里定义为直径大于 200 $\mu\text{m}$  的颗粒）可以以悬浮载荷和床荷载的形式运输，每个颗粒的比例取决于颗粒直径和剪应力。对于特定尺寸的颗粒，启动悬浮载荷（或沉积物悬浮）时的剪应力定义为  $\tau_{cs}$  ( $\text{N/m}^2$ )。这种剪应力  $\tau_{cs}$  在 van Rijn (1984) 的公式中定义：

$$\tau_{cs} = \begin{cases} \frac{1}{\rho_w} \left( \frac{4w_s}{d_*} \right)^2, & \text{for } d \leq 400 \mu\text{m} \\ \frac{1}{\rho_w} (0.4w_s)^2, & \text{for } d > 400 \mu\text{m} \end{cases} \quad (6.121)$$

其中，

$d_*$  无量纲颗粒直径由  $d_* = d \left[ \frac{(\rho_s - \rho) g}{\rho v^2} \right]^{1/3}$  其中， $d$  为颗粒直径 (cm)

$w_s$  颗粒沉降速度 (cm/s)

对于  $\tau_b > \tau_{cs}$ , 沉积物以床载和悬浮载荷的形式运输, 悬浮载荷为  $f$ , 随着  $\tau_b$  的增加, 从  $f = 0$  到 1。对于大于此的  $\tau_b$ , 沉积物完全作为悬浮载荷运输。

在 EFDC+ 中, 每个沉积物类别的沉降速度被确定为用户指定的输入参数, 该参数可以根据 Cheng (1997) 和 van Rijn (1984) 进行指定。Cheng 的沉降速度公式为

$$w_s = \frac{v}{d} \left( \sqrt{25 + 1.2d_*^2} - 5 \right)^{1.5} \quad (6.122)$$

其中,  $v$  为运动学流体粘度 (cm<sup>2</sup>/s)。

由于程的公式是基于对真实沉积物颗粒沉降的观测, 它产生的沉降速度低于斯托克定律。这是因为真正的沉积物的形状通常是不规则的, 并且比斯托克定律(Stoke)中的完美球体具有更大的水动力沉降阻力。

van Rijn (1984) 计算的沉降速度为:

$$w_s = \begin{cases} \frac{1}{18} \left[ \frac{(s-1)gD_s^2}{v} \right], & D_s < 100 \mu\text{m} \\ 10 \frac{v}{D_s} \left\{ \left[ 1 + \frac{0.01(s-1)gD_s^3}{v^2} \right]^{0.5} - 1 \right\}, & 100 \mu\text{m} \leq D_s < 1000 \mu\text{m} \\ 1.1 [(s-1)gD_s]^{0.5}, & D_s \geq 1000 \mu\text{m} \end{cases} \quad (6.123)$$

其中,

$D_s$  具有代表性的粒径(m)

$s$  比密度

$g$  重力加速度(m/s<sup>2</sup>)

$v$  运动粘度系数和  $w_s$  均为 m/s

Guy 等人 (1966) 对平均直径为  $d_{50}$ 、从 190 $\mu\text{m}$  到 930 $\mu\text{m}$  的沉积物的悬浮载荷和床载运输进行了详细的水槽测量。他们发现, 随着剪切速度 (定义为  $u_* = \tau_b / \rho_w$ ) 与沉降速度的比值增大, 悬浮载荷占总负荷输送的比例,  $q_s / q_t$  增加。它们的数据可以用以下函数来近似:

$$\frac{q_s}{q_t} = \begin{cases} 0, & \tau^b < \tau_{cs} \\ \frac{\ln(u_* / w_s) - \ln(\sqrt{\tau_{cs} / \rho_w} / w_s)}{\ln(4) - \ln(\sqrt{\tau_{cs} / \rho_w} / w_s)}, & \tau^b > \tau_{cs} \text{ and } \frac{u_*}{w_s} < 4 \\ 1, & \frac{u_*}{w_s} > 4 \end{cases} \quad (6.124)$$

这里使用了这个近似值。原始数据的结果如图 6.8 所示。

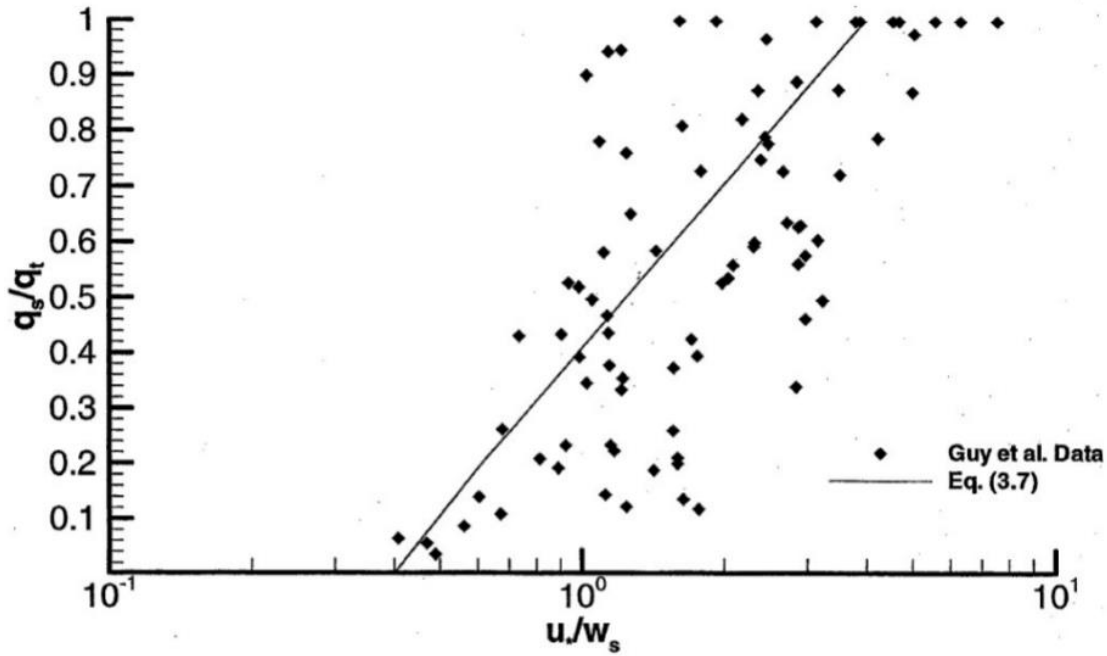


图 6.8. 悬移质和推移质的水槽测量结果 (Guy 等人, 1966)

虽然自然界中的沉积物具有连续的尺寸分布，但数值模型中的物理量本质上是离散的；因此，沉积物颗粒大小被离散化。颗粒度类别  $j$  的离散化是通过测量特定地点沉积物岩心中的不同沉积物大小，并将其分成适当的大小类别来进行离散化。颗粒度类别  $j$  的离散化是通过测量特定地点沉积物岩心中的不同沉积物大小，并将其分成适当的大小类别来进行离散化，通过将特定尺寸类  $j$  的总侵蚀通量乘以  $q_s/q_t$ ，可以计算出该类别的侵蚀通量为悬转载荷  $E_{s,j}$ 。通过将床荷载  $E_{b,j}$  的总侵蚀通量乘以该因子  $(1-q_s/q_t)$ ，也可以计算出相应的侵蚀通量。因此，任何尺寸的  $j$  类的侵蚀通量为：

$$E_{s,j} = \begin{cases} 0, & \tau^b < \tau_{ce} \\ \frac{q_s}{q_t} f_j E, & r\tau^b \geq \tau_{ce} \end{cases} \quad (6.125)$$

$$E_{b,j} = \begin{cases} 0, & \tau^b < \tau_{ce} \\ \left(1 - \frac{q_s}{q_t}\right) f_j E, & \tau^b \geq \tau_{ce} \end{cases} \quad (6.126)$$

其中， $f_j$  为第  $j$  个沉积物大小等级的质量分数。

#### 6.4.4 悬挂荷载



对于悬浮沉积物，在床上的水中随时间变化的三维输运方程见方程 (6.1)。进入悬浮  $Q_s$  的净泥沙通量，计算为进入悬浮负荷的总侵蚀通量  $E_{s,j}$ ，减去悬浮载荷的沉积通量  $D_{s,j}$ ，每个沉积物大小为  $j$  级：

$$Q_{s,j} = E_{s,j} - D_{s,j} \quad (6.127)$$

其中，

$$Q_s = \sum_j Q_{s,j} \quad (6.128)$$

在没有剪切应力的静止流体中，悬浮沉积物的沉积通量可以描述为沉积物的沉降速度和沉积物在覆盖水中的浓度的乘积。然而，在流动的水中，沉积受到流体湍流的影响，量化为剪切应力。在这种情况下，每个大小的沉积概率类  $j$ ， $P_k$ ，可以包括在公式中来解释剪应力对屈服的影响：

$$D_{s,j} = P_j w_{s,j} C_{s,j} \quad (6.129)$$

在静止流动的情况下，这种概率将是统一的，并随着流动、湍流和剪切应力的增加而减小。悬浮载荷沉积的概率似乎因粘性和非粘性颗粒尺寸而不同。对于内聚颗粒（有效直径小于  $200\mu\text{m}$  的尺寸等级），Krone (1962) 发现沉积的概率变化约为

$$P_j = \begin{cases} 0 & \text{for } \tau^b \leq \tau_{cs,j} \\ \left(1 - \frac{\tau^b}{\tau_{cs,j}}\right) & \text{for } \tau^b > \tau_{cs,j} \end{cases} \quad (6.130)$$

对于较大的非粘聚粒子（有效直径大于  $200\mu\text{m}$ ），Gessler (1967) 表明，沉积的概率可以用高斯分布或误差函数来描述

$$P_j(Y) = \text{erf}\left(\frac{Y}{2}\right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{Y/2} \exp(-\xi^2) d\xi \quad (6.131)$$

其中，

$$Y = \frac{1}{\sigma} \left( \frac{\tau_{cs,j}}{\tau^b} - 1 \right) \quad (6.132)$$

其中， $\tau_{cs}$ ， $j$  是尺寸等级  $j$  的悬浮液的临界剪切应力， $\sigma$  是剪切应力变化的标准差，且值是 Gessler (1967) 确定约为 0.57。

$Y > 0$  的这个函数的近似误差小于 0.001% 情况被发现 (Abramowitz, 1964; Dwight, 1947):

$$P_j = 1 - F(Y)(0.4632X - 0.1202X^2 + 0.9373X^3) \quad (6.133)$$

其中，

$$F(Y) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{-\frac{1}{2}Y^2} \quad (6.134)$$

$$X = \frac{1}{(1 + 0.33267Y)} \quad (6.135)$$

其中， $Y < 0$

$$P_j = 1 - P(|Y|) \quad (6.136)$$

图 6.9 显示了使用粘性和非粘性颗粒公式的样本概率分布。

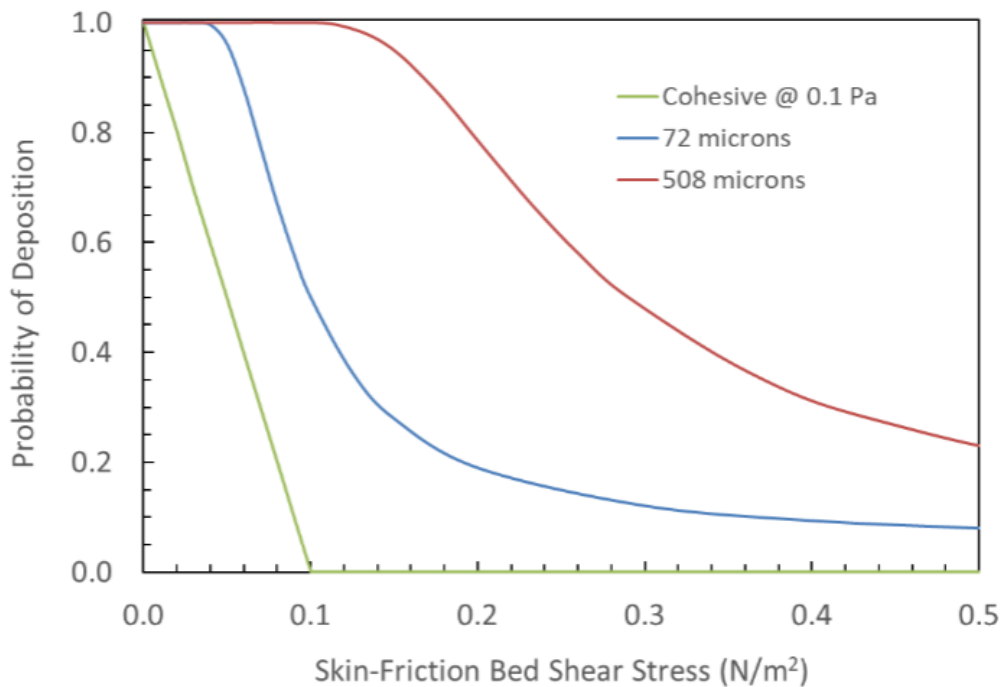


图 6.9.粘性和非粘性粒子的样本概率分布

#### 6.4.5 推移质

为了描述床载运输，采用了 van Rijn (1984) 的方法。为了计算在床载中移动的粒子浓度，质量平衡方程可以写为

$$\frac{\partial(mC_b)}{\partial t} = \frac{\partial(mq_{bx})}{\partial x} + \frac{\partial(mq_{by})}{\partial y} + Q_b \quad (6.137)$$

其中，

$C_b$  床负荷浓度 (g/cm<sup>2</sup>)

$q_b$  x 或 y 方向上的水平床载通量 (g/s/cm)

$m$  细胞面积 (cm<sup>2</sup>)

$Q_b$  沉积物床与床载之间沉积物净垂直通量 (g/s)

这个方程用 x 和 y 方向通量的中心差分近似求解。水平床载通量一般计算为

$$q_b = u_b C_b \quad (6.138)$$

其中， $u_b$  是感兴趣方向上的床载速度 (cm/s)。床载速度和厚度可以由 van Rijn (1984)

计算出来，公式如下

$$u_b = 1.5T^{0.6}[(\rho_s - 1)gd]^{0.5} \quad (6.139)$$

$$h_b = 3dd_*^{0.6}T^{0.9} \quad (6.140)$$

传输参数 T，计算结果为

$$T = \frac{\tau^b - \tau_{ce}}{\tau_{ce}} \quad (6.141)$$

底部沉积物和床载  $Q_b$  之间的沉积物的通量，计算为沉积物对床载  $E_b$  的侵蚀，减去来自床载  $D_b$  的沉积物的沉积，和为

$$Q_b = E_b - D_b \quad (6.142)$$

其中， $D_b$  是由

$$D_b = Pw_s C_b \quad (6.143)$$

在稳态平衡下，床载中沉积物的浓度， $C_e$  是由于侵蚀和沉积之间的动态平衡，即，

$$E_b = Pw_s C_e \quad (6.144)$$

由此可见，沉积的概率可以写成

$$P = \frac{E_b}{w_s C_e} \quad (6.145)$$

侵蚀速率由 SEDFlume 确定，沉降速率由公式 (6.123) 计算。平衡浓度  $C_e$  已经被作者调查研究，这里将使用 van Rijn (1984) 的公式，其计算方法为

$$C_e = 0.117 \frac{\rho_s T}{d_*} \quad (6.146)$$

一旦  $E_b$ ,  $w_s$  和  $C_e$  被称为是颗粒直径和剪应力的函数， $P$  可以由式 (6.145) 计算得到。然后假设这个概率在非稳态情况下也有效，因此在这种情况下也可以计算出沉积速率。

平衡浓度  $C_e$  是基于均匀沉积物的实验。一般来说，沉积物床必须用一个以上的尺寸等级来表示。在这种情况下，每个尺寸类的侵蚀速率由  $f_j E_b$  给出，然后对尺寸  $j$  类的沉积概率为

$$P_j = \frac{f_j E_b}{w_{sj} f_j C_{ej}} = \frac{E_b}{w_{sj} C_{ej}} \quad (6.147)$$

在方程 (6.147) 中，隐式地假设每种尺寸为  $j$  类的侵蚀和沉积之间存在一个动态平衡。

#### 6.4.6 床装甲

泥沙侵蚀率随时间的减少而减少，主要归结三个原因，(1)粘性沉积物随深度和时间的固结；(2)一个流动事件，较粗沉积物在沉积物床上的沉积；(3)表层沉积物对较细的沉积物的侵蚀，再次在流动事件中，留下较粗的沉积物。沉积物的固结及随后的侵蚀速率随深度的变化可以通过 SEDFlume 的原位测量来确定。沉积物的固结和侵蚀速率随时间的增加可以再次通过 SEDFlume 从巩固研究中近似确定。

这里我们关注的是由于过程(2)和(3)造成的床层装甲。为了描述这些过程，在本模型中假设有一个形成于床的表面上的较薄的混合层，或活性层。以前的研究人员已经讨论过它的存在和性质 (Parker 等人, 2000 年; van Niekerk 等人, 1992 年)。这种活性层的存在允许沉积和侵蚀的沉积物的相互作用发生在一个离散的层中，而不允许沉积的沉积物影响下面未受扰动的沉积物。van Niekerk 等人 (1992) 的作者提出，厚度  $T_a$ ，可以近似为

$$T_a = 2d_{50} \frac{\tau^b}{\tau_{ce}} \quad (6.148)$$

这个公式考虑了随着剪切应力的增加，湍流对基床的更深的渗透。在目前的计算中，为了提高计算效率， $d_{50}$  近似于平均直径。

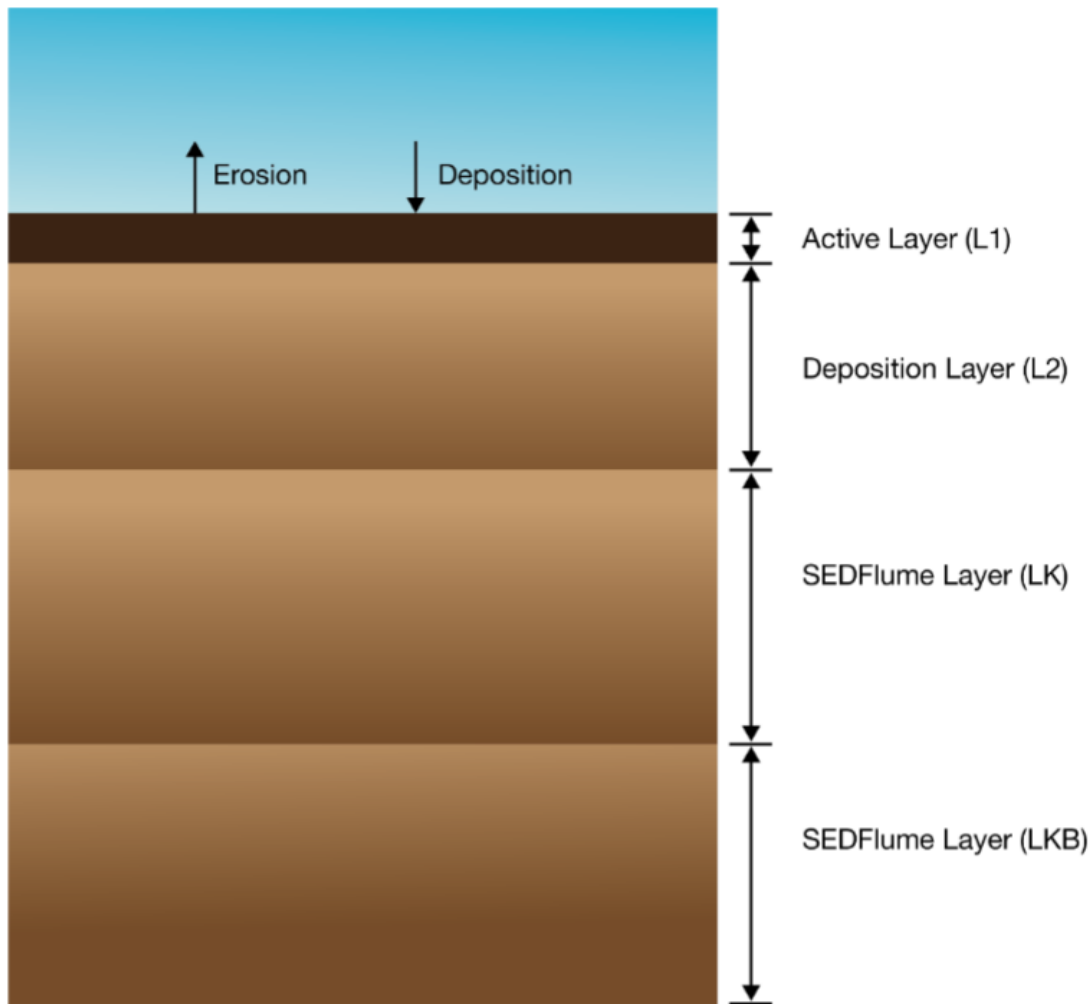


图 6.10.SEDflume 分层系统示意图

由于活性层保持在一个恒定的厚度 ( $T_a$ )，因此必须考虑活性层的三种可能的状态。第一种状态是活性层的净侵蚀，其中可能会发生沉积，但净通量是侵蚀的。如果该净侵蚀后的活性层的厚度为  $T$ ，则在活性层上加入等于  $T_a - T$  的材料的厚度，从而保持  $T_a$  的厚度。该材料从下面的层中添加，其尺寸等级比例相当于下面的层中。活性层的第二种可能状态是活性层的厚度超过  $T_a$  的净沉积状态。在这种情况下，多余的材料  $T - T_a$  被放入一个新的沉积材料层中，就在活性层下面，但在母层上方。该材料以等于活性层的尺寸等级比例添加到沉积层中。活性层的第三种状态是， $T$  的厚度等于  $T_a$ 。在这种情况下，不采取任何行动。图 6.10 显示了分层系统的示意图。

该活性层的侵蚀速率取决于其平均粒径。图 6.9 显示了石英沉积物的侵蚀率与粒径的关系。可以看出，当粒径增加到 200 $\mu\text{m}$  以上时，侵蚀速率降低。这说明了床层粗化是如何影响侵蚀率。这种类型的数据集可以利用实验室和现场核心构建，以确定任何特定地点的颗粒大小的函数。活性层或沉积层的侵蚀率可以从该层的平均粒径中计算出来，其插值类似于方程 (6.127)，用粒径代替厚度。

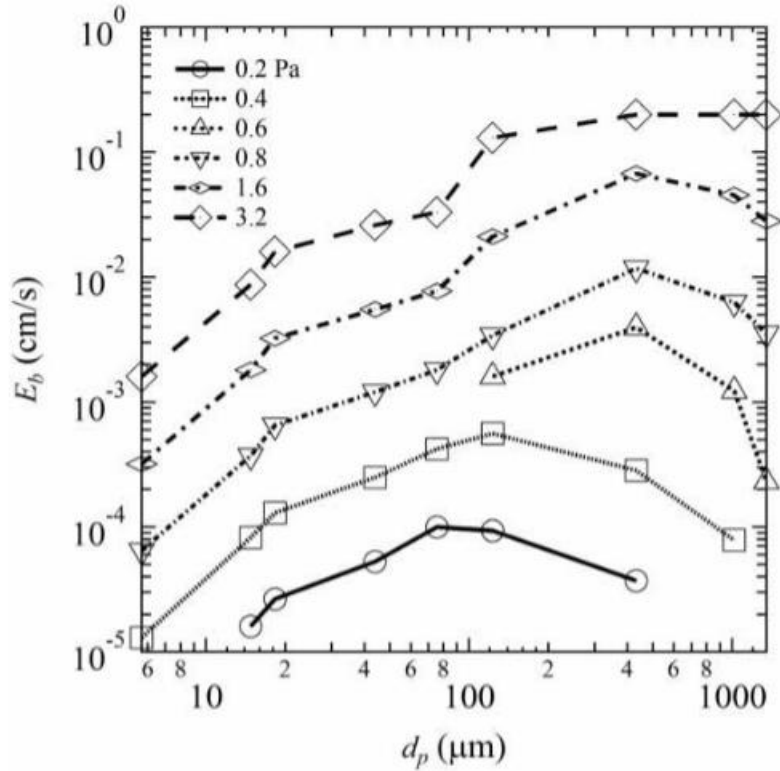


图 6.11 体积密度为 1.9 g/cm<sup>3</sup> 时的侵蚀速率与颗粒大小和剪切应力，改编自 Roberts 等人 (1998)，作者 James 等人 (2010)。模型使用插值数据来估计 1Pa 时的侵蚀速率。

## 第7章 化学命运和运输模块

本章介绍了与有机和金属化合物的命运和运输相关的过程，以及它们在水和沉积物中的数学模型。它从基本的方程式及其数值方面开始，然后是有机化学品和金属的特性，以及吸附和解吸过程。图7.1提供了EFDC+中化学命运和运输的概念模型的轮廓。

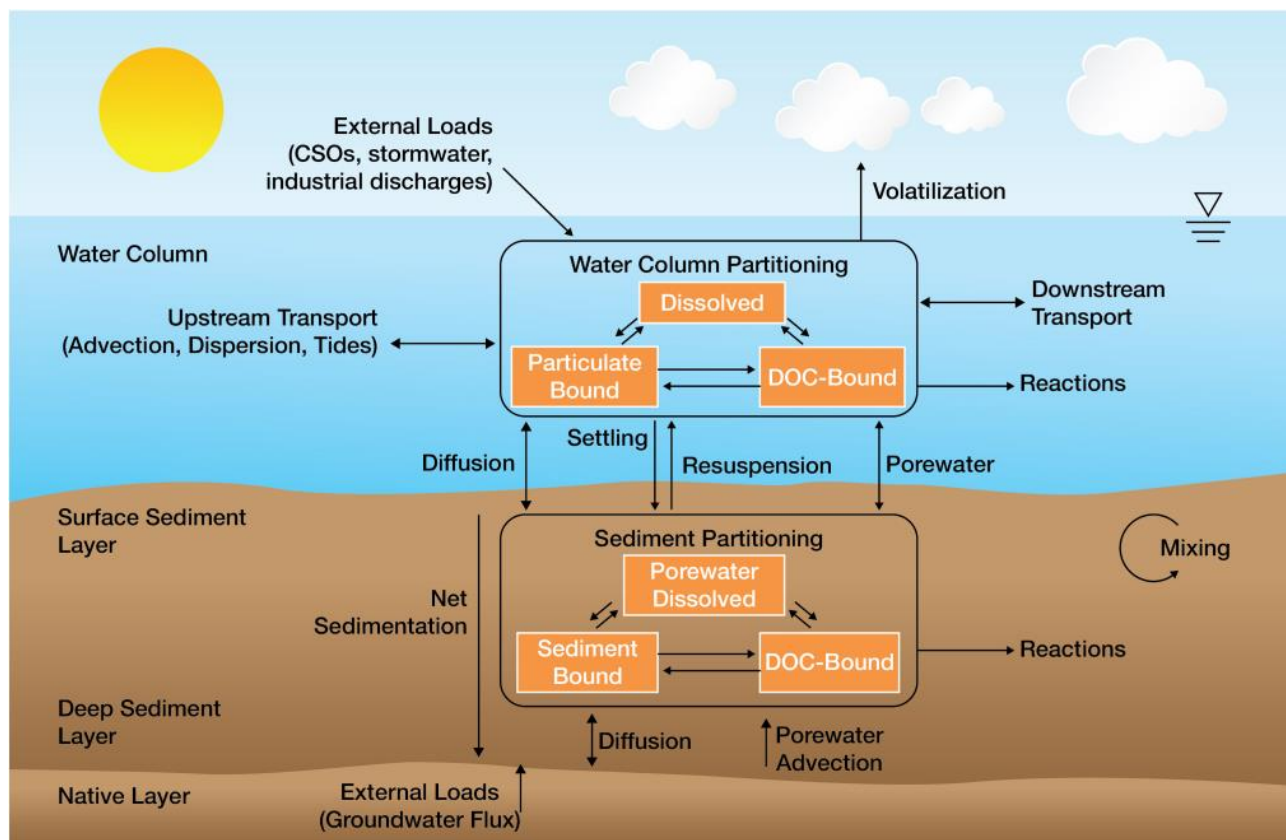


图7.1. EFDC+中化学命运与运输的概念模型

### 7.1. 开发概况

当增加了“原始”沉积物运输能力时，还增加了化学命运和运输(Tetra Tech, 2002b)。该模块允许在水柱和沉积物床固体上进行化学分配。在2015年之前，尽管有多个分区选项可用，但只有一种方法可以用于模拟中包含的所有化学品。DSI更新了化学分区模块，允许每个化学成分使用它自己独特的分区方法。图7.2提供了基本方法的示意图。

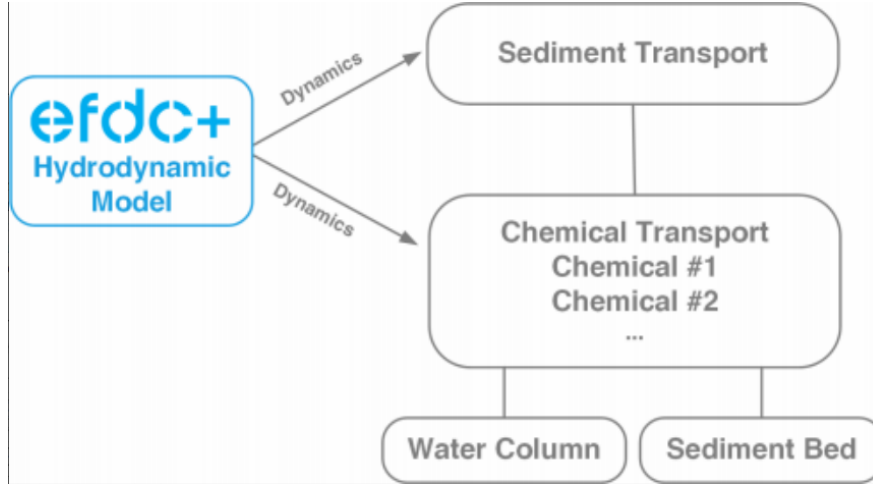


图7.2. 水动力、沉积物输运和化学命运和输运模型之间的联系

## 7.2. 基本方程

吸附性化学物质在水柱中的输运由溶解在水相中的化学物质控制，吸附到有效溶解在水相中的化学物质的输运方程，并被吸附成悬浮的沉积物颗粒。请注意，以下方程已推广到水柱中为简单起见，忽略了具有一般源术语的流程

对于溶解在水相中的化学物质的部分，运输可以描述为：

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (mHC_w) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u C_w) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v C_w) + \frac{\partial}{\partial z} (m w C_w) = \\
 \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} C_w \right) + mH \left( \sum_i (K_{as}^i S^i \chi_S^i) + \sum_j (K_{ad}^j D^j \chi_D^j) \right) \\
 - mH \sum_i (K_{as}^i S^i) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_S^i - \chi_S^i) \\
 - mH \sum_j (K_{ad}^j D^j) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_D^j - \chi_D^j) - mH \gamma C_w \quad (7.1)
 \end{aligned}$$

吸附到溶解成分D上的材料部分的输运方程为

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial}{\partial t} (mH D^j \chi_D^j) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u D^j \chi_D^j) \\
 + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v D^j \chi_D^j) + \frac{\partial}{\partial z} (m w D^j \chi_D^j) \\
 = \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} (D^j \chi_D^j) \right) + mH (K_{sd}^j D^j) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_D^j - \chi_D^j) \\
 - mH (K_{ad}^j + \gamma) (D^j \chi_D^j) \quad (7.2)
 \end{aligned}$$

吸附到悬浮成分S上的材料部分的输运方程为



$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mHS^i \chi_S^i) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u S^i \chi_S^i) \\
& \quad + \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v S^i \chi_S^i) + \frac{\partial}{\partial z} (m_w S^i \chi_S^i) \\
& = \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} (S^i \chi_S^i) \right) + mH (K_{as}^i S^i) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_S^i - \chi_S^i) \\
& \quad - mH (K_{as}^i + \gamma) (S^i \chi_S^i) \quad (7.3)
\end{aligned}$$

其中,

$C_w$  单位总体积中溶解化学品的质量 ( $\text{mg}/\text{m}^3$ )

$S^i$  第*i*类沉积物的质量 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$D_j$  溶解物质*j*类 (即DOC)的质量 ( $\text{g}/\text{m}^3$ )

$x_S^i$  每质量沉积物 ( $\text{mg}/\text{g}$ ) 吸附至沉积物*i*级的污染物质量

$x_D^j$  吸附到溶解物质的污染物质量 *j* 每单位质量的溶解物质 (即吸附到DOC)

( $\text{mg}/\text{g}$ )

$\hat{X}$  每个载流子质量的饱和吸附质量, 下标表示沉积物 *S* 或溶解材料 *D* 和上标表示沉积物*I*类或溶解物质 *J* 类 ( $\text{mg}/\text{g}$ )

$\phi$  空隙度 (无量纲)

$\psi_w$  可供吸附的水溶解污染物的分数 (无量纲)

$K_{aS}$  沉积物的吸附速率 (/s)

$K_{aD}$  溶解材料的吸附速率 (/s)

$K_{dS}$  *s*为沉积物的解吸速率 (/s)

$K_{dD}$  溶解材料的解吸速率 (/s)

$\gamma$  由于生物降解、挥发和/或腐烂而造成的净损失率

### 7.3. 化学分配

吸附动力学是基于朗缪尔等温线 (Chapra et al., 1997)。引入吸附浓度, 定义每单位总体积的吸附质量

$$C_D^j = D^j \chi_D^j \quad (7.4)$$

$$C_S^i = S^i \chi_S^i \quad (7.5)$$

EFDC+吸附的污染物输运配方目前采用吸附和解吸附项的平衡分配

$$(K_{sD}^j D^j) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_D^j - \chi_D^j) = K_{dD}^j C_D^j \quad (7.6)$$

$$(K_{aS}^i S^i) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_S^i - \chi_S^i) = K_{dS}^i C_S^i \quad (7.7)$$

吸附与水相浓度比的求解方程 (7.6) 和 (7.7) 得出

$$\begin{aligned} \frac{C_D^j}{C_w} &= \frac{f_D^j}{f_w} = P_D^j \frac{D^j}{\phi} \\ P_D^j &= P_{Do}^j \left( 1 + P_{Do}^j \left( \frac{C_w}{\hat{\chi}_D^j \phi} \right) \right)^{-1} \\ P_{Do}^j &= \frac{\psi_w K_{dD}^j \hat{\chi}_D^j}{K_{dD}^j} \end{aligned} \quad (7.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{C_S^i}{C_w} &= \frac{f_S^i}{f_w} = P_S^i \frac{S^i}{\phi} \\ P_S^i &= P_{So}^i \left( 1 + P_{So}^i \left( \frac{C_w}{\hat{\chi}_S^i \phi} \right) \right)^{-1} \\ P_{So}^i &= \frac{\psi_w K_{dS}^i \hat{\chi}_S^i}{K_{dS}^i} \end{aligned} \quad (7.9)$$

式中,  $P$ 表示划分系数,  $P_o$ 为其线性平衡值。对于线性平衡划分,  $P$ 被设为 $P_o$ , 它实际上是近似的

$$\left( 1 + P_{So}^i \left( \frac{C_w}{\hat{\chi}_S^i \phi} \right) \right)^{-1}$$

方程 (7.8) 和 (7.9) 中的项。要求质量分数统一求和

$$f_w + \sum_i f_S^i + \sum_j f_D^j = 1 \quad (7.10)$$

给出

$$\begin{aligned} f_w &= \frac{C_w}{C} = \frac{\phi}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j D^j} \\ f_D^j &= \frac{C_D^j}{C} = \frac{P_D^j D^j}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j D^j} \\ f_S^i &= \frac{C_S^i}{C} = \frac{P_S^i S^i}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j D^j} \end{aligned} \quad (7.11)$$

溶解的浓度可以用单位体积的水相的质量交替表示

$$\begin{aligned} C_{w:w} &= \frac{C_w}{\phi} \\ C_{D:w}^j &= \frac{C_D^j}{\phi} \\ D_{:w}^j &= \frac{D^j}{\phi} \end{aligned} \quad (7.12)$$

等式 (7.11) 变为

$$\begin{aligned} \frac{C_{w:w}}{C} &= \frac{1}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j \phi D_{:w}^j} \\ \frac{C_{D:w}^j}{C} &= \frac{P_D^j D_{:w}^j}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j \phi D_{:w}^j} \\ \frac{C_S^i}{C} &= \frac{P_S^i S^i}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j \phi D_{:w}^j} \end{aligned} \quad (7.13)$$

这是Chapra等人 (1997) 对DOC和POC吸附配方的推广。

#### 7.4. 水柱化学输运及边界条件

方程 (7.4) 和方程 (7.5) 中所示的划分关系允许将方程 (7.1)、(7.2) 和 (7.3) 扩展为每个污染物组分的输运方程

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mHC_w) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y HuC_w) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x HvC_w) + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y wC_w) \\
&= \frac{\partial}{\partial z} \left( m_x m_y \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} (C_w) \right) + mH \left( \sum_i (K_{dS}^j C_S^i) + \sum_j (K_{dD}^j C_D^i) \right) \\
&\quad - mH \left( \sum_i (K_{aS}^i) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_S^i - \chi_S^i) \right. \\
&\quad \left. + \sum_j (K_{aD}^j D^j) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_D^j - \chi_D^j) + \gamma C_w \right) \quad (7.14)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mHC_D^j) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y HuC_D^j) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x HvC_D^j) + \frac{\partial}{\partial z} (mwC_D^j) \\
&= \frac{\partial}{\partial z} \left[ m \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} (C_D^j) \right] + mH (K_{sD}^j D^j) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_D^j - \chi_D^j) \\
&\quad - mH (K_{dD}^j + \gamma) C_D^j \quad (7.15)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mHC_S^i) + \frac{\partial}{\partial x} (m_y HuC_S^i) + \frac{\partial}{\partial y} (m_x HvC_S^i) + \frac{\partial}{\partial z} (mwC_S^i) + \frac{\partial}{\partial z} (mw_S^i C_S^i) \\
&= \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} C_S^i \right) + mH (K_{aS}^i) \left( \psi_w \frac{C_w}{\phi} \right) (\hat{\chi}_S^i - \chi_S^i) \\
&\quad - mH (K_{dS}^i + \gamma) C_S^i \quad (7.16)
\end{aligned}$$

其中，式 (7.14) 为溶解分数，式 (7.15) 为吸附到溶解材料中的分数，式 (7.16) 为吸附到沉积物中的分数。

使用平衡划分关系方程 (7.6) 和 (7.7) 添加方程 (7.14)、(7.15) 和 (7.16)

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t} (mHC) + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial x} (m_y HuC) + \frac{1}{m} \frac{\partial}{\partial y} (m_x vC) \\
&\quad + \frac{\partial}{\partial z} (m_x m_y wC) - \frac{\partial}{\partial z} \left( m \sum_i w_S^i f_S^i C \right) \\
&\quad = \frac{\partial}{\partial z} \left( m \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} \right) - mH \gamma C \quad (7.17)
\end{aligned}$$

总浓度C的方程式。水柱沉积物床界面的边界条件 $z = 0$ :

$$\begin{aligned}
& -\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} - \sum_i w_S^i f_S^i C \\
& = \sum_i \left( \left( \max(J_{SBS}^i \chi_S^i, 0) + \varepsilon \max\left(\frac{J_{SBS}^i}{\rho_S^i}, 0\right) \right) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi} \right) \right)_{SB} \\
& + \sum_i \left( \left( \min(J_{SBS}^i \chi_S^i, 0) + \varepsilon_{dep} \min\left(\frac{J_{SBS}^i}{\rho_S^i}, 0\right) \right) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi_{dep}} \right) \right)_{WC} \\
& + \sum_i \left( \left( \varepsilon \max\left(\frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0\right) \right) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi} \right) \right)_{SB} \\
& + \sum_i \left( \left( \varepsilon_{dep} \min\left(\frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0\right) \right) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi_{dep}} \right) \right)_{WC} \\
& + \left( \max(q_w, 0) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi} \right) \right)_{SB} + \left( \min(q_w, 0) \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi_{dep}} \right) \right)_{WC} \\
& - q_{dif} \left( \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi_{dep}} \right)_{WC} - \left( \frac{C_w + \sum_j C_D^j}{\phi} \right)_{SB} \right) \quad (7.18)
\end{aligned}$$

其中，

$J_{SBS}$ 和 $J_{SBB}$  沉积床和水柱之间的悬浮载荷和床载沉积通量，定义为床的正

$\rho_S$  沉积物密度为g/m<sup>3</sup>

$q_w$  床固结和地下水相互作用引起的水比排放，定义为床的正，单位为m<sup>3</sup>/s

$q_{dif}$  融合了分子扩散效应的扩散速度， 流体动力分散， 和生物诱导混合 (m/s)

下标SB表示沉积物床顶层的条件，而下标WC表示床上方水柱中的条件，除了在水柱-床界面处定义特定的排放和扩散速度。下标dep表示新沉积物的孔隙比和孔隙率。式(7.13)表明，床和水柱之间的污染物通量包括悬浮沉积物吸附材料的通量；由于固结和地下水相互作用引起的水的特定排放以及悬浮和床载泥沙沉积和再悬浮引起的水溶解和吸附到水溶解材料的通量；以及水溶解和吸附到水溶解物质的扩散过程。床载沉积物吸附材料的输运表示为水平相邻的顶床层之间的直接输运，并包含在沉积物床的污染物质量守恒方程中。在无水面上的边界条件：

$$-\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} - \sum_i w_S^i f_S^i C = 0 : z = 1 \quad (7.19)$$

利用孔隙率和空隙比之间的关系：

$$\phi = \frac{\varepsilon}{1 + \varepsilon} \quad (7.20)$$

并且式 (7.5) 允许将式 (7.18) 写成:

$$\begin{aligned} & -\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} - \sum_i w_s^i f_s^i C \\ & = \sum_i \left( \left( \max \left( J_{SBS}^i \frac{C_S^i}{S^i}, 0 \right) + (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SB}^i}{\rho_s^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{SB} \\ & + \sum_i \left( \left( \min \left( J_{SBS}^i \frac{C_S^i}{S^i}, 0 \right) + (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBS}^i}{\rho_s^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{WC} \\ & + \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_s^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{SB} \\ & + \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_s^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{WC} \\ & + \left( (\max(q_w, 0) + q_{dif}) \frac{1}{\phi} \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{SB} \\ & + \left( (\min(q_w, 0) - q_{dif}) \frac{1}{\phi} \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{WC} \quad (7.21) \end{aligned}$$

泥沙浓度可以用泥沙密度和空隙比来表示

$$S^i = \frac{F^i \rho_s^i}{1 + \varepsilon} \quad (7.22)$$

式中,  $F^i$  为各泥沙类所占总泥沙量的比例:

$$F^i = \left( \sum_i \left( \frac{S^i}{\rho_s^i} \right) \right)^{-1} \left( \frac{S^i}{\rho_s^i} \right) \quad (7.23)$$

将方程 (7.11) 和 (7.22) 引入到方程 (7.21) 中, 给出了底部边界的最终形式

$$\begin{aligned}
& -\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} - \sum_i w_S^i f_S^i C \\
& = \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) C + \max \left( \frac{F^i J_{SBS}^i}{S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{SB} \\
& + \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) C + \min \left( \frac{F_{dep}^i J_{SBS}^i}{S_{dep}^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC} \\
& + \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{SB} \\
& + \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{WC} \\
& + \left( (\max(q_w, 0) + q_{dif}) \frac{1}{\phi} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{SB} \\
& + \left( (\min(q_w, 0) - q_{dif}) \frac{1}{\phi} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC} \quad (7.24)
\end{aligned}$$

请注意，与床载运输相关的床通量的形式仍然没有改变，因为水柱中的沉积物浓度。

#### 7.4.1 水柱化学输运方程的数值解

采用分数步法求解了水体中的总污染物浓度的输运方程 (7.17)

1. 平流；
2. 沉降、沉积和再悬浮；
3. 孔隙水平流和扩散；
4. 反应

在上述公式 (7.11) 之间重新计算污染物的分数相分布。

##### 7.4.1.1 平流

平流步骤：

$$(HC)^{n+1/4} - (HC)^n + \frac{\Delta t}{m} \frac{\partial}{\partial x} (m_y H u C) + \frac{\Delta t}{m} \frac{\partial}{\partial y} (m_x H v C) + \Delta t \frac{\partial (wC)}{\partial z} = 0 \quad (7.25)$$

与垂直边界条件一起

$$wC = 0 : z = 0, 1 \quad (7.26)$$

用方程 (7.25) 中和随后的方程中的分数时间水平来表示分数步进过程中的中间结果。方程 (7.25) 的空间离散形式采用了EFDC+中的一种标准的高阶、通量有限的平流输运求解器。

### 7.4.1.2 沉降、沉积和再悬浮

沉降、沉积和再悬浮的步骤：

$$(H)^{n+1/2} - (HC)^{n+1/4} = \Delta t \frac{\partial}{\partial z} \left( \sum_i w_S^i f_S^i C \right) \quad (7.27)$$

在边界条件下

$$\begin{aligned} - \sum_i w_S^i f_S^i C &= \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) C + \max \left( \frac{F^i J_{SBS}^i}{S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{SB} \\ &\quad + \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) C + \min \left( \frac{F_{dep}^i J_{SBS}^i}{S_{dep}^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC} \\ &\quad + \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{SB} \\ &= \sum_i \left( \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \right) \left( C_w + \sum_j C_D^j \right) \right)_{WC} : z = 0 \quad (7.28) \end{aligned}$$

$$w_S^i f_S^i C = 0 : z = 1 \quad (7.29)$$

在水柱层上积分方程 (7.27) ，并使用逆风差进行沉降，

$$\begin{aligned} \Delta_k (HC)_k^{n+1/2} - \Delta_k (HC)_k^{n+1/4} &= \Delta t \sum_i \left( \frac{(w_S^i S^i)_{k+}}{H} \left( \frac{f_S^i}{S^i} \right)_{k+1} \right)^{n+1/2} (HC)_{k+1}^{n+1/2} \\ &\quad - \Delta t \sum_i \left( \frac{(w_S^i S^i)_{k-}}{H} \left( \frac{f_S^i}{S^i} \right)_k \right)^{n+1/2} (HC)_k^{n+1/2} \quad (7.30) \end{aligned}$$

对于不靠近床的一层 (即  $k > 1$ ) :



$$\begin{aligned}
\Delta_1(HC)_1^{n+\frac{1}{2}} - \Delta_1(HC)_1^{n+\frac{1}{4}} &= \Delta t \sum_i \left( (w_S^i S^i)_1 + \left( \frac{f_S^i}{S^i} \right)_2 \right)^{n+\frac{1}{2}} C_2^{n+\frac{1}{2}} \\
&+ \Delta t \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) + \max \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{sb}^{n+\frac{1}{2}} C_{sb}^{n+\frac{1}{2}} \\
&+ \Delta t \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) + \min \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} C_1^{n+\frac{1}{2}} \\
&+ \Delta t \sum_i \left( (1+\varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{sb}^{n+\frac{1}{2}} C_{sb}^{n+\frac{1}{2}} \\
&+ \Delta t \sum_i \left( (1+\varepsilon) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} C_1^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.31)
\end{aligned}$$

对于靠近床的第一层（即 $k=1$ ）。请注意，公式（7.31）也是单层或深度平均应用的合适形式。由于自由表面相邻层顶部的泥沙沉降通量为零，因此公式（7.27）从顶层到底层向下积分。底层方程（7.31）与沉积物层顶层对应的方程同时求解。沉降通量、 $w_{SS}$ 和水柱-沉积床通量、 $J_{SB}$ （S/B）已从上述公式（7.30）和（7.31）中沉积、沉积和再悬浮的步骤解决方案中得到。

$$\frac{f_S^i}{S^i} = \frac{P_S^i}{\phi + \sum_i P_S^i S^i + \sum_j P_D^j D^j} \quad (7.32)$$

### 7.4.1.3 孔隙水平流和扩散

扩散步骤

$$(HC)^{n+\frac{3}{4}} - (HC)^{n+\frac{1}{2}} = \Delta t \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial}{\partial z} C \right) \quad (7.33)$$

边界条件

$$\begin{aligned}
-\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} &= \left( (\max(q_w, 0) + q_{dif}) \frac{1}{\phi} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{SB} \\
&+ \left( (\min(q_w, 0) - q_{dep}) \frac{1}{\phi_{dep}} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC} \quad : z=0 \quad (7.34)
\end{aligned}$$

$$-\frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} = 0 : z = 1 \quad (7.35)$$

对于靠近床层的第一层

$$\begin{aligned} (HC)_1^{n+3/4} - (HC)_1^{n+1/2} &= \frac{\Delta t}{\Delta_1} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{1+}^{n+3/4} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta_1} (\max(q_w, 0) + q_{dif}) \left( \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \frac{1}{\phi} \right)_{SB}^{n+1/2} C_{SB}^{n+3/4} \\ &+ \frac{\Delta t}{\Delta_1} (\min(q_w, 0) - q_{dif}) \left( \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \frac{1}{\phi_{dep}} \right)_1^{n+1/2} C_1^{n+1/2} \end{aligned} \quad (7.36)$$

值得注意的是，在水柱浓度上升之前，床层浓度上升到 $n+3/4$ 的中间时间水平。而对于不靠近床层的图层

$$(HC)_k^{n+3/4} - (HC)_k^{n+1/2} = \frac{\Delta t}{\Delta_1} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{k+}^{n+3/4} - \frac{\Delta t}{\Delta_1} \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{k-}^{n+3/4} \quad (7.37)$$

#### 7.3.1.4 反应

解决方案：

$$(HC)_k^{n+1} - (HC)_k^{n+3/4} = -\Delta t \gamma (HC)_k^{n+1} \quad (7.38)$$

隐式反应步骤。

#### 7.5. 沉积物床化学过程

沉积床中的化学输运用床地质力学过程的离散层公式来表示。沉积层一层总化学浓度的质量守恒：

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}(BC)_k &= -\gamma(BC)_k \\
&- \delta(k, kt) \sum_i \left( \max\left(\frac{J_{SBS}^i f_S^i}{BS^i}, 0\right) + \max\left(\frac{J_{SBS}^i F^i}{BS^i}, 0\right) \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) \right)_{kt} (BC)_{kt} \\
&- \delta(k, kt) \sum_i \left( \min\left(\frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0\right) C + \min\left(\frac{J_{SBS}^i F_{dep}^i}{S_{dep}^i}, 0\right) \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) C \right)_{WC} \\
&- \delta(k, kt) \sum_i \left( \min(J_{SBB}^i \chi_{SBL}^i, 0) - \delta(k, kt) \sum_i \left( (1 + \varepsilon) \max\left(\frac{J_{SBB}^i}{B\rho_S^i}, 0\right) \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) \right)_{kt} (BC)_{kt} \right. \\
&\quad \left. - \delta(k, kt) \sum_i \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min\left(\frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0\right) \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) C \right)_{WC} \right. \\
&\quad \left. - \left( (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{k+} - (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{k-} \right) \left( \frac{1}{\phi B} \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) \right)_{k} (BC)_k \right. \\
&\quad \left. - \delta(k, kt) (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{kt+} \left( \frac{1}{\phi} \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) C \right)_{WC} \right. \\
&\quad \left. - (1 - \delta(k, kt)) (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{k+} \left( \frac{1}{\phi B} \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) \right)_{k+1} (BC)_{k+1} \right. \\
&\quad \left. + (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{k-} \left( \frac{1}{\phi B} \left(f_w + \sum_j f_D^j\right) \right)_{k-1} (BC)_{k-1} \right) \quad (7.39)
\end{aligned}$$

其中，

$$\delta(k, kt) = \begin{cases} 1 & : k = kt \\ 0 & : k \neq kt \end{cases} \quad (7.40)$$

用于区分特定于顶部，水柱相邻层的床，kt。方程(7.39)中与孔隙水平流相关的平流量以逆风形式表示。在沉积床中，沉积物、污染物和溶解物质的实际计算变量是它们的浓度乘以河床厚度。与此公式一致，床中的分数相分量被定义为：

$$\begin{aligned}
(f_w)_k &= \left( \frac{BC_w}{BC} \right)_k = \left( \frac{B\phi}{B\phi + \sum_i P_S^i BS^i + \sum_j P_D^j BD^j} \right)_k \\
(f_D^j)_k &= \left( \frac{BC_D^j}{BC} \right)_k = \left( \frac{P_D^j BD^j}{B\phi + \sum_i P_S^i BS^i + \sum_j P_D^j BD^j} \right)_k \\
(f_S^i)_k &= \left( \frac{BC_S^i}{BC} \right)_k = \left( \frac{P_S^i BS^i}{B\phi + \sum_i P_S^i BS^i + \sum_j P_D^j BD^j} \right)_k
\end{aligned} \quad (7.41)$$

### 7.5.1 河流床上的碎石、泥沙运输

与床载输沙量相关的污染物通量确定如下：

$$mJ_{SBB}^i = \frac{\partial}{\partial x} (m_y Q_{SBLx}^i) + \frac{\partial}{\partial x} (m_x Q_{SBLy}^i) \quad (7.42)$$

在公式 (7.25) 和 (7.39) 中, 使用公式 (7.42) 来评价与孔隙水夹带和排出相关的通量。

床载物料的输送方程

$$\frac{\partial}{\partial x} (m_y Q_{SBLx}^i \chi_{SBL}^i) + \frac{\partial}{\partial x} (m_x Q_{SBLy}^i \chi_{SBL}^i) = mJ_{SBB}^i \chi_{SBL}^i \quad (7.43)$$

由于运输散度中每个沉积物质量的污染物质量对应于沉积物层顶层的条件, 因此公式

(7.43) 可以写为

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( m_y Q_{SBLx}^i \frac{f_S^i}{S^i} C \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( m_x Q_{SBLy}^i \frac{f_S^i}{S^i} C \right) = mJ_{SBB}^i \chi_{SBL}^i \quad (7.44)$$

并使用逆风近似进行求解:

$$\begin{aligned} mJ_{SB}^i \chi_{SBL}^i = & \max (m_y Q_{SBLx}^i)_E \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_C + \min (m_y Q_{SBLx}^i)_E \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_E \\ & - \max (m_y Q_{SBLx}^i)_W \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_W - \min (m_y Q_{SBLx}^i)_W \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_C \\ & + \max (m_x Q_{SBLy}^i)_N \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_C + \min (m_x Q_{SBLy}^i)_N \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_N \\ & - \max (m_x Q_{SBLy}^i)_S \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_S - \min (m_x Q_{SBLy}^i)_S \left( \frac{f_S^i}{S^i} C \right)_C \end{aligned} \quad (7.45)$$

评估床载吸附材料在沉积层水平相邻顶层之间的运输情况。

## 7.5.2 床层化学过程方程的数值解

式 (7.39) 采用与水柱输送的步骤一致的分步法求解。采用式 (7.41) 更新了地层中沉降、沉积和再悬浮步骤与孔隙水平流和扩散步骤之间的分数分布。

### 7.5.2.1 沉降、沉积和再悬浮

沉降、沉积和再悬浮步骤只适用于床层的顶层

$$\begin{aligned}
& (BC)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} - (BC)_{kt}^n \\
&= -\Delta t \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{BS^i}, 0 \right) + \max \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{BS^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} (BC)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \\
&\quad - \Delta t \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) C + \min \left( \frac{J_{SBS}^i F_{dep}^i}{S_{dep}^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC}^{n+\frac{1}{2}} \\
&\quad\quad - \Delta t \sum_i \left( J_{SBB}^i \chi_{SBL}^i, 0 \right) \\
&\quad - \Delta t \sum_i \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{B\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} (BC)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \\
&\quad\quad - \Delta t \sum_i \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) C \right)_{WC}^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.46)
\end{aligned}$$

该方程与水柱底层的方程 (7.31) 同时求解。该解用

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} (BC)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \\ (HC)_1^{n+\frac{1}{2}} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} (BC)_{kt}^n - \Delta t \sum_i \left( J_S^i \chi_{SBL}^i \right)_{i=ib}^{n+\frac{1}{2}} \\ \Delta_1 C_1^{n+\frac{1}{4}} + \Delta t \sum_i \left( (w_S^i S^i)_1 + \left( \frac{f_S^i}{S^i} \right)_2 \right)_{i=ib}^{n+\frac{1}{2}} C_2^{n+\frac{1}{2}} \end{Bmatrix} \quad (7.47)$$

其中的系数是

$$\begin{aligned}
a_{11} = 1 + \Delta t \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{BS^i}, 0 \right) + \max \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{BS^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \\
+ \Delta t \sum_i \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{B\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{12} = \frac{\Delta t}{H} \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) + \min \left( \frac{J_{SBS}^i F_{dep}^i}{S_{dep}^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} \\
+ \frac{\Delta t}{H} \sum_i \left( (1 + \varepsilon_{dep}) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.49)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{21} = & -\Delta t \sum_i \left( \max \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{BS^i}, 0 \right) + \max \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{BS^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \\
& - \Delta t \sum_i \left( (1 + \varepsilon) \max \left( \frac{J_{SBB}^i}{B\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.50)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_{22} = & \Delta_1 - \frac{\Delta t}{H} \sum_i \left( \min \left( \frac{J_{SBS}^i f_S^i}{S^i}, 0 \right) + \min \left( \frac{J_{SBS}^i F^i}{S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} \\
& - \frac{\Delta t}{H} \sum_i \left( (1 + \varepsilon) \min \left( \frac{J_{SBB}^i}{\rho_S^i}, 0 \right) \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.51)
\end{aligned}$$

在 (7.46) 中加入这两个方程式，给出：

$$\begin{aligned}
(BC)_{kt}^{n+\frac{1}{2}} + \Delta_1 (HC)_1^{n+\frac{1}{2}} = & \\
& (BC)_{kt}^n + \Delta_1 (HC)_1^{n+\frac{1}{4}} + \Delta t \sum_i \left( (w_S^i S^i)_{1+} \left( \frac{f_S^i}{S^i} \right)_2 \right)^{n+\frac{1}{2}} C_2^{n+\frac{1}{2}} \\
& - \Delta t \sum_i (J_S^i \chi_{SBL}^i)^{n+\frac{1}{2}} \quad (7.52)
\end{aligned}$$

该方程验证了水柱-沉积物层交换的一致性，因为右侧的源和下沉只包括沉积物层的顶部，以及水平沉积物层单元之间的转移。

### 7.5.2.2 孔隙水水平流和扩散

孔隙水上下层的孔隙水平流扩散步骤

$$\begin{aligned}
(BC)_{kt}^{n+3/4} = & (BC)_{kt}^{n+1/2} \\
& - \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{kt+} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+1/2} (BC)_{kt}^{n+3/4} \\
& + \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{kt-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+1/2} (BC)_{kt}^{n+3/4} \\
& - \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{kt+} \left( \frac{1}{\phi H} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+1/2} (HC)_1^{n+1/2} \\
& + \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{kt-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt-1}^{n+1/2} (BC)_{kt-1}^{n+1/2} \quad (7.53)
\end{aligned}$$

这是一种隐式的形式。用表格书写公式 (7.36)

$$\begin{aligned}
\Delta_1 (HC)_1^{n+3/4} &= \Delta_1 (HC)_1^{n+1/2} + \Delta t \left( \frac{A_b}{H} \frac{\partial C}{\partial z} \right)_{1+}^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{kt+} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{SB}^{n+1/2} (BC)_{kt}^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{kt+} \left( \frac{1}{\phi H} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_1^{n+1/2} (HC)_1^{n+1/2} \quad (7.54)
\end{aligned}$$

并结合等式 (7.52) 给出

$$\begin{aligned}
(BC)_{kt}^{n+3/4} + \Delta_1 (HC)_1^{n+3/4} &= (BC)_{kt}^{n+1/2} + \Delta_1 (HC)_1^{n+1/2} + \Delta t \left( \frac{A_b}{H} \partial_z C \right)_{1+}^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{kt-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt}^{n+1/2} (BC)_{kt}^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{kt-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{kt-1}^{n+1/2} (BC)_{kt-1}^{n+3/4} \quad (7.55)
\end{aligned}$$

该方程验证了孔隙水平流和扩散在水柱-沉积物床界面上的一致性，因为方程 (7.55) 右侧的源项和汇项代表了水柱单元顶部和床单元底部的通量。

其余床层的孔隙水扩散和平流步长：

$$\begin{aligned}
(BC)_k^{n+3/4} &= (BC)_k^{n+1/2} \\
&- \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{k+} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{k+1}^{n+1/2} (BC)_{k+1}^{n+3/4} \\
&- \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{k+} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_k^{n+1/2} (BC)_k^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\min(q_w, 0) - q_{dif})_{k-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_k^{n+1/2} (BC)_k^{n+3/4} \\
&+ \Delta t (\max(q_w, 0) + q_{dif})_{k-} \left( \frac{1}{\phi B} \left( f_w + \sum_j f_D^j \right) \right)_{k-1}^{n+1/2} (BC)_{k-1}^{n+3/4} \quad (7.56)
\end{aligned}$$

对于最底层 ( $k=1$ ) 的层底边界 (用 $k-$ 表示)，具体的排放和扩散速度必须与总污染物的浓度 $C_0$ 一起指定。未分辨层的相应厚度  $k=0$ ，设置为统一而不损失通用性。由方程 (7.52) 和 (7.55) 表示的方程组是隐式的，并使用三对角线性方程求解器进行求解。需要注意的是， $n+3/4$  时间层厚度实际上是由方程 (7.23) 解确定的  $n+1$  时间层厚度。方程 (7.52) 和

(7.55) 中的具体放电由方程 (7.41) 给出, 并表示方程 (7.23) 中出现的放电, 保证了孔隙水平流的质量守恒。

### 7.5.2.3 反应

床层运输的解决方案是

$$(BC)_k^{n+1} - (BC)_k^{n+3/4} = -\Delta t \gamma (BC)_k^{n+1} \quad (7.57)$$

隐式反应步骤。

## 7.6 化学损失条件

### 7.6.1 批量降解

批量降解可以包括在水柱和/或沉积物床中的任何化学成分。水柱中的体积降解遵循一级衰减速率:

$$\frac{dC_k}{dt} = -KC_k \quad (7.58)$$

其中,

C 第k层的化学浓度为mg/m<sup>3</sup>

K 一阶衰减速率, 单位为1/s

t 以秒计的时间

对于整体降解, 温度对降解速率没有影响

在沉积物床中, 体积降解可应用于沉积物厚度到最大沉积物深度:

$$\frac{dC_{b,k}}{dt} = -KC_{b,k}, \quad \text{for } \sum_k^{kt} H_{bed,k} \leq D_{max} \quad (7.59)$$

其中,

C<sub>b,k</sub> 沉积物层化学污染物浓度 (mg/g)

K 体积衰减速率 (1/s)

H<sub>bed,k</sub> 沉沙床层厚度(m)

D<sub>max</sub> 使用体积退化的最大深度(m)



## 7.6.2 生物降解

细菌降解，有时也被称为微生物转化、生物降解或生物溶解，是指细菌中的酶系统对一种化合物的分解。虽然这些转化可以解毒和矿化化学物质，并化解潜在的化学物质，但它们也可以激活潜在的化学物质。EFDC+中的生物降解遵循之前显示的批量降解方法：

$$\frac{dC_k}{dt} = -K_{w,bio}C_k \quad (7.60)$$

和

$$\frac{dC_{b,k}}{dt} = -K_{b,bio}C_{b,k}, \quad \text{for } \sum_k^{kt} H_{bed,k} \leq D_{bio} \quad (7.61)$$

其中，

$C_k$	$k$ 层水柱中的化学浓度 (mg/m <sup>3</sup> )
$C_{b,k}$	沉积物层化学污染物浓度 (mg/g)
$K_{w,bio}$	水柱生物降解速率 (1/s)
$K_{b,bio}$	沉积物床的生物降解速率 (1/s)
$H_{bed,k}$	泥沙床层厚度(m)
$D_{bio}$	应用生物降解的最大深度(m)

当降解系数与温度有关时，可以计算：

$$K_{bio} = K_{bio,ref} Q_{10}^{(T-20)/10} \quad (7.62)$$

其中，

$K_{bio,ref}$	20°C下的参考生物降解速率 (1/s)
$Q_{10}$	生物降解的温度修正因子
$T$	当前温度 (°C)

温度修正因子代表了由10°C温度升高所导致的生物降解速率常数的增加。在1.5到2.0范围内的值是常见的。

## 7.5.3 挥发性

挥发性是指当溶解的中性浓度试图与气相浓度相平衡时，化学物质在气-水界面上的运动。当溶液中化学物质施加的分压等于上层大气中化学物质的分压时，就发生平衡。交换速率与溶

解浓度与上覆大气中浓度之间的梯度以及两种流体界面的电导率成正比。电导率同时受到化学性质（分子量、亨利定律常数）和空气-水界面的环境条件（湍流-由风速、水流速度和水深控制）的影响。

在EFDC+中，一种溶解的化学成分的挥发是由

$$\frac{\partial C}{\partial t} \Big|_{volat} = \frac{K_v}{H_{KC}} \left( f_d C - \frac{C_a}{\frac{H_L}{RT_K}} \right) \quad (7.63)$$

其中，

- C KC层中的水柱浓度 (mg/m<sup>3</sup>)
- KC 最顶层编号 (无量纲)
- KV 转移率 (m/day)
- HKC KC层的水柱厚度 (m)
- fd 被溶解的总化学物质的部分
- Ca 大气浓度 (mg/m<sup>3</sup>)
- R 通用气体常数  $8.206 \times 10^{-5} \text{ atm} \cdot \text{m}^3 / \text{mol} \cdot \text{K}$
- TK 开尔文环境中的水温 (°K)
- HL 化学物质的空气-水分配的亨利定律系数 (atm·m<sup>3</sup>/mole)

当溶解的浓度等于分压除以亨利定律常数时，就会发生平衡。

地表水柱段中一种化学物质的溶解浓度可以由两层电阻模型Whitman等人（1923）确定的速率挥发。双电阻方法假设两个“停滞膜”的两边都是混合良好的隔间。浓度差是水层扩散的驱动力。压力差驱动了空气层的扩散。从质量平衡的考虑来看，很明显，相同的质量必须通过两个薄膜，因此两个电阻串联起来，因此电导率是总电阻的倒数：

$$K_v = (R_L + R_G)^{-1} = \left[ K_L^{-1} + \left( K_G \frac{H_L}{RT_K} \right)^{-1} \right]^{-1} \quad (7.64)$$

其中，

- RL 液相电阻 (day/m)
- KL 液相转移系数(m/day)

RG 气相电阻 (day/m)

KG 气相转移系数(m/day)

还有另一个阻力，两个界面之间的传输阻力，但它被认为是可以忽略的。在非常湍流的条件下，以及在表面活性污染物的存在下，这可能不是真的。虽然这种双电阻方法，即惠特曼模型，在其均匀层的假设中被相当简化，但它已被证明与更复杂的模型一样准确。

$K_v$  的值，即电导率，取决于水体和上层大气中的湍流强度。Leinonen和Mackay (1975) 讨论了  $K_v$  的值主要由水中湍流的强度决定的条件。随着亨利定律(Henry's Law)系数的增加，电导率往往越来越受到水中湍流强度的影响。随着亨利定律系数的减小，导流值受大气湍流强度的影响越来越大。

由公式 (7.64) 计算出的挥发速率为温度为20°C。根据水温进行调整：

$$K_{v,T} = K_v \Theta^{T-20} \quad (7.65)$$

其中，

$\Theta$  温度校正系数

T 水温 (°C)

在此选项下计算的液体和气体膜传递系数随水体类型而变化。水体的类型被指定为挥发常数之一，可以是水流、河流或河口，或死水塘或湖泊。主要的区别是，在一个流动的水体中，湍流主要是一个河流速度的函数，而对于停滞的水体，风切变可能占主导地位。用于计算传递系数的公式随水体类型而变化，如下图所示。EFDC+会根据以下标准自动确定要应用哪个流量状态。

$$\left[ \begin{array}{l} H > H_{max}, \text{ Lake conditions} \\ H \leq H_{max}, \text{ River conditions} \end{array} \right] \quad (7.66)$$

或者

$$\left[ \begin{array}{l} U \leq U_{max}, \text{ Lake conditions} \\ U > U_{max}, \text{ River conditions} \end{array} \right] \quad (7.67)$$

其中，

H 总深度(m)

Hmax 河流条件下允许的最大深度(m)

U 深度平均速度量级 (m/s)

Umax 最大湖泊速度大小 (m/s)

### 7.5.3.1 流流、河流或河口

对于流动系统，传递系数由流动引起的湍流控制。对于流动条件，液体膜传递系数 (KL) 使用Covar方法 (Covar, 1976) 计算，其中使用的方程随细胞的速度和深度而变化。对于深度小于0.61 m的细胞，使用Owens公式计算氧通气率 (7.68)。

$$K_L = \frac{5.349 U^{0.67}}{86400 H^{1.5}} \quad (7.68)$$

其中，

U 深度平均水流速大小 (m/s)

H 细胞深度(m)

对于速度小于0.518 m/s或深度(m)大于13.584U 2.9135的段，使用曲线公式：

$$K_L = D_w \frac{U^{0.5}}{H^{1.5}} \quad (7.69)$$

式中，Dw为该化学物质在水中的扩散系数 (m<sup>2</sup>/s)，由

$$D_w = \frac{22 \cdot 10^{-9}}{M_w^{0.6667}} \quad (7.70)$$

在所有其他情况下，丘吉尔公式都用于计算重计率：

$$K_L = \frac{5.049 U^{0.969}}{86400 H^{1.673}} \quad (7.71)$$

假设流动系统的气体传递系数 (KG) 不变为100m/day。

### 7.5.3.2 湖或池塘

对于更静息的条件，传递系数由风诱导的湍流控制。对于这些系统，液体膜传递系数 (KL) 是使用奥康纳(O' Connor)方程或Mackay和Yeun (1983) 计算的。

#### 选项1 O' Connor 方法

$$K_L = u_* \left( \frac{\rho_a}{\rho_w} \right)^{0.5} \frac{K^{0.33}}{\lambda_2} S_{cw}^{-0.67} \quad (7.72)$$

$$K_G = u_* \frac{K^{0.33}}{\lambda_2} S_{ca}^{-0.67} \quad (7.73)$$

式中， $u_*$  为由式中计算得到的剪切速度 (m/s)

$$u_* = C_d^{0.5} W_{10} \quad (7.74)$$

$C_d$	阻力系数 (0.0011)
$W_{10}$	离水面10米的风速(m/s)
$\rho_a$	空气密度，内部根据空气温度计算(kg/m <sup>3</sup> )
$\rho_w$	水密度，内部计算自水温(kg/m <sup>3</sup> )
$K$	从卡门的常量
$\lambda_2$	无量纲粘性子层厚度
$S_{ca}$ 和 $S_{cw}$	空气和水的施密特数

$$S_{ca} = \frac{\mu_a}{\partial_a D_a} \quad (7.75)$$

$$S_{cw} = \frac{\mu_w}{\partial_w D_w} \quad (7.76)$$

其中，

$D_a$	空气中化学物质的扩散系数 (m <sup>2</sup> /s)
$D_w$	化学品在水中的扩散系数 (m <sup>2</sup> /s)
$\mu_a$	空气粘度，内部根据空气温度计算 (kg/m-sec)
$\mu_w$	水的粘度，内部计算依据水温 (kg/m-sec)

化学物质在水中的扩散系数用公式 (7.70) 计算，而化学物质在空气中的扩散系数 ( $D_a$ , m<sup>2</sup>/sec) 的计算方法：

$$D_a = \frac{1.9 \cdot 10^{-4}}{M_w^{2/3}} \quad (7.77)$$

因此， $K_G$ 与风成正比，并且与分子量的4/9次幂成反比。

## 选项2 Mackay 和 Yeun 方法

在这个选项下，液体和气体膜的转移系数是使用Mackay和Yeun (1983) 描述的公式来计算。Mackay方程式为：

$$K_L = \begin{cases} 10^{-6} + 0.00341u_*S_{cw}^{-0.5}, & u_* > 0.3\text{m/s} \\ 10^{-6} + 0.01441u_*^{2.2}S_{cw}^{-0.5}, & u_* < 0.3\text{m/s} \end{cases} \quad (7.78)$$

$$K_G = 10^{-3} + 0.0462u_*S_{ca}^{-0.67} \quad (7.79)$$

## 挥发性输入数据

虽然确定挥发涉及许多计算，但大多数是在内部使用一组小数据执行的。表7.1总结了挥发性数据规范，并非需要所有的常数。挥发性只对表面层有效。

表7.1 挥发性输入数据

Measured or calibrated conductance	$K_v$	0.6 — 25	$m/day$
Henry's Law Constant	$H$	$10^{-7} — 10^{-1}$	$atm - m^3/mole$
Concentration of chemical in atmosphere	$C_a$	0 — 1000	$\mu g/L$
Molecular weight	$M_w$	10 — $10^3$	$g/mole$
Reaeration coefficient (conductance of oxygen)	$K_a$	0.6 — 25	$m/day$
Experimentally measured ratio of volatilization to reaeration	$k_{vo}$	0 — 1	
Current velocity	$u_x$	0.2	$m/s$
Water depth	$D$	0.1 — 10	$m$
Water temperature	$T$	4 — 30	$^{\circ}C$
Wind speed 10m above surface	$W_{10}$	0 — 20	$m/s$

## 第8章 富营养化模块

在EFDC+中，富营养化模块是指模拟水生植物和藻类、浮游动物，以及在这一过程中营养物质的生化转化。总的来说，这些生物生物体在EFDC+界面上被称为“生物群”，尽管它不包括消耗这些浮游动物的更高营养水平的生物体。本章总结了在EFDC+中建模的这些过程的基本理论。EFDC+富营养化模块中包含的动力学过程来源于Park等人（1995）中所述的ICM水质模型（Cerco和Cole，1995），以及Cerco等人（2004）提供的公式。EFDC+还实施了沉积物成岩过程，主要基于由DiToro和Fitzpatrick（1993）开发的切萨皮克湾沉积物通量模型。沉积物成岩作用模块与水质模块的耦合增强了该模型，以模拟水质条件的长期变化，以响应从河床释放的泥沙通量对养分负荷的变化。

在EFDC+10.3之前，富营养化模块可以模拟三组浮游植物（自由漂浮）和一组大型藻类（随附）。浮游动物等高热带生物对浮游植物的捕食是用恒定的速率或与藻类生物量成比例的速率进行建模的。从EFDC+10.3开始，富营养化模块被增强，以模拟一个无限制的水生植物和藻类组，以及浮游动物组。用户可以通过分配给这些组的名称和参数来区分这些组。该模型模拟了水质参数的时空分布，包括溶解氧、漂浮或附着的藻类（无限种）、浮游动物（无限种）、碳、氮、磷和硅循环的各种成分，以及粪便大肠菌群。图8.1展示了在EFDC+中实现的水质模型的结构，以及表8.1中列出的状态变量集。水质组件之间的耦合如图8.2所示。

EFDC+中的所有生物区系类都以碳(C)单位表示。OC、N和P由三种活性亚类表示：耐火颗粒、不稳定颗粒和不稳定颗粒。当数据可用来估计分布因子时，使用子类允许有机物质更真实的分布。下面的部分将讨论每个变量的作用，并总结它们的动力学相互作用过程。沉积物成岩过程包括沉积物-水界面的营养通量交换和沉积物需氧量（SOD）作为一个完整的沉积物成岩模型。本文还描述了一种有根的植物和附生植物亚模块，可用于模拟带有芽、根和附生植物的深层大型植物。本节中对EFDC+富营养化模块的描述密切遵循Park等人（1995）。

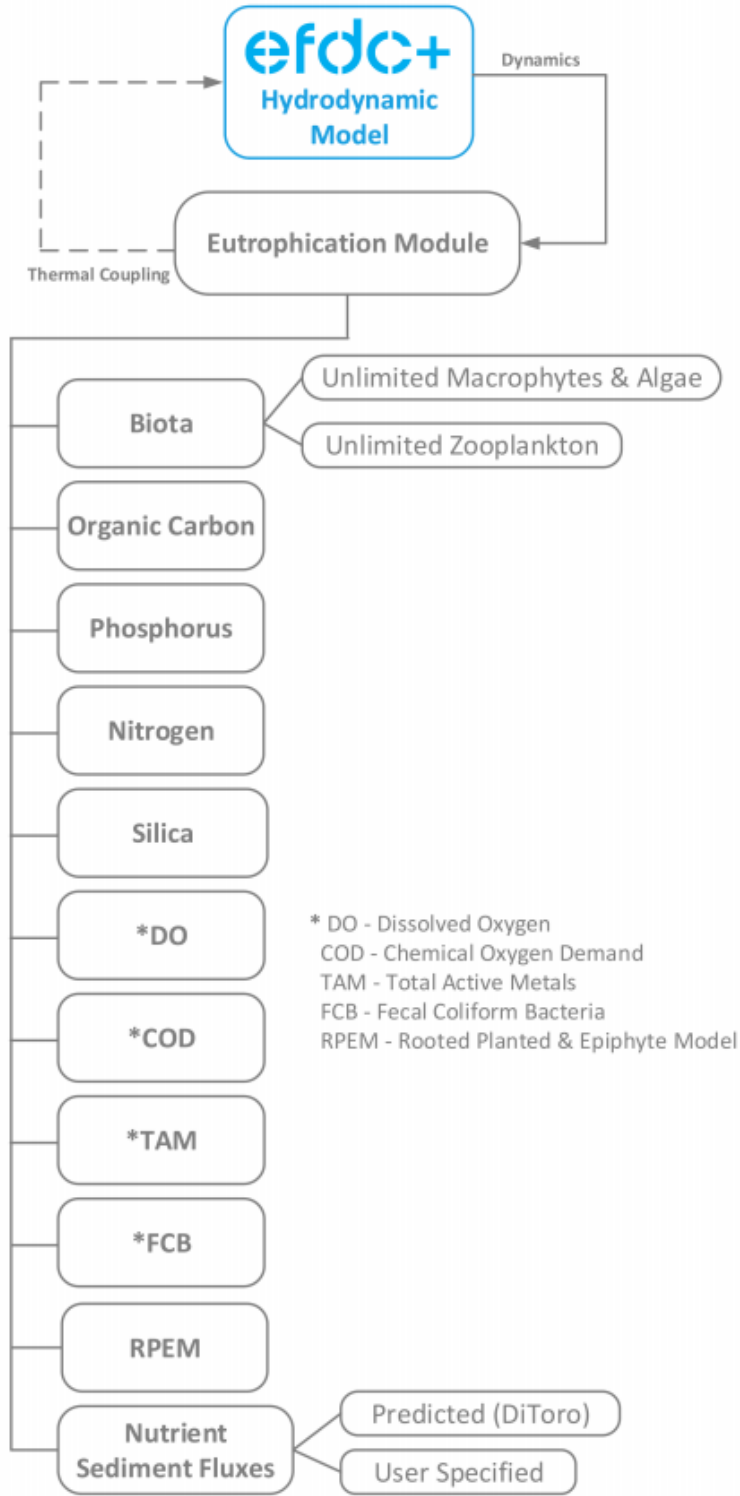


图8.1. EFDC+水质模型的结构

表 8.1 EFDC+水质状态变量



#	Water quality state variable	Acronyms	Units	Group
1	Refractory particulate organic carbon	<i>RPOC</i>	<i>mg/l</i>	Organic carbon
2	Labile particulate organic carbon	<i>LPOC</i>	<i>mg/l</i>	
3	Dissolved Organic Carbon	<i>DOC</i>	<i>mg/l</i>	
4	Refractory particulate organic phosphorus	<i>RPOP</i>	<i>mg/l</i>	Phosphorus
5	Labile particulate organic phosphorus	<i>LPOP</i>	<i>mg/l</i>	
6	Dissolved organic phosphorus	<i>DOP</i>	<i>mg/l</i>	
7	Total phosphate	<i>PO4t</i>	<i>mg/l</i>	
8	Refractory particulate organic nitrogen	<i>RPON</i>	<i>mg/l</i>	Nitrogen
9	Labile particulate organic nitrogen	<i>LPON</i>	<i>mg/l</i>	
10	Dissolved Organic Nitrogen	<i>DON</i>	<i>mg/l</i>	
11	Ammonium	<i>NH4</i>	<i>mg/l</i>	
12	Nitrate and Nitrite	<i>NO3, NO2</i>	<i>mg/l</i>	
13	Particulate biogenic silica	<i>SiP</i>	<i>mg/l</i>	Silica
14	Dissolved available silica	<i>SiA</i>	<i>mg/l</i>	
15	Chemical Oxygen Demand	<i>COD</i>	<i>mg/l</i>	Others
16	Dissolved Oxygen	<i>DO</i>	<i>mg/l</i>	
17	Total Active Metals	<i>TAM</i>	<i>mole/m<sup>3</sup></i>	
18	Fecal coliform bacteria	<i>FCB</i>	<i>MPN/100 ml</i>	
19	Carbon dioxide	<i>CO<sub>2</sub></i>	<i>mg/l C</i>	
20	Aquatic Plants	<i>B<sub>a</sub></i>	<i>mg/l C</i>	Algae and Macrophytes (Unlimited groups)
21	Aquatic Animals	<i>Z<sub>z</sub></i>	<i>mg/l C</i>	Zooplankton (Unlimited groups)

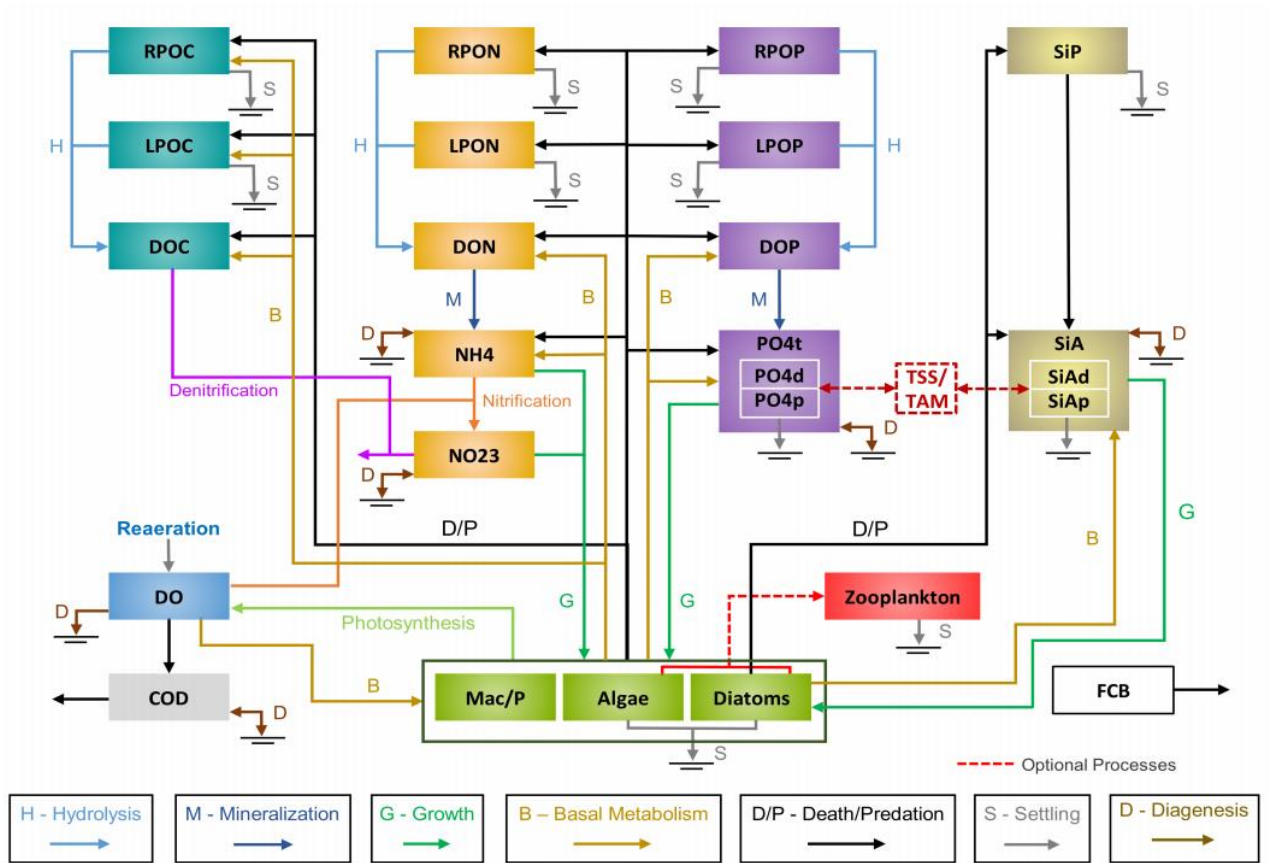


图.8.2. EFDC+水质模型结构示意图

## 8.1. 水柱富营养化配方

### 8.1.1 模型状态变量

#### 8.1.1.1 藻类和大型植物

藻类和大型植物在数值富营养化模型中起着中心地位。从建模的角度来看，藻类通常是根据其独特的特征和这些特征在生态系统中所发挥的重要作用来进行分组的。遗留的EFDC富营养化模块包括三个自由漂浮的类群（蓝藻细菌、硅藻和绿色藻类）和一个固定或非运输的类群（大型藻类）。

蓝藻，通常被称为蓝绿藻，其特征是它们在盐水中的丰富（作为微浮游生物）和在淡水中开花的特征。蓝藻细菌的独特之处在于，一些物种可以固定大气中的氮，尽管固氮剂并不被认为在许多河流系统中占主导地位。硅藻的区别在于它们需要二氧化硅作为一种营养物质来形成细胞壁。硅藻是一种大型藻类，其特征是沉降速度高。对于SOD，春季硅藻华定居在沉积物中

可能是一个重要的碳来源。不属于前两类的藻类被归为绿藻。绿藻的沉降速率介于蓝藻和硅藻之间，并且比蓝藻受到更大的摩擦压力。

大型植物类群，定义为固定的或非运输的藻类变量，可以包括在模型中来模拟大型藻类/周围植物类群。固定藻类变量具有与原始藻类组相同的动力学公式，只是它们没有被运输。固定的藻类群也可以用来代表各种类型的底底物附着或漂浮的附生植物。

从EFDC+10.3开始，可以模拟出无限的藻类和大型植物类群，并根据标签和参数进行区分。附录8.4提供了关于富营养化模拟的模型配置的附加信息。

### 8.1.1.2 浮游动物

浮游动物包括漂浮在水中的动物。它们包括大型成年生物的幼虫形式（如螃蟹、鱼）和从不超过几毫米的小动物。浮游动物是食物网中的一个重要组成部分。它们通过过滤周围的水，然后清除藻类来消耗藻类。它们还消耗细菌、碎屑，有时也消耗其他浮游动物，而且也早于小鱼。浮游动物的放牧可能是藻类的一个关键损失机制，这取决于一年中的时间、浮游动物的数量和浮游动物的放牧率。浮游动物的放牧可能是藻类的一个关键损失机制，这取决于一年中的时间、浮游动物的数量和浮游动物的放牧率。从EFDC+10.3开始，通过指定它们的动力学参数，在模拟中可以包含无限数量的浮游动物群。浮游动物的动力学方程及其与水质成分的相互作用来自（Cerco et al., 2004; Seo, 2019）。图8.2说明了浮游动物与其他状态变量之间的相互作用。

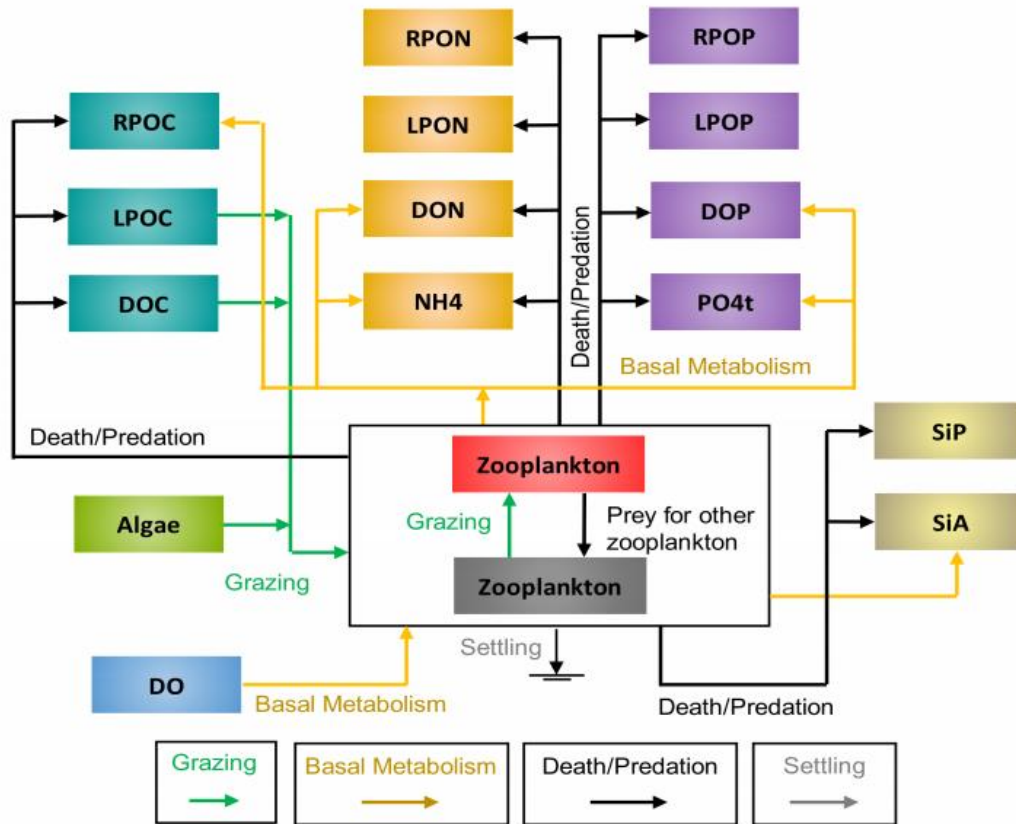


图.8.3. 浮游动物与富营养化成分的相互作用

### 8.1.1.3 有机碳 (OC)

在EFDC+中所考虑的三个OC状态变量分别为：溶解有机碳 (DOC)、不稳定微粒有机碳 (LPOC) 和耐火微粒有机碳 (RPOC)。不稳定和难治的区别基于分解的时间尺度。不稳定的OC在从天到几周的时间尺度上迅速分解，而难治性OC需要更多的时间，可能需要多年。

### 8.1.1.4 氮气(N)

N首先分为有机组和矿物组分。有机氮 (ON) 状态变量为溶解的有机氮 (DON)、不稳定颗粒有机氮 (LPON) 和耐火颗粒有机氮 (RPON)。矿物 N 形式为铵(NH<sub>4</sub><sup>+</sup>) 和硝酸盐 (NO<sub>3</sub><sup>-</sup>)。这两种矿物形式都被用来满足藻类的营养需求，尽管NH<sub>4</sub><sup>+</sup>是热力学首选。NH<sub>4</sub><sup>+</sup>被硝化细菌氧化成NO<sub>3</sub><sup>-</sup>。这种氧化可能是水柱和沉积物中氧(O)的一个重要汇。在NH<sub>4</sub><sup>+</sup>完全氧化的中间体，亚硝酸盐 (NO<sub>2</sub><sup>-</sup>) 也存在。NO<sub>2</sub><sup>-</sup>的浓度通常远低于NO<sub>3</sub><sup>-</sup>，为了建模目的，NO<sub>2</sub><sup>-</sup>与NO<sub>3</sub><sup>-</sup>结合。因此，NO<sub>3</sub><sup>-</sup>状态变量实际上代表了NO<sub>3</sub><sup>-</sup>和NO<sub>2</sub><sup>-</sup>的总和。

### 8.1.1.5 磷(P)

有机磷也被认为有三种状态；溶解的有机磷（DOP）、不稳定的微粒有机磷（LPOP）和耐火的微粒有机磷（RPOP）。只考虑一种单一的矿物形式，即磷酸盐（ $\text{PO}_4^{-3}$ ）。 $\text{PO}_4^{-3}$  在模型生态系统中以多种状态存在；溶解，吸附成无机固体，并并入藻类细胞中。利用平衡分配系数将 $\text{PO}_4^{-3}$ 分布在三种状态之间。

#### 8.1.1.6 二氧化硅( $\text{SiO}_2$ )

二氧化硅分为两个状态变量；溶解的可用二氧化硅（SiA）和颗粒生物二氧化硅（SiP）。SiA主要溶解，可被硅藻利用。不能使用SiP。在该模型中，SiP 是通过硅藻死亡率产生的。SiP溶解到 SiA 或沉淀到底部沉积物。

#### 8.1.1.7 化学需氧量 (COD)

在本研究中，COD 是指可通过无机方式氧化的还原物质的浓度。DO 的可用性决定了一个生态系统中生物体的分布以及能量和营养物质的流动。

#### 8.1.1.7 化学需氧量 (COD)

$\text{PO}_4^{-3}$  和 SiA 都能吸附在无机固体上，主要是铁（Fe）和锰（Mn）。吸附和随后的沉降是从水柱中去除 $\text{PO}_4^{-3}$  和 SiA 的途径之一。然而，有限的数据不允许对 Fe 和 Mn 的化学性质进行完全的处理。相反，单态变量 TAM 被定义为在 $\text{PO}_4^{-3}$  和 SiA 中活性金属的总浓度。TAM 通过氧依赖分配系数在颗粒和溶解相之间分配。无机悬浮物可以代替 TAM，作为 $\text{PO}_4^{-3}$  和 SiA 的吸附位点。TSS 浓度由EFDC+建模系统的输沙量成分提供。

#### 8.1.1.8 溶解氧 (DO)

DO是存在更高生命形式所必需的，也是水质模型的中心组成部分。DO的可用性决定了一个生态系统中生物体的分布以及能量和营养物质的流动。

#### 8.1.1.9 总活性金属 (TAM)

$\text{PO}_4^{-3}$ 和SiA都能吸附在无机固体上，主要是铁（Fe）和锰（Mn）。吸附和随后的沉降是从水柱中去除 $\text{PO}_4^{-3}$  和SiA的途径之一。然而，有限的数据不允许对铁和锰的化学性质进行完全的处理。相反，单态变量总活性金属（TAM）被定义为在 $\text{PO}_4^{-3}$  和SiA中活性金属的总浓度。TAM通过氧依赖分配系数在颗粒和溶解相之间分配。无机悬浮物可以代替TAM，作为 $\text{PO}_4^{-3}$ 和SiA的吸附位点。TSS浓度由EFDC+建模系统的输沙量成分提供。

### 8.1.2 质量方程的守恒

质量守恒包括物质进入/离开水体、物质在水体内的运输以及物质的物理、化学、生物转化。因此，浓度为 C 的每个水质状态变量的控制质量平衡方程可以表示为：

$$\frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y H C) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u C) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v C) + \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w C) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{m_y H A_x}{m_x} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{m_x H A_y}{m_y} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(m_x m_y \frac{A_z}{H} \frac{\partial C}{\partial z}\right) + m_x m_y H S_C \quad (8.1)$$

方程 (8.1) 的左手边 (LHS) 的最后三项说明了平流输运，右手边 (RHS) 的前三项说明了扩散输运。这六项物理输运类似，因此求解的数值方法与水动力模型中的质量平衡方程相同 (Hamrick, 1992)。方程 (8.1) 中的最后一项 SC 是每单位体积的内部和外部源和汇，表示每个状态变量的动力学过程和外部负荷。

EFDC+使用分数步法求解方程 (8.1)，它将动力学项与物理输运项解耦。物理传输的公式写为：

$$\frac{\partial}{\partial t_p}(m_x m_y H C) + \frac{\partial}{\partial x}(m_y H u C) + \frac{\partial}{\partial y}(m_x H v C) + \frac{\partial}{\partial z}(m_x m_y w C) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{m_y H A_x}{m_x} \frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{m_x H A_y}{m_y} \frac{\partial C}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(m_x m_y \frac{A_z}{H} \frac{\partial C}{\partial z}\right) + m_x m_y H S_{CP} \quad (8.2)$$

动力学过程和外部载荷的方程，称为动力学方程：

$$\frac{\partial C}{\partial t_k} = S_{CK} \quad (8.3)$$

和，

$$\frac{\partial}{\partial t}(m_x m_y H C) = \frac{\partial}{\partial t_p}(m_x m_y H C) + (m_x m_y H) \frac{\partial C}{\partial t_k} \quad (8.4)$$

在上述方程中，下标k为动力学过程，下标p为水质分量的物理输运。

方程 (8.2) 中的源汇项SC分别被分为与体积流入和流出相关的物理源和汇，以及方程 (8.3) 和 (8.4) 中的动力学源和汇。由于水柱深度的变化与体积输运场的散度耦合，动力学步骤是在物理输运步骤末端的水柱深度对应的恒定深度下进行的。这允许从公式 (8.3) 中的动力学步骤中消除深度和尺度因素，其可进一步分为反应源和内汇，如：

$$\frac{\partial C}{\partial t_k} = K \cdot C + R \quad (8.5)$$

其中，

K            动力学速率 (time<sup>-1</sup>)

R            表示内部源项(mass volume<sup>-1</sup> time<sup>-1</sup>)

方程 (8.5) 是通过将动力学方程中的一些项线性化得到的，主要是 Monod 型表达式。因此，K 和 R 是方程 (8.5) 中的已知值。方程 (8.2) 与盐度的质量平衡方程相同，因此它的数值解方法与盐度的质量平衡方程相同 (Hamrick, 1992)。物理输运 (Hamrick, 1992) 和动力学方程的求解方案都是二阶精确的。

### 8.1.3 状态变量的动力学方程

本章的其余部分详细介绍了每个状态变量的质量守恒方程的动力学部分。参数在它们第一次出现的地方定义。所有参数按字母顺序列在附录中 (第8.4节)。为了与报告的速率系数相一致，动力学使用天的时间维度进行了详细说明。在EFDC+代码中，动力学源和汇在用于质量守恒方程之前被转换为一个秒的维度。

#### 8.1.3.1 大型植物和藻类

EFDC+模拟了无限的一般自养生物群，可以参数化来代表任何特定的物种或一个群体的现有物种。每个组都可以进行参数化和相应的标记。对于一般组，模型中的动力学由以下因素控制：

1. 增长 (产量)
2. 基础代谢
3. 被浮游动物捕食<sup>4</sup>
4. 死亡率
5. 沉降
6. 外部的负荷

由于这些过程对所有藻类群基本相同，因此一般藻类 x 的动力学方程可以写成：

$$\frac{\partial B_x}{\partial t} = (P_x - BM_x - D_x) B_x - PR_x + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_x B_x) + \frac{WB_x}{V} \quad (8.6)$$

其中,

$B_x$  藻类类群的藻类生物量  $x$  (g C/m<sup>3</sup>)

$t$  时间 (day)

$P_x$  藻类群的生产率  $x$  (1/day)

$BM_x$  藻类组的基础代谢率  $x$  (1/day)

$D_x$  藻类组的死亡率  $x$  (1/day)

$PR_x$  浮游动物对  $x$  类藻类群的捕食率

$WS_x$  藻类群  $x$  的正沉降速度 (m/day)

$WB_x$  藻类群的外部负荷  $x$  (g C/day)

$V$  模型细胞体积 (m<sup>3</sup>)

#### 8.1.3.1.1 生产 (藻类增长)

藻类的生长取决于养分的利用率、环境光和温度。这些过程的影响被认为是乘法性的:

$$P_x = PM_x f_1(N) f_2(I) f_3(T) f_4(S) \quad (8.7)$$

其中,

$PM_x$  藻类类群在最优条件下的最大生长速率  $x$  (1/day),

$f_1(N)$  次优营养物质浓度的影响 ( $0 \leq f_1 \leq 1$ ),

$f_2(I)$  次优光强的影响 ( $0 \leq f_2 \leq 1$ ),

$f_3(T)$  次优温度的影响 ( $0 \leq f_3 \leq 1$ ),

$f_4(S)$  盐度对生长的影响 ( $0 \leq f_4 \leq 1$ )

对于淡水生物, 蓝藻生长方程中的盐度毒性项包含在模型中。

##### 8.1.3.1.1.1 营养物质对藻类生长的影响

利用李比希的(Liebig's)“最小定律”(Odum, 1971) 藻类的生长是由供应最少的营养物质决定的, 将藻类群生长的营养限制表示为:

$$f_1(N) = \min \left( \frac{NH_4 + NO_3}{KHN_x + NH_4 + NO_3}, \frac{PO_4}{KHP_x + PO_4}, \frac{SAd}{KHS + SAd} \right) \quad (8.8)$$



其中,

NH<sub>4</sub><sup>+</sup> NH<sub>4</sub><sup>+</sup> 浓度为N (g N/m<sup>3</sup>)

NO<sub>3</sub><sup>-</sup> NO<sub>3</sub><sup>-</sup> 浓度为N (g N/m<sup>3</sup>)

KHN<sub>x</sub> 藻类组吸收氮的半饱和度常数x (g N/m<sup>3</sup>)

PO<sub>4</sub> 溶解的磷酸盐浓度为P (g P/m<sup>3</sup>)

KHP<sub>x</sub> 藻类组吸收磷的半饱和度常数x (g P/m<sup>3</sup>)

SAd 溶解可用SiO<sub>2</sub>的浓度 (g Si/m<sup>3</sup>)

KHS 硅藻吸收SiO<sub>2</sub>的半饱和度常数 (g Si/m<sup>3</sup>)

一些蓝藻细菌 (如鱼腥藻) 可以从大气中固定氮, 因此不受氮的限制。在这种情况下, 对于蓝藻细菌, 可以忽略固定氮。二氧化硅是硅藻的限制, 其他组可以忽略。

#### 8.1.3.1.1.2 光对藻类生长的影响

光对藻类生长的影响是用Steele方程 (Cerco和Cole, 1995) 的每日和垂直积分形式计算的, 如下所示:

$$f_2(I) = \frac{\exp(1) FD}{K_{ess} (ZB - ZT)} (\exp(-\alpha_b) - \exp(-\alpha_T)) \quad (8.9)$$

$$\alpha_B = \left( \frac{I_0}{FD \cdot I_{sx}} \right) \exp(-K_{ess} ZB) \quad (8.10)$$

$$\alpha_T = \left( \frac{I_0}{FD \cdot I_{sx}} \right) \exp(-K_{ess} ZT) \quad (8.11)$$

其中,

FD 分日长度 (0 ≤ FD ≤ 1)

K<sub>ess</sub> 总消光系数(1/m)

ZT 从水面至水表层的距离(m)

ZB 从水面至水层底层的距离(m)

I<sub>0</sub> 水面日总光强度(langleys/day)

I<sub>sx</sub> 藻类组的最佳光强度x (langleys/day)

用公式5.15计算了水柱中的总消光 $K_{ess}$ 。光合作用的最佳光强 $I_{sx}$ 取决于藻类的分类、暴露时间、温度、营养状况和以前的驯化情况。 $I_{sx}$ 的变化很大程度上是由于藻类的适应，旨在在不同的环境中最大限度地生产。Steele (1962) 指出，适应的结果是，最佳强度是每日强度的一致部分（约50%）。Kremer和Nixon (1978) 报告了一个类似的发现，即藻类的最大生长发生在水柱中的恒定深度（大约1米）。采用他们的方法，以便将最佳强度表示为：

$$I_{sx} = \max(I_{0avg} \cdot \exp(-K_{ess} D_{optx}), I_{sxmin}) \quad (8.12)$$

其中，

- $D_{optx}$  藻类群的最大生长深度x (m)  
 $I_{0avg}$  调整后的表面光强度(W/m<sup>2</sup>)  
 $I_{sxmin}$  最小最佳光强(W/m<sup>2</sup>)

在式 (8.12) 中规定了一个最小的 $I_{sxmin}$ ，这样藻类在极低的光照水平下就不能茁壮成长。通过估计基于日光强度的时间加权平均值  $I_{0avg}$  来辨认藻类适应光强变化所需的时间。

$$I_{0avg} = C_{Ia}I_0 + C_{Ib}I_1 + C_{Ic}I_2 \quad (8.13)$$

其中，

- $I_1$  在模型日的前一天1天的日光强(langleys/day)  
 $I_2$  在模型日的前一天2天的日光照强度(langleys/day)  
 $C_{Ia}, C_{Ib}, C_{Ic}$   $I_0, I_1$ 和 $I_2$ , 各自的加权因子相加： $C_{Ia} + C_{Ib} + C_{Ic} = 1$ 。

### 8.1.3.1.1.3 温度对藻类生长的影响

用高斯概率曲线来表示藻类生长的温度依赖性：

$$f_3(T) = \begin{cases} \exp(-KTG_{1x} \cdot (T - TM_{1x})^2), & T \leq TM_{1x} \\ 1, & TM_{1x} < T < TM_{2x} \\ \exp(-KTG_{2x} \cdot (T - TM_{2x})^2), & T \geq TM_{2x} \end{cases} \quad (8.14)$$

其中，

- $T$  由水动力模型提供的温度 (°C)  
 $TM_{1x}$  藻类x中藻类生长的最低最佳温度 (°C)  
 $TM_{2x}$  藻类x组藻类生长的最最佳温度 (°C)

KTG1<sub>x</sub> 温度低于TM1<sub>x</sub>对藻类群<sub>x</sub>生长的影响 (1/°C<sup>2</sup>)

KTG2<sub>x</sub> TM2<sub>x</sub>以上温度对藻类群<sub>x</sub>生长的影响 (1/°C<sup>2</sup>)

方程 (8.14) 的公式是对ICM公式的修改, 以允许最佳生长的温度范围规范。

#### 8.1.3.1.1.4 盐度效应

对于模拟受盐度影响的藻类群的模型 (例如蓝藻细菌), 由于盐度而导致的生长限制可以计算为:

$$f_4(S) = \frac{STOXS^2}{STOXS^2 + S^2} \quad (8.15)$$

其中,

STOXS 微囊藻生长减半的盐度 (ppt)

S 由水动力模型提供的水柱中的盐度 (ppt)

#### 8.1.3.1.2 基础代谢

该模型中的藻类生物量通过基础代谢 (呼吸和排泄)、捕食和死亡而减少。在基础代谢过程中, 藻类物质 (C、N、P、二氧化硅) 返回到环境中的有机和无机池中, 主要是溶解的有机和无机物质。呼吸作用, 可以被视为光合作用的逆转, 消耗DO。基础代谢被认为是温度的指数增长函数:

$$BM_x = BMR_x \exp(KTB_x [T - TR_x]) \quad (8.16)$$

其中,

TR<sub>x</sub> 藻类组基础代谢的参考温度<sub>x</sub> (°C)

BMR<sub>x</sub> 藻类组TR<sub>x</sub>的基础代谢率<sub>x</sub> (1/day)

KTB<sub>x</sub> 温度对藻类群代谢的影响<sub>x</sub> (1/°C)

#### 8.1.3.1.3 藻类捕食

在关于浮游动物的数据有限的情况下, 可以为每个藻类群指定一个恒定的捕食率, 这隐含地假定浮游动物生物量是藻类生物量的一个恒定比例。另外, 捕食率也可以与藻类的生物量成正比。利用类似于新陈代谢的温度效应, 捕食率为:

$$PR_x = PRR_x \left( \frac{B_x}{B_{xP}} \right)^{\alpha_p} \exp(KTP_x [T - TP_x]) \quad (8.17)$$

其中，

- TP<sub>x</sub>            x类藻类群捕食的参考温度速率
- B<sub>xP</sub>            被捕食的参考藻类浓度 (g C/m<sup>3</sup>)
- PRR<sub>x</sub>          藻类x组在B<sub>xP</sub>和TP<sub>x</sub>处的参考捕食率
- ap              指数相关系数
- KTP<sub>x</sub>          温度对x类藻类群捕食的影响(1/ °C)

当该模型模拟浮游动物时，根据对浮游动物的利用，估计藻类群x的捕食情况为：

$$PR_x = \frac{PA_z}{KHC_z + PA_z} \cdot RMAX_z \cdot Z_z \cdot \frac{UB_{xz} \cdot B_x}{PA_z} \cdot f(T) \quad (8.18)$$

其中，

- Z<sub>z</sub>            浮游动物z组的浓度(gCm<sup>-3</sup>)
- PA<sub>z</sub>            浮游动物z组可获得的猎物(gCm<sup>-3</sup>)
- KHC<sub>z</sub>          放牧时的猎物密度减半(gCm<sup>-3</sup>)
- BMAX<sub>z</sub>        浮游动物z组的最大比例 ( g猎物C g<sup>-1</sup>浮游动物C day<sup>-1</sup>)
- UB<sub>xz</sub>          浮游动物z组对藻类x组的利用
- f (T)          温度对捕猎的影响

捕食和基础代谢的区别在于这两个过程的最终产物的分布。在捕食过程中，藻物质 (C、N、P和二氧化硅) 被返回环境中的有机和无机池，主要是颗粒有机物，而藻物质被返回溶解的有机和无机物质。还注意到，EFDC+水质模型中的捕食遵循ICM模型 (Cerco和Cole, 1995) 中的原始公式，该模型使用捕食速率常数，总捕食损失与藻类浓度成正比。随后的CE-QUAL-ICM文件Cerco等人 (2000年) ，似乎定义了不依赖于藻类浓度的捕食。

#### 8.1.3.1.4 藻类沉降

沉降过程将藻类从水柱中移除，并沉积在水体的底部。沉降藻类是沉积物床的重要营养来源，在沉积物成岩过程中发挥重要作用。沉降后的藻类生物量在床上进行细菌和生化反应，然后将营养物质释放回水柱中。在EFDC+中，藻类群的沉降速度是一个输入参数，它可以根据类别和区域的不同而变化。

#### 8.1.3.2 藻类 (不动)

EFDC+模拟了无限的藻类和大型植物群，一个类是移动的还是固定的决定了该类是附着在通道底部还是基底上。大型植物和周围植物是常见的固定类。附着和自由浮动类建模技术的主要区别如下：(1)附着藻类表示的面积密度而不是体积浓度，(2)附属类别的可用性会受到流速的影响，和(3)这些类不受水动力运输。

### 8.1.3.2.1 藻类生产 (不动)

在Warwick等人(1997)中可以找到与水质建模相关的周植物动力学的良好描述，并已被用于开发本文档的当前部分。

质量平衡方法被用来模拟附着藻类的生长，C作为固定作物大小或生物量的测量。对于每个模型网格单元，生长方程与自由漂浮藻类的生长方程略有不同(式(8.7)):

$$P_m = PM_m \cdot \min(f_1(N), f_4(V)) \cdot f_2(I) \cdot f_3(T) \cdot f_5(D) \quad (8.19)$$

其中，

- PM<sub>m</sub>            大型藻类在最佳条件下的最大生长速率
- f<sub>1</sub> (N)        次优营养物质浓度的影响 (0 ≤ f<sub>1</sub> ≤ 1)
- f<sub>2</sub> (I)        次优光强的影响(0 ≤ f<sub>2</sub> ≤ 1)
- f<sub>3</sub> (T)        次优温度的影响(0 ≤ f<sub>3</sub> ≤ 1)
- f<sub>4</sub> (V)        速度限制因子(0 ≤ f<sub>4</sub> ≤ 1)
- f<sub>5</sub> (D)        密度依赖的增长率降低因子(0 ≤ f<sub>5</sub> ≤ 1)

在一定水平以上，河流速度通过将上覆的水与细胞周围营养不良的水混合，对周围植物代谢有刺激作用(Whitford and Schumacher, 1964)。另一方面，过量的速度会导致冲刷和生物质的损失。

在该模型中，用速度限制函数表示了次优速度对增长率的影响。模型中可指定速度限制：(1)米凯利斯门顿Michaelis-Menton(或Monod)方程(8.20)，(2)五参数logistic函数方程(8.21)。Monod方程限制了附着的藻类的低速生长，而五参数逻辑函数可以配置为限制低速或高速附着的生长(见图8.4)。

速度限制选项1，米凯尔-门顿(Michaelis-Menton)方程写得如下：

$$f_4(V) = \frac{U}{KMV + U} \quad (8.20)$$

其中，

U 流速 (m/s)

KMV 半饱和度速度 (m/s)

速度限制选项2，五参数逻辑函数如下：

$$f_4(V) = d + \frac{a-d}{\left[1 + \left(\frac{U}{c}\right)^b\right]^e} \quad (8.21)$$

其中，

U 流速 (m/s)

a 在最小值x处的渐近线

b 渐近线a后的斜率

c x翻译

d 在最大值x处的渐近线

e 在渐近线d之前的斜率

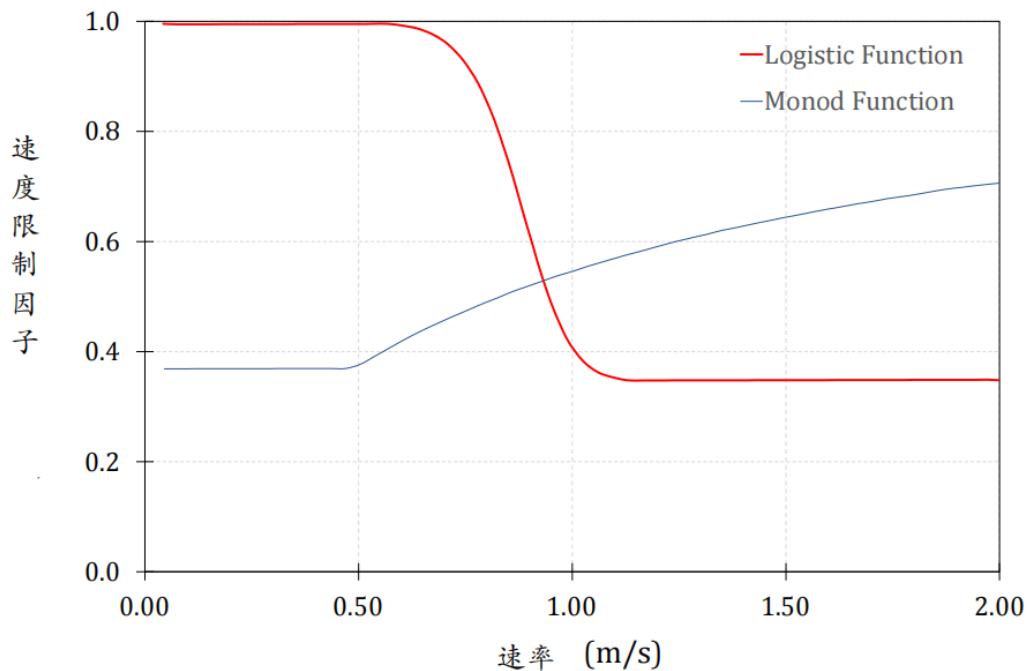


图8.4. 速度限制函数（选项1）的Monod方程，其中 $KMV = 0.25\text{m/s}$ 和 $KMV \text{ min} = 0.15\text{m/s}$ ，并且（选项2）5参数逻辑函数，其中 $a = 1.0$ ， $b = 12.0$ ， $c = 0.3$ ， $d = 0.35$ ，和 $e = 3.0$ （高速是限制）

方程（8.20）中的半饱和速度是最大增长率的一半出现的速度。这种效应类似于营养限制，因为在较低的流速下，藻类基质与上覆水之间的营养交换较低（Runke, 1985），并且随着流速的增加而增加。然而，这个公式在低速或静水时可能太有限了。因此，该函数仅应用于高于最小阈值水平（ $KMV \text{ min}$ ）的速度。当速度在或低于这个较低的水平时，限制函数被应用于最小水平。在这个速度以上，电流在大型植物和周围植物周围产生了一个更陡的扩散梯度（Whitford and Schumacher, 1964）。采用最小公式来结合N、P、速度的限制因素，而最严重的限制因素单独限制了大型植物和周围植物的生长。请注意，方程（8.21）可以通过设置参数 $d$ 大于参数 $a$ 来限制低速，反之亦然，以限制高速导致的生长。在富含营养物质的水域中，低速度不会限制生长。然而，高速速度可能会导致大型藻类的冲刷和分离，从而导致生物量的减少。五参数逻辑函数可以被配置为通过限制在高速下的增长来近似这种减少。

大型植物和周围植物的生长也可能受到合适底物的可用性的限制（Ross和Ultsch, 1980）。大型藻类群落在较低生物量的条件下达到最大的初级生产力（McIntire, 1973年；Pfeifer and McDiffett, 1975年）。长期作物与产量之间的关系采用米凯尔斯-曼顿(Michaelis-Menton)动力学方程，如下所示：

$$f_5(D) = \frac{KBP}{KBP + MAC_m} \quad (8.22)$$

其中，

$KBP$             半饱和生物量水平 ( $\text{g C/m}^2$ )

$MAC_m$         大型藻类生物量水平 ( $\text{g C/m}^2$ )

半饱和生物量水平 $KBP$ 是最大生长速率一半的生物量。Caupp等人（1991）对加利福尼亚州特拉基河系统的一个地区使用了 $KBP$ 值为 $5.0\text{g C/m}^2$ （假设50%的无灰分干质量为C）。公式（8.22）中的函数允许在低生物量水平下的初级生产力最高，随着群落矩阵的扩大，初级生产力率下降。

### 8.1.3.2.2 浮游动物生长

从EFDC+ 11开始，固定或附着的藻类的动力学从床层通过模型层向上生长。这一特性从最初附着并仅存在于底层的水下大型植物的建模扩展到悬浮的冠层，如悬浮的水产养殖场。为了进一步实施，将考虑大型植物生长及其密度对流体动力学的反馈。

大型植物冠层以茎的密度和尺寸为特征。指定了生物量浓度的分层阈值。如果层中的浓度大于阈值浓度，而上层的浓度小于相同的阈值浓度，则通过将层的生物量移动到上述层来实现植物向上生长。树冠的高度的计算方法为：

$$HM = \min \left( \frac{\sum_{K=1}^{KC} BM}{BM_{Lim}}, HM_{Max} \right) \quad (8.23)$$

其中HM为冠层高度，HMMax为冠层高度的最大值，BMLim为生物量浓度的阈值。

此外，大型植物遮荫的模型是通过使光衰减作为大型植物浓度的函数。

### 8.1.3.3 浮游动物

浮游动物被认为是不移动的，只能通过平流和分散来运输。模型中浮游动物的来源和汇为：

- 1.正在放牧
- 2.基础代谢
- 3.死亡率
- 4.捕食者
- 5.外部的负荷

每个浮游动物组都用一个相同的生产方程来表示。描述这一过程的动力学方程为：

$$\frac{\partial Z_z}{\partial t} = (G_z - BM_z - D_z - PR_z) Z_z + \frac{WZ_z}{V} \quad (8.24)$$

其中，

- |        |                                  |
|--------|----------------------------------|
| $Z_z$  | 浮游动物z组的浓度(gCm <sup>-3</sup> )    |
| $t$    | 时间 (day)                         |
| $G_z$  | 浮游动物z群的放牧率(day <sup>-1</sup> )   |
| $BM_z$ | 浮游动物z组的基础代谢率(day <sup>-1</sup> ) |



D <sub>z</sub>	浮游动物z组的死亡率(day <sup>-1</sup> )
PR <sub>z</sub>	浮游动物z类群的捕食率(day <sup>-1</sup> )
WZ <sub>z</sub>	浮游动物z群的外部负荷(gC day <sup>-1</sup> )
V	模型细胞体积(m <sup>3</sup> )

### 8.1.3.3.1 浮游动物生长

浮游动物的生长速率被认为是食物和温度的函数。浮游动物的食物包括浮游植物和粪便作为POCs。浮游动物的同化效率是在假设所有被放牧的猎物都被同化的情况下应用的。

$$G_z = \frac{PA_z}{KHC_z + PA_z} \cdot RMAX_z \cdot f(T) \quad (8.25)$$

其中,

PA <sub>z</sub>	浮游动物z组可获得的猎物(gCm <sup>-3</sup> )
KHC <sub>z</sub>	放牧时的猎物密度减半(gCm <sup>-3</sup> )
BMAX <sub>z</sub>	浮游动物z组的最大比例 ( g猎物C g <sup>-1</sup> 浮游动物C day <sup>-1</sup> )
f (T)	温度对捕猎的影响
可用猎物	

浮游动物通常被认为以浮游植物和POC为食。为了计算每个浮游动物组的浮游植物可用猎物, 定义了一个阈值浓度CT<sub>z</sub>, 在这个阈值下猎物不被捕食。浮游植物群x作为浮游动物群z的食物来源的部分可以确定为:

$$BA_{xz} = Max(B_{xz} - CT_z, 0) \quad (8.26)$$

其中,

BA <sub>xz</sub>	浮游植物群x可用于浮游动物群z的部分(gCm <sup>-3</sup> )
CT <sub>z</sub>	浮游动物z组的阈值浓度(gCm <sup>-3</sup> )

当该模型模拟了多个浮游动物群体, 如微型浮游动物和中浮游动物时, 微型浮游动物就成为了中浮游动物的重要猎物。在这个场景中, EFDC+允许用户将所有浮游动物分为两组; 捕食者和猎物。浮游动物捕食者群体的总可用猎物, 包括来自POC的食物来源的一般公式表示为:

$$PA_z = UL_z \cdot LPOCA_z + UR_z \cdot RPOCA_z + \sum UB_{xz} \cdot BA_{xz} + UZ_z \cdot ZA \quad (8.27)$$

PA <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z的猎物(gCm <sup>-3</sup> )
-----------------	---------------------------------

UL <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z组对LPOC的利用
UR <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z组对RPOC的利用
UB <sub>xz</sub>	浮游动物捕食者z对浮游植物群的利用
LPOCA <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z组可用的LPOC(gCm <sup>-3</sup> )
RPOCA <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z组可用的RPOC(gCm <sup>-3</sup> )
BA <sub>xz</sub>	浮游植物群x可用于浮游动物捕食者群z (gCm <sup>-3</sup> )
ZA	浮游动物猎食生物量(gCm <sup>-3</sup> )
UZ <sub>z</sub>	浮游动物捕食者z组对浮游动物猎物的利用

一个浮游动物猎物组的总可用猎物可以简单地通过去除浮游动物猎物的生物量项来获得。

$$PA_z = UL_z \cdot LPOCA_z + UR_z \cdot RPOCA_z + \sum UB_{xz} \cdot BA_{xz} \quad (8.28)$$

温度影响

温度对捕食的影响可以描述为：

$$f(T) = \begin{cases} \exp(-KT_{g1} \cdot (T - T_{opt1})^2), & T \leq T_{opt1} \\ 1, & T_{opt1} < T < T_{opt2} \\ \exp(-KT_{g2} \cdot (T - T_{opt2})^2), & T \geq T_{opt2} \end{cases} \quad (8.29)$$

其中，

KT<sub>g1</sub> 温度低于最优温度对放牧的影响(°C<sup>-2</sup>)

KT<sub>g2</sub> 温度优于最优温度对放牧的影响(°C<sup>-2</sup>)

T<sub>opt</sub> 放牧的最佳温度(°C)

### 8.1.3.3.2 基础代谢

浮游动物的基础代谢表现为温度的指数增长函数：

$$BM_z = BMR_z \cdot \exp(KTB_z \cdot (T - T_{rz})) \quad (8.30)$$

其中，

T<sub>rz</sub> 浮游动物z组代谢的参考温度(°C)

BMR<sub>z</sub> 浮游动物z组在温度T<sub>rz</sub>下的代谢速率 (day<sup>-1</sup>)

KT<sub>Bz</sub> 温度对浮游动物z组代谢的影响 (°C<sup>-1</sup>)

### 8.1.3.3.3 死亡率

浮游动物在低浓度的DO时容易死亡。死亡项在阈值下为零，并随着DO的减小而增加。其死亡率的计算方法为：

$$D_z = DZERO_z \left(1 - \frac{DO_{ref}}{DOCRIT_z}\right) \quad (8.31)$$

其中，

$D_z$  浮游动物z组的死亡率(day-1)

$DZERO_z$  零DO浓度下浮游动物群z组的死亡率(day-1)

$DOCRIT_z$  浮游动物死亡时发生的DO阈值(gDOM-3)

$DO_{ref}$  当 $DO < DOCRIT$ 时的DO浓度，否则为零(gDOM-3)

#### 8.1.3.3.4 浮游动物捕食

浮游动物可以被模型中没有表现出来的高级捕食者吃掉（如水母、鳍状鱼）。浮游动物的捕食是用温度的指数函数计算的：

$$PR_z = PRR_z \cdot \exp(KTP_z \cdot (T - Tr_z)) \quad (8.32)$$

其中，

$Tr_z$  浮游动物z组代谢的参考温度(°C)

$PRR_z$  温度 $Tr_z$ 下浮游动物群z的捕食率 (day-1)

$KTP_z$  温度对z组浮游动物捕食的影响 (°C<sup>-1</sup>)

#### 8.1.3.4 有机碳 (OC)

EFDC+模拟了OC的三个状态变量：耐火颗粒、不稳定颗粒和溶解颗粒。

##### 8.1.3.4.1 颗粒有机碳 (POC)

对于LPOC和RPOC，模型中包含的源和接收器为（图8.1）：

- 1.藻类的死亡和被捕食
- 2.浮游动物的死亡和捕食
- 3.由浮游动物生长引起的吸收
- 4.溶解到DOC
- 5.沉降

## 6.外部负载

LPOC和RPOC的控制方程为：

$$\frac{\partial RPOC}{\partial t} = \sum_{algae} FCRP_x \cdot D_x \cdot B_x + \sum_{zoopl} \left( FCRDZ_z \cdot D_z + FCRPZ_z \cdot PR_z - \frac{UR_z \cdot RPOC}{PA_z} \cdot R_z \right) \cdot Z_z - K_{RPOC} \cdot RPOC + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{RP} \cdot RPOC) + \frac{WRPOC}{V} \quad (8.33)$$

$$\frac{\partial LPOC}{\partial t} = \sum_{algae} FCLP_x \cdot D_x \cdot B_x + \sum_{zoopl} \left( FCLDZ_z \cdot D_z + FCLPZ_z \cdot PR_z - \frac{UL_z \cdot LPOC}{PA_z} \cdot R_z \right) \cdot Z_z - K_{LPOC} \cdot LPOC + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{LP} \cdot LPOC) + \frac{WLPOC}{V} \quad (8.34)$$

其中，

RPOC	RPOC的浓度 (g C/m <sup>3</sup> )
LPOC	LPOC的浓度 (g C/m <sup>3</sup> )
D <sub>x</sub>	z类藻类 (以前) 的死亡率(day <sup>-1</sup> )
FCRP <sub>x</sub>	藻类x以RPOC产生的死亡 (或提前) C的比例
FCLP <sub>x</sub>	藻类x以LPOC产生的死亡 (或提前) C的比例
FCRDZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生为RPOC的死亡C的比例
FCLDZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生为LPOC的死亡C的比例
FCRPZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生为RPOC的前C的部分
FCLPZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生的前C部分为LPOC
UR <sub>z</sub>	浮游动物z组对RPOC的利用
UL <sub>z</sub>	浮游动物z组对LPOC的利用
K <sub>RPOC</sub>	RPOC的溶解速率(1/day)
K <sub>LPOC</sub>	LPOC的溶解速率(1/day)
WS <sub>RP</sub>	RPOC的沉降速度(m/day)
WS <sub>LP</sub>	LPOC的沉降速度(m/day)
WRPOC	RPOC的外部负载(g C/day)
WLPOC	LPOC的外部负载(g C/day)

浮游动物群z的总C吸收率是最大配给R<sub>z</sub>及其生物量的乘积。

定量  $R_z$  (g猎物C g<sup>-1</sup>浮游动物C day<sup>-1</sup>) 可以计算为:

$$R_z = \frac{PA_z}{KHC_z + PA_z} \cdot RMAX_z \cdot f(T) \quad (8.35)$$

其中,

$PA_z$  浮游动物z组可获得的猎物(gCm<sup>-3</sup>)

$KHC_z$  放牧时的猎物密度减半(gCm<sup>-3</sup>)

$RMAX_z$  浮游动物z组的最大比例g猎物C

$f(T)$  温度对放牧的影响

#### 8.1.3.4.2 溶解有机碳 (DOC)

EFDC+中包含的DOC的源和汇为 (图8.2) ;

1.藻类排泄 (渗出)、死亡和捕食

2.浮游动物的基础代谢和死亡

3.从LPOC和RPOC中溶解

4.DOC的异养呼吸 (分解)

5.反硝化作用

6.外部负载

DOC的变化率可计算为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial DOC}{\partial t} = & \sum_{algae} \left[ FCD_x + (1 - FCD_x) \left( \frac{KHR_x}{KHR_x + DO} \right) \right] \cdot BM_x \cdot B_x + \sum_{algae} FCDP_x \cdot D_x \cdot B_x \\ & + \sum_{zoopl} (BM_z + FCDDZ \cdot D_z + FCDPZ \cdot PR_z) \cdot Z_z + K_{RPOC} \cdot RPOC \\ & + K_{LPOC} \cdot LPOC - K_{HR} \cdot DOC - Denit \cdot DOC + \frac{WDOC}{V} \end{aligned} \quad (8.36)$$

其中,

DOC DOC浓度 (g C/m<sup>3</sup>)

FCD<sub>x</sub> 藻x组在无限DO浓度下的基础代谢分数为DOC

KHR<sub>x</sub> x组对DOC排泄的DO的半饱和度常数 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>)

DO DO浓度 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>)

FCDP<sub>x</sub> 藻类x产生DOC的死亡 (或提前) C的比例

FCDDZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生DOC的死亡C的比例
FCDPZ <sub>z</sub>	浮游动物z组产生DOC的前C部分
KHR	DOC的异养呼吸速率(1/day)
Denit	反硝化速率(1/day)
BFDOC	仅在底层的DOC的底栖生物通量(g C/m <sup>2</sup> /day)
WDOC	DOC的外部负荷(g C/day)

本节的其余部分解释了方程式 (8.32) - (8.35) 中的每一项。

### 8.1.3.4.3藻类对有机碳(OC)的影响

#### 8.1.3.4.3.1基础代谢

由呼吸和排泄组成的基础代谢将藻类物质 (C、N、P和SiO<sub>2</sub>) 返回环境。通过基础代谢造成的藻类生物量损失计算如下:

$$\frac{\partial B_x}{\partial t} = -BM_x B_x \quad (8.37)$$

方程 (8.36) 表明, 由于基础代谢导致的藻类生物量的总损失与环境DO浓度无关。在这个模型中, 假设呼吸和排泄之间的总损失分布是恒定的, 只要有足够的DO让藻类呼吸。在这种情况下, 呼吸和排泄造成的损失可以写成:

$$FCD_x)BM_x B_x : \text{respiration} \quad (8.38)$$

$$FCD_x)BM_x B_x : \text{excretion} \quad (8.39)$$

其中, FCD<sub>x</sub>是一个介于0和1之间的常数。

尽管由于基础代谢导致的藻类生物量的总损失与O无关 (方程 (8.37) ), 但呼吸和排泄之间的总损失分布是O依赖性的, 因为藻类在没有O的情况下无法呼吸。当O水平高时, 呼吸占总损失的很大一部分。当DO变得稀缺时, 排泄物就占主导地位。因此, 方程 (8.38) 表示仅在高O水平下呼吸造成的损失。通常, 方程 (8.38) 可以分解为两个分数, 作为DO可用性的函数:

$$(1 - FCD_x) \left( \frac{DO}{KHR_x + DO} \right) BM_x B_x : \text{respiration} \quad (8.40)$$

$$(1 - FCD_x) \left( \frac{KHR_x}{KHR_x + DO} \right) BM_x B_x : \text{excretion} \quad (8.41)$$

其中， $KHR_x$ 为代谢溶解氧系数(g/m<sup>3</sup>O<sub>2</sub>)。

方程 (8.40) 表示藻类生物量因呼吸而损失，方程 (8.41) 表示DO浓度不足导致的额外排泄。参数 $KHR_x$ 在方程 (8.36) 中被定义为藻类DOC排泄的DO的半饱和常数，在方程 (8.41) 中也可以被定义为藻呼吸的DO的一半饱和常数。

结合方程 (8.39) 和 (8.41) ，排泄引起的总损失可计算为

$$\left[ FCD_x + (1 - FCD_x) \left( \frac{KHR_x}{KHR_x + DO} \right) \right] BM_x B_x \quad (8.42)$$

方程 (8.40) 和 (8.42) 结合起来给出了由于基础代谢引起的藻类生物量的总损失。方程中分数 $FCD_x$ 的定义在方程 (8.42) 中变得明显，即在无限DO浓度下以DOC形式渗出的基础代谢分数。在零氧气水平下，由于基础代谢而产生的总损失是通过排泄产生的，而与 $FCD_x$ 无关。

呼吸的最终C产物主要是二氧化碳 (CO<sub>2</sub>) ，这是本模型中未考虑的一种无机形式，而排泄的最终C产品主要是DOC。因此，方程 (8.36) 中出现的方程 (8.42) 表示排泄对DOC的贡献，并且在方程 (8.33) 和 (8.34) 中没有来自藻类基础代谢的POC的源项。

尽管为了与最初的CE-QUAL-ICM配方保持一致而加入了这种通用配方 (Cerco和Cole, 1995) ，但ICM的大多数后续应用都简化了已发表的DOC和DO方程或指定的输入参数中的基础代谢，这些参数有效地将 $KHR_x$ 和 $FCD_x$ 设置为零 (见表8.2) ，这导致将DOC方程简化为：

$$\frac{\partial DOC}{\partial t} = \sum_{algae} FCDP_x PR_x B_x + K_{RPOC} RPOC + K_{LPOC} LPOC - K_{HR} DOC - Denit\ DOC + \frac{WDOC}{V} \quad (8.43)$$

表8.2. ICM基础代谢配方及参数

Study	$FCD_x$ and $KHR_x$ in DOC Equation	$FCD_x$ and $KHR_x$ in from DO Equation
Cerco and Cole (1995) (Chesapeake Bay)	General	General
Bunch et al. (2000) (San Juan Bay, PR)	General (used $FCD = 0$ , $KHR_x = 0.5$ )	General (used $FCD = 0$ , $KHR_x = 0.5$ )
Cerco et al. (2000) (Florida Bay)	No $BM_x$ source in equation, implies $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$	Consistent with $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$
Cerco et al. (2002) (Chesapeake Bay, Trib. Refinements)	No $BM_x$ source in equation, implies $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$	Consistent with $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$
Cerco et al. (2004) (Lake Washington)	Equation implies $KHR_x = 0$ (used $FCD_x = 0$ )	Consistent with $KHR_x = 0$ (used $FCD_x = 0$ )
Tillman et al. (2004) (St. Johns River)	No $BM_x$ source in equation, implies $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$	Consistent with $FCD_x = 0$ , $KHR_x = 0$

### 8.1.3.4.3.2 捕食

藻类通过捕食作用产生OC。浮游动物通过放牧、同化、呼吸和排泄吸收并重新分配藻类C。在模型中不包括浮游动物的情况下，通过方程 (8.33) 至 (8.36) 中的经验分布系数模拟藻类C通过浮游动物捕食的路径； $F_{CRP_x}$ 、 $F_{CLP_x}$ 和 $F_{CDP_x}$ 。对于每一类藻类来说，这三个捕食分数的总和应该是统一的。

### 8.1.3.4.4 异养呼吸和溶解

RPOC和LPOC方程 (8.33) 和 (8.36) 包含表示颗粒材料溶解为溶解材料的衰变项。这些项作为来源出现在方程 (8.36) 中。DOC方程 (8.36) 中的第三个汇项表示DOC的异养呼吸。氧异养呼吸是DO的一种功能；DO越低，呼吸项就变得越小。因此，异养呼吸速率是用DO的Monod函数表示的；

$$K_{HR} = \left( \frac{DO}{KHOR_{DO} + DO} \right) K_{DOC} \quad (8.44)$$

其中，

$KHOR_{DO}$ 是DO的氧呼吸半饱和常数 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>)，以及

$K_{DOC}$ 是在无限DO浓度 (1/天) 下DOC的异养呼吸速率。

溶解和异养呼吸速率取决于碳质基质的可用性和异养活性。藻类产生不稳定的C，为异养活动提供燃料；溶解和异养呼吸不需要藻类的存在，并且可以完全由外部C输入提供燃料。在



该模型中，藻类生物量作为异养活动的替代物，被纳入溶解和异养呼吸速率的公式中。这些速率的公式需要藻类依赖性和藻类非依赖性速率的规范：

$$K_{RPOC} = \left( K_{RC} + K_{RCalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.45)$$

$$K_{LPOC} = \left( K_{LC} + K_{LCalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.46)$$

$$K_{DOC} = \left( K_{DC} + K_{DCalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{MIN}(T - TR_{MIN})) \quad (8.47)$$

$K_{RC}$ 是RPOC的最小溶解速率（1/天），

$K_{LC}$ 是LPOC的最小溶解速率（1/天），

$K_{DC}$ 是DOC的最小呼吸速率（1/天），

$K_{RCalg}$ 、 $K_{LCalg}$ 是分别将RPOC和LPOC的溶解与藻类生物量（1/天；每gC/m<sup>3</sup>）相关的常数，

$K_{DCalg}$ 是将呼吸作用与藻类生物量相关的常数（1/天/gC/m<sup>3</sup>），

$K_{THDR}$ 是温度对聚甲醛水解的影响（1/°C），

$TR_{HDR}$ 是聚甲醛水解的参考温度(°C)，

$K_{TMIN}$ 是温度对溶解有机物矿化的影响（1/°C），以及

$TR_{MIN}$ 是溶解有机物矿化的参考温度(°C)。

方程（8.45）至（8.47）具有将速率与温度相关联的指数函数。

在EFDC+中，术语“水解”被定义为POM转化为溶解的有机形式的过程，因此包括颗粒C的溶解和颗粒P和N的水解。因此，参数 $K_{THDR}$ 和 $TR_{HDR}$ ，也用于温度对颗粒P水解的影响

（方程（8.58）和（8.59））和N水解的影响。术语“矿化”被定义为溶解有机物转化为溶解无机物的过程，因此包括DOC的异养呼吸和DOP和DON的矿化。因此， $K_{TMIN}$ 和 $TR_{MIN}$ 参数也用于温度对溶解P（8.60）和N（8.70）矿化的影响。

#### 8.1.3.4.5反硝化对溶解有机碳(DOC)的影响

当O从天然系统中耗尽时，有机物通过交替电子受体的还原而被氧化。热力学上，在没有O的情况下还原的第一个替代受体是NO<sub>3</sub><sup>-</sup>。根据Stumm等人（1970），大量异养厌氧菌对NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的还原被称为反硝化作用，该反应的化学计量为：



方程（8.35）中倒数第二项说明了脱氮对DOC的影响。模型中的反硝化动力学为一级动力学：

$$\text{Denit} = \left( \frac{K\text{HOR}_{\text{DO}}}{K\text{HOR}_{\text{DO}} + \text{DO}} \right) \left( \frac{\text{NO}_3}{K\text{HDN}_N + \text{NO}_3} \right) A\text{ANOX} \cdot K_{\text{DOC}} \quad (8.49)$$

其中，

KHOR<sub>DO</sub>是DO的反硝化半饱和常数（g O/m<sup>3</sup>），

KHD<sub>NN</sub>是NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的脱氮半饱和常数（g N/m<sup>3</sup>），以及

AANOX是脱氮速率与含氧DOC呼吸速率的比值。

在方程（8.49）中，对DOC呼吸速率K<sub>DOC</sub>进行了修改，使得只有当NO<sub>3</sub><sup>-</sup>自由可用且DO耗尽时，才能通过脱氮进行显著分解。AANOX的比例使缺氧呼吸比有氧呼吸慢。注意，方程（8.47）中定义的K<sub>DOC</sub>包括温度对反硝化作用的影响。

### 8.1.3.5磷(P)

EFDC+有四个P的状态变量：三种有机形式的RPOP、LPOP和DOP，以及一种无机形式的总磷（PO<sub>4</sub>t），它表示水相中溶解的磷酸盐（PO<sub>4</sub>d）和吸附的磷酸盐（PO<sub>4</sub>p）的总和，但不包括藻类细胞中的PO<sub>4</sub><sup>-3</sup>。

#### 8.1.3.5.1颗粒有机磷(POP)

对于RPOP和LPOP，包括在EFDC+中的源和汇是（图8.2）；

- 1.藻类的基础代谢、死亡和捕食，
- 2.浮游动物的死亡和捕食，
- 3.动物对浮游生物生长的吸收，
- 4.对DOP的溶解，
- 5.安置，以及

6.外部负载。

RPOP和LPOP的动力学方程为：；

$$\begin{aligned} \frac{\partial RPOP}{\partial t} = & \sum_{algae} (FPR_x \cdot BM_x + FPRP_x \cdot D_x) \cdot APC \cdot B_x + \sum_{zoopl} FPRDZ_z \cdot D_z \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & + \sum_{zoopl} (FPRPZ_z \cdot PR_z - \frac{UR_z \cdot RPOP}{PA_z} \cdot R_z) \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & - K_{RPOP} \cdot RPOP + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{RP} \cdot RPOP) + \frac{WRPOP}{V} \end{aligned} \quad (8.50)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial LPOP}{\partial t} = & \sum_{algae} (FPL_x \cdot BM_x + FPLP_x \cdot D_x) \cdot APC \cdot B_x + \sum_{zoopl} FPLDZ_z \cdot D_z \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & + \sum_{zoopl} (FPLPZ_z \cdot PR_z - \frac{UL_z \cdot LPOP}{PA_z} \cdot R_z) \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & - K_{LPOP} \cdot LPOP + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{LP} \cdot LPOP) + \frac{WLPOP}{V} \end{aligned} \quad (8.51)$$

其中，

RPOP是RPOP的浓度 (g P/m<sup>3</sup>) ，

LPOP是LPOP的浓度 (g P/m<sup>3</sup>) ，

FPR<sub>x</sub>是由藻类群x产生的代谢P的分数，作为RPOP，

FPL<sub>x</sub>是作为LPOP产生的藻类组x代谢的P的部分，

FPRP<sub>x</sub>是藻类组x作为RPOP产生的死亡（或被捕食）P的分数，

FPLP<sub>x</sub>是藻类组x作为LPOP产生的死亡（或被捕食）P的分数，

FPRDZ<sub>z</sub>是浮游动物组z产生的作为RPOP的死亡P的分数，

FPLDZ<sub>z</sub>是由浮游动物组z产生的作为LPOP的死亡P的分数，

FPRPZ<sub>z</sub>是浮游动物组z作为RPOP产生的捕食磷的分数，

FPLPZ<sub>z</sub>是浮游动物组z作为LPOP产生的捕食磷的分数，

APC是所有藻类组的平均藻类P-C比 (g P/gC) ，

APC<sub>z</sub>是浮游动物的磷碳比 (g p/gC) ，

K<sub>RPOP</sub>是RPOP的水解速率 (1/天) ，

K<sub>LPOP</sub>是LPOP的水解速率 (1/天) ，

WRPOP是RPOP的外部负荷 (g P/天) ， 以及

WLPOP是LPOP的外部负荷 (g P/天)。

### 8.1.3.5.2溶解有机磷(DOP)

模型中包括的DOP的来源和汇为 (图8.2)；

- 1.藻类的基础代谢、死亡和捕食，
- 2.浮游动物的基础代谢、死亡和捕食，
- 3.解散RPOP和LPOP，
- 4.矿化至 $PO_4^{-3}$ ，以及
- 5.外部荷载。

描述这些过程的动力学方程是：

$$\begin{aligned} \frac{\partial DOP}{\partial t} = & \sum_{algae} (FPD_x \cdot BM_x + FPDP_x \cdot D_x) \cdot APC_x \cdot B_x + \sum_{zoopl} FPDBZ_z \cdot BM_z \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & + \sum_{zoopl} (FPDDZ_z \cdot D_z + FPDPZ_z \cdot PR_z) \cdot Z_z \cdot APC_z \\ & + K_{RPOP} \cdot RPOP + K_{LPOP} \cdot LPOP - K_{DOP} \cdot DOP + \frac{WDOP}{V} \end{aligned} \quad (8.52)$$

DOP是DOP的浓度 (g P/m<sup>3</sup>)，

FPD<sub>x</sub>是由藻类组x产生的作为DOP的代谢P的部分，

FPDP<sub>x</sub>是藻类组x作为DOP产生的死亡 (或被捕食) P的分数，

FPDBZ<sub>z</sub>是由浮游动物组z产生的作为DOP的代谢P的分数，

FPDDZ<sub>z</sub>是由浮游动物组z产生的作为DOP的死亡P的分数，

FPDPZ<sub>z</sub>是由浮游动物组z以DOP形式产生的捕食磷的分数，

KDOP是DOP的矿化率 (1/天)，以及

WDOP是DOP的外部负荷 (g P/天)。

### 8.1.3.5.3总水相磷酸盐

对于同时包括水相中的PO<sub>4d</sub>和PO<sub>4p</sub>的PO<sub>4t</sub>，模型中包括的源和汇为；

- 1.藻类的基础代谢、捕食和吸收，
- 2.浮游动物的基础代谢、死亡和捕食，
- 3.来自DOP的矿化作用，
- 4.PO<sub>4</sub><sup>-3</sup>的沉淀，

5.仅底层PO4d的沉积物-水交换，以及

6.外部负载。

描述这些过程的动力学方程是：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(PO4p+PO4d) = & \sum_{algae} (FPI_x BM_x + FPIP_x D_x - P_x) APC \cdot B_x + K_{DOP} \cdot DOP \\ & + \sum_{zoopl} (FPIBZ_z \cdot BM_z + FPIDZ_z \cdot D_z + FPIPZ_z \cdot PR_z) Z_z \cdot APC_z \quad (8.53) \\ & + \frac{\partial}{\partial Z}(WS_{TSS} \cdot PO4p) + \frac{BFPO4d}{\Delta Z} + \frac{WPO4p}{V} + \frac{WPO4d}{V} \end{aligned}$$

其中，

PO4t为PO4d+PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>] (g P/m<sup>3</sup>) ，

PO4d是以P (g P/m<sup>3</sup>) 表示的溶解磷酸盐，

PO4p是以P (g P/m<sup>3</sup>) 表示的被吸附的磷酸盐，

FPI<sub>x</sub>是由藻类群x产生的代谢磷的部分，作为无机磷，

FPIP<sub>x</sub>是藻类群x作为无机磷产生的死亡（或被捕食）磷的分数，

FPIBZ<sub>z</sub>是z组浮游动物以PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>形式产生的代谢磷的分数，

FPIDZ<sub>z</sub>是z组浮游动物因死亡而以PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>的形式产生的磷的分数，

FPIPZ<sub>z</sub>是z组浮游动物因捕食而以PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>形式产生的磷的分数，

WS<sub>TSS</sub>是由流体动力学模型提供的悬浮固体的沉降速度 (m/天) ，

BFPO4d是PO<sup>-3</sup><sub>4</sub> (g P/m<sup>2</sup>/天) 的沉积物-水交换通量，仅适用于底层，以及

WPO4t是PO4t的外部负荷 (g P/天) 。

在方程 (8.53) 中，如果选择TAM作为吸附位点的测量，则TSS-WS<sub>TSS</sub>的沉降速度被颗粒金属WS<sub>s</sub>的沉降速度所取代。本节的其余部分解释了方程 (8.50) 至 (8.53) 中的每个项。PO4t方程的替代形式将在下一段中讨论。

#### 8.1.3.5.4总磷酸盐(PO4T)

悬浮和底部沉积物颗粒（粘土、淤泥和金属氢氧化物）在河流和河口水中吸附和解吸PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>。这种吸附-解吸过程缓冲了水柱中PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>的浓度，并增强了PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>从外部来源的传输（Carritt和Goodgal, 1954; Froelich, 1988）。为了缓解由于PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>的吸附-解吸引起的计算复杂性，PO4d和PO4p被作为一个单一的状态变量处理和传输。因此，模型PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>状态变量PO4t被定

义为PO4d和PO4p的总和（方程（8.53）），并且每个部分的浓度通过其总和的平衡分配来确定。

在ICM中，根据切萨皮克湾主系统监测数据中观察到的现象，考虑了PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>对包括Fe和Mn在内的金属颗粒物种的吸附，在秋季复氧事件期间，切萨皮克海湾缺氧底层水中的PO4p迅速耗尽（Cerco和Cole，1994）。他们的假设是，底层水的再氧化导致溶解的Fe和Mn沉淀，PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>吸附到新形成的金属颗粒上并迅速沉降到底部。ICM中的一个状态变量TAM被定义为充当吸附位点的所有金属的总和，并且TAM通过平衡分配系数被分配为颗粒和溶解部分。然后假设PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>仅吸附到TAM的颗粒部分。

在处理ICM中的PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>吸附时，强调金属氢氧化物的颗粒部分是缺氧条件下底层水中的吸附位点。磷是一种高度颗粒反应性元素，溶液中的PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>与各种表面快速反应，被颗粒Froelich吸收并从中释放（1988）。本模型有两种选择，SED和TAM，作为PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>吸附位点的测量，溶解和吸附的组分通过其总和的平衡分配来确定，作为SED或TAM浓度的函数：

$$\begin{aligned}
 PO4p &= \left( \frac{K_{PO4p}SORPS}{1 + K_{PO4p}SORPS} \right) (PO4p + PO4d) \\
 PO4d &= \left( \frac{1}{1 + K_{PO4p}SORPS} \right) (PO4p + PO4d) \quad (8.54) \\
 SORPS &= SED \text{ or } TAM_p
 \end{aligned}$$

其中，

$K_{PO4p}$ 是将PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>吸附与SED（每g/m<sup>3</sup>）或颗粒TAM（每mol/m<sup>3</sup>）浓度相关的经验系数，

SED是总粘性沉积物浓度（mg/l），以及

TAM<sub>p</sub>是颗粒TAM（mol/m<sup>3</sup>）。

根据方程（8.53），分配系数的定义如下：

$$K_{PO4p} = \frac{PO4p}{PO4d} \frac{1}{SED} \quad (8.55)$$

$$K_{PO4p} = \frac{PO4p}{PO4d} \frac{1}{TAM_p} \quad (8.56)$$

其中 $K_{PO4p}$ 的含义变得明显，即每单位浓度的SED或颗粒TAM的PO4p与PO4d的比率（即每单位可用的吸附位点）。

### 8.1.3.5.5 藻类磷碳比(APC)

藻类生物量以每体积水的C为单位进行量化。为了表达藻类生物量对磷和氮的影响，必须指定藻类生物量中磷与碳和氮与碳的比例。尽管这些比率的全球平均值是众所周知的 (Redfield, 1963)，但藻类组成的变化尤其是作为营养物质可用性的函数。随着磷和氮的稀缺，藻类会调整其组成，从而产生碳质生物量所需的这些重要营养素数量较少 (Di-Toro, 1980)。Cerco和Cole (1993) 对切萨皮克湾上游表面的现场数据进行了检查，结果表明，氮碳化学计量的变化很小，因此使用了恒定的藻类氮碳比ANC<sub>x</sub>。然而，观察到藻类磷碳比的巨大变化，表明藻类对环境磷浓度的适应 (Cerco和Cole, 1993)；当环境磷充足时，藻类磷含量高，而当环境磷稀缺时，藻类P含量低。因此，在模型制定中使用了可变藻类磷碳比APC。通过对现场数据中观察到的趋势的经验近似来描述所有藻类群APC的平均比率 (Cerco和Cole, 1994)：

$$APC = (CP1_{prm} + CP2_{prm} \exp(-CP3_{prm} PO4d))^{-1} \quad (8.57)$$

其中，

CP1<sub>prm</sub>是最小的C-to-P比率 (gC/g P)，

CP2<sub>prm</sub>是最小和最大碳磷比 (gC/g P) 之间的差值，以及

CP3<sub>prm</sub>是溶解磷酸盐浓度对碳磷比 (每克磷/立方米) 的影响。

#### 8.1.3.5.6 藻类对磷的影响

方程 (8.50) 至 (8.53) 中的总和项说明了藻类对磷的影响。基础代谢 (呼吸和排泄) 和捕食都被考虑在内，因此被公式化，有助于有机和无机磷。也就是说，基础代谢的总损失 (BM<sub>x</sub> · APC · B<sub>x</sub>) 使用分布系数 (FPR<sub>x</sub>、FPL<sub>x</sub>、FPD<sub>x</sub>和FPI<sub>x</sub>) 进行分布。当模型不包括浮游动物时，捕食总损失 (PR<sub>x</sub> · APC · B<sub>x</sub>) 也使用分布系数 (FPRP<sub>x</sub>、FPLP<sub>x</sub>、FPDP<sub>x</sub>和FPIP<sub>x</sub>) 进行分布。基础代谢的四个分布系数之和应该是一致的，捕食的和也是一致的。藻类吸收溶解的 PO<sup>-3</sup><sub>4</sub> 进行生长，藻类对 PO<sup>-3</sup><sub>4</sub> 的吸收用方程 (8.52) 中的 (∑P<sub>x</sub> · APC · B<sub>x</sub>) 表示。

#### 8.1.3.5.7 矿化和水解

方程 (8.50) 和 (8.51) 的RHS上的第三项表示颗粒有机磷 (POP) 的水解，方程 (8.52) 中的最后一项表示DOP的矿化。有机磷的矿化是由细菌Chr'ost和Overbeck (1987) 以及藻类 Boni等人 (1989) 释放的核苷酸酶和磷酸酶介导的。由于藻类本身会释放酶，并且细菌丰度与



藻类生物量有关，因此在模型公式中，有机磷矿化率与藻生物量有关。这种机制包括在模型配方中，其中藻类刺激一种酶的产生，当 $PO_4^{-3}$ 稀缺时，该酶将有机磷矿化为 $PO_4^{-3}$ （Boni等人，1989；Chr'ost和Overbeck，1987年）。包括这些过程在内的水解和矿化速率的配方为：

$$K_{RPOP} = \left( K_{RP} + \left( \frac{KHP}{KHP + PO4d} \right) K_{RPalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.58)$$

$$K_{LPOP} = \left( K_{LP} + \left( \frac{KHP}{KHP + PO4d} \right) K_{LPalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.59)$$

$$K_{DOP} = \left( K_{DP} + \left( \frac{KHP}{KHP + PO4d} \right) K_{DPalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{MIN}(T - TR_{MIN})) \quad (8.60)$$

其中，

$K_{RP}$ 是RPOP的最小水解速率（1/天），

$K_{LP}$ 是LPOP的最小水解速率（1/天），

$K_{DP}$ 是DOP的最小矿化率（1/天），

$K_{RPalg}$ 和 $K_{LPalg}$ 是将RPOP和LPOP的水解分别与藻类生物量（1/天/gC/m<sup>3</sup>）相关的常数，

$K_{DPalg}$ 是将矿化与藻类生物量相关的常数（1/天/gC/m<sup>3</sup>），以及

$KHP$ 是藻类磷吸收的平均半饱和常数（g P/m<sup>3</sup>）。

$$KHP = \frac{\sum_{algae} KHP_x}{number\ algae} \quad (8.61)$$

当 $PO_4^{-3}$ 相对于 $KHP$ 丰富时，速率接近最小值，藻类生物量的影响很小。当 $PO_4^{-3}$ 相对于 $KHP$ 变得稀缺时，速率随着藻类生物量的增加而增加。方程（8.58）至（8.60）具有将速率与温度相关的指数函数。

### 8.1.3.6 氮(N)

EFDC+有五个N的状态变量：三种有机形式（难降解颗粒、不稳定颗粒和溶解颗粒）和两种无机形式（ $NH_4^+$ 和 $NO_3^-$ ）。模型中的 $NO_3^-$ 状态变量表示 $NO_3^-$ 和 $NO_2^-$ 的总和。

#### 8.1.3.6.1 Particulate Organic Nitrogen (PON)

对于RPON和LPON，模型中包括的源和汇是（图8.2）；

- 1.藻类的基础代谢、死亡和捕食，
- 2.浮游动物的死亡和捕食，



3.溶解至DON,

4.安置, 以及

5.外部荷载。

RPON和LPON的动力学方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial RPON}{\partial t} = & \sum_{algae} (FNR_x \cdot BM_x + FNRP_x \cdot D_x) \cdot ANC_x \cdot B_x + \sum_{zoopl} FNRDZ_z \cdot D_z \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & + \sum_{zoopl} (FNRPZ_z \cdot PR_z - \frac{UR_z \cdot RPON}{PA_z} \cdot R_z) \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & - K_{RPON} RPON + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{RP} \cdot RPON) + \frac{WRPON}{V} \end{aligned} \quad (8.62)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial LPON}{\partial t} = & \sum_{algae} (FNL_x \cdot BM_x + FNLP_x \cdot D_x) \cdot ANC_x \cdot B_x + \sum_{zoopl} FNLDZ_z \cdot D_z \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & + \sum_{zoopl} (FNLPZ_z \cdot PR_z - \frac{UL_z \cdot LPON}{PA_z} \cdot R_z) \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & - K_{LPON} LPON + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{LP} \cdot LPON) + \frac{WLPON}{V} \end{aligned} \quad (8.63)$$

其中,

RPON是RPON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>) ,

LPON是LPON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>) ,

FNR<sub>x</sub>是藻类组x代谢的N的分数, 作为RPON,

FNL<sub>x</sub>是藻类组x代谢的N的分数, 作为LPON,

FNRP<sub>x</sub>是藻类组x产生的作为RPON的死亡 (或被捕食) N的分数,

FNLP<sub>x</sub>是藻类组x作为LPON产生的死亡 (或被捕食) N的分数,

FNRDZ<sub>x</sub>是浮游动物组z以RPON形式产生的死亡N的分数,

FNLDZ<sub>x</sub>是浮游动物组z以LPON形式产生的死亡N的分数,

FNRPZ<sub>x</sub>是浮游动物组z作为RPON产生的捕食N的分数,

FNLPZ<sub>x</sub>是浮游动物组z作为LPON产生的捕食N的分数,

ANC<sub>x</sub>是藻类组x中的氮碳比 (g; N; 每gC) ,

ANC<sub>z</sub>是浮游动物组z中的氮碳比 (g; N; 每gC) ,

K<sub>RPON</sub>是RPON的水解速率 (1/天) ,

K<sub>LPON</sub>是LPON的水解速率 (1/天) ,

WRPON是RPON的外部负载 (g N/天) , 以及

WLPON是LPON的外部负载 (g N/天) 。

### 8.1.3.6.2溶解有机氮(DON)

模型中包括的DON的来源和汇为 (图8.1) ;

- 1.藻类的基础代谢、死亡和捕食,
- 2.浮游动物的基础代谢、死亡和捕食,
- 3.解散RPON和LPON,
- 4.矿化为 $\text{NH}_4^+$ , 以及
- 5.外部荷载。

描述这些过程的动力学方程是:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{DON}}{\partial t} = & \sum_{\text{algae}} (FND_x \cdot BM_x + FNDP_x \cdot D_x) \cdot ANC_x \cdot B_x + \sum_{\text{zoopl}} FNDZ_z \cdot BM_z \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & + \sum_{\text{zoopl}} (FNDDZ_z \cdot D_z + FNDPZ_z \cdot PR_z) \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & + K_{\text{RPON}} \cdot \text{RPON} + K_{\text{LPON}} \cdot \text{LPON} - K_{\text{DON}} \cdot \text{DON} + \frac{W_{\text{DON}}}{V} \end{aligned} \quad (8.64)$$

其中,

DON是DON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>) ,

FND<sub>x</sub>是以DON形式产生的藻类组x代谢的N的分数,

FNDP<sub>x</sub>是藻类组x以DON形式产生的死亡 (或被捕食) N的分数,

FNDBZ<sub>z</sub>是由浮游动物组z以DON形式产生的代谢N的分数,

FNDDZ<sub>z</sub>是浮游动物组z以DON形式产生的死亡N的分数,

FNDPZ<sub>z</sub>是浮游动物组z以DON形式产生的捕食N的分数,

K<sub>DON</sub>是DON的矿化速率 (1/天) ,

BFDON仅为底层DON的海底通量 (gC/m<sup>2</sup>/天) , 以及

WDON是DON的外部负荷 (g N/天) 。

### 8.1.3.6.3铵(NH<sub>4</sub>)

模型中包括的NH<sub>4</sub><sup>+</sup>的来源和汇为 (图8.1) :

- 1.藻类的基础代谢、死亡、捕食和吸收,

- 2.浮游动物的基础代谢、死亡和捕食,
- 3.来自DON的矿化作用,
- 4.硝化为 $\text{NO}_3^-$ ,
- 5.仅用于底层的沉积物-水交换, 以及
- 6.外部负载。

描述这些过程的动力学方程是:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \text{NH}_4}{\partial t} = & \sum_{\text{algae}} (FNI_x \cdot BM_x + FNIP_x \cdot D_x - PN_x \cdot P_x) \cdot ANC_x \cdot B_x + K_{\text{DON}} \cdot \text{DON} \\ & + \sum_{\text{zoopl}} (FNIBZ_z \cdot BM_z + FNIDZ_z \cdot D_z + FNIPZ_z \cdot PR_z) \cdot Z_z \cdot ANC_z \\ & - K_{\text{nit}} \cdot \text{NH}_4 + \frac{BF\text{NH}_4}{\Delta Z} + \frac{W\text{NH}_4}{V} \end{aligned} \quad (8.65)$$

$FNI_x$ 是由藻类群 $x$ 代谢的N以无机N的形式产生的部分,

$FNIP_x$ 是以无机氮的形式产生的捕食性氮的分数,

$PN_x$ 是藻类组 $x$ 对 $\text{NH}_4^+$ 吸收的偏好 ( $0 \leq PN_x \leq 1$ ),

$FNIBZ_z$ 是由浮游动物组 $z$ 以 $\text{NH}_4^+$ 产生的代谢N的分数,

$FNIDZ_z$ 是浮游动物组 $z$ 以 $\text{NH}_4^+$ 形式产生的死亡N的分数,

$FNIPZ_z$ 是浮游动物组 $z$ 以 $\text{NH}_4^+$ 形式产生的捕食N的分数,

$K_{\text{nit}}$ 是方程式 (8.71) 中给出的硝化速率 (1/天),

$BF\text{NH}_4$ 是 $\text{NH}_4^+$ 的沉积物-水交换通量 ( $\text{g N/m}^2/\text{天}$ ), 仅适用于底层

$W\text{NH}_4$ 是 $\text{NH}_4^+$ 的外部负荷 ( $\text{g N/天}$ )

#### 8.1.3.6.4硝酸盐( $\text{NO}_3^-$ )

模型中包括的 $\text{NO}_3^-$ 的来源和汇点有:

- 1.藻类吸收,
- 2.由 $\text{NH}_4^+$ ,
- 3.对氮气进行反硝化,
- 4.仅用于底层的沉积物-水交换, 以及
- 5.外部荷载。

描述这些过程的动力学方程为:

$$\frac{\partial NO_3}{\partial t} = - \sum_{algae} (1 - PN_x) P_x ANC_x B_x + KNit NH_4 - ANDC Denit DOC + \frac{BFNO_3}{\Delta Z} + \frac{WNO_3}{V} \quad (8.66)$$

其中，

ANDC是每氧化DOC质量中还原的NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的质量 (0.933 g N/gC) ，

BFNO<sub>3</sub>是NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的沉积物-水交换通量 (g N/m<sup>2</sup>/天) ，仅适用于底层，以及

WNO<sub>3</sub>是NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的外部负荷 (g N/天) 。

本节的其余部分解释了方程 (8.62) - (8.66) 中的每一项。值得注意的是，(8.65) 中硝化沉降的形式以及NO<sub>3</sub><sup>-</sup>方程 (8.66)

#### 8.1.3.6.5藻类对氮素的影响

方程 (8.62) 至 (8.66) 中的总和项说明了藻类对N的影响。在P中，考虑了基础代谢（呼吸和排泄）和捕食，因此公式化为有助于ON和NH<sub>4</sub><sup>+</sup>。也就是说，通过基础代谢和捕食释放的藻类氮由分布系数 (FNR<sub>x</sub>、FNL<sub>x</sub>、FND<sub>x</sub>、FNI<sub>x</sub>、FNRP<sub>x</sub>、FNLP<sub>x</sub>、FNDP<sub>x</sub>和FNIP<sub>x</sub>) 表示。基础代谢的四个分布系数之和应该是统一的；捕食分布系数的总和也应该是一。

藻类吸收NH<sub>4</sub><sup>+</sup>和NO<sub>3</sub><sup>-</sup>进行生长，从热力学角度考虑，NH<sub>4</sub><sup>+</sup>是优选的。藻类对NH<sub>4</sub><sup>+</sup>的偏好表示为：

$$PN_x = NH_4 \frac{NO_3}{(KHN_x + NH_4)(KHN_x + NO_3)} + NH_4 \frac{KHN_x}{(NH_4 + NO_3)(KHN_x + NO_3)} \quad (8.67)$$

当不存在NO<sub>3</sub><sup>-</sup>时，该方程迫使NH<sub>4</sub><sup>+</sup>的偏好为1，当不存在NH<sub>4</sub><sup>+</sup>时，偏好为0。

#### 8.1.3.6.6矿化和水解

方程 (8.61) 和 (8.62) 的RHS上的术语KRPON和KLPON表示颗粒有机氮 (PON) 的两种状态的水解，方程 (8.63) 中的术语KDON表示DON的矿化。水解率和矿化率可以通过以下公式指定：

$$K_{RPON} = \left( K_{RN} + \left( \frac{KHN}{KHN + NH_4 + NO_3} \right) K_{RNalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.68)$$

$$K_{LPON} = \left( K_{LN} + \left( \frac{KHN}{KHN + NH_4 + NO_3} \right) K_{LNalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{HDR}(T - TR_{HDR})) \quad (8.69)$$

$$K_{DON} = \left( K_{DN} + \left( \frac{KHN}{KHN + NH_4 + NO_3} \right) K_{DNalg} \sum_{algae} B_x \right) \exp(KT_{MIN}(T - TR_{MIN})) \quad (8.70)$$

$K_{RN}$ 是RPON的最小水解速率 (1/天) ,

$K_{LN}$ 是LPON的最小水解速率 (1/天) ,

$K_{DN}$ 是DON的最小矿化率 (1/天) ,

$K_{RNalg}$ 和 $K_{LNalg}$ 是将RPON和LPON的水解分别与藻类生物量 (1/天/gC/m<sup>3</sup>) 相关的常数,

$K_{DNalg}$ 是矿化与藻类生物量相关的常数 (1/天/gC/m<sup>3</sup>) , 以及

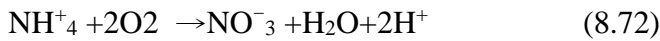
$KHN$ 是藻类氮吸收的平均半饱和常数 (g N/m<sup>3</sup>) 。

$$KHN = \frac{\sum_{algae} KHN_x}{number\ of\ algae} \quad (8.71)$$

方程 (8.68) 至 (8.70) 包括将速率与温度相关联的指数函数。

### 8.1.3.6.7 硝化

硝化是一个由自养硝化细菌介导的过程, 自养硝化菌通过将NH<sub>4</sub><sup>+</sup>氧化为NO<sub>2</sub><sup>-</sup>和将NO<sub>2</sub><sup>-</sup>氧化为NO<sub>3</sub><sup>-</sup>来获得能量。根据Bowie等人 (1985) , 完全反应的化学计量为:



方程 (8.64) 和 (8.65) 中的KNit项表示硝化作用对NH<sub>4</sub><sup>+</sup> 和NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的影响。完全硝化过程的动力学公式为可用NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、DO和温度的函数:

$$KNit \cdot NH_4 = fNit(T) \left( \frac{DO}{KHNit_{DO} + DO} \right) \left( \frac{NH_4}{KHNit_N + NH_4} \right) Nit_m \quad (8.73)$$

其中,

$$fNit(T) = \begin{cases} \exp(-KNit1(T - TNit)^2) , & T \leq TNit \\ \exp(-KNit2(TNit - T)^2) , & T > TNit \end{cases} \quad (8.74)$$

其中,

$KHNit_{DO}$ 是DO的硝化半饱和常数 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>) ,

$KHNit_N$ 是NH<sub>4</sub><sup>+</sup>的硝化半饱和常数 (g N/m<sup>3</sup>) ,

Nit<sub>m</sub>是TNit时的最大硝化速率 (g N/m<sup>3</sup>/天) ,

TNit是硝化作用的最佳温度(°C) ,

KNit1是低于TNit的温度对硝化速率的影响 (1/°C<sup>2</sup>) , 以及

KNit2是高于TNit的温度对硝化速率的影响 (1/°C<sup>2</sup>) 。

这遵循硝化作用的ICM模型公式。方程 (8.71) 中DO的Monod函数表明在低O水平下对硝化作用的抑制作用。NH<sub>4</sub><sup>+</sup>的Monod函数表明, 当NH<sub>4</sub><sup>+</sup>充足时, 硝化速率受到硝化细菌可用性的限制。

在EFDC+中, 通过将方程 (8.73) 写成:

$$KNit = fNit(T) \left( \frac{DO}{KHNit_{DO} + DO} \right) \left( \frac{KHNit_N}{KHNit_N + NH_4} \right) KNit_m \quad (8.75)$$

其中,

$$KNit_m = \frac{Nit_m}{KHNit_N} \quad (8.76)$$

KNit<sub>m</sub>被解释为对应于等于1的KHNit<sub>N</sub>的线性动力学速率, 因为在这种情况下NH<sub>4</sub>必须小于1, 并且通过将KHNit<sub>DO</sub>设置为零来消除DO效应。在某些应用中, 特别是那些具有长期生物需氧量 (BOD) 和氮系列测试结果的应用中, 可以观察到KNit<sub>m</sub>。

### 8.1.3.6.8反硝化

第8.1.3.4.5节描述了脱氮对DOC的影响。反硝化作用从系统中去除NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, 其化学计量比与方程 (8.45) 确定的C去除率成比例。(8.66) 中的汇项表示NO<sub>3</sub><sup>-</sup>的去除。

### 8.1.3.7二氧化硅

EFDC+为两种不同形式的二氧化硅建模; SiP和SiA。

#### 8.1.3.7.1颗粒生物二氧化硅 (SiP)

模型中包括的SiP的源和汇为 (图8.2) :

1. 硅藻的基础代谢、死亡和捕食,
2. 浮游动物的死亡和捕食,
3. 溶解到可用的二氧化硅中,
4. 安置, 以及

5.外部荷载。

描述这些过程的动力学方程是：

$$\begin{aligned} \frac{\partial SiP}{\partial t} = & (FSP_d \cdot BM_d + FSPP_d \cdot D_d) ASC_d B_d + \sum_{zoopl} FSPDZ_z \cdot D_z \cdot Z \cdot ASC_z \frac{UB_d B_d}{PA_z} \\ & + \sum_{zoopl} FSPPZ_z \cdot PR_z \cdot Z \cdot ASC_z \frac{UB_d B_d}{PA_z} - KSUA \cdot SiP + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_d \cdot SiP) + \frac{WSiP}{V} \end{aligned} \quad (8.77)$$

SiP是颗粒生物二氧化硅的浓度 (g Si/m<sup>3</sup>) ,

FSPd是以SiP形式产生的硅藻代谢的SiO<sub>2</sub>的部分,

FSPPd是作为SiP产生的死亡 (或早于死亡) 硅藻SiO<sub>2</sub>的分数,

FSPDZ<sub>z</sub>是浮游动物组z以SiP形式产生的捕食SiO<sub>2</sub>的分数,

FSPPZ<sub>z</sub>是浮游动物组z以SiP形式产生的死亡SiO<sub>2</sub>的分数,

ASC<sub>d</sub>是硅藻的SiO<sub>2</sub>与C的比率 (g Si/gC) ,

KSUA是SiP的溶解速率 (1/天) , 以及

WSiP是SiP的外部负荷 (g Si/天) 。

### 8.1.3.7.2可用二氧化硅(SiA)

模型中包括的SiA的源和汇为：

- 1.硅藻的基础代谢、死亡、捕食和吸收,
- 2.浮游动物的基础代谢、死亡和捕食,
- 3.吸附的 (颗粒的) 可用SiO<sub>2</sub>的沉淀,
- 4.从SiP中溶解,
- 5.仅底层溶解SiO<sub>2</sub>的沉积物-水交换, 以及
- 6.外部负载。

描述这些过程的动力学方程为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial SiA}{\partial t} = & (FSI_d BM_d + FSIP_d D_d - P_d) ASC_d B_d + KSUA \cdot SiP \\ & + \sum_{zoopl} (BM_z + FSADZ_z \cdot D_z + FSAPZ_z \cdot PR_z) Z_z \cdot ASC_z \cdot \frac{UB_d B_d}{PA_z} \\ & + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_{TSS} SiAp) + \frac{BF SiAd}{\Delta Z} + \frac{WSiA}{V} \end{aligned} \quad (8.78)$$

其中，

$SiAd$ 是溶解的 $SiA$  ( $g Si/m^3$ )，

$SiAp$ 是颗粒（吸附的） $SiA$  ( $g Si/m^3$ )，

$SiA = SiAd + SiAp$ 是 $SiA$ 的浓度 ( $g Si/m^3$ )，

$FSId$ 是以 $SiA$ 形式产生的硅藻代谢的 $SiO_2$ 的分数，

$FSIPd$ 是作为 $SiA$ 产生的死亡（或早于死亡）硅藻 $SiO_2$ 的分数，

$FSADZz$ 是浮游动物组 $z$ 以 $SiA$ 形式产生的死亡 $SiO_2$ 的分数，

$FSAPZz$ 是浮游动物组 $z$ 以 $SiA$ 形式产生的捕食 $SiO_2$ 的分数，

$BFSAd$ 是 $SiA$ 的沉积物-水交换通量 ( $g Si/m^2/天$ )，仅适用于底层，以及

$WSiA$ 是 $SiA$ 的外部负载 ( $g Si/天$ )。

在方程 (8.78) 中，如果选择TAM作为吸附位点的测量，则总悬浮固体WSTSS的沉降速度被颗粒金属WSs的沉降速度所取代。

### 8.1.3.7.3有效二氧化硅系统

对切萨皮克湾监测数据的分析表明，二氧化硅在吸附-解吸过程中表现出与PO-34相似的行为 (Cerco和Cole, 1993)。因此，在PO-34中， $SiA$ 被定义为包括溶解的和吸附的馏分。 $SiA$ 的处理与总的PO-34相同，并且使用相同的分配溶解和吸附的PO-34的方法来分配溶解和吸收的 $SiA$ 。

$$SiAp = \left( \frac{K_{SiAp} SORPS}{1 + K_{SiAp} SORPS} \right) SiA \quad (8.79)$$

$$SiAd = \left( \frac{1}{1 + K_{SiAp} SORPS} \right) SiA \quad (8.80)$$

$$SORPS = SED \text{ or } TAM_p \quad (8.81)$$

$$SiA = SiAp + SiAd \quad (8.82)$$

其中， $K_{SiAp}$ 是将 $SiA$ 吸附与SED (每 $g/m^3$ ) 或颗粒TAM (每 $mol/m^3$ ) 浓度相关的经验系数。

### 8.1.3.7.4硅藻对二氧化硅的影响

在方程 (8.77) 和 (8.79) 中，这些表示为硅藻生物量 ( $Bd$ ) 函数的项说明了硅藻对二氧



化硅的影响。与磷和氮一样，基础代谢（呼吸和排泄）和捕食

被认为有助于SiP和SiA。也就是说，由基础代谢和捕食释放的硅藻二氧化硅由分布系数（FSPd、FSId、FSPP和FSIP）表示。基础代谢的两个分布系数之和应该是一，捕食也是如此。硅藻需要二氧化硅以及P和N，硅藻对SiA的吸收由方程（8.78）中的（-Pd ASCd Bd）表示。

### 8.1.3.7.5溶解

方程（8.77）中的项（-KSUASiP）及其方程（8.78）中的相应项表示SiP溶解为SiA。溶解速率表示为温度的指数函数

$$KSUA = KPSi \exp(KTSUA (T - TRSUA)) \quad (8.83)$$

其中，

KSIP是在TRSUA下SiP的溶解速率（1/天），

KTSUA是温度对SiP（1/°C）溶解的影响，以及

TRSUA是SiP溶解的参考温度（°C）。

### 8.1.3.8化学需氧量(COD)

在EFDC+中，COD是可通过无机方式氧化的还原物质的浓度。盐水中COD的来源是沉积物中释放的S<sup>-2</sup>。发生一个循环，其中沉积物中的SO<sup>-2</sup><sub>4</sub>还原为S<sup>-2</sup>，水柱中的SO<sup>-2</sup><sub>4</sub>再氧化。在淡水中，甲烷（CH<sub>4</sub>）通过沉积物过程模型释放到水柱中。S<sup>-2</sup>和CH<sub>4</sub>均以O需求为单位进行量化，并采用相同的动力学配方进行处理。包括外部载荷（如有）在内的动力学方程为：

$$\frac{\partial COD}{\partial t} = - \left( \frac{DO}{KH_{COD} + DO} \right) K_{COD} COD + \frac{BFCOD}{\Delta Z} + \frac{WCOD}{V} \quad (8.84)$$

其中，

COD是COD的浓度（g O<sub>2</sub>-当量/m<sup>2</sup>/天），

KH<sub>COD</sub>是COD氧化所需DO的半饱和常数（g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>），

K<sub>COD</sub>是COD的氧化速率（1/天），

BFCO是COD的沉积物通量（g O<sub>2</sub>-当量/m<sup>2</sup>/天），仅适用于底层，以及

WCOD是COD的外部负荷（g O<sub>2</sub>-当量/天）。

采用指数函数来描述温度对COD氧化速率的影响；

$$K_{COD} = K_{CD} \exp(KT_{COD} (T - TR_{COD})) \quad (8.85)$$

$K_{CD}$ 是在 $TR_{COD}$ 下COD的氧化速率（1/天），

$KT_{COD}$ 是温度对COD氧化的影响（1/°C），以及

$TR_{COD}$ 是COD氧化的参考温度（°C）。

### 8.1.3.9 溶解氧(DO)

模型中水柱中DO的来源和汇点为（图8.2）：

- 1.藻类光合作用和呼吸作用，
- 2.浮游动物基础代谢，
- 3.硝化作用，
- 4.DOC的异养呼吸，
- 5.COD的氧化，
- 6.仅对表面层进行表面再曝气，
- 7.仅针对底层的SOD，以及
- 8.外部荷载。

描述这些过程的动力学方程为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial DO}{\partial t} = & \sum_{algae} \left( (1 + 0.3(1 - PN_x)) P_x - (1 - FCD_x) \frac{DO}{K_{HR_x} + DO} \cdot BM_x \right) AOCR B_x \\ & - AONT Nit NH_4 - AOCR K_{HR} DOC - \frac{DO}{K_{H_{COD}} + DO} \cdot K_{COD} COD \\ & - \sum_{zoopl} BM_z \cdot Z_z \cdot AOCR + K_R (DO_s - DO) + \frac{SOD}{\Delta Z} + \frac{WDO}{V} \end{aligned} \quad (8.86)$$

其中，

$AONT$ 是每单位质量 $NH_4^+$ 在N硝化时消耗的DO的质量（4.33 g  $O_2$ /g N），

$AOCR$ 是呼吸中的DO-C比（2.67 g  $O_2$ /gC），

$K_R$ 为复氧系数（1/天）：复氧项仅适用于表层，

$DO_s$ 是DO的饱和浓度（g  $O_2$ /m<sup>3</sup>），

$SOD$ 是仅应用于底层的SOD（g  $O_2$ /m<sup>2</sup>/天）；对水柱是正的，

$WDO$ 是DO的外部负荷（g  $O_2$ /天），以及

PN<sub>x</sub>是藻类x组对NH<sub>4</sub>吸收的偏好 (0<PN<sub>x</sub><1) 。

本节的其余部分解释了藻类、硝化作用和表面复氧的影响。

### 8.1.3.9.1 溶解氧饱和度

DO的饱和浓度可以根据温度、盐度和海拔高度使用以下形式的经验公式来确定：

$$DO_s = f(T) \cdot f(S) \cdot f(z) \quad (8.87)$$

其中f (T) 和f (S) 表示饱和DO对温度和盐度的依赖性，其随着温度和盐度增加而降低，f (Z) 是氧分压对饱和DO的影响。

在海平面上，饱和DO可以使用几个经验公式计算，如Genet等人 (1974) 、 Garcia和Gordon (1992) 以及Chapra (1997) 。

根据Genet等人 (1974) ，饱和DO对温度的依赖性为：

$$f(T) = 5.4258 \times 10^{-3} T^2 - 0.38217 \times T + 14.5532 \quad (8.88)$$

Garcia和Gordon (1992) 提出了基于从文献中选择的精确数据拟合的公式：

$$\ln f(T) = 1.41575 T_s^5 + 1.01567 T_s^4 + 4.93845 T_s^3 + 4.11890 T_s^2 + 3.20684 T_s + 5.80818 \quad (8.89)$$

$$\ln f(S) = -10^{-3} S \times [1.32412 \times 10^{-4} S^2 + (5.54491 T_s^3 + 7.93334 T_s^2 + 7.25958 T_s + 7.01211)] \quad (8.90)$$

其中T<sub>s</sub>为刻度温度

$$T_s = \log \left( \frac{298.15 - T}{273.15 + T} \right) \quad (8.91)$$

DO的饱和浓度随后使用32.0 × 10<sup>-3</sup>的因子从μmol/L近似转换为mg/L。

根据Chapra (1997) ，由于海平面的温度和盐度，DO饱和度的分数降低为：

$$\ln f(T) = -\frac{8.621949 \times 10^{11}}{T_a^4} + \frac{1.2438 \times 10^{10}}{T_a^3} - \frac{6.642308 \times 10^7}{T_a^2} + \frac{1.575701 \times 10^5}{T_a} - 139.34411 \quad (8.92)$$

$$\ln f(S) = -S \times \left( -\frac{2140.7}{T_a^2} + \frac{10.754}{T_a} + 1.7674 \times 10^{-2} \right) \quad (8.93)$$

其中T<sub>a</sub>是绝对温度(K) ， T<sub>a</sub>=T+273.15。

根据Chapra等人 (2021) ，大气压力对海拔DO饱和度的影响基于三次多项式所描述的标准

大气:

$$f(z) = 1 - 0.11988 \cdot z + 6.10834 \times 10^{-3} \cdot z^2 - 1.60747 \times 10^{-4} \cdot z^3 \quad (8.94)$$

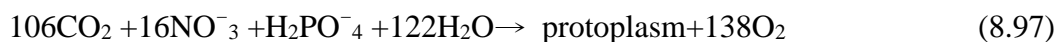
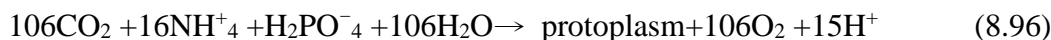
Zison (1978) 使用了线性高程调整系数

$$f(z) = 1 - 0.1148 \cdot z \quad (8.95)$$

在这些公式中, Z是以km为单位的高程。

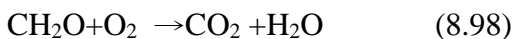
### 8.1.3.9.2藻类对溶解氧(DO)的影响

方程 (8.85) RHS上的第一行说明了藻类对DO的影响。藻类通过光合作用产生O, 通过呼吸消耗O。产量取决于用于生长的氮的形式。描述DO产生的方程式如下 (Morel, 1983) ;



当 $\text{NH}_4^+$ 是氮源时, 每摩尔固定的 $\text{CO}_2$ 产生一摩尔O。当 $\text{NO}_3^-$ 是N源时, 每固定一摩尔 $\text{CO}_2$ , 就会产生1.3摩尔O。方程 (8.85) 第一项中的量 ( $1.3 - 0.3\text{PN}_x$ ) 是光合作用比, 表示每摩尔固定 $\text{CO}_2$ 产生的O的摩尔量。当藻类对 $\text{NH}_4^+$ 的偏好接近统一时, 它接近统一。

方程 (8.85) 第一行中的最后一项说明了由于藻类呼吸引起的O消耗。呼吸过程的一个简单表示是:



其中 $\text{AOCR} = 2.67 \text{ g O}_2/\text{g C}$ 。

### 8.1.3.9.3硝化作用对溶解氧(DO)的影响

硝化反应方程式 (8.71) 的化学计量表明, 需要两摩尔O才能将一摩尔 $\text{NH}_4^+$ 硝化为 $\text{NO}_3^-$ 。然而, 硝化细菌的细胞合成是通过固定 $\text{CO}_2$ 来完成的, 因此每使用一摩尔 $\text{NH}_4^+$ 消耗不到两摩尔的氧气 (Wezenak和Gannon, 1968), 即 $\text{AONT} = 4.33 \text{ g O}_2/\text{g N}$ 。

### 8.1.3.9.4表面复氧对溶解氧 (DO) 的影响

假设空气中O饱和, 空气-水界面处DO的再充气率与界面上的O梯度 ( $\text{DO}_s - \text{DO}$ ) 成比例。方程 (8.85) RHS上的项 $K_r$ 是再充气率, 它在数学上代表了再充气过程。天然水中的复氧率取决于 (1) 水流速度和风速, (2) 水温和盐度, 以及 (3) 水深。当排除风的影响时, 复氧率系数的经验公式基于速度和深度:

$$K_r(20^\circ\text{C}) = A \cdot \frac{V^B}{H^C} \quad (8.99)$$

其中，

$K_r(20^\circ\text{C})$  是20时的再充气率 $^\circ\text{C}$  (1/天)

V为水流速度 (m/s)

H为水深或顶层厚度 (m)

A、 B、 C为经验参数

水温对复氧率的影响表示为：

$$K_r = K_r(20^\circ\text{C})1.024^{T-20} \quad (8.100)$$

其中，

$K_r$ 是T下的再充气率 $^\circ\text{C}$

T为水温( $^\circ\text{C}$ )

复氧系数包括底部摩擦产生的湍流效应 (O'Connor和Dobbins, 1958) 和表面风应力产生的湍流影响 (Banks和Herrera, 1977) :

$$K_r = \frac{1}{\Delta z} \left( K_{ro} \sqrt{\frac{ueq}{heq}} + W_{rea} \right) (KT_r)^{T-20} \quad (8.101)$$

其中，

$K_{ro}=3.933$ 是以国际单位制为单位的比例常数，

$ueq = \sum (ukVk) / 3$  (Vk) 是横截面上的加权速度 (m/),

$heq = \sum (Vk) / B$ 是横截面上的加权深度 (m) ,

Bis为自由表面处的宽度 (m) , 以及

$KT_r$ 是DO复氧速率的温度调节常数。

风致复氧 $W_{rea}$  (m/day) 表示为：

$$W_{rea} = 0.728\sqrt{U_w} - 0.317U_w + 0.0372U_w^2 \quad (8.102)$$

其中 $U_w$ 是在表面以上10m的高度处的风速 (m/s) 。

EFDC+代码提供了几个用于计算再充气系数比率的选项。这些选项从一个常数值到复杂的公式，其中包括温度、水和风速以及复氧过程中水深的影响。

### 8.1.3.9.5 溶解氧简化方程

KHR<sub>x</sub>和FCD<sub>x</sub>等于零的简化DO方程为：

$$\begin{aligned} \frac{\partial DO}{\partial t} = & \sum_{algae} ((1.3 - 0.3PN_x) P_x - BM_x) AOCR B_x - AONT \text{ Nit } NH_4 \\ & - AOCR K_{HR} DOC - \sum_{zoopl} BM_z \cdot Z_z \cdot AOCR - \left( \frac{DO}{KH_{COD} + DO} \right) K_{COD} COD + \\ & K_R (DO_S - DO) + \frac{SOD}{\Delta Z} + \frac{WDO}{V} \quad (8.103) \end{aligned}$$

符合方程 (8.86)。

### 8.1.3.10 总活性金属(TAM)

EFDC+需要模拟TAM以吸附 $PO_4^{-3}$ ，如果选择了该选项，则需要模拟 $SiO_2$ 。TAM状态变量是颗粒和溶解的Fe和Mn浓度的总和。TAM的来源是EFDC+中的海底沉积物。由于沉积物模型中没有明确的金属沉积物释放（见第6章），因此水柱模型的动力学部分规定了金属沉积物的释放。唯一包括的其他术语是颗粒部分的沉降。然后，TAM的动力学方程，包括外部载荷（如果有），可以写成：

$$\begin{aligned} \frac{\partial TAM}{\partial t} = & \left( \frac{KH_{bmf}}{KH_{bmf} + DO} \right) (\exp(K_{tam}(T - T_{tam}))) \frac{BFTAM}{\Delta z} \\ & + \frac{\partial}{\partial Z} (WS_s TAM_p) + \frac{WTAM}{V} \quad (8.104) \end{aligned}$$

其中，

TAM = TAM<sub>d</sub> + TAM<sub>p</sub> 是TAM浓度 (mol/m<sup>3</sup>)，

TAM<sub>d</sub> 是溶解的TAM (mol/m<sup>3</sup>)，

TAM<sub>p</sub> 是颗粒TAM (mol/m<sup>3</sup>)，

KH<sub>bmf</sub> 是在TAM释放是缺氧释放速率的一半时的DO浓度 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>)，

BFTAM 是仅应用于底层的TAM的缺氧释放速率 (mol/m<sup>2</sup>/天)，

K<sub>tam</sub> 是温度对TAM沉积物释放的影响 (1/°C)，

T<sub>tam</sub> 是TAM沉积物释放的参考温度(°C)，

WS<sub>s</sub> 是颗粒金属的沉降速度 (m/天)，以及

WTAM 是TAM的外部负荷 (mol/天)。

在河口，Fe和Mn以颗粒和溶解形式存在，具体取决于DO浓度。在含氧水中，大多数Fe和Mn以颗粒形式存在，而在缺氧条件下，大部分Fe和Mn溶解。颗粒相和溶解相之间的分配使用这样一个概念来表达，即在沉淀发生之前，TAM浓度必须达到最低水平，这是DO的函数：

$$TAM_d = \min(TAM_{dmx} \exp(-K_{dotam} DO), TAM) \quad (8.105)$$

$$TAM_p = TAM - TAM_d \quad (8.106)$$

其中，

TAM<sub>dmx</sub>是TAM在缺氧条件下的溶解度 (mol/m<sup>3</sup>)，以及

K<sub>dotam</sub>是将TAM溶解度与DO (每克O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>) 联系起来的常数。

### 8.1.3.11 粪大肠菌群

粪便大肠杆菌是人类和其他动物肠道中生物体的指示菌，可作为衡量公共健康的指示菌 (Thomann和Mueller, 1987)。EFDC+在富营养化模块中包括粪便大肠菌群变量，以方便开发最大日总负荷 (TMDL) 应用程序，并与其他水质模型完全解耦。在EFDC+中，粪便大肠菌群与其他状态变量没有相互作用，并且只有一个汇项，即死亡。包括外部载荷在内的动力学方程可以写成：

$$\frac{\partial FCB}{\partial t} = KFCB(TFCB^{T-20})FCB + \frac{WFCB}{V} \quad (8.107)$$

其中，

FCB是细菌浓度 (MPN/100ml)，

KFCB是20°C时的一阶死亡率 (1/天)，

TFCB是温度对细菌衰变的影响 (1/°C)，以及

WFCB是粪便大肠杆菌的外部负荷 (每100毫升m<sup>3</sup>/天的MPN)。

### 8.1.4 颗粒物的沉降、沉积和再悬浮

颗粒物的动力学方程，包括颗粒有机物、PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>、两个SiO<sub>2</sub>状态变量和TAM，包含沉降项。一个有代表性的通用方程是：

$$\frac{\partial PM}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} (WS_{PM} PM) + PM_{SS} \quad (8.108)$$

其中，PM<sub>SS</sub>表示方程中的附加项。方程 (8.108) 在底层上的积分给出

$$\frac{\partial PM_1}{\partial t} = \frac{WS_{PM}}{\Delta Z_1} PM_2 - \frac{WS_{PM}}{\Delta Z_1} PM_1 + PM_{SS1} \quad (8.109)$$

最初的ICM和EFDC水质模型是用代表长期平均净沉降的沉降速度来制定的。在随后将ICM应用于佛罗里达湾的过程中（Cercu等人，2000年），添加了沉积物床中颗粒物质的再悬浮或侵蚀，并已添加到EFDC+水质模型中。

EFDC+模型允许使用净沉降配方（8.109）和允许再悬浮的配方，并修改方程（8.109）

$$\frac{\partial PM_1}{\partial t} = \frac{WS_{POM}}{\Delta Z_1} PM_2 - \frac{P_{depPM} WS_{PM}}{\Delta Z_1} PM_1 + \frac{E_{PM}}{\Delta Z_1} + PM_{SS1} \quad (8.110)$$

以包括沉积因子的概率和具有每单位时间单位面积的质量单位的侵蚀项EPM。对于水质模块中颗粒材料受到侵蚀的EFDC+模型应用，水动力学模型中的沉积物传输必须是主动的。侵蚀术语定义如下：

$$E_{PM} = \left( \frac{PM_{bed}}{SED_{bed}} \right) \max(J_{ERO}, 0) \quad (8.111)$$

其中，

$PM_{bed}$ 是床中的颗粒物浓度（g PM/m<sup>2</sup>或g PM/m<sup>3</sup>），

$SED_{bed}$ 是床中最细沉积物类别的浓度（g PM/m<sup>2</sup>或g PM/m<sup>3</sup>），

$P_{depPM}$ 是特定颗粒物变量沉积的概率（ $0 \leq P_{depPM} \leq 1$ ），以及

$J_{ERO}$ 是最细沉积物类别的侵蚀或再悬浮的质量速率（g SED/天/m<sup>2</sup>）。

使用水质模型颗粒状态可变浓度与最细泥沙粒级浓度而非总固体浓度的比值是基于这样一个事实，即最细泥沙等级（通常小于63μm）包括无机和有机物质，以及沉降、沉积和再悬浮的现场观测，当可用于模型校准时，对此进行说明。如果不允许同时沉积和侵蚀，当沉积物侵蚀通量大于零时，沉积的概率被定义为零。

总之，值得注意的是，在包括颗粒物再悬浮的ICM文件中（Cercu等人，2000），再悬浮被明确包括在各种状态变量方程中，而在本文件中，它被隐含地包括在当前部分中。

### 8.1.5动力学方程的解法

EFDC+水柱水质模型中状态变量（不包括粪大肠菌群）的动力学方程可以在每个模型单元中的n×n（其中n=状态变量总数）偏微分方程系统中表达，在线性化一些项后，主要是Monod



型表达式:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = KC + \frac{\partial}{\partial z}(WC) + R \quad (8.112)$$

其中,

$C$ 是 $[ML^{-3}]$ 中水质状态变量的浓度矢量,

$K$ 是 $[T^{-1}]$ 中的基质动力学速率,

$W$ 是 $[LT^{-1}]$ 中沉降速度的矢量, 以及

$R$ 是 $[ML^{-3}T^{-1}]$ 中源/汇项的矢量。

变量的排序遵循表8.1中的顺序, 这导致 $K$ 为下三角。在层 $k$ 上积分 (8.112), 得出

$$\begin{aligned} \frac{C_k}{\partial t} &= K1_k C_k + \delta_k K2_k C_{k+1} + R_k \\ K1_k &= K_k - \frac{1}{\Delta_k} W \\ K2_k &= \frac{1}{\Delta_k} W \end{aligned} \quad (8.113)$$

这表明来自上覆细胞的颗粒物质的沉降作为给定细胞的输入。对于与床相邻的细胞层, (8.110) 中的侵蚀项包含在向量 $R$ 中。Park等人 (1995) 的附录A中定义了 (8.112) 和 (8.113) 中的矩阵和向量。层索引 $k$ 随着 $KC$ 垂直层的增加而向上增加;  $k=1$ 为底层,  $k=KC$ 为表层, 当 $k=KC$ 时,  $\delta_k=0$ ; 否则,  $\delta_k=1$ 。矩阵 $K2$ 是对角矩阵, 并且非零元素说明了来自上覆细胞的颗粒物质的沉降。

方程 (8.113) 使用广义梯形格式在 $\theta$ 的时间步长上求解, 该时间步长可以表示为:

$$\begin{aligned} C_k^{n+1} - C_k^n &= \lambda \theta (K1_k^n C_k^{n+1} + \delta_k K2_k^n C_{k+1}^{n+1} + R_k^{n+1}) \\ &\quad + (1-\lambda) \theta (K1_k^n C_k^n + \delta_k K2_k^n C_{k+1}^n + R_k^n) \end{aligned} \quad (8.114)$$

or

$$\begin{aligned} (I - \lambda \theta K1_k^n) C_k^{n+1} &= (I + (1-\lambda) \theta K1_k^n) C_k^n + \\ &\quad \theta \delta_k K2_k^n (\lambda C_{k+1}^{n+1} + (1-\lambda) C_{k+1}^n) + \theta (\lambda R_k^{n+1} + (1-\lambda) R_k^n) \end{aligned} \quad (8.115)$$

其中,

$\lambda$ 是隐含因子 ( $0 \leq \lambda \leq 1$ ),

$\theta=2 \cdot m \cdot \Delta t$ 是动力学方程的时间步长

I是单位矩阵；上标n和n+1表示对相关动力学过程进行调整之前和之后的变量。由于方程(8.112)是从表层向下求解的，因此 $C^{n+1}_{k+1}$ 的项对于第k层是已知的，因此被放置在RHS上。在方程(8.114)中，当按照表8.1中给出的顺序求解20个状态变量时，可以避免矩阵的反演。

## 8.2 生根水生植物配方

在许多河流的河岸边通常可以看到有根的大型植物床。从技术上讲，准确性可以通过模拟淹没的水生植被（附生藻类）来改善水质模型以及有根的大型植物，如果水体已经记录了有根的巨型植物的出现。EFDC++的通用生根水生植物和表生藻类子模型（RPEM）使用动力学质量平衡方程有根的植物枝条、根和生长在枝条上的附生藻类。用户可以启用或禁用RPEM的各种组合，包括能够模拟有根植物或附生植物；有可能生长在有根植物上的附生植物；实现RPEM - 水柱营养物相互作用；和启用RPEM - 沉积物成岩作用相互作用。

本节的重点将放在RPEM变量及其过程上。子模型中的状态变量是有根植物芽、根、附生藻类生物量和有根植物茎碎屑生物量。这个这些变量的动力学质量平衡主要取决于生产、呼吸和非呼吸损失利率。这些速率反过来主要由营养物质、C、O、光场和温度控制。参数通过与佛罗里达湾海草模型的比较，重点介绍了RPEM子模型和Halodule被选为优势物种（Madden et al., 2018）。

### 8.2.1 State Variable Equations

有根植物枝条、根系和生长在枝条上的附生藻类的动力学质量平衡方程为

$$\frac{\partial (RPS)}{\partial t} = ((1 - F_{PRPR}) \cdot P_{RPS} - R_{RPS} - L_{RPS}) RPS + JRP_{RS} \quad (8.116)$$

$$\frac{\partial (RPR)}{\partial t} = F_{PRPR} \cdot P_{RPS} \cdot RPS - (R_{RPR} + L_{RPR}) RPR + JRP_{RS} \quad (8.117)$$

$$\frac{\partial (RPE)}{\partial t} = (P_{RPE} - R_{RPE} - L_{RPE}) RPE \quad (8.118)$$

其中，

t是时间（天），

$RPS(T_a, H_a)$ 有根植物枝条的生物量( $g C/m^2$ ),

$F_{PRPR}(X_{Ta}, X_{Ha})$ 是直接转移到根部的产量 ( $0 < F_{PRPR} < 1$ ),

$P_{RPS}(g_{Ta}, g_{Ha})$ 是植物嫩芽的生产率(1/天),  
 $R_{RPS}(r_{Ta}, r_{Ha})$ 是植物嫩芽的呼吸速率 (1/天) ,  
 $L_{RPS}(m_{Ta}, m_{Ha})$ 是植物嫩芽的非呼吸损失率 (1/天) ,  
 $JRP_{RS}(X_{Tb}T_b, X_{Hb}H_b)$ 是从根到芽的C转运阳性 (g C/m<sup>2</sup>/天) ,  
 $RPR(T_b, H_b)$ 是生根植物根系生物量 (g C/m<sup>2</sup>) ,  
 $R_{RPR}(r_{Tb}, r_{Hb})$ 是植物根的呼吸速率 (1/天) ,  
 $L_{RPR}(m_{Tb}, m_{Hb})$ 是植物根系的非呼吸损失率 (1/天) ,  
 $RPE(E)$ 是生根植物表生植物生物量 (g C/m<sup>2</sup>) ,  
 $P_{RPE}(gE)$ 是附生植物的生产速率 (1/天) ,  
 $R_{PRE}(r_{TE}E)$ 是附生植物的呼吸速率 (1/天) , 以及  
 $L_{RPE}(r_{Ta}+mE)$ 是附生植物的非呼吸损失率 (1/天)

佛罗里达湾海草模型中使用的等效符号出现在括号 ( ) 中, 其中T与Thalassia相关, H与Halodule相关。为了进行比较, 表8.3和表8.4显示通用和佛罗里达湾海草模型参数。

表8.3. Thalassia和Halodule物种的通用和佛罗里达湾海草模型参数

Parameter	Dimension	Generic	Thalassia	Halodule
$F_{RPR}$ ( $\chi_{Ta}, \chi_{Ha}$ )	none	constant	0.4	0.34
$P_{RPS}$ ( $g_{Ta}, g_{Ha}$ )	1/day	Function of $N, P, \text{Light},$ $\text{Temp}, \text{Salt}$	Function of $N,$ $P, \text{Light}, \text{Temp},$ $\text{Salt}$	Function of $N,$ $P, \text{Light}, \text{Temp},$ $\text{Salt}$
$R_{RPS}$ ( $r_{Ta}, r_{Ha}$ )	1/day	Function of $\text{Temp}$	0.01 (base) Temperature Function	0.029 (base) Temperature Function
$L_{RPS}$ ( $m_{Ta}, m_{Ha}$ )	1/day	Function of $\text{Temp}$	0.001 (base) Temperature Function	0.004 (base) Temperature Function
$R_{RPR}$ ( $r_{Tb}, r_{Hb}$ )	1/day	Function of $\text{Temp}$	0.0025 (base) Temperature Function	0.011(base) Temperature Function
$L_{RPR}$ ( $m_{Tb}, m_{Hb}$ )	1/day	Function of $\text{Temp}$	0.0001 (base) Temperature Function	0.0004 (base) Temperature Function
$JRP_{RS}$ ( $\chi_{Tb}T_b, \chi_{Hb}H_b$ )	g C/m <sup>2</sup> /day	$KRP_{RS} \cdot RPR$	$\chi_{Tb}T_b$ ( $\chi_{Tb} = 0.0005$ )	$\chi_{Hb}H_b$ ( $\chi_{Hb} = 1 \times 10^{-5}$ )

表8.4.表生植物的通用和佛罗里达湾海草模型参数

Parameter	Dimension	Generic	Epiphytes
$P_{RPE}(gE)$	none	Function of $N, P,$ Light, Temp, Salt	Function of $N, P,$ Light, Temp, Salt
$R_{RPE}(r_E E)$	1/day	Function of Temp	$r_E E$ $r_E = 0.01m^2/g - day$
$L_{RPE}(m_{Ta} + m_E E)$	1/day	constant	$m_{Ta} + m_E E$ $r_E = 0.05m^2/g - day$

还添加了一个额外的状态变量，以说明水柱底部的芽碎屑：

$$\frac{\partial(RPD)}{\partial t} = F_{PRSD} \cdot P_{RPS} \cdot RPS - L_{RPD}RPS \quad (8.119)$$

其中，

RPD是生根植物茎腐生物量 (g C/m<sup>2</sup>) ，

F<sub>PRSD</sub>是枝条损失到碎屑中的比例 (0<FRPSD<1) ， 以及

L<sub>RPD</sub>是碎屑的衰变率 (1/天) 。

值得注意的是，佛罗里达湾海草模型不包括这个变量。

### 8.2.1.1植物芽的生产率

植物嫩芽的产量或生长速率由下式给出

$$P_{RPS} = PM_{RPS} \cdot f_{1W}(N) \cdot f_{1B}(N) \cdot f_2(I) \cdot f_3(T) \cdot f_4(S) \cdot f_5(RPS)$$

其中，

PM<sub>RPS</sub>(V<sub>T</sub>,V<sub>H</sub>)是植物新芽在最佳条件下的最大生长速率 (1/天) ，

f<sub>1</sub>(N)是次优营养浓度 (0≤f<sub>1</sub>≤1) 的影响，

f<sub>2</sub>(I)是次优光强 (0≤f<sub>2</sub>≤1) 的影响，

f<sub>3</sub>(T)是次优温度的影响 (0≤f<sub>3</sub>≤1)

f<sub>4</sub>(S)盐度对淡水植物枝条生长的影响 (0≤f<sub>4</sub>≤1) ， 以及

f<sub>5</sub>(RPS)是对枝条生长的承载力效应 (0≤f<sub>5</sub>≤1)

佛罗里达湾海草模型的最大生长率如表8.5所示

表8.5.最大增长率

Parameter	Units	Generic	Thalassia	Halodule
$PM_{RPS}(V_T, V_H)$	1/day	constant	0.208	0.29

### 8.2.1.1.1 营养素对生产的影响

营养限制是根据水柱和床层营养水平规定的，具体如下：

$$f_{1w}(N) = \min \left( \frac{(NH_4 + NO_3)_w}{KHN_{RPS} + (NH_4 + NO_3)_w}, \frac{PO_4d_w}{KHP_{RPS} + PO_4d_w} \right)$$

$$f_{1b}(N) = \min \left( \frac{(NH_4 + NO_3)_b}{KHN_{RPS} + (NH_4 + NO_3)_b}, \frac{PO_4d_b}{KHP_{RPS} + PO_4d_b} \right)$$

其中，

$NH_4$ 是以N表示的 $NH_4+$ 浓度 ( $g N/m^3$ ) ，

$NO_3$ 为 $NO_3^-+NO_2^-$ 浓度，单位为N ( $g N/m^3$ ) ，

$KHN_{RPS}$ 是水柱吸收氮的半饱和常数 ( $g N/m^3$ )

$KHN_{RPS}(K_{TN}, K_{HN})$ 是从床吸收N的半饱和常数 ( $g N/m^3$ ) ，

$PO_4d$ 是溶解的磷酸盐磷浓度 ( $g P/m^3$ ) ，

$KHP_{RPS}$ 是水柱吸收磷的半饱和常数 ( $g P/m^3$ ) ， 以及

$KHP_{RPR}(K_{TP}, K_{HP})$ 是从床吸收磷的半饱和常数 ( $g P/m^3$ ) 。

表8.6.佛罗里达湾海草模型的营养限制参数列表

Parameter	Units	Generic	Thalassia	Halodule
$KHN_{RPS}$	$g N/m^3(mg N/l)$	constant	0.0	0.0
$KHN_{RPR}$	$g N/m^3(mg N/l)$	constant	0.00056	0.00056
$KHP_{RPS}$	$g P/m^3(mg P/l)$	constant	0.0	0.0
$KHP_{RPR}$	$g P/m^3(mg P/l)$	constant	0.0031	0.0031

### 8.2.1.1.2 光场

水柱中的光场由

$$\frac{\partial I}{\partial Z_*} = -K_{ess} \cdot I \quad (8.122)$$

其中，

$I$ 是光强度 (兰利/天) ，

$K_{ess}$ 是消光系数 ( $1/m$ ) ， 以及

$Z_*$ 是水面以下的深度 (m) 。

消光系数是水面以下深度的函数。(8.122)的集成给出

$$I = I_{ws} \exp \left( - \int_0^{Z_*} K_{ess} \cdot dZ_* \right) \quad (8.123)$$

水面处的光强度 $I_{ws}$ 由下式给出

$$I_{ws} = I_0 \min \left( \exp(-K_{eme} \cdot (H_{RPS} - H)), 1 \right) \quad (8.124)$$

其中,

$I_0$ 是出射嫩芽在出射嫩枝冠层顶部的光强度,或是淹没嫩枝在水面的光强度(W/m<sup>2</sup>),

$K_{eme}$ 是出射嫩芽的消光系数(1/m),

$H_{RPS}$ 是射高(m),以及

$H$ 为水柱深度(m)

对于淹没的嫩芽,假设嫩芽上方水柱中的消光系数遮篷由

$$K_{essac} = K_{eb} + K_{eTSS} \cdot TSS + K_{eVSS} \cdot VSS + K_{eChl} \sum_{m=1}^M \left( \frac{B_m}{CChl_m} \right) \quad (8.125)$$

遮篷内水柱中的消光系数由

$$K_{essic} = K_{eb} + K_{eTSS} \cdot TSS + K_{eVSS} \cdot VSS + K_{eChl} \sum_{m=1}^M \left( \frac{B_m}{CChl_m} \right) + K_{eRPS} \cdot RPS \quad (8.126)$$

其中,

$K_{eb}$ 是背景光消光(1/m),

$K_{eTSS}$ 是无机悬浮固体的消光系数(1/m/g/m<sup>3</sup>),

$TSS$ 是由流体动力学模型提供的总无机悬浮固体浓度(g/m<sup>3</sup>)

$K_{eVSS}$ 是挥发性悬浮固体的消光系数(1/m/g/m<sup>3</sup>),

$VSS$ 是由水质模型提供的挥发性悬浮固体浓度(g/m<sup>3</sup>),

$CChl_{RPE}$ 是附生植物的C与叶绿素的比率(g C/mg Chl),

$K_{eChl}$ 是藻类叶绿素的消光系数(1/m/mg Chl/m<sup>3</sup>),

$B_m$ 是藻类组m的浓度(g C/ml),

$CChl_m$ 是藻类组m中的C与叶绿素的比率(g C/mg Chl),

$K_{eRPS}$ 是有根植物枝条的消光系数(1/m/gm C/m<sup>2</sup>),以及

RPS是植物嫩芽的浓度 (g C/m<sup>2</sup>) 。

方程 (8.125) 和 (8.126) 的形式容易允许将藻类生物质包含到挥发性悬浮固体中，或者反之亦然。方程 (8.126) 的形式假设芽主要是自遮阳的，并且附生效应在芽表面上很明显。

上述方程 (8.123) 的解和雨棚中的解为

$$I = I_{ws} \exp(-K_{essac} \cdot Z_*) \quad ; \quad 0 \leq Z_* \leq H - H_{RPS} \quad (8.127)$$

$$I = I_{ct} \cdot \exp(-K_{essic} \cdot (Z_* - H + H_{RPS})) \quad ; \quad H - H_{RPS} \leq Z_* \leq H \quad (8.128)$$

$$I_{ct} = I_{ws} \cdot \exp(-K_{essac} \cdot (H - H_{RPS}))$$

由于有根植物以每单位面积的C质量表示，因此树冠上的平均光照强度是一个合适的光照测量。对于紧急芽，方程 (8.126) 在水柱深度上的平均值，注意H=HRPS，为

$$I_{icwa} = \frac{I_{ws}}{K_{essic} \cdot H} (1 - \exp(-K_{essac} \cdot H)) \quad (8.129)$$

对于淹没的嫩芽，树冠上的平均值为

$$I_{icwa} = \frac{I_{ws}}{K_{essic} \cdot H_{RPS}} \exp(-K_{essac} \cdot (H - H_{RPS})) \cdot (1 - \exp(-K_{essic} \cdot H_{RPS})) \quad (8.130)$$

其中方程 (8.128) 和方程 (8.129) 中的I<sub>icwa</sub>是冠层水柱光强的平均值。

当附生植物生长在茎表面时，根据

$$I_{RPS} = I_{icw} \exp(-K_{eRPE} \cdot RPE) \quad (8.131)$$

其中，

I<sub>RPS</sub>是植物枝条上的光强度 (W/m<sup>2</sup>) ，

I<sub>icw</sub>是枝条冠层中的平均水柱光强度 (W/m<sup>2</sup>) ， 以及

K<sub>eRPE</sub>是附生植物的消光系数 (m<sup>2</sup>/gm C) 。

对于佛罗里达湾海草模型，附生光消光系数由下式给出

$$K_{eRPE} = 0.11 \frac{\delta_{RPE}}{\sum N_{species} \left( \frac{2 \cdot RPS \cdot \delta_{RPS}}{W_{RPS}} \right)} \quad (8.132)$$

其中，

δ<sub>RPE</sub>是骨骼干质量与C质量的比值，

δ<sub>RPS</sub>是有根植物茎干质量与C质量的比值， 以及



$W_{RPS}$ 是单位芽面积的有根植物芽质量。

佛罗里达湾模型的这些参数值列于表8.7中。值得注意的是，方程（8.131）中的表达式在尺寸上是不均匀的，数值系数0.11具有（ $\text{cm}^2 \text{ leaf surface area}$ ）/（ $\text{mg dry weight}$ ）的隐含单位。通过使用替代形式，可以使方程（8.131）在尺寸上一致

$$K_{eRPE} \cdot RPE = \frac{RPE}{\sum_{N_{species}} (KRPSE \cdot RPS)} \quad (8.133)$$

其中无量纲参数KRPSE也在表8.7中定义

表8.7.佛罗里达湾海草模型的表生植物光衰减参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$\delta_{RPE}$	Dry mass/ Carbon mass	9	9
$\delta_{RPS}$	Dry mass/ Carbon mass	2.94	2.4
$W_{RPS}$	Mg dry mass/ $\text{C-m}^2 \text{ leaf area}$	1.7	2
$KRPSE$	Dimensionless	3.49	2.42

使用方程（8.131）和（8.127），拍摄表面上的光强可以表示为

$$I_{RPS} = I_{ws} \cdot \exp(-K_{essac} \cdot (H - H_{RPS}) - K_{eRPE} \cdot RPE) \cdot \exp(-K_{essic} \cdot (Z_* - H + H_{RPS})) \quad (8.134)$$

而方程（8.130）和（8.129）给出了枝条表面的冠层平均光强

$$I_{RPSA} = \frac{I_{ws}}{K_{essic} \cdot H_{RPS}} \exp(-K_{essac} \cdot (H - H_{RPS}) - K_{eRPE} \cdot RPE) \cdot (1 - \exp(-K_{essic} \cdot H_{RPS})) \quad (8.135)$$

### 8.2.1.1.3光对生长的影响

在EFDC+通用生根植物模型中，光照对生根植物生长的影响是基于斯蒂尔(Steele's)方程（斯蒂尔，1962）

$$f_2(I) = \frac{I}{I_{RSPopt}} \exp\left(1 - \frac{I}{I_{RSPopt}}\right) \quad (8.136)$$

其可以根据到达芽的平均光强度来应用，以给出

$$f_2(I) = \frac{I_{RPSA}}{I_{RSPopt}} \exp\left(1 - \frac{I_{RPSA}}{I_{RSPopt}}\right) \quad (8.137)$$

或者由于其独特的数学形式直接在枝条冠层上平均。平均值由



$$f_{2avg}(I) = \frac{F_2}{H_{RPS}} \int_{H-H_{RPS}}^H \exp \left( \begin{array}{c} 1 - K_{essic} \cdot (Z_* - H + H_{RPS}) \\ -F_2 \cdot \exp(-K_{essic} \cdot (Z_* - H + H_{RPS})) \end{array} \right) dZ_* \quad (8.138)$$

结果是

$$f_{2avg}(I) = \frac{\exp(1)}{K_{essic} \cdot H_{RPS}} [\exp(-F_2 \cdot \exp(-K_{essic} \cdot H_{RPS})) - \exp(F_2)] \quad (8.139)$$

$$F_2 = \frac{I_{ws}}{I_{RSPopt}} \cdot \exp(-K_{essac} \cdot (H - H_{RPS}) - K_{eRPE} \cdot RPE) \quad (8.140)$$

#### 8.2.1.1.4 温度对枝条生长的影响

温度对枝条生长的影响由高斯函数给出

$$f_3(T) = \begin{cases} \exp(-KTP1_{RPS}[T - TP1_{RPS}]^2) & \text{if } T \leq TP1_{RPS} \\ 1 & \text{if } TP1_{RPS} < T < TP2_{RPS} \\ \exp(-KTP2_{RPS}[T - TP2_{RPS}]^2) & \text{if } T \geq TP2_{RPS} \end{cases} \quad (8.141)$$

其中，

T是温度(°C) 由流体动力学模型提供，

TP1<sub>RPS</sub><T<TP2<sub>RPS</sub>是嫩芽生产的最佳温度范围(°C) ，

KTP1<sub>RPS</sub>温度低于TP1<sub>RPS</sub>对芽产量的影响 (1/°C<sup>2</sup>) ， 以及

KTP2<sub>RPS</sub>温度高于TP2<sub>RPS</sub>对芽产量的影响 (1/°C<sup>2</sup>) 。

或指数函数。

$$f_3(T) = \exp(KTP_{RPS}[T - TPREF_{RPS}]) \quad (8.142)$$

其中，

TPREF<sub>RPS</sub>是嫩芽生产的参考温度(°C) ， 以及

KTP<sub>RPS</sub>是温度对芽产量的影响 (1/°C) 。

佛罗里达湾海草模型的参数如表8.8所示。

表8.8. 方程 (8.142) 中温度对生长影响的参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$TPREF_{RPS}$	$^{\circ}C$	28	31
$KTP_{RPS}$	$1/^{\circ}C$	0.07	0.07

### 8.2.1.1.5 盐度的影响

盐度对淡水植物枝条生长的影响由下式给出

$$f_4(S) = \frac{STOXS^2}{STOXS^2 + S^2} \quad (8.143)$$

其中,

STOXS是生长减半的盐度 (ppt) , 以及

S是由流体动力学模型提供的水柱盐度 (ppt)

### 8.2.1.1.6 生根植物密度的影响

生根植物密度对生长的影响如下

$$f_5(RPS) = 1 - \left( \sum_{species} \frac{RPS}{RPS_{sat}} \right)^2 \quad (8.144)$$

其中RPSsat是密度饱和参数 ( $g C/m^2$ ) 。

总和表明, 当模拟多个物种时, 所有物种的总密度会影响每个物种

表8.9. 方程 (8.143) 中植物密度对生长的影响参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$RPS_{sat}$	$(g C/m^2)$	400	667

### 8.2.1.2 植物嫩芽的呼吸速率

植物嫩芽的呼吸速率被认为与温度有关

$$R_{RPS} = RREF_{RPS} \cdot \exp(KTR_{RPS} [T - TRREF_{RPS}]) \quad (8.145)$$

其中,

RREF<sub>RPS</sub>是嫩芽的参考呼吸速率 (1/天)

T是温度( $^{\circ}C$ ) 由流体动力学模型提供

TRREF<sub>RPS</sub>是枝条呼吸的参考温度( $^{\circ}C$ ) , 以及

$KTP_{RPS}$ 是温度对枝条呼吸的影响 ( $1/^\circ C^2$ )。

表8.10.佛罗里达海草模型中的芽呼吸参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$RREF_{RPS}$	1/day	0.01	0.029
$KTR_{RPS}$	dimensionless	0.07	0.07
$TRREF_{RPS}$	$^\circ C$	28	31

### 8.2.1.3植物枝条的非呼吸损失率

嫩芽的非呼吸损失率被认为与温度有关。

$$L_{RPS} = LREF_{RPS} \cdot \exp(KTL_{RPS} [T - TLREF_{RPS}]) \quad (8.146)$$

其中,

$LREF_{RPS}$ 是嫩芽的参考损失率 (1/天)

T是温度( $^\circ C$ ) 由流体动力学模型提供,

$TLREF_{RPS}$ 是枝条的参考温度( $^\circ C$ ) , 以及

$KTL_{RPS}$ 是温度对枝条损失的影响 ( $1/^\circ C^2$ )。

表8.11.佛罗里达海草模型中非呼吸损失的枝条死亡率参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$LREF_{RPS}$	1/day	0.001	0.004
$KLR_{RPS}$	dimensionless	0.07	0.07
$TLREF_{RPS}$	$^\circ C$	28	28

### 8.2.1.4碳从根到芽的运输

C从根到芽的运输被定义为对芽的正向运输。可以使用两种配方；第一个是基于观测到的地上部与根部的生物量比

$$JRP_{RS} = KRPO_{RS} \cdot (RPR - RORS \cdot RPS) \quad (8.147)$$

$$RORS = \frac{RPR_{obs}}{RPS_{obs}} \quad (8.148)$$

其中,

$KRPO_{RS}$ 是根到茎的转移速率，遵循观察到的比率（1/天），以及  
 $RORS$ 是观测到的根C与茎C的比值（无量纲）。

并且第二制剂在对芽不利的光照条件下将根C转移到芽C

$$JRP_{RS} = KRP_{RS} \left( \frac{I_{SS}}{I_{SS} + I_{SSS}} \right) RPR \quad (8.149)$$

其中，

$KRP_{RS}(X_{Tb}, X_{Hb})$ 是根到茎的转移速率（1/天），

$I_{SS}$ 是射出面处的太阳能比（ $W/m^2$ ），

$I_{SSS}$ 是拍摄表面的半饱和太阳光比（ $W/m^2$ ）

表8.12.方程（8.148）中的根-茎传输参数

Parameter	Dimension	Generic	Thalassia	Halodule
$KRPO_{RS}$	1/day	constant	5E-4	1E-5
$RORS$	dimensionless	constant	0.0	0.0
$KRP_{RS}$	1/day	constant	5E-4	1E-5
$I_{SSS}$	$W/m^2$	constant	0.0	0.0

### 8.2.1.5植物根系的呼吸速率

假设植物根系的呼吸速率与温度有关

$$R_{RPR} = RREF_{RPR} \cdot \exp(KTR_{RPR} [T - TRREF_{RPR}]) \quad (8.150)$$

其中，

$RREF_{RPR}$ 是根的参考呼吸速率（1/天），

$T$ 是温度( $^{\circ}C$ ) 由流体动力学模型提供，

$TRREF_{RPR}$ 是根部呼吸的参考温度( $^{\circ}C$ )，以及

$KTR_{RPR}$ 是温度对枝条呼吸的影响（ $1/^{\circ}C^2$ ）

表8.13.方程（8.150）中的根部呼吸参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$RREF_{RPR}$	1/day	0.0025	0.011
$KTR_{RPR}$	dimensionless	0.07	0.07
$TRREF_{RPR}$	°C	28	31

### 8.2.1.6 植物根系的非呼吸损失率

嫩芽的非呼吸损失率被认为与温度有关。

$$L_{RPR} = LREF_{RPR} \cdot \exp(KTL_{RPR}[T - TLREF_{RPR}]) \quad (8.151)$$

表8.14. 方程 (8.151) 中的根系死亡率参数

Parameter	Units	Thalassia	Halodule
$LREF_{RPR}$	1/day	1E-4	4E-4
$KLR_{RPR}$	dimensionless	0.07	0.07
$TLREF_{RPR}$	°C	28	28

### 8.2.1.7 表生植物的生产率

植物枝条上附生植物的产量或生长速率由下式给出

$$P_{RPE} = PM_{RPE} \cdot f_W(N) \cdot f_2(I) \cdot f_3(T) \cdot f_4(RPE, RPS) \quad (8.152)$$

其中,

$PM_{RPE}$ 是植物新芽在最佳条件下的最大生长速率 (1/天),

$f_1(N)$ 是次优营养浓度 ( $0 \leq f_1 \leq 1$ ) 的影响,

$f_2(I)$ 是次优光强 ( $0 \leq f_2 \leq 1$ ) 的影响,

$f_3(T)$ 是次优温度 ( $0 \leq f_3 \leq 1$ ) 的影响, 以及

$f_4(RPE, RPS)$ 是附生植物和寄主根密度的影响 ( $0 \leq f_4 \leq 1$ )

#### 8.2.1.7.1 营养物质对表生植物生长的影响

附生植物的营养限制由

$$f_1(N) = \min \left( \frac{NH_4 + NO_3}{KHN_{RPE} + NH_4 + NO_3}, \frac{PO_4d}{KHP_{RPE} + PO_4d} \right) \quad (8.153)$$

其中,

$NH_4$ 是以N表示的 $NH_4^+$ 浓度 ( $g N/m^3$ ) ,

$NO_3$ 为 $NO^{-3}+NO^{-2}$ 浓度, 单位为N ( $g N/m^3$ ) ,

$KHN_{RPE}$ 是附生植物氮吸收的半饱和常数 ( $g N/m^3$ ) ,

$PO_4d$ 是溶解的 $PO_4^{-3}$ 浓度, 以P表示 ( $g P/m^3$ ) , 以及

$KHP_{RPE}$ 是附生植物吸收磷的半饱和常数 ( $gP/m^3$ )

### 8.2.1.7.2光照对附生植物生长的影响

附生植物生长的光限制基于Monod型方程 (例如Bunch等人 (2000) ) :

$$f_2(I) = \left( \frac{I_{RPE}}{I_{RPE} + KHI_{RPE}} \right) \quad (8.154)$$

其中,

$KHI_{RPE}$ 是附生植物光限制的半饱和常数 ( $W/m^2$ ) 。

树冠上的平均光照强度

$$I_{RPEA} = \frac{I_{ws}}{K_{essic} \cdot H_{RPS}} \exp(-K_{essic} \cdot (H - H_{RPS})) \cdot (1 - \exp(-K_{essic} \cdot H_{RPS})) \quad (8.155)$$

其由方程 (8.134) 得出, 其中 $K_{cRPE}=0$ 。方程 (8.153) 可以在拍摄过程中取平均值给予的

遮篷

$$f_{2avg}(I) = \frac{1}{K_{essic} \cdot H_{RSP}} \ln \left( \frac{KHI_{RPE} + I_{ct} \exp(-K_{essic} \cdot (H - H_{RSP}))}{KHI_{RPE} + I_{ct} \exp(-K_{essic} \cdot H)} \right) \quad (8.156)$$

$$I_{ct} = I_{ws} \cdot \exp(-K_{essic} \cdot (H - H_{RSP})) \quad (8.157)$$

### 8.2.1.7.3温度对表生植物生长的影响

温度对附生植物生长的影响如下

$$f_3(T) = \begin{cases} \exp(-KTP1_{RPE}[T - TP1_{RPE}]^2), & T \leq TP1_{RPE} \\ 1, & TP1_{RPE} < T < TP2_{RPE} \\ \exp(-KTP2_{RPE}[T - TP2_{RPE}]^2), & T \geq TP2_{RPE} \end{cases} \quad (8.158)$$

其中,

T是温度( $^{\circ}C$ ) 由流体动力学模型提供,

$TP1_{RPE} < T < TP2_{RPE}$  是生产附生植物的最佳温度范围( $^{\circ}C$ ) ,  
 $KTP1_{RPE}$  温度低于  $TP1_{RPE}$  对附生植物产量的影响 ( $1/^{\circ}C^2$ ) , 以及  
 $KTP2_{RPE}$  温度高于  $TP2_{RPE}$  对附生植物产量的影响 ( $1/^{\circ}C^2$ )

#### 8.2.1.7.4 表生植物和生根植物密度对表生植物生长的影响

生根植物密度对生长的影响如下

$$f_4(RPE, RPS) = 1 - \left( \frac{RPE \cdot \delta_{RPE}}{W_{RPE} \sum N_{species} \left( \frac{2 \cdot RPS \cdot \delta_{RPS}}{W_{RPS}} \right)} \right)^2 \quad (8.159)$$

其中,

$\delta_{RPE}$  是表生植物干质量与C质量的比值

$W_{RPE}$  是单位芽面积的最大附生质量

#### 8.2.1.8 表生植物的呼吸速率

附生植物的呼吸速率被认为与温度有关

$$R_{RPE} = RREF_{RPE} \cdot \exp \left( KTR_{RPE} [T - TRREF_{RPE}]^2 \right) \quad (8.160)$$

其中,

$RREF_{RPE}$  是附生植物的参考呼吸速率 (1/天) ,

$T$  是温度( $^{\circ}C$ ) 由流体动力学模型提供,

$TRREF_{RPE}$  是附生植物呼吸的参考温度( $^{\circ}C$ ) , 以及

$KTR_{RPE}$  是温度对附生植物呼吸的影响 ( $1/^{\circ}C^2$ )

#### 8.2.1.9 与有机碳 (OC) 的耦合

有根植物和附生植物以及水柱 (w) 和床OC物种之间的相互作用由下式给出

$$\begin{aligned} \frac{\partial RPOC_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FCR_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FCRL_{RPS} \cdot L_{RPS}) RPS \\ & + \frac{1}{H} (FCR_{RPE} \cdot R_{RPE} + FCRL_{RPE} \cdot L_{RPE}) RPE + \frac{1}{H} FCRL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPD \end{aligned} \quad (8.161)$$

$$\frac{\partial RPOC_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FCR_{RPR} \cdot R_{RPR} + FCRL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPR \quad (8.162)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial LPOC_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FCL_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FCLL_{RPS} \cdot L_{RPS}) RPS \\ & + \frac{1}{H} (FCL_{RPE} \cdot R_{RPE} + FCLL_{RPE} \cdot L_{RPE}) RPE + \frac{1}{H} FCLL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPD \end{aligned} \quad (8.163)$$

$$\frac{\partial LPOC_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FCL_{RPR} \cdot R_{RPR} + FCLL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPR \quad (8.164)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial DOC_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FCD_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FCDL_{RPS} \cdot L_{RPS}) RPS \\ & + \frac{1}{H} (FCD_{RPE} \cdot R_{RPE} + FCDL_{RPE} \cdot L_{RPE}) RPE + \frac{1}{H} FCDL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPD \end{aligned} \quad (8.165)$$

$$\frac{\partial DOC_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FCD_{RPR} \cdot R_{RPR} + FCDL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPR \quad (8.166)$$

其中,

RPOC是RPOC的浓度 (gC/m<sup>3</sup>) ,

LPOC是LPOC的浓度 (gC/m<sup>3</sup>) ,

DOC是DOC的浓度 (gC/m<sup>3</sup>) ,

FCR是作为RPOC产生的呼吸C的分数,

FCL是作为LPOC产生的呼吸的C的分数,

FCD是以DOC形式产生的呼吸C的分数,

FCRL是作为RPOC产生的未呼吸的C的分数,

FCLL是作为LPOC产生的未呼吸的C的分数,

FCDL是以DOC形式产生的未呼吸的C的分数,

H为水柱深度

B是床的深度。



### 8.2.1.10与溶解氧(DO)的耦合

根系植物和附生植物与DO的相互作用由

$$\frac{\partial DO_W}{\partial t} = \frac{1}{H} (P_{RPS} \cdot RPSOC \cdot RPS + P_{RPE} \cdot RPEOC \cdot RPE) \quad (8.167)$$

其中,

DO是DO的浓度 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>) ,

RPSOC是植物嫩芽的氧碳比 (g O<sub>2</sub>/gC) , 以及

RPEOC是附生植物的氧碳比 (g O<sub>2</sub>/gC) 。

### 8.2.1.11与磷(P)的耦合

根系植物和附生植物与水柱和床 P 之间的相互作用由下式给出

$$\begin{aligned} \frac{\partial RPOP_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FPR_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FPRL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSPC \cdot RPS \\ & + \frac{1}{H} (FPR_{RPE} \cdot R_{RPE} + FPRL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPEPC \cdot RPE \\ & + \frac{1}{H} FPRL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSPC \cdot RPD \quad (8.168) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial RPOP_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FPR_{RPR} \cdot R_{RPR} + FPRL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRPC \cdot RPR \quad (8.169)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial LPOP_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FPL_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FPLL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSPC \cdot RPS \\ & + \frac{1}{H} (FPL_{RPE} \cdot R_{RPE} + FPLL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPEPC \cdot RPE \\ & + \frac{1}{H} FPLL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSPC \cdot RPD \quad (8.170) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial LPOP_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FPL_{RPR} \cdot R_{RPR} + FPLL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRPC \cdot RPR \quad (8.171)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial DOP_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FPD_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FPD_{L_{RPS}} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSPC \cdot RPS \\ & + \frac{1}{H} (FPD_{RPE} \cdot R_{RPE} + FPD_{L_{RPE}} \cdot L_{RPE}) \cdot RPEPC \cdot RPE \\ & + \frac{1}{H} FCD_{L_{RPD}} \cdot L_{RPD} \cdot RPSPC \cdot RPD \end{aligned} \quad (8.172)$$

$$\frac{\partial DOP_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FPD_{RPR} \cdot R_{RPR} + FPD_{L_{RPR}} \cdot L_{RPR}) RPRPC \cdot RPR \quad (8.173)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial PO4t_W}{\partial t} = & \frac{1}{H} (FPI_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FPI_{L_{RPS}} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSPC \cdot RPS \\ & + \frac{1}{H} (FPI_{RPE} \cdot R_{RPE} + FPI_{L_{RPE}} \cdot L_{RPE}) \cdot RPEPC \cdot RPE \\ & + \frac{1}{H} FCIL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSPC \cdot RPD - \frac{1}{H} F_{RPSPW} \cdot R_{RPS} \cdot RPSPC \cdot RPS \\ & - \frac{1}{H} P_{RPE} \cdot RPEPC \cdot RPE \end{aligned} \quad (8.174)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial PO4t_B}{\partial t} = & \frac{1}{B} (FPI_{RPR} \cdot R_{RPR} + FPI_{L_{RPR}} \cdot L_{RPR}) RPRPC \cdot RPR - \\ & \frac{1}{H} (1 - F_{RPSPW}) P_{RPS} \cdot RPRPC \cdot RPS \end{aligned} \quad (8.175)$$

$$F_{RPSPW} = \frac{KHP_{RPR} PO4d_w}{KHP_{RPR} PO4d_w + KHP_{RPS} PO4d_b} \quad (8.176)$$

其中,

RPOP为RPOP浓度 (g P/m<sup>3</sup>) ,

LPOP为LPOP浓度 (g P/m<sup>3</sup>) ,

DOP为DOP浓度 (g P/m<sup>3</sup>) ,

PO4t = PO4d+PO4p为PO4t (g P /m<sup>3</sup>),

PO4d 是溶解的 PO<sup>-3</sup><sub>4</sub> (g P/m<sup>3</sup>) 的浓度,

PO4p 是吸附的 PO<sup>-3</sup><sub>4</sub>的浓度 (g P /m<sup>3</sup>),

FPR 是作为 RPOP 产生的呼吸 P 的分数,

FPL 是作为 LPOP 产生的呼吸 P 的分数,

FPD 是作为 DOP 产生的呼吸 P 的分数,

FPI 是作为 PO4t 产生的呼吸 P 的分数,

FPRL 是作为 RPOP 产生的非呼吸 P 的分数,  
FPLL 是作为 LPOP 产生的非呼吸 P,  
FPDL 是作为 DOP 产生的非呼吸 P 的分数,  
FPIL 是作为 PO<sub>4t</sub> 产生的非呼吸 P 的分数,  
RSPC 是植物枝条 P 与 C 的比率 (g P / gC) ,  
RPRPC 是植物根系 P 与 C 的比率 (g P / gC) ,  
RPEPC 是附生植物 P 与 C 的比率 (g P / gC) ,  
FRPSPW 是从水柱吸收 PO<sub>4d</sub> 的分数,  
KHPRPS 是从水柱吸收 P 的半饱和常数 (g P/m<sup>3</sup>),  
KHPRPR 是从床吸收 P 的半饱和常数 (g P/m<sup>3</sup>).

#### 8.2.1.12与氮(N)的耦合

根系植物和附生植物与水柱和床层N的相互作用由下式给出

$$\begin{aligned}
\frac{\partial RPON_W}{\partial t} &= \frac{1}{H} (FNR_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FNRL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSNC \cdot RPS \\
&\quad + \frac{1}{H} (FNR_{RPE} \cdot R_{RPE} + FNRL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPENC \cdot RPE \\
&\quad + \frac{1}{H} FNRL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSNC \cdot RPD \quad (8.177)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial RPON_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FNR_{RPR} \cdot R_{RPR} + FNRL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRNC \cdot RPR \quad (8.178)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial LPON_W}{\partial t} &= \frac{1}{H} (FNL_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FNLL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSNC \cdot RPS \\
&\quad + \frac{1}{H} (FNL_{RPE} \cdot R_{RPE} + FNLL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPENC \cdot RPE \\
&\quad + \frac{1}{H} FNLL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSNC \cdot RPD \quad (8.179)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial LPON_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FNL_{RPR} \cdot R_{RPR} + FNLL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRNC \cdot RPR \quad (8.180)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial DON_W}{\partial t} &= \frac{1}{H} (FND_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FNDL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSNC \cdot RPS \\
&\quad + \frac{1}{H} (FND_{RPE} \cdot R_{RPE} + FNDL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPENC \cdot RPE \\
&\quad + \frac{1}{H} FNDL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSNC \cdot RPD \quad (8.181)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial DON_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FND_{RPR} \cdot R_{RPR} + FNDL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRNC \cdot RPR \quad (8.182)$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial NH4_W}{\partial t} &= \frac{1}{H} (FNI_{RPS} \cdot R_{RPS} + (1 - F_{RPSD}) \cdot FNIL_{RPS} \cdot L_{RPS}) \cdot RPSNC \cdot RPS \\
&\quad + \frac{1}{H} (FNI_{RPE} \cdot R_{RPE} + FNIL_{RPE} \cdot L_{RPE}) \cdot RPENC \cdot RPE \\
&\quad + \frac{1}{H} FNIL_{RPD} \cdot L_{RPD} \cdot RPSNC \cdot RPD \\
&\quad - \frac{1}{H} PN_{RPS} \cdot F_{RPSNW} \cdot R_{RPS} \cdot RPSNC \cdot RPS \\
&\quad - \frac{1}{H} PN_{RPE} \cdot P_{RPE} \cdot RPENC \cdot RPE \quad (8.183)
\end{aligned}$$

$$\frac{\partial NH4_B}{\partial t} = \frac{1}{B} (FNI_{RPR} \cdot R_{RPR} + FNIL_{RPR} \cdot L_{RPR}) RPRNC \cdot RPR - \frac{1}{H} PN_{RPE} (1 - F_{RPSW}) P_{RPS} \cdot RPSNC \cdot RPS \quad (8.184)$$

$$\frac{\partial NO3_W}{\partial t} = -\frac{1}{H} (1 - PN_{RPS}) F_{RPSNW} \cdot P_{RPS} \cdot RPSNC \cdot RPS - \frac{1}{H} (1 - PN_{RPE}) P_{RPE} \cdot RPENC \cdot RPE \quad (8.185)$$

$$\frac{\partial NO3_B}{\partial t} = -\frac{1}{H} (1 - PN_{RPS}) (1 - F_{RPSNW}) P_{RPS} \cdot RPSNC \cdot RPS \quad (8.186)$$

$$PN_{RPS} = \frac{NH4 \cdot NO3}{(KHNP_{RPS} + NH4)(KHNP_{RPS} + NO3)} + \frac{NH4 \cdot KHNP_{RPS}}{(NH4 + NO3)(KHNP_{RPS} + NO3)} \quad (8.187)$$

$$PN_{RPE} = \frac{NH4 \cdot NO3}{(KHNP_{RPE} + NH4)(KHNP_{RPE} + NO3)} + \frac{NH4 \cdot KHNP_{RPE}}{(NH4 + NO3)(KHNP_{RPE} + NO3)} \quad (8.188)$$

$$F_{RPSNW} = \frac{KHNRPR(NH4 + NO3)_w}{KHNRPR(NH4 + NO3)_w + KHNRPS(NH4 + NO3)_b} \quad (8.189)$$

其中,

RPON是RPON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>),

LPON是LPON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>),

DON是DON的浓度 (g N/m<sup>3</sup>),

NH4是NH<sup>+</sup><sub>4</sub>作为N的浓度 (g N/m<sup>3</sup>),

NO3是NO<sup>-</sup><sub>3</sub>+NO<sup>-</sup><sub>2</sub>作为N的浓度 (g N/m<sup>3</sup>),

FNR是作为RPON产生的呼吸N的分数,

FNL是作为LPON产生的呼吸N的分数,

FND是作为DON产生的呼吸N的分数,

FNI是作为NH<sup>+</sup><sub>4</sub>产生的呼吸N的分数,

FNRL是作为RPON产生的非呼吸N的分数,

FNLL是以LPON形式产生的非呼吸氮的比例,

FNDL是以DON形式产生的非呼吸氮的比例,

FNIL是以NH<sup>+</sup><sub>4</sub>形式产生的非呼吸氮的比例,

RPSNC为植物地上部氮碳比 (g; N; per gC) ,

RPRNC为植物根系氮碳比 (g; N; per gC) ,

$F_{RPSNW}$ 是从水柱中吸收 $NH_4$ 和 $NO_x$ 的植物地上部分数,

$PN_{RPS}$ 是植物地上部 $NH_4^+$ 偏好分数,

$KHNP_{RPS}$ 是植物地上部N偏好的饱和系数 (g; N; per gC),

$PN_{RPE}$ 是附生植物地上部 $NH_4^+$ 偏好分数,

$KHNP_{RPE}$ 是附生植物地上部N偏好的饱和系数 (g; N; per gC),

$KHN_{RPS}$ 是从水柱中吸收N的半饱和常数 (g; N; per gC),

$KHN_{RPR}$ 是从床层中吸收N的半饱和常数 (g N/m<sup>3</sup>)。

### 8.3. 沉积物成岩作用与通量公式

EFDC+水质模型提供了三个选项, 用于定义营养物质和DO的沉积物-水界面通量; (1) 外部强迫的时空恒定通量, (2) 外部强迫的空间和时间可变通量, 以及(3) 用沉积物成岩模型模拟的内部耦合通量。受沉积物-水界面扩散交换控制的水质状态变量包括 $PO_4^{-3}$ 、 $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 、 $SiO_2$ 、COD和DO。前两个选项要求根据实地调查中观察到的特定地点数据或基于文献和沉积物床特征的最佳估计, 将沉积物通量分配为空间/时间强迫函数。前两个选项虽然可用于根据历史数据集进行模型校准, 但不能提供评估未来水质状况所需的因果预测能力, 而未来水质状况可能是由于实施流域径流污染物负荷排放而导致的。第三种选择, Di-Toro等人开发的沉积物成岩作用模型的激活。(2001) 确实提供了因果预测能力, 以评估水质条件如何随着替代减载或管理方案的实施而变化。

EFDC+水质模型中模拟的活颗粒和非活颗粒OC沉积与EFDC+沉积物成岩模型内部耦合。沉积物成岩作用模型基于Di-Toro等人(2001)的沉积物通量模型, 描述了沉积物床中颗粒有机物的分解、沉积物-水界面DO的消耗以及溶解成分( $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 、 $PO_4^{-3}$ 、 $SiO_2$ 、COD)在沉积物-水交界面上的交换。EFDC+沉积物通量模型的状态变量为沉积物床温度、沉积物床POC、PON、POP、 $PO_4^{-3}$ 、 $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 、 $SiO_2$ 和 $S_2/CH_4$ 的孔隙水浓度。沉积物成岩作用模型计算了COD、SOD、 $PO_4^{-3}$ 、 $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 和 $SiO_2$ 的沉积物水通量。表8.15列出并描述了为典型湖泊沉积物通量模型建模的状态变量。本节概述了源术语和汇术语, 并对每个状态变量组进行了描述。状态变量的详细信息Di-Toro等人(2001)提出了沉积物成岩作用模型的方程、动力学

项和数值求解方法；吉（2008）；Park等人（1995年）。

表8.15.EFDC+沉积物成岩模型状态变量

No.	Name	Bed Layer	Units
1	POC-G1	Layer-2	$g/m^3$
2	POC-G2	Layer-2	$g/m^3$
3	POC-G3	Layer-2	$g/m^3$
4	PON-G1	Layer-2	$g/m^3$
5	PON-G2	Layer-2	$g/m^3$
6	PON-G3	Layer-2	$g/m^3$
7	POP-G1	Layer-2	$g/m^3$
8	POP-G2	Layer-2	$g/m^3$
9	POP-G3	Layer-2	$g/m^3$
10	SiP	Layer-2	$g/m^3$
11	$S_2^-/CH_4$	Layer-1	$g/m^3$
12	$S_2^-/CH_4$	Layer-2	$g/m^3$
13	$NH_4^+$	Layer-1	$g/m^3$
14	$NH_4^+$	Layer-2	$g/m^3$
15	$NO_3^-$	Layer-1	$g/m^3$
16	$NO_3^-$	Layer-2	$g/m^3$
17	$PO_4^{3-}$	Layer-1	$g/m^3$
18	$PO_4^{3-}$	Layer-2	$g/m^3$
19	Available- $SiO_2$	Layer-1	$g/m^3$
20	Available- $SiO_2$	Layer-2	$g/m^3$
21	$NH_4^+$ -Flux		$g/m^2 - day$
22	$NO_3^-$ -Flux		$g/m^2 - day$
23	$PO_4^{3-}$ -Flux		$g/m^2 - day$
24	$SiO_2$ Flux		$g/m^2 - day$
25	SOD		$g/m^2 - day$
26	COD Flux		$g/m^2 - day$
27	Sediment Temperature		$^{\circ}C$

DiToro和Fitzpatrick（1993）开发的沉积物过程模型（以下简称D&F）与ICM结合用于切萨皮克湾水质建模（Cercio和Cole，1994）。对沉积物过程模型进行了轻微修改，并将其纳入EFDC+水质模型，以模拟沉积物和沉积物-水界面的过程。本节对EFDC+泥沙过程模型的描述来自Park等人（1995）。

$NO_3^-$ 状态变量（表8.15中的（15）、（16）和（22））表示模型中 $NO_3^-$ 和 $NO_2^-$ 的总和。

POM衰变率的差异是通过将一部分POM分配给不同的衰变类别来解释的（Westrich和Berner，1984）。沉积物中的聚甲醛分为三个G类或组分，代表表现出三种反应程度。G1（不稳定）馏分的半衰期为20天，G2（难熔）馏分的寿命为一年。G3（惰性）组分是非反应性的，

即在埋藏到深的、无活性的沉积物中之前，它不会发生显著的衰变。G类反应性的变化控制着沉积通量的变化将反映在成岩通量变化中的时间尺度。如果G1级将主导POM对沉积物的输入，那么POM成岩作用将不会引入显著的时间滞后，沉积通量的任何变化都将很容易反映在成岩作用通量中。

在沉积物模型中，海底沉积物被表示为两层（图8.4）。图8.4所示过程的细节将在下一节中讨论。上层（第1层）与水柱接触，根据上层水中的DO浓度，上层可能是有氧的或缺氧的。下层（第2层）永久缺氧。上层深度由氧气对沉积物的渗透决定，最大时仅占总深度的一小部分。因为 $H_1 (\sim 0.1\text{cm}) \ll H_2$ ,

$$H = H_1 + H_2 \approx H_2 \tag{8.190}$$

where,

H为总深度（约10cm），

H1为上层深度，

H2为下层深度。

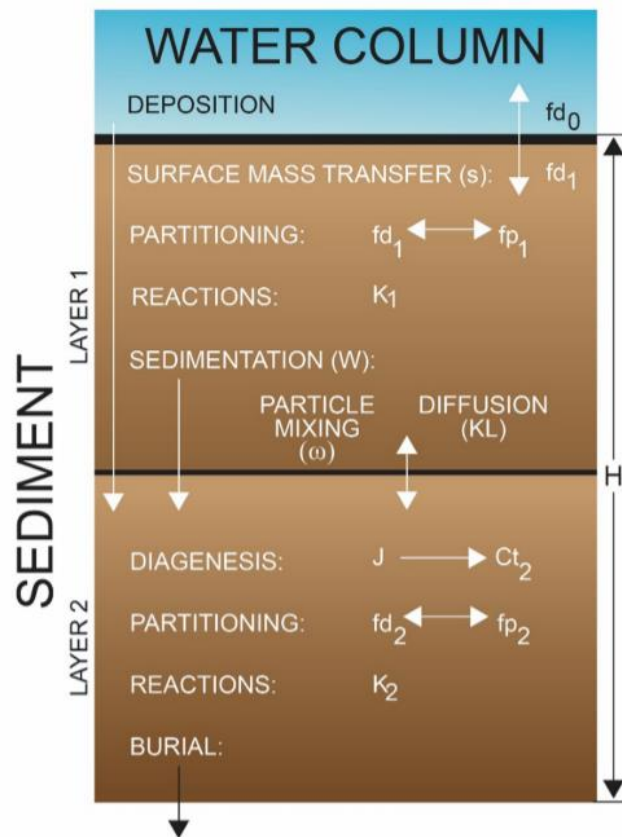


图 8.5. 泥沙过程模型中包含的泥沙层次和过程



该模型包含三个基本过程（图8.6）；（1）POM的沉积通量，（2）POM的成岩作用，以及（3）由此产生的沉积通量。沉积物模型是由POC、PON、POP和PSi从上覆水到沉积物的净沉降（沉积通量）驱动的。由于上层的厚度可以忽略不计（方程（8.191）），沉积从水柱直接进行到下层。在下层，该模型模拟了沉积聚甲醛的成岩作用（矿化或衰变），从而产生氧气需求和无机营养物质（成岩作用通量）。第三个基本过程是成岩作用产生的物质的通量（沉积物通量）。氧气需求，如S<sub>2</sub>（在盐水中）或CH<sub>4</sub>（在淡水中），从沉积物中经过三条路径；（1）沉积物-水界面的氧化作用为SOD，（2）以COD的形式输出到水柱中，或（3）埋藏到深层、无活性的沉积物中。

成岩作用产生的无机营养物质通过两条途径从沉积物中排出；（1）释放到水柱中，或（2）埋藏到深层、不活跃的沉积物中（图8.6）。

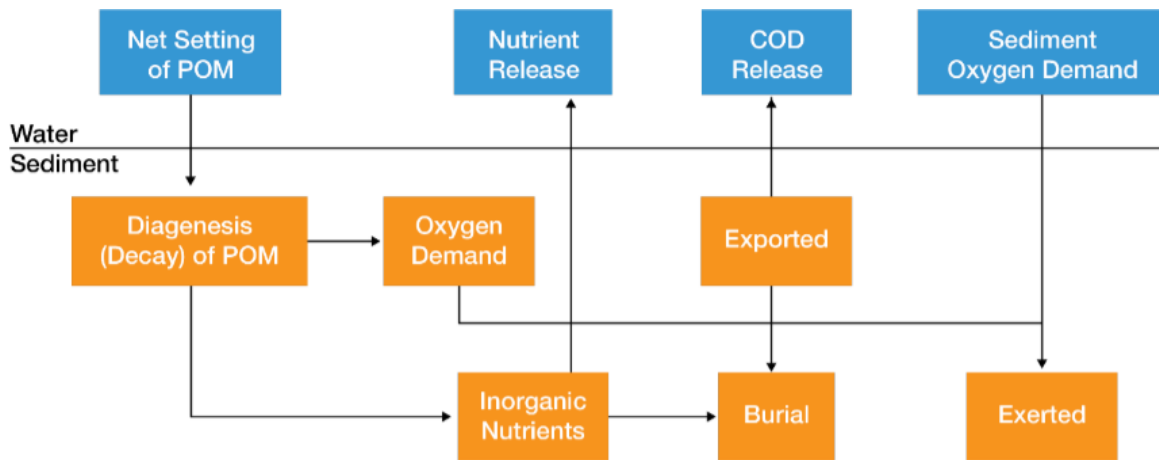


图8.5.泥沙过程模型示意图

本节描述了三个基本过程，每个状态变量都有反应和源/汇。求解方法包括有限差分方程、求解方案、边界条件和初始条件。完整的模型文件可在DiToro和Fitzpatrick（1993）中找到。

### 8.3.1 沉积通量

沉积是一个将水柱模型与沉积物模型耦合的过程。因此，在水柱和沉积物模型中都可以表示沉积物。在水柱模型中，以下状态变量的控制质量平衡方程包含沉降项，这些沉降项表示沉积通量：

- 1.藻类群（方程（8.6））
- 2.RPOC和LPOC（方程（8.33）和（8.34））
- 3.RPOP和LPOP（方程（8.50）和（8.51）以及PO<sub>4</sub>t（方程（8.53））

4.RPON和LPON（方程（8.62）和（8.63））

5.SiP（方程（8.77））和SiA（方程（8.78））

沉积物模型接收这些POC、PON、POP和SiP的沉积通量。由于上层的厚度可以忽略不计（方程（8.190）），沉积被认为是从水柱直接进行到下层。由于沉积物模型根据反应性的时间尺度有三个G类聚甲醛（第8.3.1节），因此水柱的聚甲醛通量应根据其反应性划分为三个G级。然后，第*i*个G类（*i*=1、2或3）的沉积通量可以表示为：

$$J_{POC,i} = FCLP_i \cdot WS_{LP} \cdot LPOC^N + FCRP_i \cdot WS_{RP} \cdot RPOC^N + \sum_{algae} FCB_{x,i} \cdot WS_x \cdot B_x^N \quad (8.191)$$

$$J_{PON,i} = FNL P_i \cdot WS_{LP} \cdot LPON^N + FNRP_i \cdot WS_{RP} \cdot RPON^N + \sum_{algae} FNB_{x,i} \cdot ANC_x \cdot WS_x \cdot B_x^N \quad (8.192)$$

$$J_{POP,i} = FPLP_i \cdot WS_{LP} \cdot LPOP^N + FPRP_i \cdot WS_{RP} \cdot RPOP^N + \sum_{algae} FPB_{x,i} \cdot APC \cdot WS_x \cdot B_x^N + \gamma_i \cdot WS_{TSS} \cdot PO4_p^N \quad (8.193)$$

$$J_{PSi} = WS_d \cdot PSi^N + ASC_d \cdot WS_d \cdot B_d^N + WS_{TSS} \cdot SA_p^N \quad (8.194)$$

其中，

$J_{POM,i}$ 是POM（M=C、N或P）进入第*i*个G类的沉积通量（G/m<sup>2</sup>/天），

$J_{PSi}$ 是SiP的沉积通量（g Si/m<sup>2</sup>/天），

$FCLP_i, FNL P_i$ 和 $FPLP_i$ 分别是进入沉积物中第*i*个G类的水柱LPOC、LPON和LPOP的分数，

$FCRP_i, FNRP_i$ 和 $FPRP_i$ 分别是沉积物中第*i*个G类的水柱RPOC、RPON和RPOP的分数，

$FCB_{x,i}, FNB_{x,i}$ 和 $FPB_{x,i}$ 分别是在沉积物中进入第*i*个G类的藻类组*x*中POC、PON和POP的分数，对于*i*=1， $\gamma_i=1$ ，对于*i*=2或3， $\gamma_i=0$

在源代码中，泥沙过程模型是在水柱水质模型之后求解的，并且使用 $t=t_n$ 时的水柱条件计算的通量用于计算 $t=t_n+\theta$ 时的水质变量。方程8.191~8.194中的上标N表示动力学过程更新后的变量。

在方程（8.193）中，吸附的 $PO_4^{3-}$ 的沉降被认为有助于不稳定的G1池，而在方程（8.194）中，吸收的 $SiO_2$ 的沉降有助于 $J_{PSi}$ ，以避免为无机颗粒产生额外的沉积通量。分配系数之和应为

一:

$$\sum_i FCLP_i = \sum_i FNLP_i = \sum_i FPLP_i = \sum_i FCRP_i =$$

$$\sum_i FNRP_i = \sum_i FPRP_i = \sum_i FCB_{x,i} = \sum_i FNB_{x,i} = \sum_i FPB_{x,i} = 1.$$

EFDC+水柱模型（第8.1.3.2节）中定义的沉降速度 $WS_{LP}$ 、 $WS_{RP}$ 、 $WS_x$ 和 $WS_{TSS}$ 为净沉降速度。如果选择TAM作为吸附位点的测量，则 $WS_{TSS}$ 被方程（8.193）和（8.194）中的 $WS_s$ 取代。

### 8.3.2成岩通量

泥沙模型与水柱模型的另一个耦合点是泥沙流量。沉积物通量的计算要求已知成岩作用通量的大小。使用沉积POC、PON和POP的质量平衡方程明确计算成岩作用通量。由于SiP的溶解，沉积物中产生了溶解的SiO<sub>2</sub>。由于溶解过程不同于细菌介导的成岩过程，因此将其单独提出。在质量平衡方程中，POM的沉积通量是源项，沉积物中POM的衰变产生成岩作用通量。POM质量平衡方程的积分提供了成岩作用通量，这些通量是沉积物中NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>、PO<sub>4</sub><sup>-3</sup>和S<sup>-2</sup>/CH<sub>4</sub>质量平衡方程输入。

由于上层厚度可忽略不计（方程（8.190）），沉积通量被认为直接进入下层（方程（8.191）至（8.194）），成岩作用被认为仅发生在下层。POC、PON和POP以及不同G类的质量平衡方程相似。缺氧下层第i个G类（i=1、2或3）的质量平衡方程式可表示为：

$$H_2 \frac{\partial G_{POM,i}}{\partial t} = -K_{POM,i} \cdot \theta_{POM,i}^{T-20} \cdot G_{POM,i} \cdot H_2 - W \cdot G_{POM,i} + J_{POM,i} \quad (8.195)$$

其中，

$G_{POM,i}$ 是第2层第i个G类中POM（M=C、N或P）的浓度（G/m<sup>3</sup>）

$K_{POM,i}$ 是第i个G类POM在20°C的衰减率第2层中的（1/天）

$\theta_{POM,i}$ 是 $K_{POM,i}$ 的温度调节常数，

T是沉积物温度(°C)

W是埋葬速率（米/天）

由于G3类是惰性因此 $K_{POM,3}=0$

一旦求解了  $G_{POM,1}$  和  $G_{POM,2}$  的质量平衡方程，就可以根据两个反应性 G 类的矿化速率计算成岩通量：

$$J_M = \sum_{i=1}^2 K_{POM,i} \cdot \theta_{POM,i}^{T-20} \cdot G_{POM,i} \cdot H_2 \quad (8.196)$$

$J_M$ 为M=C、N或P的成岩通量 (g/m<sup>2</sup>/天)

### 8.3.3 泥沙通量

#### 8.3.3.1 基本方程

聚甲醛的矿化作用产生可溶性中间体，这些中间体在上一节中被量化为成岩作用通量。中间产物在好氧层和缺氧层中发生反应，部分作为沉积物通量返回到上覆水中。沉积物通量的计算需要NH<sup>+</sup><sub>4</sub>、NO<sup>-</sup><sub>3</sub>、PO<sup>-</sup><sub>4</sub>、S<sup>-</sup><sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>和可用SiO<sub>2</sub>的质量平衡方程。本节描述了模型中NH<sup>+</sup><sub>4</sub>、NO<sup>-</sup><sub>3</sub>、PO<sup>-</sup><sub>4</sub>和S<sup>-</sup><sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>的通量部分。

在上层，熔剂部分包括的过程是：

1. 层1和上层水之间的溶解部分的交换，
2. 通过扩散传输在层1和层2之间交换溶解的部分，
3. 通过颗粒混合在层1和层2之间交换颗粒级分，
4. 由于掩埋到下层（第2层）而造成的损失，
5. 通过反应移除（水槽），以及
6. 内部来源。

由于上层相当薄（H<sub>1</sub>~0.1 cm，方程（8.190）），表面传质系数约为0.1 m/天，溶解营养物质在上层的停留时间为：H/s~10<sup>-2</sup>天。因此，在上层中进行了稳态近似。那么上层NH<sup>+</sup><sub>4</sub>、NO<sup>-</sup><sub>3</sub>、PO<sup>-</sup><sub>4</sub>或S<sup>-</sup><sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>的质量平衡方程为：

$$H_1 \frac{\partial C_{t1}}{\partial t} = 0 = s(f_{d0} \cdot C_{t0} - f_{d1} \cdot C_{t1}) + KL(f_{d2} \cdot C_{t2} - f_{d1} \cdot C_{t1}) + \omega(f_{p2} \cdot C_{t2} - f_{p1} \cdot C_{t1}) - W \cdot C_{t1} - \frac{K_1^2}{s} C_{t1} + J_1 \quad (8.197)$$

其中，

$C_{t1}$ 和 $C_{t2}$ 分别为第1层和第2层中的总浓度 (g/m<sup>3</sup>)，

$C_{t0}$ 是上覆水中的总浓度 (g/m<sup>3</sup>)，

$S$ 是表面传质系数 (m/天)，

$KL$ 是第1层和第2层之间溶解部分的扩散速度 (m/天)，

$\omega$ 是第1层和第2层之间的颗粒混合速度 (m/天)，

$fd_0$ 是上覆水中总物质的溶解分数 ( $0 \leq fd_0 \leq 1$ ) ,

$fd_1$ 为第1层总物质的溶解分数 ( $0 \leq fd_1 \leq 1$ ) ,

$fp_1$ 是第1层中总物质的颗粒分数 ( $=1-fd_1$ ) ,

$fd_2$ 为第2层总物质的溶解分数 ( $0 \leq fd_2 \leq 1$ ) ,

$fp_2$ 是第2层中总物质的颗粒分数 ( $=1-fd_2$ ) ,

$k_1$ 是第1层中的反应速度 (m/天) , 以及

$J_1$ 是第1层中所有内部来源的总和 ( $g/m^2/天$ )

方程 (8.197) 中RHS的第一项代表了沉积物-水界面的交换。然后, 将泥沙模型与水柱模型耦合的从第1层到上覆水中的泥沙通量可表示为:

$$J_{aq} = s(fd_1 \cdot Ct_1 - fd_0 \cdot Ct_0) \quad (8.198)$$

其中,  $J_{aq}$ 为 $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 、 $PO_4^{3-}$ 或 $S_2/CH_4$ 向上覆水体的沉积物通量( $g/m^2/天$ )。方程 (8.198) 中使用的惯例是, 正通量是从沉积物到上覆水。在下层, 通量部分包括的过程是 (图8.5) :

- 1.通过扩散传输在层1和层2之间交换溶解的部分,
- 2.通过颗粒混合在层1和层2之间交换颗粒级分,
- 3.从第1层沉积并埋藏到深层无活性沉积物,
- 4.通过反应移除 (水槽) , 以及
- 5.内部来源, 包括成岩来源。

下层中 $NH_4^+$ 、 $NO_3^-$ 、 $PO_4^{3-}$ 或 $S_2/CH_4$ 的质量平衡方程为

$$H_2 \frac{\partial Ct_2}{\partial t} = -KL(fd_2 \cdot Ct_2 - fd_1 \cdot Ct_1) - \omega(fp_2 \cdot Ct_2 - fp_1 \cdot Ct_1) + W(Ct_1 - Ct_2) - K_2 \cdot Ct_2 + J_2 \quad (8.199)$$

其中,

$K_2$ 是第2层中的反应速度 (m/天) , 以及

$J_2$ 是包括第2层成岩作用在内的所有内部来源的总和 ( $g/m^2/天$ )。

沉积物中聚甲醛矿化产生的物质可能存在于溶解相和颗粒相中。这种分布直接影响返回到上覆水中的物质的大小。在方程 (8.197) 至 (8.199) 中, 使用线性分配系数对沉积物中溶解相和颗粒相之间的物质分布进行参数化。

溶解和颗粒组分由分配方程计算：

$$fd_1 = \frac{1}{1 + m_1 \cdot \pi_1} \quad fp_1 = 1 - fd_1 \quad (8.200)$$

$$fd_2 = \frac{1}{1 + m_2 \cdot \pi_2} \quad fp_2 = 1 - fd_2 \quad (8.201)$$

其中，

$m_1$ 和 $m_2$ 分别为第一层和第二层的固体浓度 (kg/l) ，

$\pi_1$ 和 $\pi_2$ 分别为第一层和第二层的分配系数 (每kg/l) 。

分配系数是每单位固体浓度 (即每单位可用吸附位) 的颗粒与溶解部分的比率。

除后两项外，方程 (8.197) 和 (8.199) 中的所有项对所有状态变量都是通用的，并在 5.3.1 节中描述。后两项分别代表反应和源/汇项。

### 8.3.3.2 泥沙通量的常用参数

泥沙通量所需的参数为  $s$ 、 $\omega$ 、 $KL$ 、 $W$ 、 $H_2$ 、 $m_1$ 、 $m_2$ 、 $\pi_1$ 、 $\pi_2$ 、 $K_1$ 、 $K_2$ 、 $J_1$ 和 $J_2$ 。其中， $K_1$ 、 $K_2$ 、 $J_1$ 、 $J_2$ 是可变的。其他常见参数 $W$ 、 $H_2$ 、 $m_1$ 和 $m_2$ 被指定为输入。本节描述了其余三个参数 $s$ 、 $\omega$ 、 $KL$ 的建模。

#### 8.3.3.2.1 表面传质系数

表面传质系数 $s$ 可以根据SOD和上覆水O浓度的比率来估计 (Di-Toro等人, 1990)：

$$s = \frac{D_1}{H_1} = \frac{SOD}{DO_0} \quad (8.202)$$

其中， $D$ 是第1层中的扩散系数 (m<sup>2</sup>/天)。

一旦计算出 $s$ ，就可以估计其他模型参数。

#### 8.3.3.2.2 颗粒物相混合系数

层1和层2之间的颗粒混合速度 $\omega$ 参数化为：

$$\omega = \frac{D_p \cdot \theta_{D_p}^{T-20}}{H_2} \frac{G_{POC,1}}{G_{POC,R}} \frac{DO_0}{KM_{D_p} + DO_0} \quad (8.203)$$

其中，

$D_p$ 是颗粒混合的表观扩散系数 (m<sup>2</sup>/天) ，

$\theta_{D_p}$ 是用于 $D_p$ 的温度调节的常数，

$G_{POC,R}$ 是 $G_{POC,1}$  (gC/m<sup>3</sup>) 的参考浓度, 以及

$K_{M_{DP}}$ 是氧气的颗粒混合半饱和常数 (g O<sub>2</sub>/m<sup>3</sup>)

通过估算 $D_p$ 来量化大型底栖动物对沉积物颗粒的强化混合 (生物扰动)。颗粒混合似乎与底栖生物量成正比(Matisoff, 1982), 而底栖生物量与沉积物中的碳输入量相关 (Robbins et al., 1989)。这是通过假设底栖生物量与可用的不稳定C成正比来参数化的,  $G_{POC,1}$ 和 $G_{POC,R}$ 是粒子混合速度在其标称值时的参考浓度。Monod型O依赖性解释了底栖生物量的O依赖性。

结果表明, 底水O与底栖生物量的关系存在滞后性。底栖生物量随着夏季的进行而增加。然而, 缺氧/低氧的发生使生物量急剧下降, 也对底栖生物的活动造成了压力。完全倾覆后, 底水O增加, 但种群不会立即恢复。因此, 颗粒混合速度与底栖生物量成正比, 并不随底水氧的增加而增加。底栖生物量在低氧事件后的恢复取决于许多因素, 包括低氧的严重程度和持续时间、组成物种和盐度 (Diaz et al., 1995)。

这种海底活动减少和迟滞的现象是基于LOWO对海底种群施加的应力的想法而参数化的。它类似于化学物质对生物体的毒性作用的模型(Mancini, 1983)。采用一阶微分方程, 其中底栖应力1) 仅在上覆O低于 $K_{M_{DP}}$ 时累积, 而2) 以一阶速率消散 (图8.7a):

$$\frac{\partial ST}{\partial t} = \begin{cases} -K_{ST} \cdot ST + \left(1 - \frac{DO_0}{K_{M_{DP}}}\right), & \text{if } DO_0 < K_{M_{DP}} \\ -K_{ST} \cdot ST, & \text{if } DO_0 > K_{M_{DP}} \end{cases} \quad (8.204)$$

其中,

ST是累积的海底压力 (天), 以及

$K_{ST}$ 是ST的一阶衰减率 (1/天)。

该公式的性质可以通过评估上覆水氧两种极端条件下的稳态应力来理解,  $DO_0$ 为:

$$DO_0 = 0, K_{ST} \cdot ST = 1 \quad f(ST) = (1 - K_{ST} \cdot ST) = 0$$

$$DO_0 \geq K_{M_{DP}}, K_{ST} \cdot ST = 0 \quad f(ST) = (1 - K_{ST} \cdot ST) = 1$$

无量纲表达式 $f(ST) = 1 - K_{ST} \cdot ST$ 似乎是量化影响的合适变量海底压力对海底生物量的影响以及由此产生的颗粒混合 (图8.7b)。

包括海底应力在内的颗粒混合速度的最终公式为:

$$\omega = \frac{D_p \cdot \theta_{DP}^{T-20}}{H_2} \frac{G_{POC,1}}{G_{POC,R}} \frac{DO_0}{K_{M_{DP}} + DO_0} f(ST) + \frac{D_{pmin}}{H_2} \quad (8.205)$$



其中  $D_{p\min}$  是粒子混合的最小扩散系数 ( $m^2/\text{天}$ )。

通过采用以下程序来估计海底应力引起的颗粒混合的减少  $f(\text{ST})$ 。压力  $\text{ST}$  通常使用方程 (8.204) 计算。一旦  $\text{DO}_0$  连续几天或更长时间下降到临界浓度  $\text{DO}_{\text{ST},c}$  以下，则计算的应力不允许降低，直到  $\text{DO}_0 > \text{DO}_{\text{ST},c}$ ， $c$  的  $t_{\text{MBS}}$  天数。也就是说，只有当缺氧天数长于临界缺氧天数时，最大应力或最小应力  $(1 - K_{\text{ST}} \cdot \text{ST})$  才会在  $\text{DO}_0$  恢复后保留一段特定的时间 ( $t_{\text{MBS}}$  天) (图 8.7)。如果  $\text{DO}_0$  没有降至  $\text{DO}_{\text{ST},c}$  以下，或者缺氧持续时间小于临界缺氧天数，则不会出现滞后。当在  $t_{\text{MBS}}$  天数内施加最大压力时，随后的缺氧天数不包括在  $t_{\text{MBS}}$  中。这种滞后的参数化基本上假设了季节性缺氧，即夏季发生的一两次主要缺氧事件，并且可能不适用于一年中发生多次缺氧事件的系统。

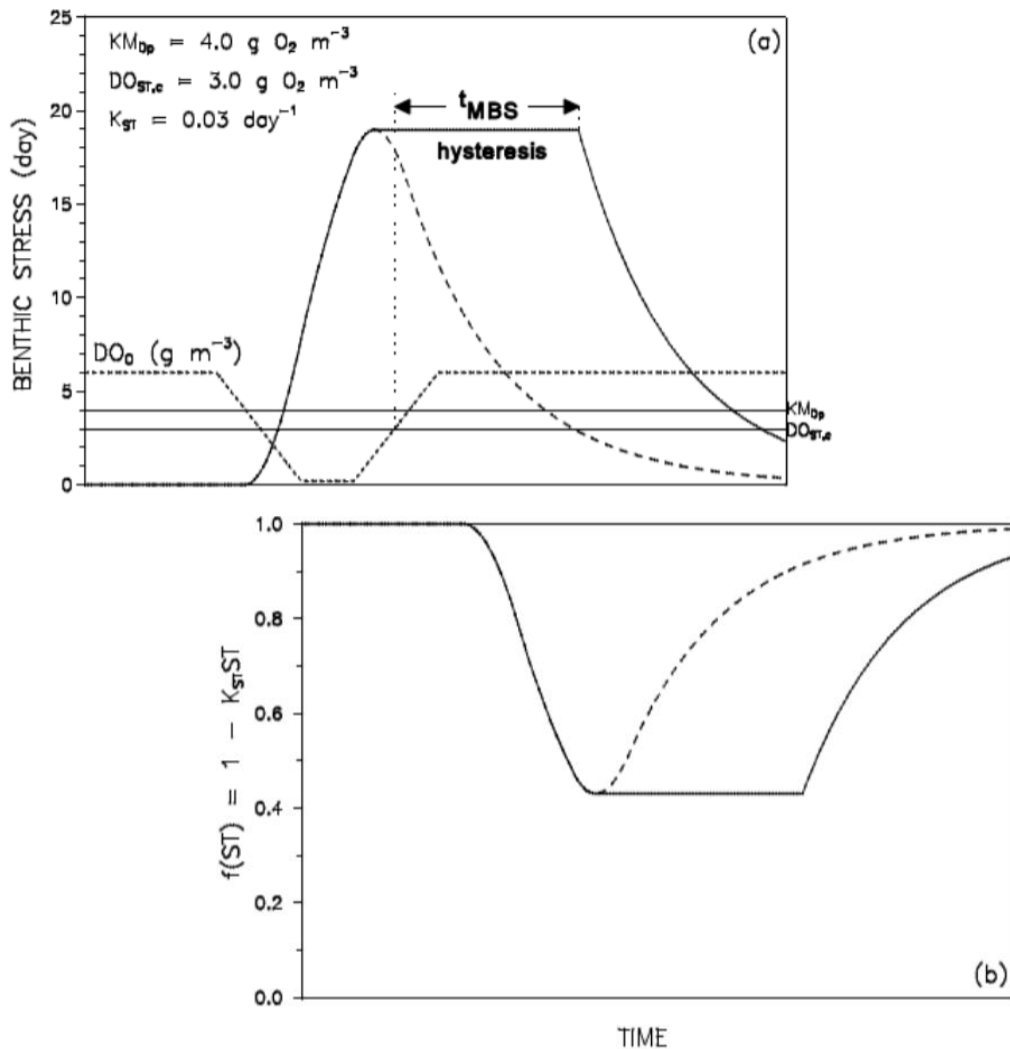


图 8.6.底栖应力 (a) 及其对颗粒混合的影响 (b) 作为上覆水柱溶解氧浓度的函数



与滞后有关的三个参数 $DO_{ST,c}$ 、 $NC_{hypoxia}$ 和 $t_{MBS}$ 是许多因素的函数，包括缺氧的严重程度和寿命、组成物种和盐度，因此具有特定位点的可变性（Diaz等人，1995）。临界上覆DO浓度 $DO_{ST,c}$ 也取决于离 $DO_0$ 位置底部的距离。临界缺氧天数 $NC_{hypoxia}$ 取决于海底生物对缺氧的耐受性，从而取决于海底群落结构（Diaz et al., 1995）。缺氧事件后海底生物量恢复的时间滞后， $t_{MBS}$ 在盐度较高时往往更长。上述三个参数被认为是空间上恒定的输入参数。

### 8.3.3.2.3 溶解相混合系数

第1层和第2层之间的溶解相混合是通过被动分子扩散进行的，底栖生物的混合活动（生物灌溉）增强了这种扩散。这是通过增加相对于分子扩散系数的扩散系数来模拟的

$$KL = \frac{D_d \cdot \theta_{Dd}^{T-20}}{H_2} + R_{BI,BT} \cdot \omega \quad (8.206)$$

其中，

$D_d$ 是孔隙水中的扩散系数（ $m^2/天$ ），

$\theta_{Dd}$ 是用于调节 $D_d$ 的温度的常数，以及

$R_{BI,BT}$ 是生物灌溉与生物扰动的比率。

方程（8.206）中的最后一项说明了生物活动增强的混合。

### 8.3.3.3 氨氮

上层由于深度浅，假定不生成成岩作用， $NH_4^+$ 是由下层成岩作用产生的：

$$J_{1,NH4} = 0 \quad J_{2,NH4} = J_N \quad (8.207)$$

其中 $J_N$ 来自等式（8.196）。

在O存在的情况下， $NH_4^+$ 被硝化为 $NO_3^-$ 。单体型表达用于硝化速率对 $NH_4^+$ 和O的依赖性。

那么，方程（8.198）中 $NH_4^+$ 的氧化层反应速度可以表示为：

$$K_{1,NH4}^2 = \frac{DO_0}{2 \cdot KM_{NH4,O2} + DO_0} \frac{KM_{NH4}}{KM_{NH4} + NH4_1} K_{NH4}^2 \cdot \theta_{NH4}^{T-20} \quad (8.208)$$

然后硝化通量变成：

$$J_{NH4} = \frac{K_{1,NH4}^2}{s} \cdot NH4_1 \quad (8.209)$$

其中，

$K_{M_{NH_4, O_2}}$ 是DO的硝化半饱和常数 ( $g\ O_2/m^3$ ) ,  
 $NH_4_1$ 是第1层中作为N的总 $NH_4^+$ 浓度 ( $g\ N/m^3$ ) ,  
 $K_{M_{NH_4}}$ 是 $NH_4^+$ 的硝化半饱和常数 ( $g\ N/m^3$ ) ,  
 $K_{NH_4}$ 硝化作用的最佳反应速度为 $20^\circ C$  (米/天) ,  
 $\Theta_{NH_4}$ 是 $K_{NH_4}$ 的温度调节常数, 以及  
 $J_{Nit}$ 是硝化通量 ( $g\ N/m^2/天$ ) 。

缺氧的下层不发生硝化作用:

$$K_{2, NH_4} = 0 \quad (8.210)$$

对 $NH_4_1$ 和 $NH_4_2$ 解方程 (8.197) 和 (8.199) 后, 用方程 (8.198) 计算出 $NH_4^+$ 对上覆水的泥沙通量。请注意, 不是 $NH_4_1$ 和 $NH_4_2$ 决定了 $J_{aq, NH_4}$ 的大小 (Ditoro和Fitzpatrick(1993, X-B-2)), 而是由 (1) 成岩通量、(2)硝化馏分和 (3) 混合剩余部分的表面传质系数(S)决定的大小。

### 8.3.3.4 硝态氮

硝化通量是上层 $NO_3^-$ 的唯一来源, 由方程 (8.210) 给出, 两层 $NO_3^-$ 都不存在成岩来源:

$$J_{1, NO_3} = J_{Nit} \quad (8.211)$$

$$J_{2, NO_3} = 0$$

$NO_3^-$ 作为溶解物质存在于沉积物中, 即 $\pi_{1, NO_3} = \pi_{2, NO_3} = 0$ , 使得 $fd_{1, NO_3} = fd_{2, NO_3} = 1$  (方程式 (8.201) 和 (8.202)) : 这也使得R没有意义, 因此 $R=0$ 。  $NO_3^-$ 在氧化层和缺氧层中都通过反硝化作用去除, 反硝化作用所需的碳由成岩作用提供。方程式 (8.198) 和 (8.200) 中 $NO_3^-$ 的反应速度可表示为:

$$K_{1, NO_3}^2 = K_{NO_3, 1}^2 \cdot \theta_{NO_3}^{T-20} \quad (8.212)$$

$$K_{2, NO_3} = K_{NO_3, 2} \cdot \theta_{NO_3}^{T-20} \quad (8.213)$$

沉积物中作为 N 气体的反硝化通量变为:

$$J_{N_2(g)} = \frac{K_{1, NO_3}^2}{s} NO_3_1 + K_{2, NO_3} \cdot NO_3_2 \quad (8.214)$$

其中,

$K_{NO_3, 1}$ 是第1层 $20^\circ C$ 脱氮的反应速度 (米/天) ,

$K_{NO_3, 2}$ 是第2层 $20^\circ C$ 时脱氮的反应速度 (米/天) ,

$\theta_{NO3}$ 是 $KNO_{3,1}$ 和 $KNO_{3,2}$ 的温度调节常数,

$J_{N2(g)}$ 是脱氮通量 ( $g\ N/m^2/天$ ) ,

$NO_{31}$ 是第1层中 $NO_3^-$ 的总浓度, 以 $N$ 表示 ( $g\ N/m^3$ ) , 以及

$NO_{32}$ 是第2层中 $NO_3^-$ 的总浓度, 以 $N$ 表示 ( $g\ N/m^3$ ) 。

一旦为  $NO_{31}$  和  $NO_{32}$  求解了方程式 (8.197) 和 (8.199), 就可以使用方程式 (8.198) 计算  $NO_3^-$ 到上覆水体  $J_{aq,NO_3}$  的沉积物通量。  $NO_3^-$ 的稳态解表明 $NO_3^-$  通量是  $NO_{30}$  的线性函数 (DiToro 和 Fitzpatrick, 1993, 方程 III-15) : 截距量化沉积物中硝化但未反硝化 (因此以  $J_{aq,NO_3}$ 的形式释放) , 斜率量化了沉积物中上覆水  $NO_3^-$  反硝化的程度。它还表明, 如果 $NO_3^-$  的内部产量相对于来自上覆水体的  $NO_3^-$  通量较小, 则对于小  $s$ , 归一化的  $NO_3^-$  通量到沉积物  $-J_{aq,NO_3}/NO_{30}$  在  $s$  中呈线性和大  $s$  的常量 (DiToro 和 Fitzpatrick, 1993, 第 III-C 节)。对于小  $s$  ( $\sim 0.01m/天$ ) ,  $H$  很大 (方程式 (8.203)) , 因此好氧层反硝化占主导地位,  $J_{aq,NO_3}$  基本上为零, 与  $NO_{30}$  无关 (DiToro 和 Fitzpatrick, 1993, 图 III-4) 。

### 8.3.3.5磷酸盐磷

磷酸盐是由下层POP的成岩分解产生的:

$$J_{1,PO_4}=0 \quad (8.215)$$

$$J_{2,PO_4}=J_P$$

其中 $J_P$ 为由方程 (8.197) 得到的磷的成岩通量。 释放的 $PO_4^{3-}$ 的一部分以溶解形式保留下来, 一部分通过含有 $PO_4^{3-}$ 的矿物的沉淀(Troup, 1974) (例如薇薇安矿,  $Fe_3(PO_4)_2(S)$ ), 或通过分配到 $PO_4^{3-}$ 吸附点(Barrow, 1983; Giordani and Astorri, 1986; Lijklema, 1980)而成为颗粒 $PO_4^{3-}$ 。 颗粒形成的程度由方程 (8.201) 和 (8.202) 中分配系数 $\pi_{1,PO_4}$ 和 $\pi_{2,PO_4}$ 的大小决定。  $PO_4^{3-}$  通量受 $DO_0$ 和上覆水 $DO$ 浓度的影响较大。 当 $DO_0$ 接近零时, 沉积物中的 $PO_4^{3-}$ 通量增加。 这一机制是通过在氧化条件下使 $\pi_{1,PO_4}$ 大于 $\pi_{2,PO_4}$ 而结合的。 在模型中, 当 $DO_0$ 超过临界浓度  $(DO_0)_{crit,PO_4}$ 时, 上层的吸附量增加了  $\Delta\pi_{PO_4,1}$ :

$$\pi_{1,PO_4} = \pi_{2,PO_4} \cdot (\Delta\pi_{PO_4,1}) \quad DO_0 > (DO_0)_{crit,PO_4} \quad (8.216)$$

当 $DO$ 降至 $(DO_0)_{crit,PO_4}$ 临界值以下时, 则:

$$\pi_{1,PO_4} = \pi_{2,PO_4} \cdot (\Delta\pi_{PO_4,1})^{\frac{DO_0}{(DO_0)_{crit,PO_4}}} \quad DO_0 \leq (DO_0)_{crit,PO_4} \quad (8.217)$$

当 $DO_0$ 变为零时,  $\pi_{1,PO_4}$ 平滑地减少到 $\pi_{2,PO_4}$ 。

两层均无 $\text{PO}_4^{3-}$ 脱除反应：

$$K_{1,\text{po4}}=k_{2,\text{po4}}=0 \quad (8.218)$$

一旦求解了方程 (8.197) 和 (8.199) 的  $\text{PO}_4$  和  $\text{PO}_4$ ,  $\text{PO}_4^{3-}$  到上覆水体  $J_{\text{aq,PO4}}$  的沉积物通量可以使用方程 (8.198) 计算。

### 8.3.3.6 硫化物/甲烷和需氧量

#### 8.3.3.6.1 硫化物

上层不发生成岩产 $\text{S}^{2-}$ 。在下层， $\text{S}^{2-}$ 由成岩作用产生（方程(8.197)），并由反硝化作用消耗的OC减少（方程（8.214））。然后：

$$J_{1,\text{H2S}}=0 \quad (8.219)$$

$$J_{2,\text{H2S}}=a_{02,c} \cdot J_C - a_{02,\text{NO3}} \cdot J_{\text{N2(g)}}$$

其中，

$a_{02,c}$ 是 $\text{S}^{2-}$ 氧化消耗的成岩作用的化学计量系数（2.6667g  $\text{O}_2$ -当量/gC），以及

$a_{02,\text{NO3}}$ 是反硝化作用消耗的成岩作用的化学计量系数（2.8571g  $\text{O}_2$ -当量/g N）。

缺氧层中产生的一部分溶解的 $\text{S}^{2-}$ 与Fe反应形成颗粒状铁一硫化物（FeS）（Morse等人，1987年）。将颗粒部分混合到含水层中，在含水层中可以将其氧化为氧化铁（ $\text{Fe}_2\text{O}_3$ ）。剩余的溶解馏分也扩散到含水层中，在那里被氧化为 $\text{SO}_4^{2-}$ 。模型中溶解和颗粒 $\text{S}^{2-}$ 之间的分配表示FeS (S) 的形成，在方程 (8.200) 和 (8.201) 中使用分配系数 $\pi_{1,\text{H2S}}$ 和 $\pi_{2,\text{H2S}}$ 对其进行参数化。

EFDC+对 $\text{S}^{2-}$ （成岩作用的还原最终产物）有三种途径：（1） $\text{S}^{2-}$ 氧化，（2）含水 $\text{S}^{2-}$ 通量，和（3）埋藏。 $\text{S}^{2-}$ 在三种途径中的分布由分配系数和氧化反应速度控制（DiToro和Fitzpatrick（1993）中的V-E部分）。溶解的和颗粒的 $\text{S}^{2-}$ 都在氧化层中被氧化，在这个过程中消耗O。在含氧上层，使用O浓度呈线性的氧化速率（Boudreau，1991；Cline和richards，1969；Millero，1986）。在缺氧的下层，不会发生氧化。然后，方程（8.197）和（8.199）中的反应速度可以表示为：

$$K_{1,\text{H2S}}^2 = (K_{\text{H2S},d1}^2 \cdot f_{d1,\text{H2S}} + K_{\text{H2S},p1}^2 \cdot f_{p1,\text{H2S}}) \theta_{\text{H2S}}^{T-20} \frac{DO_0}{2 \cdot KM_{\text{H2S},O2}} \quad (8.220)$$

$$K_{2,\text{H2S}}^2 = 0 \quad (8.221)$$

其中,

$K_{H2S,d1}$ 是20°C时第1层中溶解的 $S^{-2}$ 氧化的反应速度 (米/天) ,

$K_{H2S,P1}$ 是第1层中颗粒 $S^{-2}$ 在20°C下氧化的反应速度 (米/天) ,

$\Theta_{H2S}$ 是 $K_{H2S,d1}$ 和 $K_{H2S,P1}$ 的温度调节常数, 以及

$KM_{H2S,O2}$ 是标准化O的 $S^{-2}$ 氧化速率的常数 ( $g\ O_2/m^3$ ) 。

常数 $KM_{H2S,O2}$  (仅为方便起见) 用于标定上覆水中的O浓度。当 $DO_0=KM_{H2S,O2}$ 时,  $S^{-2}$ 氧化速率的反应速度为其标称值。

含氧上层的氧化反应导致O向沉积物流动, 从而发挥SOD的作用。按照惯例, SOD为阳性:  $SOD=-J_{aq,O_2}$ 。模型中的SOD由两种成分组成, 即 $S^{-2}$ 氧化引起的含碳沉积物需氧量 (CSOD) 和硝化作用引起的含氮沉积物需氧量:

$$SOD = CSOD + NSOD = \frac{K_{1,H2S}^2}{s} H2S_1 + a_{O_2,NH_4} \cdot J_{Nit} \quad (8.222)$$

其中,

$H2S_1$ 是第1层中 $S^{-2}$ 的总浓度 ( $g\ O_2$ -当量/ $m^2$ /天) , 以及

$a_{O_2,NH_4}$ 是硝化作用消耗的O的化学计量系数 ( $4.33\ g\ O_2/g\ N$ ) 。

方程 (8.222) 对于SOD是非线性的, 因为RHS包含 $s=SOD/DO_0$ ), 因此SOD出现在方程的两侧: 注意,  $J_{Nit}$  (方程 (8.209) ) 也是s的函数。使用简单的反代换方法。

如果上覆水DO较低, 那么上层未完全氧化的 $S^{-2}$ 可以扩散到上覆水中。这种从食物中流出的 $S^{-2}$ 水通量, 有助于水柱模型中的COD, 使用

$$J_{aq,H2S}=S(fd_{1,H2S} \cdot H2S_1 - COD) \quad (8.223)$$

当O可用时, 沉积物中释放的 $S^{-2}$ 在水柱中反应非常快, 但在缺氧条件下会在水柱中积累。COD (量化为O当量) 完全由水柱模型中的海底释放提供 (方程 (8.84) )。由于 $S^{-2}$ 也被量化为O等价物, 因此COD在方程 (8.223) 中被用作水柱中 $S^{-2}$ 的测量值。

### 8.3.3.6.2 甲烷

当 $SO^{-2}_4$ 用完时,  $CH_4$ 可以通过碳成岩作用产生,  $CH_4$ 氧化会消耗氧气 (Di-Toro等人, 1990) 。由于盐水中有丰富的 $SO^{-2}_4$ , 只有上述 $S^{-2}$ 的产生和氧化被认为发生在盐水中。由于淡水中的 $SO^{-2}_4$ 浓度通常不显著, 因此 $CH_4$ 的产生被认为可以取代淡水中的 $S^{-2}$ 的产生。在淡水中,

CH<sub>4</sub>由下层的碳成岩作用产生，并因反硝化作用消耗的OC而减少。上层没有CH<sub>4</sub>的成岩生成（方程（8.219））：

$$J_{1,CH_4}=0 \quad (8.224)$$

$$J_{2,CH_4}=a_{O_2,C} \cdot J_C - a_{O_2,NO_3} \cdot J_{N_2(g)}$$

产生的溶解CH<sub>4</sub>有两种途径；（1）含氧上层的氧化导致CSOD，或（2）以水通量或气体通量的形式从沉积物中逃逸：

$$J_{2,CH_4}=CSOD+J_{aq,CH_4}+J_{CH_4(g)} \quad (8.225)$$

其中，

$J_{aq,CH_4}$ 为CH<sub>4</sub>水通量（g O<sub>2</sub>-当量/m<sup>2</sup>/天），以及

$J_{CH_4(g)}$ 是气体CH<sub>4</sub>流量（g O<sub>2</sub>-当量/m<sup>2</sup>/天）。

在缺氧层中产生的一部分溶解的CH<sub>4</sub>扩散到有氧层中，在那里被氧化。这种CH<sub>4</sub>氧化导致淡水沉积物中的CSOD（Di-Toro等人，1990）：

$$CSOD = CSOD_{max} \cdot \left( 1 - \operatorname{sech} \left[ \frac{K_{CH_4} \cdot \theta_{CH_4}^{T-20}}{s} \right] \right) \quad (8.226)$$

$$CSOD_{max} = \operatorname{minimum} \left\{ \sqrt{2 \cdot KL \cdot CH_{4,sat} \cdot J_{2,CH_4}}, J_{2,CH_4} \right\} \quad (8.227)$$

$$CH_{4,sat} = 100 \left( 1 + \frac{h+H_2}{10} \right) 1.024^{20-T} \quad (8.228)$$

其中，

$CSOD_{max}$ 是当输送到含氧层的所有溶解CH<sub>4</sub>被氧化时发生的最大CSOD，

$K_{CH_4}$ 是层1中溶解的CH<sub>4</sub>氧化在20°C时的反应速度（米/天），

$\theta_{H_2S}$ 是 $K_{CH_4}$ 的温度调节常数，以及

$CH_{4,sat}$ 是孔隙水中CH<sub>4</sub>的饱和浓度（g O<sub>2</sub>-当量/m<sup>3</sup>）。

方程（8.228）中的项（h+H<sub>2</sub>）/10，其中h和H<sub>2</sub>以米为单位，是距水面的深度，用于校正原位压力。方程（8.228）精确到报告的CH<sub>4</sub>溶解度的3%以内，介于5和20°C之间°C（Yamamoto等人，1976年）。

如果上覆水O<sub>2</sub>较低，未完全氧化的CH<sub>4</sub>可以从沉积物中逃逸到以水通量或气体通量的形式

覆盖水。对COD有贡献的CH<sub>4</sub>水通量在水柱模型中，使用（Di-Toro等人，1990）：

$$J_{aq,CH_4} = CSOD_{max} \cdot \operatorname{sech} \left[ \frac{K_{CH_4} \cdot \theta_{CH_4}^{T-20}}{s} \right] = CSOD_{max} - CSOD \quad (8.229)$$

CH<sub>4</sub>仅微溶于水。如果超过方程（8.228）给出的其在孔隙水中的溶解度CH<sub>4</sub>sat，则其形成以气泡形式逸出的气相。CH<sub>4</sub>作为气泡的损失，即气体CH<sub>4</sub>通量，使用方程（8.225）建模，其中J<sub>2,CH<sub>4</sub></sub>来自方程（8.224），CSOD来自方程（8.226），J<sub>aq,CH<sub>4</sub></sub>来自等式（8.229）（Di-Toro等人，1990）。

### 8.3.4 二氧化硅

沉积物中NH<sub>4</sub><sup>+</sup>、NO<sub>3</sub><sup>-</sup>和PO<sub>4</sub><sup>-3</sup>的产生是细菌对PM矿化的结果。沉积物中溶解SiO<sub>2</sub>的产生是SiP或不透明SiO<sub>2</sub>溶解的结果，这被认为与细菌过程无关。SiP从上覆水到沉积物的沉积通量使用方程（8.195）进行建模。有了这个来源，SiP的质量平衡方程可以写成：

$$H_2 \frac{\partial P_{Si}}{\partial t} = -S_{Si} \cdot H_2 - W \cdot P_{Si} + J_{PSi} + J_{DSi} \quad (8.230)$$

where,

P<sub>Si</sub>是沉积物中SiP的浓度（g Si/m<sup>3</sup>），

S<sub>Si</sub>是PSi在层2中的溶解速率（g Si/m<sup>3</sup>/天），

J<sub>PSi</sub>是由方程（8.195）给出的PSi的沉积通量（g Si/m<sup>3</sup>/天），以及

J<sub>DSi</sub>是PSi的碎屑通量（g Si/m<sup>3</sup>/天），用于说明PSi沉降到沉积物中，而该沉积物与生物二氧化硅的藻类通量无关。

方程（8.230）中包括的过程是溶解（即溶解二氧化硅的产生）、埋藏以及上覆水中的沉积和碎屑通量。方程（8.230）可被视为POM成岩方程（方程（8.195））的类似物在SiO<sub>2</sub>溶解度不足中为一级反应，并且在SiP中遵循Monod型关系：

$$S_{Si} = K_{Si} \cdot \theta_{Si}^{T-20} \frac{P_{Si}}{P_{Si} + KM_{PSi}} (Si_{sat} - f_{d_{2,Si}} \cdot Si_2) \quad (8.231)$$

其中，

K<sub>Si</sub>是 20° C 时第 2 层中 SiP 的一级溶解速率（1/天），

θ<sub>Si</sub>是用于K<sub>Si</sub>的温度调节的常数，

KM<sub>PSi</sub>是PSi的SiO<sub>2</sub>溶解半饱和常数（g Si/m<sup>3</sup>），以及



$Si_{sat}$ 是孔隙水中 $SiO_2$ 的饱和浓度 ( $g\ Si/m^3$ )。

矿化 $SiO_2$ 的质量平衡方程可以使用方程 (8.197) 和 (8.199) 的一般形式来公式化。上层没有源/汇项, 也没有反应:

$$J_{1,si}=K_{1,si}=0 \quad (8.232)$$

在下层,  $SiO_2$ 是由 $SiP$ 的溶解产生的, 使用方程 (8.231) 对其进行建模。方程 (8.231.) 中的两项对应于方程 (8.199) 中的源项和反应项:

$$J_{2,si} = K_{Si} \cdot \theta_{Si}^{T-20} \frac{PSi}{PSi + KM_{PSi}} Si_{sat} \cdot H_2 \quad (8.233)$$

$$\kappa_{2,si} = K_{Si} \cdot \theta_{Si}^{T-20} \frac{PSi}{PSi + KM_{PSi}} f_{d2,si} \cdot H_2 \quad (8.234)$$

一部分从颗粒中溶解的 $SiO_2$ 吸附成固体, 一部分以溶解的形式保留下来。利用方程 (8.201) 和 (8.202) 中的分配系数 $\pi_{1,si}$ 和 $\pi_{2,si}$ 进行分配控制溶解的 $SiO_2$ 吸附到固体中的程度。由于 $SiO_2$ 在吸附-解吸过程中表现出与 $PO_4^{3-}$ 相似的行为, 因此对 $SiO_2$ 采用与适用于 $PO_4^{3-}$ 相同的分配方法。即当 $DO_0$ 超过临界浓度 $(DO_0)_{crit,si}$ 时, 上层的吸附量增加了 $\Delta\pi_{si,1}$ :

$$\pi_{1,si} = \pi_{2,si} \cdot (\Delta\pi_{si,1}) \quad DO_0 > (DO_0)_{crit,si} \quad (8.235)$$

当 $O$ 低于临界值 $(DO_0)_{crit,si}$ 时, 则:

$$\pi_{1,si} = \pi_{2,si} \cdot (\Delta\pi_{si,1})^{\frac{DO_0}{(DO_0)_{crit,si}}} \quad DO_0 \leq (DO_0)_{crit,si} \quad (8.236)$$

当 $DO_0$ 变为零时, 它将 $\pi_{1,si}$ 平滑地减少到 $\pi_{2,si}$ 。

一旦对 $Si_1$ 和 $Si_2$ 求解方程 (8.197) 和 (8.199), 就可以使用方程 (8.198) 计算 $SiO_2$ 到覆盖水的沉积物通量 $J_{aq,si}$ 。

### 8.3.5 沉积物温度

上述质量平衡方程中的所有速率系数都表示为沉积物温度 $T$ 的函数。沉积物温度基于水柱和沉积物之间的热扩散进行建模:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{D_T}{H^2} (T_W - T) \quad (8.237)$$

其中,

$D_T$ 是水柱和沉积物之间的热扩散系数 ( $m^2/s$ ), 以及



$T_w$ 是上覆水柱中的温度( $^{\circ}\text{C}$ ) 通过方程 (8.113) 计算。

模型在 (Di-Toro和Fitzpatrick, 1993) 和 (Cerco和Cole,1994) 中的应用使用 $D_T=1.8 \times 10^{-7}$   $\text{m}^2/\text{s}$ 。

### 8.3.6 解决方法

#### 8.3.6.1 有限差分方程及求解格式

使用隐式积分方案求解上层和下层铵、硝酸盐、磷酸盐或硫化物/甲烷的控制质量平衡方程。方程 (8.197) 的有限差分形式可以表示为：

$$0 = s(f_{d0} \cdot C'_{t_0} - f_{d1} \cdot C'_{t_1}) + KL(f_{d2} \cdot C'_{t_2} - f_{d1} \cdot C'_{t_1}) + \omega(f_{p2} \cdot C'_{t_2} - f_{p1} \cdot C'_{t_1}) - W \cdot C'_{t_1} - \frac{K_1^2}{s} C'_{t_1} + J'_1 \quad (8.238)$$

其中，已初始化变量表示在 $t+\theta$ 处评估的值，而未初始化变量是在 $t$ 处的值，其中 $\theta$ 在方程 (8.113) 中定义。

方程 (8.199) 的有限差分形式可以表示为：

$$0 = -KL(f_{d2} \cdot C'_{t_2} - f_{d1} \cdot C'_{t_1}) - \omega(f_{p2} \cdot C'_{t_2} - f_{p1} \cdot C'_{t_1}) + W(C'_{t_1} - C'_{t_2}) - \left(K_2 + \frac{H_2}{\theta}\right) C'_{t_2} + \left(J'_2 + \frac{H_2}{\theta} C'_{t_2}\right) \quad (8.239)$$

$-(H_2/\theta)C'_{t_2}$ 和 $(H_2/\theta)C'_{t_2}$ 这两个项来自方程 (8.199) 中的导数项 $H_2(\partial C_{t_2}/\partial t)$ 。这些项中的每一项都分别简单地添加到第2层的去除率和强迫函数中。将这两项设置为零将导致稳态模型中的结果。两个已知的 $C'_{t_1}$ 和 $C'_{t_2}$ 可以在每个时间步长使用以下公式计算：

$$\begin{bmatrix} s \cdot f_{d1} + a_1 + \frac{K_1^2}{s} & -a_2 \\ -a_1 & a_2 + W + K_2 + \frac{H_2}{\theta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C'_{t_1} \\ C'_{t_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} J'_1 + s \cdot f_{d0} \cdot C'_{t_0} \\ J'_2 + \frac{H_2}{\theta} C'_{t_2} \end{bmatrix} \quad (8.240)$$

$$\begin{aligned} a_1 &= KL \cdot f_{d1} + \omega \cdot f_{p1} + W \\ a_2 &= KL \cdot f_{d2} + \omega \cdot f_{p2} \end{aligned} \quad (8.241)$$

方程 (8.240) 的求解需要迭代法，因为表面传质系数 $S$ 是SOD (方程 (8.202)) 的函数，SOD也是 $S$  (方程 (8.222)) 的函数。使用了一种简单的回代方法：

1.从SOD的初始估计开始，例如， $SOD=a_{02,c}J_c$ 或前一时间步长SOD。

2.求解 $\text{NH}_4^+$ 、 $\text{NO}_3^-$ 和 $\text{S}^{2-}/\text{CH}_4$ 的方程 (8.240) 。

3.使用方程 (8.222) 计算SOD。

4.完善SOD的估计：使用寻根方法 (Press等人 (1986) 中的Brent方法) 进行新的估计。

5.如果没有收敛，则转到 (2) 。

6.求解 $\text{PO}_4^{3-}$ 和 $\text{SiO}_2$ 的方程8.240。

为了对称性，对成岩作用、SIP和沉积温度方程也采用隐式求解。成岩作用方程 (方程 (8.195) ) 的有限差分形式可表示为：

$$G'_{POM,i} = \left( G_{POM,i} + \frac{\theta}{H_2} J_{POM,i} \right) \left( 1 + \theta \cdot K_{POM,i} \cdot \theta_{POM,i}^{T-20} + \frac{\theta}{H_2} W \right)^{-1} \quad (8.242)$$

SiP方程 (方程 (8.231) ) 的有限差分形式可表示为：

$$PSi' = \left( PSi + \frac{\theta}{H_2} (J_{PSi} + J_{DSi}) \right) \left( 1 + \theta \cdot K_{Si} \cdot \theta_{Si}^{T-20} \frac{Si_{sat} - f_{d2,Si} \cdot Si_2}{PSi + KM_{PSi}} + \frac{\theta}{H_2} W \right)^{-1} \quad (8.243)$$

对于溶解项，使用方程(8.225)，其中Monod型项中的PSI保持在时间水平t，以简化求解。

方程 (8.237) 所示的沉积物温度的有限差分形式可表示为：

$$T' = \left( T + \frac{\theta}{H^2} D_T \cdot T_W \right) \left( 1 + \frac{\theta}{H^2} D_T \right)^{-1} \quad (8.244)$$

### 8.3.6.2边界和初始条件

上述有限差分方程构成了一个初始边值问题。边界条件是沉积通量 ( $J_{POM}$ 、 $i$ 和 $J_{PSi}$ ) 和上覆水条件 ( $C_{t0}$ 和 $T_W$ ) 作为时间的函数，它们由水柱水质模型提供。初始条件是 $t=0$ 、 $G_{POM,i}(0)$ 、 $PSi(0)$ 、 $C_{t1}(0)$ 、 $C_{t2}(0)$ 和 $t(0)$ 时的浓度，以开始计算。严格地说，这些初始条件应该反映上覆水条件和沉积通量的过去历史，这通常是不切实际的，因为缺乏这些早期的现场数据。

## 8.4. 附录

附录包括基于文献综述和专业经验的一些参数值。给出了三个遗留藻类类群蓝藻(C)、硅藻(D)和绿藻(G)的参数。这些值可以作为模型校准过程的起点。

表 8.16.与水柱中藻类相关的参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
* $PM_c$ (1/day)	2.5 (upper Potomac only)	8.7
* $PM_d$ (1/day)	2.25	8.7
* $PM_g$ (1/day)	2.5	8.7
$KHN_x$ (g N/m <sup>3</sup> )	0.01 (all groups)	8.8
$KHP_x$ (g P/m <sup>3</sup> )	0.001 (all groups)	8.8
$KHS$ (g Si/m <sup>3</sup> )	0.05	8.8
$FD$	Temporally-varying input	8.9
$I_{sx}$ (langleys/day)	Temporally-varying input	8.10
* $Ke_b$ (1/m)	spatially-varying input	8.126
$Ke_{ISS}$ (1/m per m <sup>3</sup> )	NA <sup>c</sup>	8.126
$Ke_{Chl}$ (1/m per mg Chl/m <sup>3</sup> )	0.017	8.126
$CChl_x$ (g C per mg Chl)	0.06 (all groups)	8.126
$(D_{opt})_x$ (m)	1.0 (all groups)	8.12
$(I_s)_{min}$ (langleys/day)	40.0	8.12
$CI_a$ , $CI_b$ and $CI_c$	0.7, 0.2 & 0.1	8.13
$TM_c$ , $TM_d$ and $TM_g$ (°C)	27.5, 20.0 & 25.0	8.14
$KTG1_c$ and $KTG2_c$ (°C <sup>-2</sup> )	0.005 & 0.004	8.14
$KTG1_d$ and $KTG2_d$ (°C <sup>-2</sup> )	0.004 & 0.006	8.14
$KTG1_g$ and $KTG2_g$ (°C <sup>-2</sup> )	0.008 & 0.01	8.14
$STOX$ (ppt)	1.0	8.15
* $BMR_c$ (1/day)	0.04	8.16
* $BMR_d$ (1/day)	0.01 (0.03 during Jan.-May in saltwater only)	8.16
* $BMR_g$ (1/day)	0.01	8.16
$TR_x$ , (°C)	20.0 (all groups)	8.16
$KTB_x$ (°C <sup>-1</sup> )	0.069 (all groups)	8.16

Continued on next page

Table 8.16 – continued from previous page

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
* $PRR_c$ (1/day)	0.01	8.17
* $PRR_d$ (1/day)	0.215 (0.065 during Jan-May in saltwater only)	8.17
* $PRR_g$ (1/day)	0.215	8.17
* $WS_c$ (m/day)	0.0	8.6
* $WS_d$ (m/day)	0.35 (Jan-May), 0.1 (Jun-Dec)	8.6
* $WS_g$ (m/day)	0.1	8.6

<sup>a</sup>对这些值的评价详见 (Cerco和Cole, 1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示并定义相应参数的方程数。

<sup>c</sup>在 (Cerco和Cole, 1994) 中不可用, 因为他们的配方不包括这些参数。

\*这些参数在源代码中被声明为一个数组。

表8.17. 与水柱浮游动物有关的参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$ANC_z$ ( $gN\ g^{-1}C$ )	0.2	(8.7)
$APC_z$ ( $gP\ g^{-1}C$ )	0.02	(8.8)
$BMR_z$ (1/day)	0.254	(8.8)
$CT_z$ ( $mgC/l$ )	0.01	(8.8)
$DOCRIT_z$ ( $mg\ DO/l$ )	2	(8.9)
$FCRDZ_z$	$0 \leq FCRDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FCRPZ_z$	$0 \leq FCRPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FCLDZ_z$	$0 \leq FCLDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FCLPZ_z$	$0 \leq FCLPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FCDDZ_z$	$0 \leq FCDDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FCDPZ_z$	$0 \leq FCDPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPRDZ_z$	$0 \leq FPRDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPRPZ_z$	$0 \leq FPRPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPLDZ_z$	$0 \leq FPLDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPLPZ_z$	$0 \leq FPLPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPDBZ_z$	$0 \leq FPDBZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPDPZ_z$	$0 \leq FPDDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPDPZ_z$	$0 \leq FPDPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPIBZ_z$	$0 \leq FPIBZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPIPZ_z$	$0 \leq FPIDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FPIPZ_z$	$0 \leq FPIPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNRDZ_z$	$0 \leq FNRDZ_z \leq 1$	(8.10)

Table 8.17 – continued from previous page

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$FNRPZ_z$	$0 \leq FNRPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNLDZ_z$	$0 \leq FNLDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNLPZ_z$	$0 \leq FNLPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNDBZ_z$	$0 \leq FNDBZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNDPZ_z$	$0 \leq FNDPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNDPZ_z$	$0 \leq FNDPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNIBZ_z$	$0 \leq FNIBZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNIDZ_z$	$0 \leq FNIDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FNIPZ_z$	$0 \leq FNIPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FSPDZ_z$	$0 \leq FSPDZ_z \leq 1$	(8.10)
$FSPZ_z$	$0 \leq FSPZ_z \leq 1$	(8.10)
$FSADZ_z$	$0 \leq FSADZ_z \leq 1$	(8.10)
$FSAPZ_z$	$0 \leq FSAPZ_z \leq 1$	(8.10)
$KHC_z$ (mgC/l)	0.05	(8.16)
$KTb_z$ ( $^{\circ}C^{-1}$ )	0.069	(8.16)
$KTg1$ ( $^{\circ}C^{-2}$ )	0.0035	(8.16)
$KTg2$ ( $^{\circ}C^{-2}$ )	0.025	(8.16)
$DZERO_z$ (1/day)	4.0	(8.17)
$RMAX_z$ ( $g\ prey\ Cg^{-1}\ zoopl\ Cd^{-1}$ )	2.25	(8.6)
$T_{opt1}$ ( $^{\circ}C$ )	25	(8.6)
$T_{opt2}$ ( $^{\circ}C$ )	25	(8.6)
$TR_z$ ( $^{\circ}C$ )	20	(8.6)
$UB_{2s}$ ( $^{\circ}C$ )	$0 \leq UB_{2s} \leq 1$	(8.6)
$UL_z$ ( $^{\circ}C$ )	$0 \leq UL_z \leq 1$	(8.6)
$UR_z$ ( $^{\circ}C$ )	$0 \leq UR_z \leq 1$	(8.6)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见 (Cerco和Cole, 2004) 的第八章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号

表 8.18.与水柱中有机碳 (OC) 相关的参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$FCRP_x$	0.35 (all groups)	(8.32)
$FCLP_x$	0.55 (all groups)	(8.33)
$FCDP_x$	0.10 (all groups)	(8.35)
$FCD_x$	0.0 (all groups)	(8.35)
* $WS_{RP}$ (m/day)	1.0	(8.32)
* $WS_{LP}$ (m/day)	1.0	(8.33)
$KHR_x$ (g $O_2/m^3$ )	0.5 (all groups)	(8.35)
$KHOR_{DO}$ (g $O_2/m^3$ )	0.5	(8.43)
$K_{RC}$ (1/day)	0.005	(8.44)
$K_{LC}$ (1/day)	0.075	(8.45)
$K_{DC}$ (1/day)	0.01	(8.46)
$K_{RCalg}$ (1/day per g C/ $m^3$ )	0.0	(8.44)
$K_{LCalg}$ (1/day per g C/ $m^3$ )	0.0	(8.45)
$K_{DCalg}$ (1/day per g C/ $m^3$ )	0.0	(8.46)
$TR_{HDR}$ ( $^{\circ}C$ )	20.0	(8.44)
$TR_{MIN}$ ( $^{\circ}C$ )	20.0	(8.46)
$KT_{HDR}$ ( $^{\circ}C^{-1}$ )	0.069	(8.44)
$KT_{MIN}$ ( $^{\circ}C^{-1}$ )	0.069	(8.46)
$KHDN_N$ (g N/ $m^3$ )	0.1	(8.48)
AANOX	0.5	(8.48)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见 (Cerco和Cole, 1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号。

\*在源代码中声明为数组的参数。

表8.19.与水柱中磷 (P) 相关的参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$FPLP_x$	0.2 (all groups)	(8.50)
$FPDP_x$	0.5 (all groups)	(8.51)
$FPIP_x$	0.2 (all groups)	(8.52)
$FPR_x$	0.0 (all groups)	(8.49)
$FPL_x$	0.0 (all groups)	(8.50)
$FPD_x$	1.0 (all groups)	(8.51)
$FPI_x$	0.0 (all groups)	(8.52)
* $WS_x$ (m/day)	1.0	(8.52)
$K_{PO4p}$ (per g/m <sup>3</sup> ) for TSS	NA	(8.53)
$K_{PO4p}$ (per mol/m <sup>3</sup> ) for TAM	6.0	(8.53)
$CP_{prm1}$ (g C per g P)	42.0	(8.56)
$CP_{prm2}$ (g C per g P)	85.0	(8.56)
$CP_{prm3}$ (per g P/m <sup>3</sup> )	200.0	(8.56)
$K_{RP}$ (1/day)	0.005	(8.57)
$K_{LP}$ (1/day)	0.075	(8.58)
$K_{DP}$ (1/day)	0.1	(8.59)
$K_{RPalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.0	(8.57)
$K_{LPalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.0	(8.58)
$K_{DPalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.2	(8.59)

<sup>a</sup> 这些数值的评估详见 (Cerco和Cole, 1994) 的第九章。

<sup>b</sup> 首先显示和定义相应参数的方程式编号。

<sup>c</sup> (Cerco和Cole, 1994) 中没有, 因为他们的配方不包括这些参数。

∴  $FPI_x$  由  $FPR_x + FPL_x + FPD_x + FPI_x = 1$  估算。

\*在源代码中声明为数组的参数。

表8.20. 水柱中与硝基氮(n)有关的参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$FNLP_x$	0.55 (all groups)	(8.62)
$FNDP_x$	0.1 (all groups)	(8.63)
$FNIP_x$	0.0 (all groups)	(8.64)
$FNR_x$	0.0 (all groups)	(8.61)
$FNL_x$	0.0 (all groups)	(8.62)
$FND_x$	1.0 (all groups)	(8.63)
$FNI_x$	0.0 (all groups)	(8.64)
$ANC_x$ (g; N; per g C)	0.167 (all groups)	(8.61)
$ANDC$ (g; N; per g C)	0.933	(8.65)
$K_{RN}$ (1/day)	0.005	(8.67)
$K_{LN}$ (1/day)	0.075	(8.68)
$K_{DN}$ (1/day)	0.015	(8.69)
$K_{RNalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.0	(8.67)
$K_{LNalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.0	(8.68)
$K_{DNalg}$ (1/day per g C/m <sup>3</sup> )	0.2	(8.69)
$Nit_m$ (g N/m <sup>3</sup> /day)	0.07	(8.72)
$KHNit_{DO}$ (g N/m <sup>3</sup> )	1.0	(8.72)
$KHNit_N$ (g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> )	1.0	(8.72)
$TNit$ (°C)	27.0	(8.73)
$KNit$ (°C <sup>-2</sup> )	0.0045	(8.73)
$KNit$ (°C <sup>-2</sup> )	0.0045	(8.73)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见 (Cerco和Cole, 1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号。

表8.21. 与水柱中二氧化硅(SiO<sub>2</sub>)有关的参数



Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$FSPp_d$	1.0	(8.76)
$FSIP_d$	0.0	(8.77)
$FSP_d$	1.0	(8.76)
$FSI_d$	0.0	(8.77)
$ASC_d$ (g Si per g C)	0.5	(8.76)
$K_{SAp}$ (per g/m <sup>3</sup> ) for TSS	NA	(8.78)
$K_{SAp}$ (per mol/m <sup>3</sup> ) for TAM	6.0	(8.78)
$K_{SU}$ (1/day)	0.03	(8.82)
$TR_{SUA}$ (°C)	20.0	(8.82)
$KT_{SUA}$ (°C <sup>-1</sup> )	0.092	(8.82)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见 (Cerco和Cole, 1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号。

<sup>c</sup> (Cerco和Cole, 1994) 中没有, 因为他们的配方不包括这些参数。

:  $FSPp_d$ 和 $FSIP_d$ 由 $FSPp_d+FSIP_d=1$ 估计。

:  $FSP_d$ 和 $FSI_d$ 是根据 $FSP_d+FSI_d=1$ 估计的。

表8.22. 水体中碳质需氧量(COD)和溶解氧(DO)的相关参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
$KH_{COD}$ (g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> )	1.5	(8.83)
$K_{CD}$ (1/day)	20.0	(8.84)
$TR_{COD}$ (°C)	20.0	(8.84)
$KT_{COD}$ (°C <sup>-1</sup> )	0.041	(8.84)
$AOCR$ (g O <sub>2</sub> per g C)	2.67	(8.85)
$AONT$ (g O <sub>2</sub> per g N)	4.33	(8.84)
$K_R$ (in MKS unit)	3.933	(8.85)
$KT_r$	1.024 (1.005-1.030)	(8.100)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见Cerco和Cole (1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号。

<sup>c</sup> (Cerco和Cole, 1994) 中没有, 因为他们的配方不包括这些参数。

: Kro is from O' Connor & Dobbins O' Connor and Dobbins (1958)。

: KTr来自Thomann&Mueller Thomann和Mueller (1987) 。

表8.23.水柱中总活性金属 (TAM) 和粪大肠杆菌的相关参数

Parameter	Value <sup>a</sup>	Equation Number <sup>b</sup>
<i>KHbmf</i> (g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> )	0.5	(8.103)
<i>BFTAM</i> (mol/m <sup>2</sup> /day)	0.01	(8.103)
<i>Ttam</i> (°C)	20.0	(8.103)
<i>Ktam</i> (°C <sup>-1</sup> )	0.2	(8.103)
<i>TAMdmx</i> (mol/m <sup>3</sup> )	0.015	(8.104)
<i>Kdotam</i> (per g O <sub>2</sub> /m <sup>3</sup> )	1.0	(8.104)
<i>KFCB</i> (1/day)	0.0-6.1 (seawater)	(8.106)
<i>TFCB</i> (°C <sup>-1</sup> )	1.07	(8.106)

<sup>a</sup>这些数值的评估详见Cерco和Cole (1994) 的第九章。

<sup>b</sup>首先显示和定义相应参数的方程式编号。

<sup>c</sup>由于Cерco和Cole (1994) 的配方不包括这些参数, 因此无法获得。

: KFCB和T FCB来自Thomann和Mueller (1987)

表8.24.水柱颗粒有机物 (POM) 在沉积物G类中的分配 (Cерco和Cole, 1994)

WCM Variable	Carbon & Phosphorus			Nitrogen		
	G1	G2	G3	G1	G2	G3
A. "stand alone" model	0.65	0.20	0.15	0.65	0.25	0.10
B. coupled model Labile Particulate	1.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.0
Refractory Particulate <sup>a</sup>						
: Bay and Tributary Zones 1	0.0	0.11	0.89	0.0	0.26	0.74
: Bay Zones 2 and 10	0.0	0.43	0.57	0.0	0.54	0.46
: All Other Zones	0.0	0.73	0.27	0.0	0.82	0.18
Algae	0.65	0.255	0.095	0.65	0.28	0.07

<sup>a</sup>区域定义见 (Cерco和Cole, 1994, 图10-6) 。

表8.25.使用的沉积物埋藏率 (W) (Cerco和Cole, 1994)

Bay Zones <sup>a</sup>	Rate (cm/yr)	Tributary Zones <sup>a</sup>	Rate (cm/yr)
1, 2, 10	0.50	1	0.50
3, 6, 9	0.25	2, 3	0.25
7, 8	0.37		

<sup>a</sup>区域定义见 (Cerco和Cole, 1994, 图10-6)。

## 第9章 拉格朗日粒子跟踪

EFDC++中的拉格朗日粒子跟踪 (LPT) 模块被开发为一种有效的工具, 用于解决流体动力学中与模拟和预测河流、湖泊和海洋系统中物体运动轨迹有关的许多问题。DSI通过简单的分析计算, 校准了带有LPT模块的EFDC+, 以实现明渠中的准稳态和均匀流动。此外, 还进行了几种不同流体动力学状态和几何形状的试验。该模块的可靠性也在各种应用程序中得到了证明 (DSI, 2009)。通过模拟发现, 不仅速度场, 湍流引起的随机性和扩散性也会显著影响簇的分散和漂移轨迹的行为。

对固体颗粒在流体环境中运动轨迹的研究在力学中很早就出现了, 并被认为是拉格朗日方法中的一种运动。该方法的优点在于, 与确定网格单元的平均浓度的方法相比, 可以更详细、更准确地跟踪每个特定颗粒的运动过程。然而, 由于计算成本的原因, 当粒子数量非常大时, 该解决方案在实践中太难实现。随着计算成本的降低, 现在更容易实现这些问题的解决方案。固体颗粒的运动是由流体速度场决定的, 因此有必要将其与流体流动模型相耦合。

### 9.1 基本方程

EFDC+中使用的控制方程是流体流动的Navier-Stokes方程, 盐度、温度、染料、有毒物质和悬浮沉积物传输的平流扩散方程 (Hamrick和Wu, 1997; Hamrick, 19921996)。方程以曲线坐标系表示, 适用于2DH坐标和垂直方向的SIG坐标。用显式格式的有限差分法对它们进行离散化。需要注意的是, EFDC+中使用了静水压假设。然而, 当垂流速与Huu Chung和Eppel (2008) 中提到的水平分量相比不是很大时, 非静水压力的影响并不重要。

三维曲线正交坐标系中质量传输的平流扩散方程为:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(uC)}{\partial x} + \frac{\partial(vC)}{\partial y} + \frac{\partial(wC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left( A_H \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( A_H \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( A_b \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (9.1)$$

其中，

t是时间，

(x, y, z) 是粒子的拉格朗日坐标，

C是浓度，

(u, v, w) 是流体流动的速度分量，以及

$A_H$ 和 $A_b$ 分别是水平扩散系数和垂直扩散系数。

质点拉格朗日运动的微分方程与方程 (9.1) 一致，如下：

$$dx = \left( u + \frac{\partial A_H}{\partial x} \right) dt + (2p-1) \sqrt{2A_H dt} \quad (9.2)$$

$$dy = \left( v + \frac{\partial A_H}{\partial y} \right) dt + (2p-1) \sqrt{2A_H dt} \quad (9.3)$$

$$dz = \left( w + \frac{\partial A_b}{\partial z} \right) dt + (2p-1) \sqrt{2A_b dt} \quad (9.4)$$

其中dt是时间步长，p是来自平均值为0.5的均匀分布随机变量生成器的随机数。当使用 $2p-1$ 进行转换时，随机分量的平均值为零，范围从-1到1。变换后的随机值允许扩散项围绕平流位置移动粒子 $\pm$ 。方程 (9.2) 至 (9.4) 遵循Dunsbergen和Stelling (1993) 使用的3D随机行走方法。

为了确定粒子的拉格朗日轨迹，将方程 (9.2) 至 (9.4) 纳入EFDC+模型。如上所述，数值解被分别分为平流传输和随机分量。这种方法允许用户启用（即开启随机行走）或禁用（仅平流传输）水平和/或垂直方向的随机分量。

微分方程 (9.2) 至 (9.4) 的解有三种选择。它们是显式欧拉、预测-校正欧拉和四阶龙格库塔。它们对方程的离散化如下：

显式欧拉法：该方法非常简单，近似为 $O(\Delta t)$

$$X_{n+1} = X_n + u(t_n, X_n, Y_n, Z_n) \Delta t \quad (9.5)$$

$$Y_{n+1} = Y_n + v(t_n, X_n, Y_n, Z_n) \Delta t \quad (9.6)$$

$$Z_{n+1} = Z_n + w(t_n, X_n, Y_n, Z_n) \Delta t \quad (9.7)$$

预测-校正-欧拉方法：该方法具有显式和隐式特征的优点，近似值为 $O(\Delta t^2)$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2} [u(t_n, x_n, y_n, z_n) + u(t_{n+1}, x_{n+1}^p, y_{n+1}^p, z_{n+1}^p)] \Delta t \quad (9.8)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{2} [v(t_n, x_n, y_n, z_n) + v(t_{n+1}, x_{n+1}^p, y_{n+1}^p, z_{n+1}^p)] \Delta t \quad (9.9)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{2} [w(t_n, x_n, y_n, z_n) + w(t_{n+1}, x_{n+1}^p, y_{n+1}^p, z_{n+1}^p)] \Delta t \quad (9.10)$$

其中， $(x_{n+1}^p, y_{n+1}^p, z_{n+1}^p)$  由方程 (9.4) 至 (9.6) 计算

龙格-库塔4法：该方法的近似值为 $O(\Delta t^4)$ ，测试表明，它是所提供的三种解决方案中的最佳选择：

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{6} (\Delta x_1 + 2\Delta x_2 + 2\Delta x_3 + \Delta x_4) \quad (9.11)$$

$$y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6} (\Delta y_1 + 2\Delta y_2 + 2\Delta y_3 + \Delta y_4) \quad (9.12)$$

$$z_{n+1} = z_n + \frac{1}{6} (\Delta z_1 + 2\Delta z_2 + 2\Delta z_3 + \Delta z_4) \quad (9.13)$$

其中

$$\Delta x_1 = u(t_n, x_n, y_n, z_n) \Delta t \quad (9.14)$$

$$\Delta y_1 = v(t_n, x_n, y_n, z_n) \Delta t \quad (9.15)$$

$$\Delta z_1 = w(t_n, x_n, y_n, z_n) \Delta t \quad (9.16)$$

$$\Delta x_2 = u \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_1, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_1, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_1 \right) \Delta t \quad (9.17)$$

$$\Delta y_2 = v \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_1, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_1, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_1 \right) \Delta t \quad (9.18)$$

$$\Delta z_2 = w \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_1, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_1, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_1 \right) \Delta t \quad (9.19)$$

$$\Delta x_3 = u \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_2, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_2, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_2 \right) \Delta t \quad (9.20)$$

$$\Delta y_3 = v \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_2, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_2, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_2 \right) \Delta t \quad (9.21)$$

$$\Delta z_3 = w \left( t_n + \frac{1}{2} \Delta t, x_n + \frac{1}{2} \Delta x_2, y_n + \frac{1}{2} \Delta y_2, z_n + \frac{1}{2} \Delta z_2 \right) \Delta t \quad (9.22)$$

$$\Delta x_4 = u(t_n + \Delta t, x_n + \Delta x_3, y_n + \Delta y_3, z_n + \Delta z_3) \Delta t \quad (9.23)$$

$$\Delta y_4 = v(t_n + \Delta t, x_n + \Delta x_3, y_n + \Delta y_3, z_n + \Delta z_3) \Delta t \quad (9.24)$$

$$\Delta z_4 = w(t_n + \Delta t, x_n + \Delta x_3, y_n + \Delta y_3, z_n + \Delta z_3) \Delta t \quad (9.25)$$

## 9.2. 溢油模型

EFDC+允许使用与漂流者相同的净运输方法模拟石油泄漏。每个石油泄漏“颗粒”（此处称为“包”）都会根据泄漏或排放的总质量以及为该事件定义的包数分配一个质量。数据包可以一次全部释放，也可以在指定的时间间隔内释放。如果沉降或上升速率设置为零，则油包将保持在水面附近（5 mm以下）。漏油模块特有的其他过程包括直接风阻力（除了风阻力引起的表面流）、蒸发和生物降解。

### 9.2.1 风阻

如果溢油位于地表，风阻可以加到随后溢油的平流输送分量上（Kim et al., 2014）。

$$V_{oil} = V_{current} + (CD \times V_{wind}) \quad (9.26)$$

其中 $V_{oil}$ 和 $V_{current}$ 分别是漏油和潮流的速度， $V_{wind}$ 是10m高度的风速， $CD$ 是风阻系数。在EFDC+中，此基本方程由两个选项实现

$$\text{选项 1} \quad CD = A \times V_{windmag} + B \quad (9.27)$$

$$\text{选项 2} \quad CD_x = A \times V_{windx} + B \quad (9.28)$$

$$CD_y = A \times V_{windy} + B \quad (9.29)$$

最后，用以下方法计算了风阻作用下的实际位移：

$$dx = CD_x \times V_{windx} \times \Delta t \quad (9.30)$$

$$dy = CD_y \times V_{windy} \times \Delta t \quad (9.31)$$

其中 $C_{coeffA}$ 的单位为s/m， $C_{coeffB}$ 为无量纲， $CD$ 为无量纲且速度项均以m/s为单位。如果 $C_{coeffA}$ 为零，则使用恒定的阻力系数，类似于Kim等人。 $CD$ 的值范围可以从0.0到0.1不等，典

型值为0.02到0.03。

## 9.2.2 损失条款

漏油的质量可能受到许多过程的影响，其中两个过程目前处于EFDC+，即蒸发和生物降解。如果数据包中的质量小于 $1e-9$  kg，EFDC+将停用该数据包以供将来处理。

为了模拟石油蒸发过程，使用了Mackin和Aller（1984）在论文中提出的表面蒸发理论。如果正在模拟水温，则假设油包温度与周围的水相同。如果没有模拟温度，那么指定的温度将用作蒸发过程的恒定值。

油包的生物降解使用基于Stewart等人（1993）的简单一阶衰变方法。例如， $0.011$ 天<sup>-1</sup>的生物降解速率大约等于两个月的半衰期。如果模拟水温，则用户指定的溢出温度是最佳生物降解的生物降解速率参考温度。如果没有模拟水温，则将用户输入的降解率作为常数应用。

要忽略蒸发，请将蒸汽压力设置为零。要忽略生物降解，请将降解率设置为零。

## 第 10 章 海洋流体动力学模块

海洋水动力（MHK）装置从洋流和潮汐中提取能量，从而改变项目现场的水流速度和水流。这些流体动力学变化可能会影响MHK装置附近和周围（即远场）区域的生态系统。在海洋和淡水环境中，设备将从系统中去除能量（动量），从而可能改变水质和沉积物动力学。在河口，潮差和停留时间可能会发生变化（根据系统流量财产和测量影响的地点，涨潮或落潮）。影响将与安装的结构的数量和大小成比例，大型MHK项目具有最大的潜在影响，需要进行最深入的分析。James等人（2010）介绍了MHK在SNL-EFDC+中的理论和实现。

### 10.1.海洋流体动力学理论

MHK装置去除了系统中的动量，但也改变了湍流动能 $K$ 和湍流动能耗散率 $\epsilon$ 。这些影响是通过适当的汇项来捕捉的。 $S_Q$  ( $m^4/s^2$ ) 是MHK装置由于能量去除以及由于MHK结构的形状和粘性阻力而产生的体积动量提取率。 $S_K$  ( $m^5/s^3$ ) 表示由于MHK装置（支架）导致的适当模型单元中净湍流动能的体积变化， $S_\epsilon$  ( $m^5/s^3$ ) 作为体积动能耗散率方程的类似项（Poggi等人，2004）。根据EFDC+中使用的标准守恒方程，这些量在MHK装置的下游进行平流和分散。 $S_Q$  的标准计算忽略了相对于MHK装置的能量去除和形状阻力的粘性阻力，从而导致

$$S_Q = -\frac{1}{2}C_T A_M U^2 \quad (10.1)$$

其中，

$C_T$  是MHK推力系数（支架的阻力系数 $C_D$ ）（无量纲），

$A_M$ 是MHK装置面向流量的面积（支持面向流量的区域）（ $m^2$ ），以及

$U$ 是单元中的局部流速 $\sqrt{(u^2+v^2)}$ （m/s）。

这里，MHK设备功率 $P_M$ （ $kgm^2/s^3$ ）定义为

$$P_M = \frac{1}{2} C_T A_M \rho U^3 \quad (10.2)$$

其中， $\rho$ ( $kg/m^3$ )为水密度。

术语SK的产生是因为MHK装置破坏了平均流动运动并产生尾流湍流（ $\approx 1/2 C_T A_M U^3$ ）。

然而，这样的尾流消散得相当快，推测在大约30MHK的装置长度（涡轮机直径）内。初步的MHK计算流体动力学（CFD）模型显示了过于持久的尾流，部分原因可能是没有考虑这个术语。

SK的正则（或基于物理的）形式反映了动量汇（或部分流阻塞）的影响，是（Sanz, 2003）：

$$S_K = \frac{1}{2} C_T A_M (\beta_p U^3 - \beta_d U K) \quad (10.3)$$

其中，

$K$ 是尾流产生的湍流动能（ $m^2/s^2$ ），

$\beta_p$ （ $\approx 1.0$ ）是通过阻力（即 $K$ 预算中的源项）转换为 $K$ 的平均流动动能的分数（无量纲），

以及

$\beta_d$ （ $\approx 1.0-5.0$ ）是通过转换为动能（即 $K$ 预算中的汇项）而耗散的 $K$ 的分数（无量纲）。

$K-\epsilon$ 方法最明显的弱点是其最不被理解的术语 $S_\epsilon$ （Wilson et al., 1998）。在过去十年左右的时间里，人们提出了各种 $S_\epsilon$ 模型（Green, 1992; Katul等人, 2004; Liu等人, 1996），但在这个模型中使用了最简单的模型：

$$S_e = C_{\epsilon 4} \frac{e}{K} S_K \quad (10.4)$$

其中 $C_{\epsilon 4}$ 是闭合常数（Katul等人, 2004）。

方程（10.4）的公式基于所有 $K-\epsilon$ 方法通用的标准尺寸分析。在将方程（10.1）至（10.4）添加到动量和 $K-\epsilon$ 方程后，如果指定了适当的上下边界条件，则可以求解动量 $K$ 和 $\epsilon$ 。对于该实现， $C_{\epsilon 4}=0.9$ ， $\beta_p=1.0$ 和 $\beta_d=5.1$ 。在SNL-EFDC+中，动量被定义为流动深度 $H$ 、速度 $u$ 和 $v$ 的乘积；动



能守恒用1 2HQ2求解，其中q是湍流强度，湍流能量耗散率守恒采用HQ2l的形式，其中l是湍流长度尺度。

## 10.2. 在 EFDC+ 中的实现

模型 $\sigma$ 层中MHK装置的简化动能方程为

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( m_x m_y \rho H \Delta_k \frac{u^2 + v^2}{2} \right) = -\frac{1}{2} \rho C_T A_M (u^2 + v^2)^{\frac{3}{2}} = -P_M \quad (10.5)$$

$$A_M = W_M H \Delta_k \quad (10.6)$$

其中，

$m_x$ 、 $m_y$ 是模型单元（m）的（水平）x和y维度，

$\Delta_k$ 是分配给第 $k^{\text{th}}$  $\sigma$ 层的总水深的分数，

$A_M$ 是装置的正面流动面积（ $\text{m}^2$ ），

$W_M$ 是设备或支架宽度（m），以及

$H \Delta_k$ 是层厚度（m）。

动量方程的相应分量，简化为排除平流和扩散项（Galperin and Orszag, 1993），

$$\frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H \Delta_k u) = -g m_y H \Delta_k \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{1}{2} C_T A_M (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} u \quad (10.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (m_x m_y H \Delta_k v) = -g m_x H \Delta_k \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \frac{1}{2} C_T A_M (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} v \quad (10.8)$$

其中，

$g$ 为重力加速度（ $\text{m/s}^2$ ），以及

$\zeta$ 是自由表面电势（m），或静水水位和流动深度之间的差（这是水位或压头驱动流动的方  
式）

EFDC+ 中 x 和 y 动量方程的解使用以下形式，

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hu) = -g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{1}{2 m_x m_y \Delta_k} C_T A_M (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} u \quad (10.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hv) = -g \frac{H}{m_y} \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \frac{1}{2 m_x m_y \Delta_k} C_T A_M (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} v \quad (10.10)$$

其可以按照MHK装置功率（并且等效地用于支撑结构动量去除）写成

$$\frac{\partial}{\partial t}(Hu) = -g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} \frac{P_M}{\rho (u^2 + v^2)} u \quad (10.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(Hv) = -g \frac{H}{m_y} \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} \frac{P_M}{\rho (u^2 + v^2)} v \quad (10.12)$$

解决程序从引入基于 $\Delta k$ 的 $\sigma$ 层符号开始:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Delta_k H u_k) = -g \Delta_k \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \left[ \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} \frac{P_M}{\rho (u^2 + v^2)} \right]_k \Delta_k u_k \quad (10.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Delta_k H v_k) = -g \Delta_k \frac{H}{m_y} \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \left[ \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} \frac{P_M}{\rho (u^2 + v^2)} \right]_k \Delta_k v_k \quad (10.14)$$

动量守恒方程为

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Delta_k H u_k) = -g \Delta_k \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \Delta_k (Q_k - \hat{Q}) u_k - \Delta_k \hat{Q} u_k \quad (10.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Delta_k H v_k) = -g \Delta_k \frac{H}{m_y} \frac{\partial \zeta}{\partial y} - \Delta_k (Q_k - \hat{Q}) v_k - \delta_k \hat{Q} v_k \quad (10.16)$$

其中容积通量 $q$ 为

$$Q_k = \left[ \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} \frac{P_M}{\rho (u^2 + v^2)} \right]_k \quad (10.17)$$

$$\hat{Q} = \sum_{k=1}^{KC} \Delta_k Q_k \quad (10.18)$$

从这一点出发, 只使用 $u$ 方程来说明求解过程, 该方程在所有 $KC$ 层上求和, 得到

$$\frac{\partial}{\partial t}(H\hat{u}) = -g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - \sum_{k=1}^{KC} \Delta_k (Q_k - \hat{Q}) u_k - \hat{Q} \hat{u} \quad (10.19)$$

$$\hat{u} = \sum_{k=1}^{KC} \Delta_k u_k \quad (10.20)$$

这是简化的外模方程。该方程使用时间差分形式, 通过深度平均速度分量的连续性方程, 以及水面高程 $H$ 来求解

$$\left( 1 + \frac{\hat{Q}}{H} \Delta t \right) (H\hat{u})^{n+1} + \frac{\Delta t}{2} g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta^{n+1}}{\partial x} = (H\hat{u})^n - \frac{\Delta t}{2} g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta^n}{\partial x} - \Delta t \sum_{k=1}^{KC} [\Delta_k (Q_k - \hat{Q}) u_k]^n \quad (10.21)$$

其中 $\Delta t$ 是时间步长。

内模方程的求解是基于考虑两个相邻层的方程之间的差异

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hu_{k+1}) = -g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - (Q_{k+1} - \hat{Q}) u_{k+1} - \hat{Q} u_{k+1} \quad (10.22)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hu_k) = -g \frac{H}{m_x} \frac{\partial \zeta}{\partial x} - (Q_k - \hat{Q}) u_k - \hat{Q} u_k \quad (10.23)$$

其余数为

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hu_{k+1} - Hu_k) + \frac{\hat{Q}}{H} (Hu_{k+1} - Hu_k) = - (Q_{k+1} - \hat{Q}) u_{k+1} + (Q_k - \hat{Q}) u_k \quad (10.24)$$

时差收益率

$$\left(1 + \Delta t \frac{\hat{Q}}{H}\right) (Hu_{k+1} - Hu_k)^{n+1} = (Hu_{k+1} - Hu_k)^n - \Delta t [(Q_{k+1} - \hat{Q}) u_{k+1} - (Q_k - \hat{Q}) u_k]^n \quad (10.25)$$

KC-1层界面方程组可以求解整个层的速度差，并与深度平均速度的定义一起使用，以确定实际层速度。

湍流动能（湍流强度）方程中的MHK装置效应由下式给出

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(H \frac{q^2}{2}\right) = \beta_p \left(\frac{1}{2} \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} C_{TAM}\right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2) - \beta_d \left(\frac{1}{2} \frac{1}{m_x m_y \Delta_k} C_{TAM}\right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} \frac{q^2}{2} - \frac{H}{B_1 l} q^3 \quad (10.26)$$

其中， $B_1=116.6$ （无量纲）是来自Mellor和Yamada（1982）的湍流闭合系数。

将装置的耗散效应与标准流量耗散项相结合，得出

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(H \frac{q^2}{2}\right) + \left[ \beta_d \left(\frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k}\right) \frac{(u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}}}{H} + \frac{q}{B_1 l} \right] H q^2 = \beta_p \left(\frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k}\right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2) \quad (10.27)$$

其中，总耗散已移动到方程的左侧，以强调必须在下式给出的数值求解程序中隐式处理

$$\left\{ 1 + \Delta t \left[ \beta_d \left(\frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k}\right) \frac{(u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}}}{H} + \frac{2q}{B_1 l} \right] \right\} (H q^2)^{n+1} = (H q^2)^n + \Delta t \beta_p \left(\frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k}\right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2) \quad (10.28)$$

湍流长度比例方程（湍流动能耗散率）为

$$\frac{\partial}{\partial t} (Hq^2l) + \left[ C_{e4}\beta_d \left( \frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k} \right) \frac{(u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}}}{H} + \frac{q}{B_1 l} \right] Hq^2l = C_{e4}\beta_p \left( \frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k} \right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2)l \quad (10.29)$$

其求解类似于湍流动能方程，使用

$$\left\{ 1 + \Delta t \left[ C_{e4}\beta_d \left( \frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k} \right) \frac{(u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}}}{H} + \frac{q}{B_1 l} \right] \right\} (Hq^2l)^{n+1} = (Hq^2l)^n + \Delta t C_{e4}\beta_p \left( \frac{1}{2} \frac{C_{TAM}}{m_x m_y \Delta_k} \right) (u^2 + v^2)^{\frac{1}{2}} (u^2 + v^2)l \quad (10.30)$$

为了完整起见，SNL-EFDC+编码中还包括了对K-ε的植物抗性影响。

## 第 11 章 贝类养殖模块

本节总结了EFDC++代码中实现的贝类模块的基本理论。DSI赞赏与韩国国家渔业科学研究所海洋环境研究部为开发该模块而进行的持续合作。贝类滤食性动物与富营养化模型的多个组成部分相互作用。这些生物从水柱中去除聚甲醛进行摄入和同化，并将一部分聚甲醛作为粪便沉积在底部沉积物中。（Cercu和Noel，2005年）。在EFDC+中，贝类的动力学过程包括过滤、摄入、同化、呼吸、死亡和产卵。贝类个体被量化为软组织中的OC，该OC是作为食物可获得性、呼吸和死亡率的函数计算的。通过与水质模型的相互作用来考虑环境对贝类生命过程的影响。

### 11.1. 控制方程

对于每个贝类个体来说，其重量随时间的变化是净产量变化的结果。因此，滤食性生物量的基本增长方程可以写成：

$$\frac{dW_d}{dt} = NP \quad (11.1)$$

其中，

t是时间，

Wd是干肉重量（g C），以及

NP是净产量（g C）。

根据White等人（1988）和Kobayashi等人（1997），净产量是体细胞和生殖组织产量的总和，这被认为是同化和呼吸之间的差异：

$$NP = P_g + P_r = A - R \quad (11.2)$$

其中，

$P_g$ 是体细胞产量 (g C) ，

$P_r$ 是生殖组织产量 (g C) ， 以及

$A$ 是同化作用 (g C) ，  $R$ 是呼吸作用 (g C) 。

### 11.2. 长度-重量关系

壳长和活重之间的关系通常被用作牡蛎生长的指标。众所周知，方程式的形式如下：

$$L = A \cdot W_d^B \quad (11.3)$$

其中，

$L$ 为外壳长度 (cm)

$A$ 、  $B$ 是常数参数。

通过将该方程与实验测量值拟合，Kobayashi等人 (1997) 给出了日本牡蛎 *Crassostrea gigas* 的  $A=77.9$ 和  $B=0.291$ 。

### 11.3. 过滤速率

贝类过滤率被量化为单位时间内每个个体清除颗粒的水量。它是生长的主要决定因素，反过来又影响贝类生物量的变化。在EFDC+中，过滤速率表示为最大或最佳速率，该速率受环境温度、悬浮固体、盐度和溶解氧的影响：

$$FR = FR_w \cdot f_1(T) \cdot f_2(S) \cdot f_3(TSS) \cdot f_4(DO) \quad (11.4)$$

其中，

$FR$ 是过滤速率 (每小时过滤1次) ，

$FR_w$ 是最大过滤速率 (每小时过滤1次) ，

$f_1(T)$  是温度对过滤速率的影响 ( $0 < f_1(T) \leq 1$ ) ，

$f_2(S)$  是盐度对过滤速率的影响 ( $0 < f_2(S) \leq 1$ ) ，

$f_3(TSS)$  是悬浮固体对过滤速率的影响 ( $0 < f_3(TSS) \leq 1$ ) ， 以及

$f_4(DO)$  是溶解氧对过滤速率的影响 ( $0 < f_4(DO) \leq 1$ ) 。

### 11.3.1 最大过滤速率

最大过滤速率通常根据干肉重量 $W_d$ 来估计。Coughlan和Ansell (1964) 为虹吸双壳类提供了以下关系:

$$FR_W = 2.59 \cdot W_d^{0.73} \quad (11.5)$$

Cloern (1982) 使用另一种配方研究南旧金山湾的双壳类:

$$FR_W = 7.0 \cdot W_d^{0.67} \quad (11.6)$$

对于日本牡蛎, 大牡蛎, 小林等人。(1997) 提出了以下最大过滤速率公式:

$$FR_W = \begin{cases} 2.51 \cdot W_d^{0.279}, & W_d \geq 2g \\ 0.117 \cdot W_d^3 - 1.05 \cdot W_d^2 + 3.09 \cdot W_d + 0.133, & W_d < 2g \end{cases} \quad (11.7)$$

Cerco和Noel(2007)在研究切萨皮克湾的本地牡蛎*Crassostrea Virginica*时, 使用了一个常数来确定最大过滤率:

$$FR_W = 0.55 \cdot \frac{1000}{24} \cdot W_d = 22.917 \cdot W_d \quad (11.8)$$

另一方面, Officer等人 (1982) 根据总重量 $W$ 确定了最大过滤速率:

$$FR_W = 0.76 \cdot W^{0.60} \quad (11.9)$$

温度对最大过滤速率的影响也可以包括在内 (Doering和Oviatt, 1986):

$$FR_W = \frac{60}{1000} \frac{L^{0.96} T^{0.95}}{2.95} \quad (11.10)$$

### 11.3.3 盐度效应

根据Loosanoff (1958), 过滤速率降低到7.5 ppt以下, 并在3.5 ppt时停止。还引入了这些阈值之间的盐度效应的线性关系:

$$f_2(S) = \begin{cases} 1, & S \geq 7.5 \text{ ppt} \\ \frac{S-3.5}{7.5-3.5}, & 3.5 < S < 7.5 \text{ ppt} \\ 0, & S \leq 3.5 \text{ ppt} \end{cases} \quad (11.13)$$

其中 $S$ 是环境盐度 (ppt)。

Quayle (1988) 和Mann等人 (1991) 报道了盐度效应的类似数学公式, 但盐度阈值不同:

$$f_2(S) = \begin{cases} 1, & S \geq 20 \text{ ppt} \\ \frac{S-10}{20-10}, & 10 < S < 20 \text{ ppt} \\ 0, & S \leq 10 \text{ ppt} \end{cases} \quad (11.14)$$

在Cерco和Noel (2005) 中, 作者提出了盐度对过滤速率影响的tanh函数:

$$f_2(T) = 0.5 \cdot (1 + \tanh(S - S_{KH})) \quad (11.15)$$

$S_{KH}$ 是过滤速率减半时的盐度 (ppt)。

Fulford等人 (2007) 根据对美国切萨皮克湾牡蛎*Crassostrea virginica*的数据测量, 将盐度效应调整为线性函数盐度:

$$f_2(T) = 0.0926 \cdot S - 0.139 \quad (11.16)$$

Buzzelli等人 (2015) 将盐度对佛罗里达州南部河口牡蛎过滤速率模拟的影响包括在内:

$$f_2(T) = -0.0017 \cdot S^2 + 0.0084 \cdot S - 0.1002 \quad (11.17)$$

#### 11.3.4 悬浮物效应

长期以来, Loosanoff和Tommers (1948) 通过实验已经认识到高悬浮固体浓度对牡蛎过滤速率的影响。根据给定的数据, Hofmann等人 (1992) 推导出如下公式:

$$f_3(TSS) = 1 - 0.001 \cdot \frac{\log_{10}(TSS) + 3.38}{0.418} \quad (11.18)$$

Cерco和Noel (2005) 应用了一个分段函数, 该函数通过对Jordan (1987) 的数据进行视觉拟合而获得, 并补充了Loosanoff和Tommers (1948) 的结果:

$$f_3(TSS) = \begin{cases} 0.1, & TSS < 5 \text{ mg/l} \\ 1.0, & 5 < TSS < 25 \text{ mg/l} \\ 0.2, & 25 < TSS < 100 \text{ mg/l} \\ 0.0, & TSS \geq 100 \text{ mg/l} \end{cases} \quad (11.19)$$

Fulford等人 (2007) 根据美国环保局切萨皮克湾监测项目测量的数据, 将悬浮固体的影响建模为幂函数:

$$f_3(TSS) = 10.364 \ln(TSS)^{-2.0477}, TSS > 25 \text{ mg/l} \quad (11.20)$$

#### 11.3.5 溶解氧(DO)效应

模型公式考虑了DO对过滤速率的影响, 如CERCO和NOEL(2005)中提出的:

$$f_4(DO) = \frac{1}{1 + \exp(1.1 \times \frac{DO_{hx} - DO}{DO_{hx} - DO_{qx}})} \quad (11.21)$$

其中DO是溶解氧浓度 (mg/l) ;  $DO_{hx}$ 和 $DO_{qx}$ 是过滤速率分别为最大值的50%和25%时的DO浓度 (mg/l) 。

#### 11.4. 摄取同化

贝类的摄取能力是通过过滤速率乘以食物浓度得出的:

$$I = \frac{24}{1000} \times f \times FR \quad (11.22)$$

其中, I为摄入量 (g干重/天-1) , f为食物浓度 (测量的食物值) (mg干重l-1) 。

贝类的同化是利用同化效率从摄入中获得的。值得注意的是, 贝类吸收的摄入碳的比例取决于碳源。

$$A = \alpha \times I \quad (11.23)$$

其中A是同化率 (g每一天的干重-1) ,  $\alpha$ 是同化效率。贝类的同化作用可以通过以下方式转化为能量:

$$E_A = C_E \times A \quad (11.24)$$

其中 $E_A$ 是同化能量 (每一天的热量-1) ,  $C_E$ 是热量转换因子 (每克干重5210卡路里) 。

#### 11.5. 呼吸作用

贝类呼吸通常表示为温度和干肉重量的函数:

$$R = B_M \cdot W_d \quad (11.25)$$

其中 $B_M$ 是呼吸对温度的依赖关系。

文献中已经提出了 $B_M$ 的几种数学公式, 并在EFDC+代码中实现。根据韩国国立水产科学研究所 (Kim, 2019) :

$$B_M = \begin{cases} \alpha_R \cdot \theta^{T-T_B}, & T > T_B \\ 0, & T \leq T_B \end{cases} \quad (11.26)$$

其中,

$T_B$ 是呼吸的基本温度( $^{\circ}C$ ) ,

$\alpha_R$ 参考温度下的 $\alpha_R$ 代谢率 (第-1天) , 以及



$\theta$ 是呼吸的温度系数。

Cerco和Noel(2007)认为基础代谢是温度的指数增长函数

$$B_M = a_R \cdot \exp(K_{Tb} \cdot (T - T_r)) \quad (11.27)$$

其中，

$T_r$ 是用于指定新陈代谢的参考温度( $^{\circ}\text{C}$ )，

$a_R$ 在参考温度下的代谢速率（第-1天），

$K_{Tb}$ 是一个常数，它将新陈代谢与温度联系起来( $^{\circ}\text{C}^{-1}$ )。

对于弗吉尼亚牡蛎，作为温度和贝类干肉重量函数的呼吸速率也可以从Dame（1972）获得：

$$R = (12.6 \cdot T + 69.7) \cdot W_d^{-0.25}$$

根据Hofmann等人（1992）的说法，盐度在一定温度范围内对牡蛎呼吸的影响是使用（Shumway和Koehn，1982）中给出的数据参数化的：

$$R_R = \begin{cases} 0.007 \cdot T + 2.099, & T < 20^{\circ}\text{C} \\ 0.0915 \cdot T + 1.324, & T \geq 20^{\circ}\text{C} \end{cases} \quad (11.29)$$

其中， $RR$ 是10 ppt时的呼吸与20 ppt时呼吸的比率： $RR = R_{10\text{ppt}}/R_{20\text{ppt}}$ 。将方程（11.28）和（11.29）组合以获得盐度范围内的呼吸，如下所示：

$$R = \begin{cases} R, & S \geq 15 \text{ ppt} \\ R(1 + (R_R - 1) \frac{15 - S}{5}), & 10 < S < 15 \text{ ppt} \\ RR R, & S \leq 10 \text{ ppt} \end{cases} \quad (11.30)$$

Shumway和Koehn（1982）确定了盐度在20 ppt时对呼吸的影响。

最后，呼吸消耗的能量由以下公式给出：

$$E_R = \frac{24}{1000} \times C_R \times R \times W_d \quad (11.31)$$

其中，

$E_R$ 是呼吸能量（每一天的热量-1），

$C_R$ 是热量转换系数（每毫升氧气的热量），以及

$R$ 是呼吸速率（ $\mu\text{l}$ 氧气/g干重h<sup>-1</sup>）。

## 11.6.再生产

对于大于或等于一定大小的成年贝类，通过使用以下形式的温度依赖性繁殖效率，将净产量分配到生长和繁殖中：

$$P_r = R_{eff} \cdot NP \quad (11.32)$$

其中 $R_{eff}$ 是依赖于温度的再现效率。

Kobayashi等人（1997）报道了根据观测经验得出的 $R_{eff}$ 公式：

$$R_{eff} = \begin{cases} 0.8, & T \geq 27^\circ\text{C} \\ 0.2 \cdot T - 4.6, & 23 < T < 27^\circ\text{C} \\ 0, & T \leq 23^\circ\text{C} \end{cases} \quad (11.33)$$

在 $NP < 0$ 的情况下，假设性腺组织的优先吸收可以弥补缺陷。

## 11.7.产卵

当环境条件（温度和盐度）在合适的范围内，并且累计生产生物量超过贝类总生物量的一定比例时，就会发生产卵。一旦产卵，总的繁殖生物量被分配为雄性和雌性生物量。女性与男性的比例计算如下（Powell et al., 1994）：

$$f_{ratio} = 0.021 \cdot L_b - 0.62 \quad (11.34)$$

其中 $f_{ratio}$ 是雌性与雄性的比例， $L_b$ 是以毫米为单位的外壳长度。然后，可以计算生殖生物量的雌性部分，并将其转换为产卵，如下所示：

$$n_{eggs} = R_f \cdot \frac{1}{E_{egg}} \cdot \frac{1}{W_{egg}} \quad (11.35)$$

其中，

$n_{eggs}$ 是产卵的数量，

$R_f$ 是生殖生物量的雌性部分，

$W_{eggs}$ 是卵的重量

$E_{eggs}$ 是卵的热量含量（cal.g干重<sup>-1</sup>）。

牡蛎的卵重可由卵体积推算为：

$$W_{eggs} = 2.14 \times 10^{-14} \cdot V_{egg} \quad (11.36)$$

其中  $V_{egg}$  是牡蛎卵的体积( $\mu\text{m}^3$ )。