

大型海湾水交换计算中随机 游动方法的应用研究*

李小宝, 袁德奎, 陶建华

(天津大学 机械学院 力学系,天津 300072)

(周恒推荐)

摘要: 水交换矩阵是反映大型海湾不同子区域之间水交换关系的有效工具,该文对随机游动方法在水交换矩阵计算中的应用进行了研究.通过与对流扩散模型的对比,指出用随机游动方法计算水交换矩阵比用对流扩散方程求解更快更灵活.同时,为了对不同区域之间的水交换特性进行长期快速预测,采用了Thompson提出的预测矩阵方法.通过理论分析得出,影响该矩阵预测效果的因素主要有:粒子数目、分区数和预测矩阵取值时间.以一个矩形海湾为例,将数值模拟结果和预测矩阵预测结果进行对比,分析了以上各因素对预测效果的影响.结果表明,粒子数目越多,预测矩阵取值时间越长,预测矩阵的预测效果越好.在粒子数目足够多的情形下,分区数越多,预测效果越好.相反,粒子数目如果较少,过多的分区数将可能导致预测矩阵效果太差而不可用.

关键词: 随机游动; Markov链; 水交换; 数值模拟; 对流扩散

中图分类号: P731.26;X145 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.05.009

引 言

湖泊、河口和近岸海域等水体的水交换能力与该水体的自净能力、环境容量、营养盐输运、生态环境等有着紧密的联系,水交换能力的研究是水环境保护与治理中的一个重要内容.

对于小型区域水体水交换能力的研究,基于区域内水体迅速充分混合假定的箱式模型^[1-2]快捷而有效;而对于大型区域,该假设可能导致对区域水交换能力的过高估计,因此箱式模型不适用^[3].目前大型海湾的水交换研究,主要通过将整个研究区域划分成多个子区域,并用数值模拟的方法分别进行计算.Thompson等^[4]提出的水交换矩阵是用来描述大型海域内各子区水交换特性的一个有力工具.水交换矩阵的每一个元素为任一时刻该子区域内流到其他子区域水体所占的比例.这样,每个子区域和研究区域内其他子区域的水交换情况就可以用一个向量表示出来,而所有子区域之间的水体相互交换情况,就可以用矩阵的形式表示出来.在实际研究中,可将具有不同水交换能力、功能区划及水质要求的区域各自划分成一个子区域,则水

* 收稿日期: 2010-10-18; 修订日期: 2011-02-16

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10702050)

作者简介: 李小宝(1982—),男,江西人,博士生(E-mail:gemli@126.com);

袁德奎,男,副研究员(联系人. Tel:+86-22-27890726;E-mail:dkeyuan@tju.edu.cn);

陶建华,女,教授,博士生导师(E-mail:jhtao@tju.edu.cn).

交换矩阵就可以生动而完整地给出各区域之间水体的详细来流去向,及它们之间水交换的相关系数,从而可以确定各区域水体之间的互相影响情况,为各子区域的功能规划和管理提供依据。

水交换矩阵是根据数值模拟结果统计得出的。目前,应用于水交换的数值模拟方法主要有:基于标识质点的 Lagrange 方法和基于对流扩散方程的 Euler 方法。标识质点路径的 Lagrange 方法只考虑了水体的对流而没有考虑水体的扩散,可能会给出和实际情形偏差较大的结果,特别是在对流比较小的区域^[5]。对流扩散模型同时考虑了水体的对流和扩散,但是在描述水体生命、驻留时间这种基于 Lagrange 观点的水交换概念时,由于它是通过统计全场中的浓度变化来实现它们的求解,因此不够直观准确。

随机游动方法是一种基于概率统计的数值方法,它利用足够多的粒子的运动来模拟物质的对流扩散过程。粒子的运动由一个包含对流项和扩散项的简单控制方程来确定,每一个粒子代表等份量的扩散质,且粒子的运动在统计特性上满足对流扩散方程。简单的控制方程使得它具有计算简单、易并行的优点;由于粒子代表等份量的扩散质且总数不变,该方法还具有无数值耗散的优点^[6]。目前,该方法在水交换研究方面已经得到较广泛的应用。Bilgili 等^[7]用该方法研究了模型的起始启动时间和湍动扩散系数的取值等多种因素对水交换的影响;Riddle^[8]用该方法模拟了苏格兰的 Forth 湾中释放化学物质的浓度分布和年龄,结果表明,采用不同扩散系数模型和参数的不确定性对模拟结果的影响都很大;Wang 等^[9]用该方法研究了胶州湾的三维水交换特性,并讨论了不同的边界处理方法、湍动扩散系数的不同取值对水交换的影响。

若在固定的分区方案下统计水交换矩阵,随机游动方法与对流扩散模型相比较并无显著的差异。然而,在实际工程中,为了优化规划或设计方案,对于同一块大型水域往往需要统计不同分区方案下的水交换矩阵。若采用对流扩散模型来计算水交换矩阵,对于每一种分区方案,都需要进行一次模拟;而采用随机游动的方法,只要在初始时刻标记每一个粒子,就可以知道在不同的分区方案下各个分区内任意时刻都有哪些粒子,对于不同的分区方案,都可根据同一次的模拟结果统计出相应的水交换矩阵,从而更加灵活快捷。此外,有时需要了解较长时间后的水交换特性,这时,可以引入 Thompson 等^[4]提出的预测矩阵来进行区域之间水交换的快速预测,而不需要再次进行长时间的数值模拟。

本文主要开展了以下几方面工作:1) 将随机游动方法模拟结果和理论解进行了对比,讨论了粒子数对模拟精度的影响;2) 用数值实验的方法讨论了粒子数目、分区数和取值时间对预测矩阵预测效果的影响;3) 探讨了随机游动方法在计算大型海湾水交换矩阵时的优势。

1 基本方程

1.1 随机游动方法

假设在三维对流扩散过程中,流体中每个粒子的运动遵守如下方程:

$$\mathbf{X}_p^{t+\Delta t} = \mathbf{X}_p^t + \mathbf{u}(\mathbf{X}_p^t, t) \Delta t + \sqrt{2\mathbf{D}(\mathbf{X}_p^t, t) \Delta t} \cdot \mathbf{r}(t), \quad (1)$$

其中, \mathbf{X}_p^t 为粒子在时刻 t 所处的位置向量, $\mathbf{u}(\mathbf{X}_p^t, t)$ 为粒子的对流速度向量, $\mathbf{D}(\mathbf{X}_p^t, t)$ 为粒子的扩散系数张量, $\mathbf{r}(t)$ 为各分量均符合 $(0, 1)$ 正态分布的随机数向量, Δt 为随机游动时间步长。Itô^[10]证明了上述粒子分布的概率密度函数 $f(\mathbf{X}_p^t, t)$ 符合如下的 Fokker-Plank 方程:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \nabla \cdot (uf) = \nabla \nabla : (Df), \quad (2)$$

$$\text{其中 } \nabla \nabla : (Df) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 D_{ij}}{\partial x_i \partial x_j} f,$$

n 代表维数, D_{ij} 为扩散系数.

考虑到浓度分布和概率密度函数之间存在如下积分关系:

$$c(\mathbf{X}, t) = \int_{-\infty}^t dt_0 \int_{-\infty}^{+\infty} C(\mathbf{X}_{t_0}, t_0) f(\mathbf{X}_t | \mathbf{X}_{t_0}) d\mathbf{X}_{t_0}, \quad (3)$$

在时间和空间上积分式(2), 可以得到浓度满足如下方程:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) = \nabla \nabla : (Dc). \quad (4)$$

因此, 采用方程(1)模拟得到的浓度分布结果和方程(4)是等价的. Kinzelbach^[11]和 Visser^[12]指出, 当扩散系数张量 D 在空间分布不均时, 采用方程(1)将会导致粒子在低扩散系数的地方聚集. 在三维水质数值模拟中常用的对流扩散方程具有如下形式:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (uc) + \nabla \cdot (c \nabla \cdot D) = \nabla \nabla : (Dc). \quad (5)$$

对比式(4)和(5)可以看出, 两方程之间只相差一项 $\nabla \cdot (c \nabla \cdot D)$. 因此, 为了使随机游动方法模拟的结果和方程(5)等价, 需要在方程(1)中添加一个由于扩散系数的空间分布不均而导致的对流项, 此时粒子运动遵循如下形式的方程:

$$\mathbf{X}_p^{t+\Delta t} = \mathbf{X}_p^t + [\mathbf{u}(\mathbf{X}_p^t, t) + \nabla \cdot D(\mathbf{X}_p^t, t)] \Delta t + \sqrt{2D(\mathbf{X}^*, t) \Delta t} \cdot \mathbf{r}(t), \quad (6)$$

其中

$$\mathbf{X}^* = \mathbf{X}_p^t + \frac{1}{2} [\nabla \cdot D(\mathbf{X}_p^t, t)] \Delta t.$$

另外, 在利用二维随机游动模型来模拟沿水深积分的二维对流扩散方程一样的现象时, 还需要考虑地形变化产生的对流项^[13].

可见, 随机游动方法和对流扩散方程在本质上描述的物理现象是一致的, 只是随机游动方法是基于概率统计的原理来描述对流扩散过程, 而对流扩散方程是采用微分方程的形式来描述这一过程.

1.2 水交换矩阵及剩余函数

为了描述大型海湾的水交换特性, 现给出水交换矩阵的定义, 以及描述水交换能力强弱的剩余函数的定义.

假设有半封闭海湾如图 1 所示, 将整个海湾的水体划分成 6 个子区域, 并分别标记其为 $A_1, A_2, A_3, A_4, A_5, A_6$, 海湾以外的水体记为 A_7 .

采用对流扩散方法时, 初始浓度布置方法如下:

$$c_j^i = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j, \end{cases} \quad (7)$$

其中, 上标 i 表示扩散质类型, 下标 j 表示扩散质所在的区域. 即初始时每种扩散质在本区域浓度为 1, 其余区域浓度均为 0, 不同区域的水体利用不一样的扩散质来区分.

水交换矩阵 \mathbf{P}^i 定义如下:

$$p_{ij}^t = \frac{m_{ij}^t}{m_i^0}, \quad (8)$$

其中, m_i^0 为初始时刻在区域 i 内的扩散质总量, m_{ij}^t 为经过时间 t 之后从区域 i 流到区域 j 的扩散质总量。

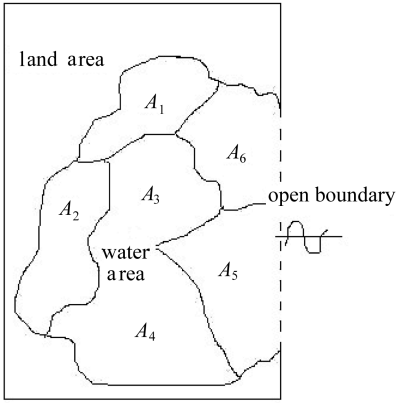


图 1 半封闭海湾及其分区示意图

Fig. 1 The sketch of a semi enclosed bay and its sub-areas

在随机游动方法中, 每个粒子都代表恒定量的扩散质. 假设粒子总数和扩散质总量的关系为 $n_i^0 = m_i^0/m_p$, m_p 为每个粒子代表的扩散质的量. 代入式(8), 水交换矩阵有如下形式:

$$p_{ij}^t = \frac{n_{ij}^t}{n_i^0}, \quad (9)$$

其中, n_i^0 为初始时刻在区域 i 的粒子数, n_{ij}^t 为经过时间 t 之后从区域 i 流到区域 j 的粒子数. 可以看出, 水交换矩阵是一个随着时间变换的矩阵, 它反映了经过时间 t 之后各子区域的水交换状况. 如果经过时间 T 之后的水交换矩阵具有足够的代表性, 则可以通过矩阵运算的方法对更长时间的水交换特性进行后期快速预测, 这个矩阵称为预测矩阵, 同时, T 称为预测矩阵取值时间。

Zimmerman 给出的驻留时间^[14]定义为: 每个粒子的驻留时间就是该粒子到达研究区域以外所用的时间. 假设初始时刻研究区域内所含的某扩散质的量为 R_0 , 经过时间 t 之后, 研究区域内所含的该扩散质的量为 $R(t)$, 则该扩散质在研究区域内的平均驻留时间^[15]为

$$\tau_r = \int_0^{\infty} r(t) dt, \quad (10)$$

其中 $r(t) = R(t)/R_0$, 称 $r(t)$ 为剩余函数, 表示在 t 时刻研究区域内扩散质总量占初始时刻扩散质总量的比例。

对于图 1 所示的半封闭海湾, 区域 i 内的水体在该海湾的剩余函数可以用水交换矩阵的元素表示为

$$r_i(t) = \sum_{j=1}^6 n_{ij}^t / n_i^0 = \sum_{j=1}^6 p_{ij}^t. \quad (11)$$

1.3 预测矩阵及影响其预测精度的因素

为了对水体的长期水交换特性进行快速计算, 可以用具有代表性的预测矩阵进行矩阵运算, 来得到较长时间内各子区域间的水交换规律. 但是, 要保证预测矩阵有好的预测效果, 就需要分析和评价影响预测精度的因素。

如果随机过程 $\{X_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ 只取有限或可列多个值, 且对任意 $i_0, i_1, \dots, i_n, i_{n+1} \in S$ 及 $P\{X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n\} > 0$, 有

$$P\{X_{n+1} = i_{n+1} | X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_n = i_n\} = P\{X_{n+1} = i_{n+1} | X_n = i_n\}, \quad (12)$$

则称该随机过程为 Markov 链, 式(12)刻画了该过程的 Markov 性, 其中 $S = \{1, 2, \dots\}$ 为状态空间. $\forall i, j \in S$, 称 $p_{ij}(n) = P\{X_{n+1} = j | X_n = i\}$ 为 n 时刻的一步转移概率矩阵. 如果对 $\forall i, j \in S, p_{ij}(n) \equiv p_{ij}$, 即 p_{ij} 与 n 无关, 则称 $\{X_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$ 为齐次 Markov 链, 同时, 简称 $\mathbf{P} = (p_{ij})$ 为转移矩阵。

同样,如果把粒子处于某个分区称为一种状态,那么粒子从一个分区对流扩散到另外一个分区,就可以认为是从一种状态转移到另外一种状态.假设粒子在全场分布的概率为 f ,且存在 Green 函数 $G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau)$, 满足如下关系式:

$$f(\mathbf{X}, t) = \int_A f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}', \quad (13)$$

$f(\mathbf{X}, t)$ 为粒子在 t 时刻位于 \mathbf{X} 的概率, $G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau)$ 为粒子从 τ 时刻的 \mathbf{X}' 位置转移到 t 时刻 \mathbf{X} 位置的概率, A 为整个研究区域.

将整个区域划分为 m 个子区域,则上述积分形式可以写成

$$f(\mathbf{X}, t) = \sum_{i=1}^m \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}'. \quad (14)$$

将上式在区域 A_j 积分,有

$$\int_{A_j} f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X} = \sum_{i=1}^m \int_{A_j} \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}' d\mathbf{X}, \quad (15)$$

上式中 $\int_{A_j} f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X}$ 代表粒子在 t 时刻处于区域 A_j 的概率.定义粒子在 τ 至 t 时间内从区域 i 到区域 j 的转移概率矩阵为

$$p_{ij}(t, \tau) = \int_{A_j} \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}' d\mathbf{X} / \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}', \quad (16)$$

记

$$f_{A_j}(t) = \int_{A_j} f(\mathbf{X}, t) d\mathbf{X},$$

则由式(15)、(16)可得

$$f_{A_j}(t) = \sum_{i=1}^m p_{ij}(t, \tau) f_{A_i}(\tau), \quad (17)$$

这里 $p_{ij}(t, \tau)$ 即为式(9)定义的水交换矩阵,代表从时刻 τ 至时刻 t 各区域之间的水交换情况.

考虑到近海水动力边界条件基本呈周期性变化,那么,每个区域内的流场、水位、流速都将呈现周期性的变化,区域之间的水体通量也是周期性的变化.因此,可令预测矩阵取值时间 $T = t - \tau$,且 t, τ 均为取值时间 T 的整数倍, T 又为潮周期的整数倍.不妨设 $t = (k + 1)T, \tau = kT$, k 为正整数,则式(17)可以写为

$$f_{A_j}((k + 1)T) = \sum_{i=1}^m p_{ij}(kT) f_{A_i}(kT), \quad (18)$$

其中将 $p_{ij}((k + 1)T, kT)$ 简记为 $p_{ij}(kT)$.将上式写成张量形式,有

$$\mathbf{f}((k + 1)T) = \mathbf{f}(kT) \cdot \mathbf{P}(kT), \quad (19)$$

这里,矩阵 $\mathbf{P}(kT)$ 是和时刻 kT 相关的,也即为 kT 时刻的一步转移矩阵.

考虑矩阵 $\mathbf{P}(kT)$ 恒定不变需要的条件,将下式调整积分顺序,有

$$\int_{A_j} \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}' d\mathbf{X} = \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) \left[\int_{A_j} G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X} \right] d\mathbf{X}'. \quad (20)$$

如果认为当前时间步粒子所处区域中的具体位置不影响它下一时间步运动到其他区域的概率,即 $G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau)$ 是和位置变量 \mathbf{X}' 无关的,则式(20)可以写为

$$\int_{A_j} \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}' d\mathbf{X} = \int_{A_i} f(\mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}' \int_{A_j} G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}, \quad (21)$$

代入式(17),有

$$p_{ij}(t, \tau) = \int_{A_j} G(\mathbf{X}, t | \mathbf{X}', \tau) d\mathbf{X}, \quad \mathbf{X}' \in A_i; \mathbf{X} \in A_j, \quad (22)$$

显然有

$$\sum_{j=1}^m p_{ij}(t, \tau) = 1.$$

取 $t = (k + 1)T, \tau = kT$, 有

$$p_{ij}(kT) = \int_{A_j} G(\mathbf{X}, (k + 1)T | \mathbf{X}', kT) d\mathbf{X}, \quad \mathbf{X}' \in A_i; \mathbf{X} \in A_j. \quad (23)$$

从上式可以看出, 矩阵和 Green 函数 G 有着直接的关系. 要使矩阵是一恒定量, 一方面要使 Green 函数和初始所处位置变量 \mathbf{X}' 相关性尽量小, 另一方面, 在一个取值时间 T 内, 需要 Green 函数 G 在各区域的积分是尽量不变的. 针对第 1 点, 就是要使区域划分尽量小, 也就是说增加分区数. 针对第 2 点, 一般来说, Green 函数 G 和时刻 τ 、时刻 t 时的水动力参数、浓度分布情况有关. 由于取值时间 T 是水动力周期的整数倍, 因此, 可以保证水动力参数在任一取值时刻是一致的. 时间 T 取值较长可以使各区域的浓度混合较为均匀平滑, 这样 Green 函数 G 在各区域的积分变化较小, 可使浓度分布情况尽量一致.

将从初始时刻经过时间 T 之后求得的水交换矩阵 $\mathbf{P}(T, 0)$ 作为预测矩阵 \mathbf{P}_T , 则有如下关系式成立:

$$\mathbf{P}(kT, 0) \approx \mathbf{P}_T^k. \quad (24)$$

由于 \mathbf{P}_T 是一恒定不变的矩阵, 因此, 粒子下一时间步在各区域的分布情况只和当前时刻它在各区域的分布有关, 也就可以认为各区域之间的水交换为一 Markov 链, 而将 \mathbf{P}_T 称为具有 Markov 性的水交换预测矩阵.

2 随机游动方法的验证和粒子数对精度的影响

设一开阔的等水深静止水域, 有质量为 M 的扩散质在 $t = 0$ 时刻于 (x_0, y_0) 位置投入, 假定 x 方向和 y 方向的扩散系数 D_{xx}, D_{yy} 在整个水域的取值不变, 则由对流扩散方程(5) 求得的浓度 $C(x, y, t)$ 的理论解如下^[16]:

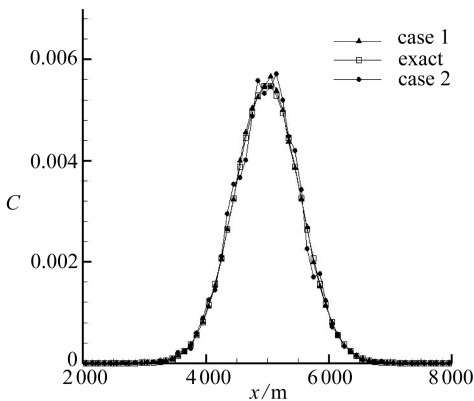


图2 随机游动方法模拟结果与理论解的对比 ($t = 1800$ s)

$$C(x, y, t) = \frac{M/H}{4\pi t \sqrt{D_{xx} D_{yy}}} \times \exp\left[-\frac{(x - x_0)^2}{4D_{xx}t} - \frac{(y - y_0)^2}{4D_{yy}t}\right]. \quad (25)$$

图2 为随机游动方法模拟浓度值和理论解浓度值在 $t = 1800$ s 时的对比. 模拟时, 计算区域大小为 100×100 网格, 空间步长为 $\Delta x = \Delta y = 100$ m, 水深 $H = 10$ m, 点源扩散质的位置为 $x_0 = 5000$ m, $y_0 = 5000$ m, 扩散系数 $D_{xx} = 20$ m²/s, $D_{yy} = 20$ m²/s, 总体模拟时间为 3600 s. 其中, 数据取值于 $y = 5000$ m, 2000 m $\leq x \leq 8000$ m 的线段上. 三角形点划线为粒子总数为 100 万个的模拟结果(方案 1), 圆形点划线为粒子总数为 10 万个的模拟结果(方案 2), 方框点划线是理论解. 可以看出, 粒子总数为 100 万的模拟结果和理

Fig.2 Results of the random walk method and the theoretical solution ($t = 1800$ s)

论解吻合很好,而粒子总数为 10 万的模拟结果和理论解的偏差较大,这说明较多的粒子数目可以提高模拟的精度。

定义随机游动方法模拟浓度值的相对误差 ε_i 和平均相对误差 $\bar{\varepsilon}$ 如下:

$$\varepsilon_i = \frac{|C_s^i - C_e^i|}{C_e^i}, \quad \bar{\varepsilon} = 100\% \times \sum_{i=1}^N \varepsilon_i / N, \quad (26)$$

其中 i 为网格编号, C_s^i 为第 i 个网格上的随机游动方法的模拟浓度值, C_e^i 为第 i 个网格上的理论解浓度值,但对于 C_e^i 小于理论最大浓度值 1% 的网格点不进行两者相对误差计算, N 为参与比较的总网格数。

表 1 给出了 $t = 1\ 800$ s 时随机游动方法模拟浓度值在所有网格上的平均相对误差 $\bar{\varepsilon}$ 。可以看出,随机游动方法求解所得浓度和理论解浓度值还是有较大偏差。

表 1 随机游动方法模拟值的平均相对误差 ($t = 1\ 800$ s)

Table 1 Average relative error of results of the random walk method ($t = 1\ 800$ s)

total number of particles	$\bar{\varepsilon} / \%$
1×10^5	23.8
1×10^6	7.4

虽然在所有网格点上的浓度值平均相对误差较大,但是在统计一个较大区域内的扩散质总量时,误差却是很小的。定义圆形区域内扩散质总量模拟值的相对误差 ε_m 如下:

$$\varepsilon_m = \sum_{i=1}^N (C_s^i - C_e^i) \delta_i / \sum_{i=1}^N C_e^i \delta_i, \quad \delta_i = \begin{cases} 1, & \sqrt{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2} \leq r, \\ 0, & \sqrt{(x_i - x_0)^2 + (y_i - y_0)^2} > r, \end{cases} \quad (27)$$

其中, δ_i 用来判定第 i 个网格是否处于统计区域范围内, (x_i, y_i) 为网格中心坐标, (x_0, y_0) 为圆形区域中心, r 为圆形区域半径,其余变量和式(26)中相同。

表 2 给出扩散质总量模拟值在以点 (x_0, y_0) 为中心,半径为 r 的圆形区域内的相对误差 ε_m 。可以看出,较多的粒子数目可以使得求解更精确。同时也可以发现,统计一个较大区域内的物质总量时,用较少的粒子数目,即可达到模拟所需精度,从而进一步减少模拟计算时间。在水交换矩阵的统计中,当粒子数目达到一定量之后,这个数目不能在每个网格点计算出很精确的浓度值,但是对于统计较大区域内的物质质量,它却足以达到模拟计算所需的精度,因此可以采用这个数目的粒子进行模拟。

表 2 圆形区域内扩散质总量模拟值的相对误差

Table 2 Relative error of the contaminant in a circular area

total number of particles	r/m	ε_m
1×10^5	1 000	1.27×10^{-3}
1×10^5	2 000	1.70×10^{-4}
1×10^6	1 000	3.02×10^{-4}
1×10^6	2 000	1.14×10^{-4}

3 预测矩阵及影响因素分析

图 3 是一长度为 50 km,宽度为 36 km,初始水深为 10 m 的矩形海湾。左、上、下 3 边均为固壁边界,右边界面采用一正弦半日潮为水动力边界条件。潮振幅取值为 1 m,潮周期为 43 200 s。底部摩擦的 Manning 系数取值 0.02。同时为了考虑 Coriolis 力的作用,假定该海域的纬度值为北

纬 45° 。进行水动力学模拟时,将计算区域划分成 100×72 的矩形网格,空间步长为 $dx = dy = 500$ m,时间步长为 $dt = 60$ s,总体模拟时间为 400 个潮周期。

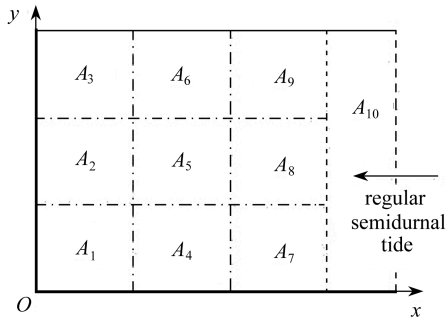


图3 模拟海湾及其分区示意图

Fig.3 Sketch of the simulated bay and its sub-areas

图3中虚线将整个海湾划分为10个区域,区域 A_{10} 大小为 25×72 网格,其余区域的大小均为 25×24 网格。在这里,主要考虑区域 $A_1 \sim A_9$ 的水交换特性,区域 A_{10} 是作为边界缓冲区用于考虑水体的回流。采用对流扩散方程模拟时,在 $A_1 \sim A_9$ 这9个区域内分别布设初始浓度为1的不同扩散质,而在采用随机游动方法模拟时,于 $A_1 \sim A_9$ 这9个区域内布设数目一致且空间均匀分布的粒子,且每个粒子都进行独立编号标识。

图4为预测矩阵通过矩阵运算求得的剩余函数和用随机游动方法数值模拟求得的剩余函数对比。

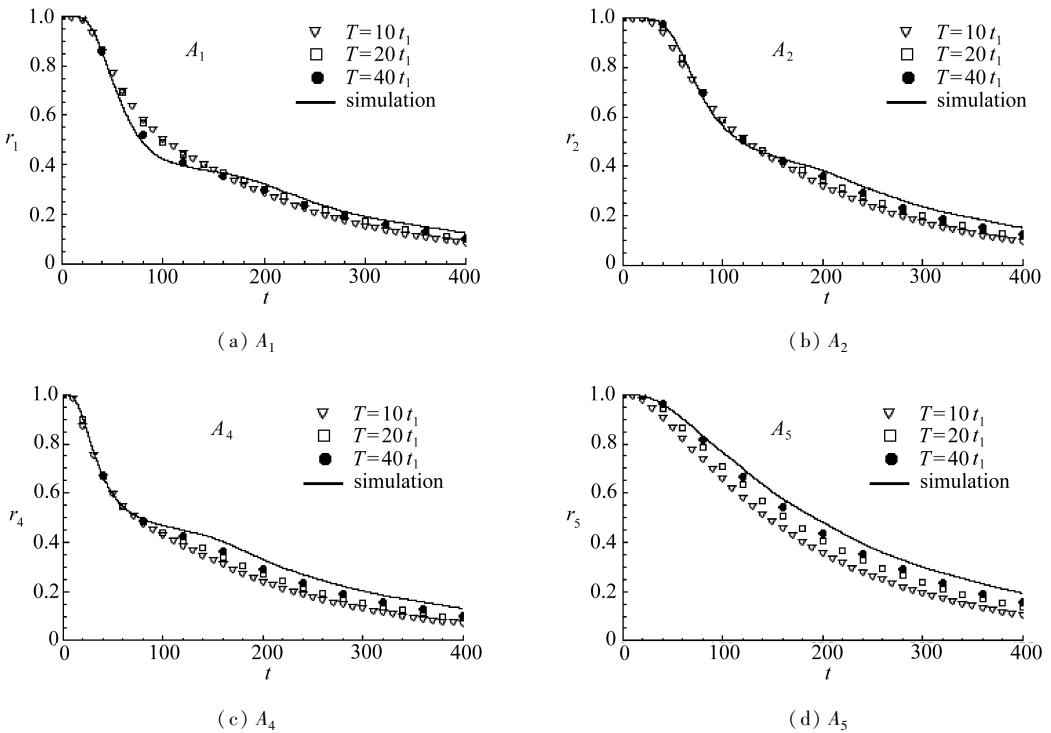


图4 预测矩阵取值时间 T 对剩余函数的影响

Fig.4 The influence of matrix generated time T on the remnant function

其中,横坐标为模拟经历的潮周期数,潮周期 $t_1 = 43\ 200$ s,纵坐标为求解得到的剩余函数 $r_i(t)$,代表区域 i 的物质在整个海湾的剩余比例。实线为随机游动方法进行数值模拟求得的结果,散点为预测矩阵进行矩阵运算求得的结果。倒三角散点、方框散点和圆形散点分别代表取值时间 T 为 10 个潮周期、20 个潮周期和 40 个潮周期下的预测结果。图4中的字符 A_1 、 A_2 、 A_4 、 A_5 代表所研究的子分区。总体来说,预测结果和模拟结果趋势吻合很好。同时可以看出,取值时间 T 越大,预测矩阵求得的剩余函数和数值模拟直接求得的剩余函数越接近。

为了分析分区数目和预测矩阵取值时间 T 对预测效果的影响,还进行了一系列的数值实

验,比较了不同方案下预测结果和数值模拟求得的剩余函数之间的相对误差.剩余函数的相对误差定义如下:

$$\varepsilon_{\text{erf}} = \sum_{i=1}^m \sum_{k=2}^n \frac{|R_{ik}^p - R_{ik}|}{R_{ik}} / (m \times (n - 1)), \quad (28)$$

其中, m 为总的分区数, n 为总采样点数, R_{ik}^p, R_{ik} 分别为预测矩阵和数值模拟求得的剩余函数 $r(t)$ 在区域 i 的第 kT 个周期的取值.结果如表 3 所示.

表 3 中,在 9 分区的情况下, T 为 10, 20, 40 个潮周期时,对应的剩余函数相对误差分别为 17.7%, 11.8%, 9.6%.可以看出,预测矩阵的取值时间 T 越长,其预测效果越好.其他分区方案也具有这个趋势.在取值时间 $T = 20$ 个潮周期时,4 分区,9 分区,18 分区情形下对应的剩余函数相对误差分别为 7.7%, 11.8%, 14.0%, 这似乎说明分区数越少,矩阵预测效果越好,这和理论分析的结论相悖.其原因可能是因为每个分区内粒子数目太少,粒子的随机性占优而导致的结果,因此下面分析粒子数目更多情形下的误差情况.

表 3 剩余函数的相对误差(粒子总数为 54 000)

Table 3 Relative error of the remnant function (total number of particles: 54 000)

T	$\varepsilon_{\text{erf}} / \%$		
	4 sub-areas	9 sub-areas	18 sub-areas
10 t_1	11.1	17.7	24.3
20 t_1	7.7	11.8	14.0
40 t_1	7.0	9.6	9.2

现增加每个分区的粒子总数,比较粒子数目不同时剩余函数的相对误差变化.比较结果如表 4 所示.其中,所有方案中,预测矩阵的取值时间 T 恒定为 10 个潮周期.可以看出,在 4 分区粒子总数为 54 000 个时和 9 分区粒子总数为 108 000 个时,两种方案下平均每个分区的粒子数目相当,剩余函数相对误差从 11.1% 减小为 10.3%;在 4 分区粒子总数为 108 000 个时和 18 分区粒子总数为 540 000 个时,两种方案下平均每个分区的粒子数目也相当,剩余函数相对误差从 9.7% 减小为 7.3%.从表 4 中也可以看出,当粒子总数达到 540 000 个时,4 分区中的剩余函数相对误差为 8.6%,而 9 分区中的剩余函数相对误差为 6.4%.

表 4 剩余函数的相对误差 ($T = 10 t_1$)

Table 4 Relative error of the remnant function ($T = 10 t_1$)

total number of particles	$\varepsilon_{\text{erf}} / \%$		
	4 sub-areas	9 sub-areas	18 sub-areas
54 000	11.1	17.7	24.3
108 000	9.7	10.3	14.2
540 000	8.6	6.4	7.3

因此可以说,粒子数目的增加提高了预测精度,在粒子数目足够多的情形下,较多的分区数也将使得预测精度有所提高.但是,分区数目的增加对精度的提高不是很明显,而粒子总数的增加和较长的预测矩阵取值时间 T 对预测精度的提高效果明显.

4 随机游动方法在大型海湾水交换矩阵计算中的优势

在大型海湾的水交换特性研究中,一般需要对多种分区方案下的水交换矩阵进行计算.应用对流扩散模型时,对于每种方案下的每个分区,都需要进行一次数值模拟,即模拟次数和方

案数、分区数成正比. 采用随机游动方法模拟时, 只需初始时刻在整个海湾布设足够多的粒子, 然后进行一次完整的模拟且每隔一段时间都对粒子的位置进行保存. 在求解多种不同分区方案下的水交换矩阵时, 只需要在后处理中判断每个粒子在每个记录时刻所属分区, 再根据所有粒子的分布情况, 就可求出对应的随时间变化或者随分区情况变化的水交换矩阵. 两种方法模拟求得所有水交换矩阵所需的时间分别如下:

$$T_{\text{total}}^{\text{ADE}} = \sum_{i=1}^{N_{\text{case}}} (N_{\text{s}}^i \times T_{\text{s}}^{\text{ADE}} + T_{\text{p}}^{\text{ADE}}), \quad (29\text{a})$$

$$T_{\text{total}}^{\text{RW}} = T_{\text{s}}^{\text{RW}} + \sum_{i=1}^{N_{\text{case}}} (T_{\text{p}}^{\text{RW}}), \quad (29\text{b})$$

其中, N_{case} 为分区方案数, N_{s}^i 为方案 i 下的分区数. 式(29a) 中 $T_{\text{total}}^{\text{ADE}}$ 表示采用对流扩散模型时所用时间之和, $T_{\text{s}}^{\text{ADE}}$ 为每种分区方案下每个分区模拟所需时间, $T_{\text{p}}^{\text{ADE}}$ 为后处理中对每种方案统计水交换矩阵时所需时间; 式(29b) 中 $T_{\text{total}}^{\text{RW}}$ 表示采用随机游方法时所用时间之和, T_{s}^{RW} 为模拟所需时间, T_{p}^{RW} 为后处理中对每种方案统计水交换矩阵时所需时间.

表 5 给出在图 3 所示的矩形海湾中, 用两种方法分别模拟求得 9 分区和 18 分区两种方案下的一系列水交换矩阵所用时间. 总体模拟时间为 20 个潮周期, 随机游动模型采用的总粒子数为 54 000 个, 而对流扩散模型采用 100×72 的网格进行模拟计算. 后处理过程中, 每隔 $1/12$ 个潮周期统计得出一个水交换矩阵, 即每种方案下统计的水交换矩阵数为 240 个. 采用对流扩散模型时, 每种方案下每个分区的数值模拟平均需要 89 s, 而采用随机游动模型时, 所有方案所有分区只需模拟一次, 总体所花时间为 667 s. 在后处理中, 采用对流扩散模型时在 9 分区和 18 分区两种方案下统计水交换矩阵各自所花时间为 37 s 和 81 s, 而采用随机游动模型在这两种方案下统计水交换矩阵所花时间为 53 s 和 205 s. 因此, 对流扩散模型和随机游动模型总共所花时间分别为 2 521 s 和 925 s. 可以看出, 随机游动模型总体所花时间比对流扩散模型要少很多, 这是随机游动方法在研究大型海湾水交换时的一个优势.

表 5 两种方法求得水交换矩阵的时间对比(总模拟时间: $20 t_1$)

Table 5 The total time consumed in calculating water exchange matrixes by the two methods (total simulation time: $20 t_1$)

method	$N_{\text{s}}^i \times T_{\text{s}}^{\text{ADE}}, T_{\text{s}}^{\text{RW}}/\text{s}$		$\sum_{i=1}^{N_{\text{case}}} T_{\text{p}}^{\text{ADE}}, \sum_{i=1}^{N_{\text{case}}} T_{\text{p}}^{\text{RW}}/\text{s}$		$T_{\text{total}}^{\text{ADE}}, T_{\text{total}}^{\text{RW}}/\text{s}$
	9 sub-areas	18 sub-areas	9 sub-areas	18 sub-areas	
advection-diffusion model	9×89	18×89	37	81	2 521
random walk model		667	53	205	925

5 结 论

本文主要是对随机游动方法在大型海湾水交换中的应用进行了研究.

1) 从理论上分析了基于分区方法的水交换预测矩阵具有 Markov 性的前提条件, 以及影响其预测精度的因素.

2) 通过和理论解的对比, 证明了随机游动方法可以用来进行对流扩散现象的模拟, 并讨论了粒子总数对计算精度的影响情况.

3) 通过一系列的数值实验, 给出了粒子数目、分区数目及预测矩阵取值时间对预测效果

的影响。实验表明:较长的预测矩阵取值时间和较多的粒子数目,可以取得更好的预测效果。同时,在粒子数目足够多的情形下,分区数越多,预测矩阵的预测效果越好。需要注意的是,采用随机游动方法时需要有足够多的粒子,才能保证水交换预测矩阵具有较好的预测效果。

4) 在大型海湾水交换研究中,往往需要对多种方案不同分区的水交换矩阵进行统计,而随机游动方法相对于对流扩散方程的优势在于:可以更快速地统计得出水交换矩阵。

5) 随机游动方法还有控制方程简单、易于并行等优点,有利于以后在大型计算中的推广。

6) 如果要研究水体的年龄或者驻留时间等水交换特性,具有 Lagrange 特性的随机游动方法比基于对流扩散方程的 Euler 方法更加直观。

参考文献:

- [1] Parker D S, Norris D P, Nelson A W. Tidal exchange at golden gate[J]. *Journal of Sanit Engineering Division, ASCE*, 1972, **98**(2): 305-323.
- [2] 柏井诚. 海水交换の概念と海水交換率[J]. *Journal of the Oceanographical Society of Japan*, 1984, **40**: 135-147. (Kashiwai M. The conception of tidal exchange and the tidal exchange ratio[J]. *Journal of the Oceanographical Society of Japan*, 1984, **40**: 135-147. (in Japanese))
- [3] 何磊. 海湾水交换数值模拟方法研究[D]. 硕士学位论文. 天津:天津大学,2004. (HE Lei. The numerical method study of water exchange for sea bay[D]. M Sc Dissertation. Tianjin:Tianjin University, 2004. (in Chinese))
- [4] Thompson K R, Dowd M, Shen Y, Greenberg D A. Probabilistic characterization of tidal mixing in a coastal embayment: a Markov chain approach[J]. *Continental Shelf Research*, 2002, **22**: 1603-1614.
- [5] Liu Z, Wei H, Liu G S, Zhang J. Simulation of water exchange in Jiaozhou Bay by average residence time approach[J]. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 2004, **61**: 25-35.
- [6] Peter S, Daniel F G, J Jaime G H. A review and numerical assessment of the random walk particle tracking method[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2006, **87**: 277-305.
- [7] Bilgili A, Proehl J A, Lynch D R, Smith K W, Swift M R. Estuary/ocean exchange and tidal mixing in a gulf of maine estuary: a Lagrangian modeling study[J]. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 2005, **65**: 607-624.
- [8] Riddle A M. Investigation of model and parameter uncertainty in water quality models using a random walk method[J]. *Journal of Marine Systems*, 2001, **28**: 269-279.
- [9] Wang C, Zhang X Q, Sun Y L. Numerical simulation of water exchange characteristics of the Jiaozhou Bay based on a three-dimensional Lagrangian model[J]. *China Ocean Engineering*, 2009, **23**(2): 277-290.
- [10] Itô K. On stochastic differential equations[C]//*Memoirs of the American Mathematical Society*. New York: AMS, 1951, **4**: 289-302.
- [11] Kinzelbach W. The random walk method in pollutant transport simulation[C]//*Groundwater Flow and Quality Modelling, NATO ASI Series C*. Netherland: D Reidel Pub Co, 1988, **224**: 227-246.
- [12] Visser A W. Using random walk models to simulate the vertical distribution of particles in a turbulent water column[J]. *Mar Ecol Prog Ser*, 1997, **158**: 275-281.
- [13] Seung W S. A hybrid approach to particle tracking and Eulerian-Lagrangian models in the simulation of coastal dispersion[J]. *Environmental Modelling & Software*, 2006, **21**: 234-242.

- [14] Zimmerman J T F. Mixing and flushing of tidal embayments in the Western Dutch Wadden Sea, part I: distribution of salinity and calculation of mixing time scales [J]. *Netherlands Journal of Sea Research*, 1976, **10**(2): 149-191.
- [15] Takeoka H. Fundamental concepts of exchange and transport time scales in a coastal sea [J]. *Continental Shelf Research*, 1984, **3**(3): 311-326.
- [16] 余常昭. 环境流体力学导论 [M]. 北京:清华大学出版社, 1992: 128-134. (YU Chang-zhao. *The Introduction of Environmental Fluid Mechanics* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1992: 128-134. (in Chinese))

Study on Application of Random Walk Method to Water Exchange in Large-Scale Bay

LI Xiao-bao, YUAN De-kui, TAO Jian-hua

(*Department of Mechanics, Tianjin University, Tianjin 300072, P. R. China*)

Abstract: Water exchange matrix is an efficient tool to study the water exchange among sub-areas in large-scale bays. The application of random walk method to calculate water exchange matrix was studied. Compared against the advection-diffusion model, the random walk model is more flexible to calculate the water exchange matrix. The forecast matrix suggested by Thompson was applied to evaluate the water exchange characteristics among the sub-areas fast. According to theoretic analysis, it is found that the precision of the predicted results is mainly affected by three factors, namely the particle number, the generated time of the forecast matrix and the number of the sub-areas. The impact of the above factors was analyzed based on the results of a series of numerical tests. The results show that the precision of the forecast matrix increases with the increase of generated time of the forecast matrix and the number of the particles. If there are enough particles in each sub-area, the precision of the forecast matrix will increase with the number of the sub-areas. On the other hand, if the particles in each sub-area are not enough, excessive number of sub-areas may result in the decrease of the precision of the forecast matrix.

Key words: random walk; markov chain; water exchange; numerical simulation; advection-diffusion