

基于多单元均衡法的地下水流与水质联合数值研究

徐西永¹, 叶为民^{1,2}

(1. 同济大学 地下建筑与工程系, 上海 200092; 2. 教育部城市环境与可持续发展联合研究中心, 上海 200092)

摘要: 针对地下渗流与污染物迁移数值模拟中计算程序复杂、效率偏低等不足,开展了地下水流与水质联合数值研究。首先基于多单元均衡法,建立了渗流与污染物迁移的联合模型,采用 Matlab 语言编制了联合程序,使之能够求解单一地下水渗流、初始流场稳定的地下水污染和初始流场不稳定的地下水污染等多种情况。然后计算了一维对流弥散问题,并与多种计算方法进行对比分析。最后对某地地下水污染物的扩散分布进行了模拟。结果表明:通过控制自定义特征数,实现了对不同水文地质特征问题的求解;采用上游加权法解决大 Peclet 数污染物迁移问题时,并无明显数值弥散现象,又能抑制数值解的振动;本程序具有较高的计算效率,并能够显著提高后处理的可视化程度。

关键词: 多单元均衡法; 上游加权; 地下水流模型; 地下水水质模型; 耦合分析; Matlab

中图分类号: P641

文献标识码: A

文章编号: 1672-643X(2016)02-0108-06

Combined numerical simulation of groundwater flow and quality based on multi – element balance

XU Xiyong¹, YE Weimin^{1,2}

(1. Department of Geotechnical Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, China; 2. United Research Center for Urban Environment and Sustainable Development, the Ministry of Education, Shanghai 200092, China)

Abstract: Aimed at the shortcomings of complexity and low efficiency of calculation program in numerical simulation of groundwater flow and contaminant transport, the paper studied a combined numerical simulation of groundwater flow and quality. Based on MEB, it firstly built a coupled model of groundwater flow and contaminant transport and programmed a coupled program by using Matlab so as to solve single flow, contaminant transport with steady flow and contaminant transport with unsteady flow. Then it studied one dimensional solute transport by using the program and compared the method with other ones. Finally, the paper simulated the diffusion distribution of groundwater pollutant in a certain place. Results show that by controlling the custom feature numbers, the paper solved the problem of different hydro – geological characteristics; when using upstream weighted method to resolve the problem of big Peclet number pollution dispersion, there no obvious numerical dispersion phenomenon and. the method can solve the vibration of numerical solutions; the program has higher computing efficiency and can significantly improve the visibility of postprocessing.

Key words: multi-element balance; upstream weighted; groundwater flow model; groundwater quality model; coupled analysis; Matlab

地下水是一种重要的自然资源,它不仅是工农业生产、居民生活的重要供水水源,而且对自然环境的自我调节具有重要意义^[1]。但是,随着城市化、工业化进程的加快,人类活动对地下水环境的影响

加剧,并且引起了一系列的地下水环境问题^[2]。这些问题包括地下水超采甚至枯竭,由于地下水超采引起的地面沉降、地面塌陷、地裂缝、咸水入侵及土地荒漠化,工业“三废”、农业化肥农药任意施用及

生活污水造成的地下水水质恶化和地下水补给地表水造成的污染。这使得地下水资源在质量和数量上都受到了严峻的挑战,并且成为制约城市发展的重要因素之一^[3]。因此,需要对地下水资源开展系统地研究,通过各种理论和方法评估及预测对其影响的速度和规模,以便实现对地下水资源的可持续利用和对地下水污染的有效防治。

对于地下水运动数学模型,可以用解析法、物理模拟法和数值模拟法等方法求解。然而,解析法只能求取少数简单渗流或污染物迁移问题的解,物理模拟法存在模型装置笨重、边界条件单一和测量精度低等固有局限性。因此,目前常采用数值模拟法解决相对复杂的水文地质问题^[4]。求解地下水问题的数值方法有多种,如有限差分法(FDM)、有限单元法(FEM)、特征线法(MOC)、多单元均衡法(MEB)、积分有限差分法(IFDM)和边界元法(BEM)等,这些方法各有优势和不足^[5]。基于这些数值模拟方法,开发的数值模拟软件 Visual Modflow、FEFLOW 和 GMS 等,能对地下水渗流和污染物迁移问题进行可视化模拟^[6-7]。但是,实际应用过程中,这些商业软件往往存在各种问题^[8]。

另一方面,在进行数值模拟时,需要大量的矩阵运算,如果用传统的编程语言,如 C、C++ 和 FORTRAN 进行编写时,工作量大,程序冗长且不易被读懂。Matlab 作为第四代高级编程语言,编程效率极高,可将用户从繁琐的底层编程中解放出来,更加专注于解决实际问题^[9]。本文基于多单元均衡法^[10-11],用 Matlab 编写了地下水流与地下水质的联合程序,对地下水渗流和污染物迁移问题进行了分析,并用算例进行了验证,可以直观地评价地下水资源利用情况和预测地下水污染状况。

1 数学模型

1.1 地下水流模型

在研究地下水流运动时,一般假设地下水流服从达西定律,渗透系数 K 和贮水率 S_s 不随地层孔隙度变化,三维地下水流模型如下式所示:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (K_{i,j} \frac{\partial H}{\partial x_j}) + w &= S_s \frac{\partial H}{\partial t} \quad i, j = 1, 2, 3 \\ H(x, y, z, 0) &= H_0(x, y, z) \quad t = 0, (x, y, z) \in \Omega \\ H(x, y, z, t) |_{\Gamma_1} &= H_1(x, y, z, t) \quad t \geq 0, (x, y, z) \in \Gamma_1 \\ K_{i,j} \frac{\partial H}{\partial x_j} n_i |_{\Gamma_2} &= q(x, y, z, t) \quad t \geq 0, (x, y, z) \in \Gamma_2 \end{aligned} \quad (1)$$

式中: K 为含水层的渗透系数; S_s 为贮水率; w 为源汇项; H 为地下水水头值; H_0 为初始水头值; H_1 为第 1 类水头边界条件 Γ_1 上的已知水头函数; q 为第 2 类水头边界条件 Γ_2 上的单宽流量; n 为边界 Γ_2 的外法线方向。

1.2 地下水质模型

当溶质浓度很低时,一般不考虑溶质浓度变化对溶液密度和黏滞系数的影响,三维地下水质模型如下式所示:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i} (Cu_i) + I &= \frac{\partial C}{\partial t} \quad i, j = 1, 2, 3 \\ C(x, y, z, 0) &= C_0(x, y, z), t = 0, (x, y, z) \in \Omega \\ C(x, y, z, t) |_{B_1} &= C_1(x, y, z, t) \quad t \geq 0, (x, y, z) \in B_1 \\ D_{i,j} \frac{\partial C}{\partial x_j} n_i |_{B_2} &= f(x, y, z, t) \quad t \geq 0, (x, y, z) \in B_2 \end{aligned} \quad (2)$$

式中: D 为水动力弥散系数; u 为地下水实际流速; I 为溶质源汇项; C 为溶液中某种溶质的浓度; C_0 为初始浓度值; C_1 为第一类浓度边界条件 B_1 上的已知水头函数; f 为第二类浓度边界条件 B_2 上的弥散质量通量; n 为边界 B_2 的外法线方向。

实际当中遇到的多数是三维地下水渗流和溶质迁移问题,但是因为三维问题使用的参数和需要输入的数据都较多,计算量又非常大,很多情况下把三维问题简化为若干个二维定解问题联立进行求解,构成准三维模型^[12]。因此,下面对平面二维模型进行数值求解,三维问题可以在此基础上扩展求解。

2 模型求解

2.1 计算方法

多单元均衡法借助于有限元的基函数,直接从积分方程导出离散方程组,该方法不仅在数学上的处理十分简单,而且能较好地保持局部和整体的质量守恒。基于上游加权的多单元均衡法通过引入虚拟节点,把上游权加到有限单元法的基函数上,在继承多单元均衡法优点的基础上,能够有效解决大 Pelect 数解的振动问题^[10-11]。利用上述方法,把地下水流动方程和溶质运移方程耦合在一起,可用于承压含水层或潜水层的稳定流及非稳定流计算。

根据研究区域的水文地质条件,将其剖分成三角形网格,任取一个单元 e , 如图 1 所示。设其结点编号为 i, j 和 k , 坐标为 (x_i, y_i) 、 (x_j, y_j) 和 (x_k, y_k) , 结点处水头为 H_i, H_j 和 H_k , 溶质浓度为 C_i, C_j 和 C_k 。

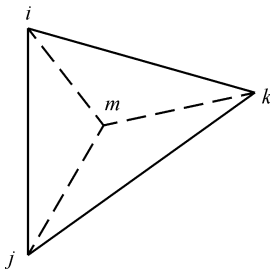


图1 任意三角形单元 e

在该单元的重心处添加一个虚拟结点,记为 m ,其坐标 (x_m, y_m) :

$$\begin{aligned} x_m &= \frac{1}{3}(x_i + x_j + x_k) \\ y_m &= \frac{1}{3}(y_i + y_j + y_k) \end{aligned} \tag{3}$$

规定中心点处 m 的水头 H_m 是 3 个结点水头的加权平均,浓度 C_m 是 3 个结点浓度的加权平均,3 个结点处的权系数分别为 $\omega_i, \omega_j, \omega_k$,如下式所示:

$$\begin{aligned} H_m &= (\omega_i H_i + \omega_j H_j + \omega_k H_k) \\ C_m &= (\omega_i C_i + \omega_j C_j + \omega_k C_k) \\ \omega_i + \omega_j + \omega_k &= 1 \end{aligned} \tag{4}$$

中心点 m 与 3 个结点的连线把单元 e 分成了 3 个三角形子单元,在每个子单元中,用 2 个原结点和虚拟结点的水位或浓度进行线性插值。如图 2 所示,对于常规的多单元均衡法,单元 e 是由结点水位或浓度所支起的平面;对于基于上游加权的多单元均衡法,单元 e 由 3 个对接的平面组成,其形状由权系数 $\omega_i, \omega_j, \omega_k$ 确定。

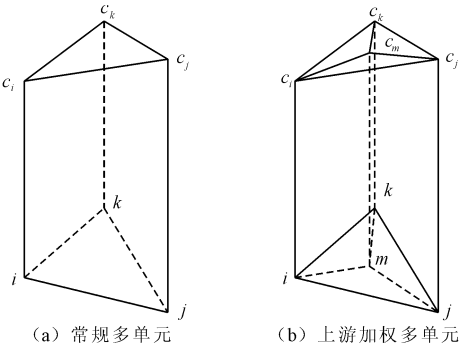


图2 常规多单元均衡法与上游加权多单元均衡法的比较

下面是权系数的确定方法,对于水流模型,由于无弥散现象,规定权系数 $\omega_i, \omega_j, \omega_k$ 的值都是 $1/3$ 。对于水质模型,利用单元中的速度向量和纵向弥散度得到三个结点的权系数值。设 V 单元 e 中的平均速度向量, V_{ij}, V_{jk} 和 V_{ki} 分别是 V 在 3 条边向量 ij, jk 和 ki 上的投影,定义:

$$\tau_{ij} = \frac{V_{ij} |ij|}{D_L} = \frac{V_{ij} |ij|}{\alpha_L |V|} \tag{5}$$

式中: D_L 为纵向弥散系数; α_L 为纵向弥散度; τ_{ij} 为结点 i 和 j 之间的 Peclet 数,当 $\tau_{ij} > 0$ 时,结点 i 位于结点 j 的上游,当 $\tau_{ij} < 0$ 时,结点 j 位于结点 i 的上游,类似的定义 τ_{ik} ,并进而得到:

$$\tau_i = \tau_{ij} + \tau_{ik} \tag{6}$$

它表示结点 i 相对于其他两个结点所处的上游地位,同理可以得到 τ_j 和 τ_k 。

根据以上分析,可以得到 3 个结点的权系数,如公式(7) 所示。式中的比例系数 λ 是一个正的常数,文献[10] 中给出的取值范围是 $0.004 \sim 0.005$ 之间,但是也有学者提出 λ 随网格的 Peclet 数和水流形式发生变化,并非固定在上述区间^[13]。

$$\begin{aligned} \omega_i &= \frac{1}{3}(1 + \lambda \tau_i) = \frac{1}{3} + \lambda \frac{V_{ij} |ij| - V_{ki} |ik|}{\alpha_L V} \\ \omega_j &= \frac{1}{3}(1 + \lambda \tau_j) = \frac{1}{3} + \lambda \frac{V_{jk} |jk| - V_{ij} |ij|}{\alpha_L V} \\ \omega_k &= \frac{1}{3}(1 + \lambda \tau_k) = \frac{1}{3} + \lambda \frac{V_{ki} |ik| - V_{jk} |jk|}{\alpha_L V} \end{aligned} \tag{7}$$

如图 3 所示,对于任意结点 i ,考虑所有以结点 i 为顶点的单元,把每个单元的中心点和边上的中点相连接,得到围绕结点 i 的一个多边形,称为结点 i 的专有子区域。

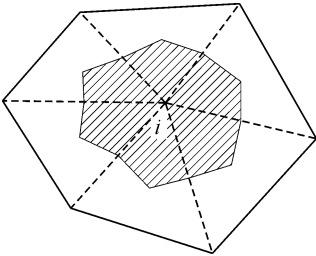


图3 结点 i 的专有子区域

利用专有子区域的水文地质参数,根据局部水量平衡和溶质质量守恒,即可建立结点 i 的离散方程。同理,可以得到其他结点处的离散方程,合在一起就得到研究区域的离散方程组,如公式(8) 所示。给出初始水头值 H_0 或初始浓度值 C_0 ,求解上述离散方程组,即可得到第一时段结束时的水头值 H_1 或浓度值 C_1 ,再把 H_1 或 C_1 作为初值,重复上述过程,可以依次求出各个时刻、各结点的水头值和浓度值。

$$\begin{aligned} [A]H + [B] \frac{\Delta H}{\Delta t} + F &= 0 \\ [A]C + [B] \frac{\Delta C}{\Delta t} + F &= 0 \end{aligned} \tag{8}$$

2.2 程序结构

基于上述方法,用 Matlab 编写了地下水流与水质的联合程序,如图 4 所示,该程序有以下特点:

(1) ICH 为定义的特征数,用于判断所求解的是水流模型还是水质模型。对于水流模型,令 $ICH = 0$,用常规的多单元均衡法进行求解,即权系数 ω_i 、 ω_j 、 ω_k 的值都是 $1/3$;对于水质模型, $ICH = 1$,用基于上游加权的多单元均衡法进行求解,并进而判断渗流场情况。

(2) NST 为定义的另一个特征数,用于判断渗流场情况。若地下水渗流场是不稳定的,污染物迁移过程中流场也发生变化,此时令 $NST = 0$,需要计算每一时间点的各单元的流速矢量,进而用公式(7)计算每个时间点时的权系数;若地下水渗流场是稳定的,既污染物迁移过程前渗流场已经稳定,令 $NST = 1$,只需要用流场稳定时的流速矢量计算权系数。

3 模型验证

在半无限长沙柱中存在着饱和均匀流场,在初始端连续注入浓度为 C_0 的污染物,求任意时刻含水层中污染物浓度的分布情况^[13]。

这是半无限沙柱中污染物的一维对流弥散问题,其控制方程为:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (9)$$

初始条件:

$$C(x, 0) = 0, 0 \leq x < \infty \quad (10)$$

边界条件:

$$C(0, t) = C_0, t \geq 0 \quad (11)$$

$$C(\infty, t) = 0, t \geq 0$$

式中: C 为污染物的浓度; V 为流体平均流速; D 为纵向弥散系数; C_0 为给定初始浓度。

该问题的解析解已经得到,如下式所示:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - Vt}{2\sqrt{Dt}} \right] + \exp \left(\frac{Vt}{D} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{x + Vt}{2\sqrt{Dt}} \right] \right\} \quad (12)$$

使用上文所述的数值解法求解该问题,其结果与解析解进行对比,从而检验数值解法的有效性。用长条状的剖分网格近似半无限长区域,结点总数为 63,单元总数为 80,如图 5 所示。

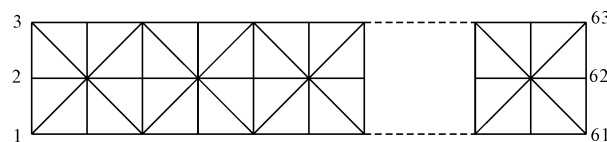


图 5 半无限沙柱污染物迁移的网格剖分图

设 $C_0 = 10 \text{ g/m}^3$, $V = 0.1 \text{ m/d}$, $D = 0.01 \text{ m}^2/\text{d}$, 剖分网格的格距 $\Delta x = 1 \text{ m}$, 则网格总长为 20 m , Peclet 数为 10, 为大 Peclet 数问题。因为该问题中纵向弥散系数较小, 在研究时间为 $0 \leq t \leq 100 \text{ d}$ 时, 沿 x 方向的长度足以近似表示半无限区域。

分别用解析法、伽辽金有限单元法、常规多单元均衡法和上游加权多单元均衡法求解上述问题, 得到 100 d 时沙柱沿长度方向上的浓度值, 如图 6 所示。因为该算例的 Peclet 数较大, 用解析解算得的沙柱沿长度方向的浓度值锋面很陡, 从距离污染源 8 m 处污染物浓度接近于 10 g/m^3 , 突然降低到 12 m 处接近于 0 g/m^3 。采用数值法求解时, 用有限单元法和常规的多单元均衡法得到的结果产生了严重的

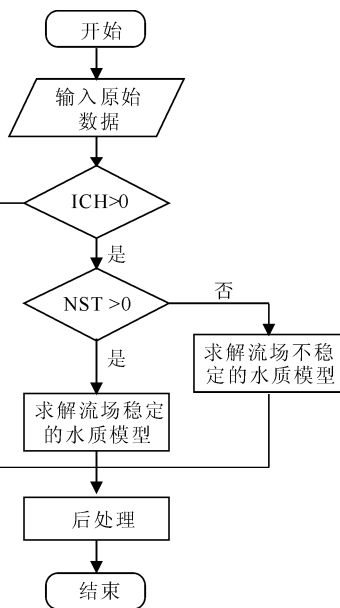


图 4 程序框图

(3) 利用 Matlab 进行编程, 可以调用其内部函数, 使程序更加紧凑, 运行效率更高, 且后处理方便。在进行计算时, 离散线性方程组是一个稀疏的大型矩阵, 用 Matlab 的内部函数 sparse 只存取离散方程中的非零元素, 可以节省大量内存。对离散线性方程组进行求解时, 可以直接对矩阵进行最优化求解, 避免了编写冗长的迭代程序。用 Matlab 中的 plot、contour、quiver 和 surf 等绘图命令, 可以绘制曲线图、等值线图、流速矢量图和三维曲面图等, 显著提高了结果的可视化程度。

振动现象,在 6 到 9 m 处,污染物浓度甚至超过了注入端的初始浓度值 10 g/m^3 ;而用基于上游加权的多单元均衡法求解时,比例系数 λ 取值为 0.0027,解的振动得到了很好的抑制,同时污染物迁移锋面未明显变缓,最接近于解析解。

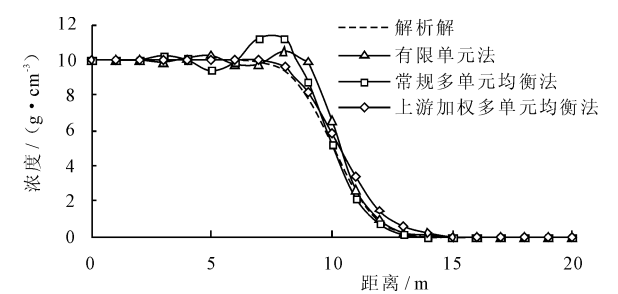


图 6 $t = 100\text{ d}$ 时沙柱沿长度方向的浓度值

4 算 例

文献[14]中介绍了一个污染物在地下水中扩散的算例:有一个几何形状不规则的承压含水层,东西两侧被隔水岩层所限为不透水边界,南北两侧为定水位的河流,水文地质参数如表 1 所示。区域北部边界河流的水位是 105 m,南部边界河流的水位是 100 m,在水头差的作用下,已经形成了稳定的渗流场。设在某一时刻,北部边界河流因某种原因遭到污染,污染物浓度为 10 g/m^3 ,且一直未得到治理。模拟地下水被污染的过程并给出河水被污染 1 000 d 时含水层中的污染物浓度的分布。

表 1 研究区域的水文地质参数

导水系数/ ($\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$)	贮水 系数	含水层 厚度/m	纵向弥 散度/m	横向弥 散度/m
1 000	0.1	50	50	15

根据算例中的描述,所研究的是稳定流场中的地下水污染物迁移问题。因此,首先采用水流模型求得研究区域内的初始渗流场,再根据得到的速度场求取各结点的上游加权系数,进而对不同时刻各结点的污染物浓度进行求解。定义特征数 ICH 和 NST 都为 1,用三角形网格对研究区域进行剖分,网格剖分如图 7 所示。

用前述的联合程序对该问题进行分析,首先算得初始稳定渗流场,并与文献[14]得到的进行比较。表 2 是初始渗流场中部分结点水头值的比较,本文求得的水头值与文献[14]十分接近,最大差值小于 0.02 m,这是由于迭代产生的误差。

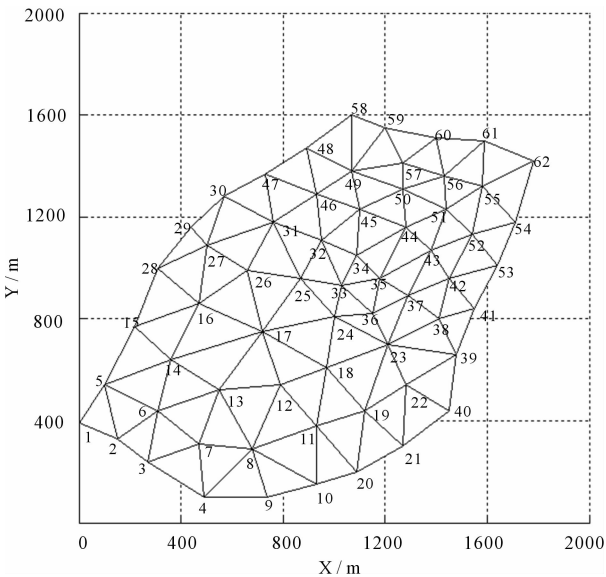


图 7 研究区域的网格剖分图

表 2 初始渗流场中部分结点的水头值 m

结点编号	文献[14]	本文
4	100.000	100.000
8	101.180	101.167
11	101.887	101.868
18	102.298	102.279
24	102.703	102.684
36	102.942	102.924
37	103.262	103.245
43	103.780	103.767
51	104.239	104.230
56	104.575	104.570
60	105.000	105.000

图 8 是初始流速矢量图,图中的小箭头表示每个单元中的流速矢量,其中小箭头的长短代表流速的大小,指向代表流速的方向。研究区域内流场由北侧河流指向南侧河流;因为区域内无抽水井或注水井,流场总体上较为均匀,由于东西两侧隔水层在中间距离较大,两端较小,中间部位的流速稍小于两端。

表 3 将 1 000 d 时本文计算得到的部分结点污染物浓度值与文献[14]的结果进行了比较。可以看出,浓度差值最大约为 0.2 g/m^3 ,比初始渗流场的水头差值要大,这是由于水质模型存在着对流弥散现象,因为权系数的不同,使得到的结果产生差异。但是误差值仍然很小,仅为初始浓度的 2%。

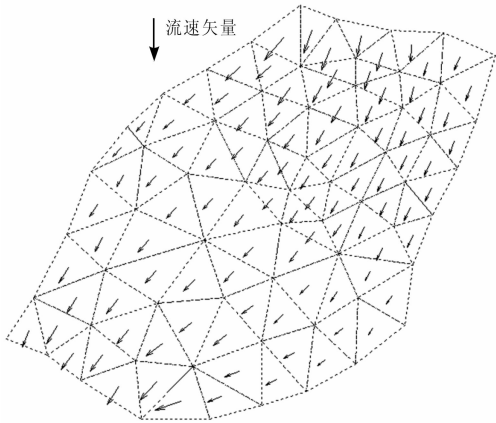


图 8 初始流速矢量图

表 3 1000 d 时部分结点的浓度值 g/m^3

结点编号	文献[14]	本文
4	0.008	0.004
8	0.000	0.000
11	0.010	0.025
18	0.660	0.670
24	2.896	3.098
36	3.867	3.669
37	4.913	5.029
43	7.716	7.959
51	9.364	9.548
56	9.893	9.893
60	10.000	10.000

5 结 论

基于多单元均衡法,本文用 Matlab 编写了地下水流与水质的联合数值模拟程序,可以得到以下结论:

- (1)将水流和水质模型耦合在一起分析,只需要对自定义特征数 *ICH* 和 *NST* 进行输入组合,就可以求解不同水文地质特征的问题。
- (2)对水质模型采用基于上游加权的多单元均衡法求解,通过引入虚拟结点把上游权加到有限单

元法的基函数上,在解决大 Plect 数问题时,解的振动问题得到了很好的抑制,而且未产生明显的数值弥散现象。

(3)与其他编程语言相比,Matlab 的内置函数使程序编写更加简便,结构更加紧凑,同时能节省大量内存。另外,Matlab 强大的绘图功能,使得计算结果的可视化程度显著提高。

参考文献:

[1] 范宏喜.我国地下水资源与环境现状综述[J].水文地质工程地质,2009,36(2):1-3.

[2] 罗 兰.我国地下水污染现状与防治对策研究[J].中国地质大学学报(社会科学版),2008,8(2):72-75.

[3] 李培月.人类活动影响下地下水环境研究[D].西安:长安大学,2014.

[4] 吴吉春,薛禹群.地下水动力学[M].北京:中国水利水电出版社,2009.

[5] 王 浩,陆垂裕,秦大庸,等.地下水数值计算与应用研究进展综述[J].地学前缘(中国地质大学(北京);北京大学),2010,17(6):1-12.

[6] 卢丹美.地下水数值模型和软件的特点及在我国的应用现状[J].中国水运,2013,13(1):107-109.

[7] 武 强,徐 华,赵 鹏,等.地下水渗流场可视化动态模拟与应用研究[J].系统仿真学报,2009,21(15):4841-4844.

[8] 薛禹群.中国地下水数值模拟的现状与展望[J].高校地质学报,2010,16(1):1-6.

[9] 熊洪槐,柳和生,涂志刚. Matlab 与有限元程序设计[J]. 计算机应用与软件,2001,18(7):61-64.

[10] 孙訥正,梁文康.地下水污染数学模拟的多单元均衡法[J].山东大学学报,1982(3):12-32.

[11] 王国重,齐学斌.地下水流与水质联合模拟模型的应用[J].水资源与水工程学报,2006,17(1):61-64.

[12] 薛禹群,谢春红.地下水数值模拟[M].北京:科学出版社,2007.

[13] 王洪涛.多孔介质污染物迁移动力学[M].北京:高等教育出版社,2008.

[14] 崔振东,唐益群,严学新,等.地下水流与水质联合数值模拟应用研究[J].土木建筑与环境工程,2009,31(1):120-124.