

山东省济宁市地下水水质模拟及其 污染趋势预测试验研究之二

许人冰

(山东省地质矿产局)

一、地下水水质模拟区水流与水质预测数学模型

(一) 水文地质模型的概化

1、模拟区边界类型的划分¹⁾：模拟区东南部以老运河为界，用边界 L_1 表示，视为定水头、定浓度补给边界，定为第一类边界；在计算中，水位与浓度采用同期（枯水期）多次测量结果之算术平均值。自县鱼种场向西北至红旗五金电镀厂一线，以边界 L_2 表示，该边界为两个地下水降落漏斗之间的分水岭，并靠模拟区一侧。由于邻近分水岭，地下水仅来自分水岭微量通过其进入模拟区，故视为弱透水边界。自红旗五金电镀厂向西北至电厂宿舍一线，与地下水流向成大角度相交，仅能接受区外少量地下水之侧向补给，故亦定为弱透水边界，并以 L_3 表示。自电厂宿舍至发电厂西侧一线，邻近地下水降落漏斗中心，为模拟区排泄地下水及污染质的边界，定为透水边界，以 L_4 表示。自发电厂西侧向东南至程庄一线，为接受京杭运河通过潜水侧向补给模拟区，其北端距漏斗中心较近，水头差人为加大而增强其侧向补给能力，该边界以 L_5 表示并视为透水边界。自程庄向东至县土产仓库一线，因其南侧有地区化肥厂地下水降落漏斗，所以该边界与 L_2 相似，以 L_6 表示，亦视为弱透水边界。上述之 L_2 至 L_6 边界，都不同程度接受地下水的侧向补给或排泄地下水，据12次统测资料证明，地下水流和其中污染质（总铬）均是通过此边界进入区内或排泄到区外，故对水位和浓度而言将以上各边界统定为第二类边界。

利用模型进行预测时，二类边界通量是通过四年来多次对边界两侧之水位观测和水质监测数据确定的，并布设垂直边界方向的数条长期观测孔、线，以进一步弄清边界的性质与变化，再根据该市发展规划并结合已有的历史资料，寻取发展趋势，最后给出比例系数（见图1）。

2、模拟区含水层类型的确定：模拟区内所研究的主要为两层承压含水层，按其岩性变化和埋藏条件等分为三个区（见图1）。I区含水层一般埋藏于13—56米，岩性以细砂为主，累积厚度约20米左右，上部砂层较厚；II区含水层一般埋藏于14—60米，岩性以中砂为主，累积厚度约33米左右，上部和下部砂层单层厚度均较大；III区含水层一般埋藏于25—60米，岩性以中、粗砂为主，累积厚度约27米左右，下部砂层略好。

1) 见许人冰，1985，山东省济宁市地下水水质模拟及其污染趋势预测试验研究之一。

图1，山东地质，第一卷，第1期，98页。

由于各含水砂层之间的连通性较好, 故在计算中视为一个含水岩组。

3、其他: 模拟区内通过弥散试验证明, 示踪剂在地下水中沿水流方向运移较快, 同时向两侧扩散。另外, 在同一垂线上, 水头和浓度变化不大, 因此, 在承压含水层中地下水流动和溶质运移可视为二维运动。承压含水层和弱透水层的介质为非均质, 基本上可认为是各向同性的、水平的和不等厚的。溶质在运移过程中化学作用可以忽略, 且与含水介质发生的吸附作用较小, 亦未予计算。

模拟区内局部地带对承压含水层地下水的垂直补给与排泄(包括区内之渗透砂坑)在计算中以“注入井”形式处理, 潜水对下部承压水的补给以越流形式处理。

(二) 数学模型的建立

根据模拟区的水文地质条件, 分别建立承压水运动微分方程和水动力—弥散方程。

1 承压水运动微分方程: 由质量守恒和达西定律, 同时利用微元分析, 在笛卡尔坐标系中可得出二维承压水非稳定流偏微分方程为:

$$\mu^* \frac{\partial h}{\partial t} = \text{div}(T \text{grad} h) + \varepsilon(x, y, t) - W_Q \quad (1-1)$$

式中T为导水系数, $T = mk(L^2/t)$; k为水力传导系数(L/t)(T和K均为二秩对称张量, 但由于把所研究的承压含水层视作各向同性, 故T和K可转化为一标量); m为含水层厚度(L); μ^* 为弹性释放系数(无量纲); ε 为越流补给强度(L/t); W_Q 为对单位面积含水层抽水或注水的流量(L/t), 抽水为正, 注水为负; x、y和t分别为横坐标、纵坐标(L)和时间(t); $h(x, y, t)$ 为点(x, y)处t时刻的水头(L)。

2 水动力—弥散方程: 根据质量守恒和水动力弥散理论及水文地质条件分析, 在笛卡尔坐标系中可得水动力—弥散方程为:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & \frac{1}{m \cdot n} \text{div}(m \cdot n \cdot D \text{grad} c) - \frac{1}{m \cdot n} \text{div}(m \cdot n \cdot v \cdot c) - \frac{C_0 W_0}{m \cdot n} \\ & + \frac{\varepsilon c'}{n \cdot m} + \frac{\mu^* \frac{\partial h}{\partial t}}{n \cdot m} C_\mu \end{aligned} \quad (1-2)$$

式中n为含水层的有效孔隙度(无量纲); $c(x, y, t)$ 为点(x, y)处t时刻的污染质(总铬)浓度(M/L³); C_0 为源或汇中所含污染质(总铬)浓度; C_μ 为释放或储存量的污染质浓度; C' 为越流量的污染质浓度; v为平均孔隙流速矢量, v_x, v_y 为其两个分量(L/t)它与水头h的关系为

$$v = - \frac{K}{n} \text{grad} h \quad (1-3)$$

D为水动力弥散系数(L²/t), 二秩对称张量, 但由于含水层可视作各向同性, 故笛卡尔坐标系中弥散系数D的四个分量可分别表示为

$$D_{xx} = a_L \frac{v_x^2}{|v|} + a_T \frac{v_y^2}{|v|} \quad (1-4)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (a_L - a_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (1-5)$$

$$D_{yy} = a_T \frac{v_x^2}{|v|} + a_L \frac{v_y^2}{|v|} \quad (1-6)$$

式中 D_{xx} 、 D_{yy} 、 D_{xy} 是在忽略分子扩散情况下弥散系数的表示式， α_L 和 α_T 分别称为含水层的纵向弥散度和横向弥散度，量纲(L)。

3、数学模型：根据以上建立的方程和初、始和边界条件，可归纳为如下定解问题：

(1) 承压水方程初、始和边值问题

$$\begin{cases} \mu^* \frac{\partial h}{\partial t} = \text{div}(T \text{grad} h) - W_0 + \varepsilon(x, y, t) \\ (x, y) \in G, t > 0 \end{cases} \quad (1-7)$$

$$\begin{cases} \text{初始条件: } h(x, y, t) \Big|_{t=0} = h_0(x, y) \\ (x, y) \in G \end{cases} \quad (1-8)$$

$$\begin{cases} \text{边界条件: } h(x, y, t) \Big|_{\Gamma_1} = g_1(x, y, t) \\ (x, y) \in \Gamma_1, t > 0 \end{cases} \quad (1-9)$$

$$\left[T \frac{\partial h}{\partial x} \cos(\vec{n}, x) + T \frac{\partial h}{\partial y} \cos(\vec{n}, y) \right] \Big|_{\Gamma_2} = -g(x, y, t) \quad (1-10)$$

式中 \vec{n} 为 Γ_2 上的外法线单位向量。

$$\Gamma_2 = \sum_{i=2}^6 l_i, \Gamma_1 = l_1, g = g_j(x, y, t), (x, y) \in l_j \quad (i=2, 3, \dots, 6)$$

(2) 对流——弥散方程定解问题：

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{m \cdot n} \text{div}(D \cdot m \cdot n \text{grad} c) - \frac{1}{m \cdot n} \text{div}(v \cdot m \cdot n \cdot c) \\ - \frac{W_0 C_0}{m \cdot n} + \frac{\varepsilon c'}{m \cdot n} + \frac{\mu^* \frac{\partial h}{\partial t} C u}{m \cdot n} \\ (x, y) \in G, t > 0 \end{cases} \quad (1-11)$$

$$\begin{cases} \text{初始条件: } C(x, y, t) \Big|_{t=0} = C_0(x, y), (x, y) \in G \end{cases} \quad (1-12)$$

$$\begin{cases} \text{边界条件:} \\ C(x, y, t) \Big|_{\Gamma_1} = f_1(x, y, t), (x, y) \in \Gamma_1, t > 0 \end{cases} \quad (1-13)$$

$$\begin{cases} m \cdot n \left\{ \left[v_x c - \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] \cos(\vec{n}, x) + \left[v_y c - \left(D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] \cos(\vec{n}, y) \right\} \Big|_{\Gamma_2} = f(x, y, t) \\ \Gamma_2 = \sum_{i=2}^6 l_i \\ (x, y) \in \Gamma_2, t > 0 \end{cases} \quad (1-14)$$

因为溶混物质的密度(ρ)和粘度(μ)可视为常数,故解题的步骤为:先由(I)解出

水头分布，再由运动方程（一3）求出流速分量，进而由（II）解出浓度分布。

二、数学模型的求解方法

（一）有限单元法（迦辽金法）

1、化边值问题（I）和（II）为变分问题：如果对固定 t ， $h(x, y, t)$ 和 $c(x, y, t) \in H^1$ 在 Γ_1 上分别取值 $g(x, y, t)$ 和 $f_1(x, y, t)$ ，且对任意 $\eta_1(x, y)$ 和 $\eta_2(x, y) \in H^1_E$ （ H^1 是一阶索别列夫空间， H^1_E 是 H^1 的子空间）分别满足变分方程：

$$\iint_G \mu^* \frac{\partial h}{\partial t} \eta_1 dx dy = - \iint_G \Gamma \left(\frac{\partial h}{\partial x} \cdot \frac{\partial \eta_1}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial y} \cdot \frac{\partial \eta_1}{\partial y} \right) dx dy + \iint_G (\varepsilon - W_0) \eta_1 dx dy - \int_{\Gamma_2} g(x, y, t) \eta_1 ds \quad (2-1-23)$$

和
$$\iint_G \frac{\partial c}{\partial t} \eta_2 dx dy = - \iint_G m \cdot n \left[(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y}) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\eta_2}{m \cdot n} \right) + (D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y}) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\eta_2}{m \cdot n} \right) \right] dx dy + \iint_G m \cdot n \left[u_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\eta_2}{m \cdot n} \right) + u_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\eta_2}{m \cdot n} \right) \right] C dx dy - \int_{\Gamma_2} \frac{1}{m \cdot n} f(x, y, t) \eta_2 ds + \iint_G \frac{1}{m \cdot n} (\varepsilon c' - W_0 C_0) \eta_2 dx dy + \iint_G \frac{\mu^*}{m \cdot n} \cdot \frac{\partial h}{\partial t} C \eta_2 dx dy \quad (2-2)$$

及初始条件（1-14）和（1-18），则称 $h(x, y, t)$ 和 $C(x, y, t)$ 分别为边值问题（I）和（II）的广义解。

2、剖分求解区域：在模拟区 G 的边界 $\Gamma (= \Gamma_1 + \Gamma_2)$ 上取有限个点、依次联成封闭多边形 Γ_α （ α 表示单元的最大直径），以此近似代替 Γ ，并以 Γ_h 围成的多边形区域 G_d 近似代替 G ，然后把 G_d 分割成 $N_e (= 132)$ 个三角形之和。从而得到一个三角形剖分（见图1）。取三角形的顶点作为节点，每个三角形叫“单元”。节点如落在区域 G 内称“内节点”，在第一边界上称“第一边界点”，在第二边界上称“第二边界点”。在第一边界和第二边界之间规定为“第一边界点”。节点编号 $i = 1, 2, \dots, N_p (= 86)$ 。其中节点 $82 \dots, 86$ 为第一边界点，节点 $49, \dots, 81$ 为第二边界点，节点 $1, \dots, 48$ 为内节点。单元编号 $\Delta \beta = 1, 2, \dots, N_e (= 132)$ ，则 $G_d = \sum_{\beta=1}^{132} \Delta \beta$ 。节点 i 号点的坐标记为 (x_i, y_i) （ $i = 1, 2, \dots, 86$ ）。

3、构造基函数和线性形状函数：设以节点 i 为顶点的三角形（见图2）的所有单元为 β_s 个，则节点 i 的基函数定义为

$$\varphi_i(x, y) = \begin{cases} L_i^{(\beta)}(x, y) & \text{当 } (x, y) \in \beta_e (e = 1, 2, \dots, s) \\ 0 & \text{当 } (x, y) \text{ 属于模拟区 } G \text{ 的其他节点} \end{cases} \quad (2-3)$$

使形状函数为线性元, 则在节点*i*上取水头 $h_i(t)$ 和污染质(总铬)的浓度为 $c_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, 86$) 的分片线性函数可分别表示为

$$\tilde{h}(x, y, t) = \sum_{i=1}^{np} h_i(t) \varphi_i(x, y) \quad (2-4)$$

$$\tilde{c}(x, y, t) = \sum_{j=1}^{np} c_j(t) \varphi_j(x, y) \quad (2-5)$$

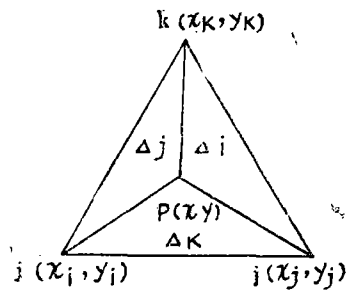


图2 $P(x, y)$ 点面积坐标图

在边界 Γ_1 上为零的任意分片光滑函数 η_1 和 η_2 可表示为

$$\eta_1(x, y) = \sum_{i=1}^m \alpha_i \varphi_i(x, y) \quad (2-6)$$

$$\text{和 } \eta_2(x, y) = \sum_{i=1}^m \beta_i \varphi_i(x, y) \quad (2-7)$$

式中: $m = (\text{内节点}) + (\text{边界点数})$;

α_i, β_i : 任意常数 ($i = 1, 2, \dots, m$)。

4、建立有限元方程: 解边值问题(I)和(II)的有限元法, 可归纳成为求一个在边界 Γ_1 上分别取已知值 g_1 和 f_1 的分片线性函数(2-4)和(2-5), 使它们对于在边界 Γ_1 上为零的任意分片光滑函数(2-6)和(2-7)分别满足变分方程(2-1)和(2-2), 即:

$$\begin{aligned} \text{即 } & \sum_{j=1}^m \left[\iint_{Gd} \mu \cdot \frac{\partial \tilde{h}}{\partial t} \varphi_j dx dy \right] \alpha_j \\ & = - \sum_{j=1}^m \iint_{Gd} \left[T \left(\frac{\partial \tilde{h}}{\partial x} \cdot \frac{\partial \varphi_j}{\partial x} + \frac{\partial \tilde{h}}{\partial y} \cdot \frac{\partial \varphi_j}{\partial y} \right) \right] \alpha_j dx dy \\ & \quad + \sum_{j=1}^m \left[\iint_{Gd} (\varepsilon - W_0) \varphi_j dx dy \right] \alpha_j - \sum_{j=1}^m \left(\int_{\Gamma_2} g \varphi_j ds \right) \alpha_j \\ \text{和 } & \sum_{j=1}^m \left[\iint_{Gd} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial t} \varphi_j dx dy \right] \beta_j \\ & = - \sum_{j=1}^m \left\{ \iint_{Gd} m \cdot n \left[(D_{xx} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y}) \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varphi_j}{m \cdot n} \right) \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + (D_{yx} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial \tilde{c}}{\partial y}) \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varphi_j}{m \cdot n} \right) \right] dx dy \right\} \beta_j \\ & \quad + \sum_{j=1}^m \left\{ \iint_{Gd} m \cdot n \left[v_x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\varphi_j}{m \cdot n} \right) + v_y \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\varphi_j}{m \cdot n} \right) \right] \tilde{c} dx dy \right\} \beta_j \\ & \quad + \sum_{j=1}^m \left(\iint_{Gd} \frac{\mu \cdot \frac{\partial \tilde{h}}{\partial t}}{m \cdot n} C \varphi_j dx dy \right) \beta_j - \sum_{j=1}^m \end{aligned}$$

$$D_{i,j} = \sum_{\beta} \iint_{(i,j) \in \Delta\beta} \mu_{\beta}^{(\beta)} L_i L_j dx dy = \begin{cases} \frac{1}{12} \sum_{\beta} \mu_{\beta}^{(\beta)} \Delta\beta & i \neq j \\ \frac{1}{6} \sum_{\beta} \mu_{\beta}^{(\beta)} \Delta\beta & i = j \end{cases}$$

同理:

$$\tilde{D}_{i,j} = \begin{cases} \frac{1}{12} \sum_{\beta} \Delta\beta & i \neq j \\ \frac{1}{6} \sum_{\beta} \Delta\beta & i = j \end{cases}$$

(2) 计算 A_{1ij} 和 A_{2ij} 、 A_{3ij} :

$$j = \sum_{\beta} \iint_{(i,j) \in \Delta\beta} T(b_i b_j + d_i d_j) dx dy$$

 T 在每个单元 β 内可视为常数, 且在 β 内 $T = T_{\beta}$, 于是:

$$A_{i,j} = \begin{cases} \sum_{\beta} T_{\beta} [b_i b_j + d_i d_j] \Delta\beta & i \neq j \\ \sum_{\beta} T_{\beta} [(b_i)^2 + (d_i)^2] \Delta\beta & i = j \end{cases}$$

m 和 n 在每个三角形内可视为常数, 且在第 β 个三角形单元内 $m = m_{\beta}$, $n = n_{\beta}$; 当每一个固定时刻 t , D_{xx} 、 D_{xy} 、 D_{yy} 在每个单元 β 内亦为常数, 且 $D_{xx} = D_{xx\beta}(t)$ 、 $D_{yx} = D_{xy} = D_{xy\beta}(t)$ 、 $D_{yy} = D_{yy\beta}(t)$ 时:

$$A_{i,j} = \sum_{(i,j) \in \Delta\beta} [(D_{xx\beta}(t) b_i^{(\beta)} + D_{xy\beta}(t) d_i^{(\beta)}) b_j^{(\beta)} + (D_{yx\beta}(t) b_i^{(\beta)} + D_{yy\beta}(t) d_i^{(\beta)}) d_j^{(\beta)}] \Delta\beta$$

同理, 此时

$$A_{2i,j} = - \sum_{(i,j) \in \Delta\beta} \left[v_x(\beta) b_i^{(\beta)} + v_y(\beta) d_i^{(\beta)} \right] \frac{\Delta\beta}{3}$$

式中： $\vec{v}(\beta) = - \frac{K\beta}{n\beta} \text{grad}h(x, y, t), (x, y) \in \Delta\beta$ ；

$$v_x(\beta) = - \frac{K\beta}{n\beta} \left[b_i^{(\beta)} h_i + b_j^{(\beta)} h_j + b_k^{(\beta)} h_k \right] ;$$

$$v_y(\beta) = - \frac{K\beta}{n\beta} \left[d_i^{(\beta)} h_i + d_j^{(\beta)} h_j + d_k^{(\beta)} h_k \right] .$$

计算每个单元流速分量后，可用如下公式计算每个节点处的流速分量。即：

$$v_{xi} = \frac{\sum_{\beta} \frac{v_x(\beta)}{d\beta}}{\sum_{i \in \Delta\beta} \left(\frac{1}{d\beta} \right)},$$

$$v_{yi} = \frac{\sum_{\beta} \frac{v_y(\beta)}{d\beta}}{\sum_{i \in \Delta\beta} \left(\frac{1}{d\beta} \right)} .$$

式中 $d\beta$ 表示节点 i 到单元 β 的中心的距离。

取 $C\mu = \tilde{C}$ 时，

$$A_{3i,j} = \begin{cases} \frac{1}{12} \sum_{\beta} \frac{\mu^{*\beta}}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}} \left(\frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{\Delta t} \right) \Delta\beta & i \neq j \\ (i, j) \in \Delta\beta \\ \frac{1}{6} \sum_{\beta} \frac{\mu^{*\beta}}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}} \left(\frac{h_t - h_{t-\Delta t}}{\Delta t} \right) \Delta\beta & i = j \\ (i, j) \in \Delta\beta \end{cases}$$

(3) 计算 G_j 和 \tilde{G}_j ：当浓度通量 f 和补给量 g 近似为线性变化，且 m 、 n 在每一个单元 β 内为常数 m_{β} 、 n_{β} 时，则

$$\tilde{G}_j = - \sum_{\beta} \frac{1}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}} \cdot \frac{l_{ij}}{6} (2f_i + f_j)$$

$$(i, j) \in \Gamma_{2d} \cap \beta$$

和 $G_j = \sum_{\beta} \frac{l_{ij}}{6} (2g_i + g_j)$

$$(i, j) \in \Gamma_{2d} \cap \beta$$

当 f 和 g 为分片常数, 且在 β 内分别为 f_{β} 和 g_{β} 时, 则:

$$\tilde{G}_j = - \sum_{\beta} f_{\beta} \frac{l_{i, j}}{2m_{\beta} \cdot n_{\beta}}$$

$$(i, j) \in \Gamma_{2d} \cap \beta$$

$$G_j = - \sum_{\beta} g_{\beta} \frac{l_{ij}}{2}$$

$$(i, j) \in \Gamma_{2d} \cap \beta$$

(4) 计算 E_j 和 \tilde{E}_j : 当越流补给强度 ε 是线性变化时, 设节点 i 的补给强度为 ε_i ($i=1, 2, \dots, n_{\beta}$), 且 m, n 在 β 内为常数 m_{β}, n_{β} 时, 则:

$$E_j = \sum_{\beta} \left(\frac{\varepsilon_i}{6} + \frac{\varepsilon_i + \varepsilon_k}{12} \right) \Delta\beta$$

$$(i, j, k) \in \Delta\beta$$

和 $\tilde{E}_j = \sum_{\beta} \left(\frac{\varepsilon_j}{6} + \frac{\varepsilon_j + \varepsilon_k}{12} \right) \frac{C_j' \Delta\beta}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}}$

$$(i, j, k) \in \Delta\beta$$

当越流补给强度 ε 在每一个三角形 β 上为常数 ε_{β} 时, 则:

$$E_j = \sum_{\beta} \frac{\varepsilon_{\beta}}{3} \Delta\beta,$$

$$j \in \Delta\beta$$

$$\tilde{E}_j = \sum_{\beta} \frac{1}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}} \cdot \frac{\varepsilon_{\beta}}{3} C_j' \Delta\beta.$$

$$j \in \Delta\beta$$

取 $C_{\mu} = C(t - \Delta t)$, 当 m, n 在 β 内为常数 m_{β}, n_{β} 时,

$$E_{2j} = \iint_{G_d} \frac{\mu^*}{m \cdot n} \cdot \frac{\partial h}{\partial t} C(t - \Delta t) \varphi_j dx dy$$

$$= \sum_{\beta} \frac{\mu_{\beta}^*}{m_{\beta} \cdot n_{\beta}} \left(\frac{h(t) - h(t - \Delta t)}{\Delta t} \right) C(t - \Delta t) \frac{\Delta\beta}{3}$$

(5) 计算 B_j 和 \tilde{B}_j :

$$B_j = - \iint_{G_d} W_0 \varphi_j dx dy = - \sum_{j \in \Delta^\beta} \iint_{\Delta^\beta} W_0^{(\beta)} L_j dx dy = - \sum_{j \in \Delta^\beta} \frac{\Delta^\beta}{3} W_{0j}$$

同理，当 m, n 在 β 内为常数 m_β, n_β 时，可得：

$$\tilde{B}_j = - \sum_{\beta} \frac{1}{m_\beta \cdot n_\beta} W_{0j} C_j'$$

式中： C_j' 为节点 j 处抽水或注水的浓度。

尤其当每一个三角形单元内和节点 i 处有一口井，且 q_β 和 q_i 分别表示第 β 个三角形内和点 j 处的抽水量或注水量。设井心坐标分别为 (x_β, y_β) ($\beta=1, 2, \dots, n_e$) 和 (x_i, y_i) ($i=1, 2, \dots, n_p$)，当 W_0 为如下形式

$$W_0 = \sum_{\beta=1}^{n_e} q_\beta \delta(x - x_\beta, y - y_\beta) + \sum_{i=1}^{n_p} q_i \delta(x - x_i, y - y_i)$$

则：

$$B_j = - \sum_{j \in \Delta^\beta} q_\beta L_j(x_\beta, y_\beta) - q_i$$

$$\text{和 } \tilde{B}_j = - \sum_{j \in \Delta^\beta} \frac{1}{m_\beta \cdot n_\beta} q_\beta L_j(x_\beta, y_\beta) C_{j0} - \frac{q_i C_{j0}}{2\pi} \sum_i \frac{\alpha_i^{(\beta)}}{m_\beta \cdot n_\beta}$$

式中： $\alpha_j^{(\beta)}$ 为三角形单元 β 顶点 j 处的内角；

C_{j0} 为节点井 j 处抽水或注水流量污染质的浓度。

由于把边值问题 (I) 和 (II) 已化为解常微分方程组的初值问题 (2-10) 和 (2-11) 式，用隐格式求上两式的近似解便得如下两组线性代数方程组：

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m (D_{ij} + \frac{1}{2} A_{ij} t) h_i(t) &= \sum_{i=1}^{n_p} (D_{ij} - \frac{1}{2} A_{ij} t) h_i(0) \\ - \sum_{i=m+1}^{n_p} (D_{ij} + \frac{1}{2} A_{ij} t) h_i(t) &+ \frac{K_j(t) + K_j(0)}{2} t \end{aligned} \quad (2-12)$$

($j = 1, 2, \dots, m$)

$$\begin{aligned} \text{和 } \sum_{i=1}^m (\tilde{D}_{ij} + \frac{1}{2} \tilde{A}_{ij} t) C_i(t) &= \sum_{i=1}^{n_p} (\tilde{D}_{ij} - \frac{1}{2} \tilde{A}_{ij} t) C_i(0) \\ - \sum_{i=m+1}^{n_p} (\tilde{D}_{ij} + \frac{1}{2} \tilde{A}_{ij} t) C_i(t) &+ \frac{K_j(t) + K_j(0)}{2} t \end{aligned} \quad (2-13)$$

($j = 1, 2, \dots, m$)

式中： $K_j(t) = E_j(t) + B_j(t) + G_j(t)$ ；

$\tilde{K}_j(t) = \tilde{E}_j(t) + \tilde{B}_j(t) + \tilde{G}_j(t)$ ；

$h(t)$ 和 $C_i(t)$ 分别表示在节点 i 处 t 时间的水头和污染质 (总铬) 的浓度。

解联立方程组(2-12)和(2-13), 并利用(1-3)式可得到t时刻节点i的浓度值 $C_i(t)$ 。(i=1, 2, ...m)。于是利用(2-5)式, 可得模拟区G上的浓度分布 $\tilde{C}(x, y, t)$ 。

(二) 矩形元一函数磨光法

为了使有限单元求解方法能适应以对流为主的情形, 提高计算精度, 并克服数值弥散, 而采用矩阵元及磨光技术和井点析奇, 使得以线性之解模型(I)所得到的水头 $h(x, y, t)$ 具有连续一阶导数, 克服其所造成的速度不连续性和影响解模型(II)的精度, 同时在使用矩形元中采用了平面三角插值的办法。这就基本上克服了矩形有限元法处理边界不灵活的缺点。

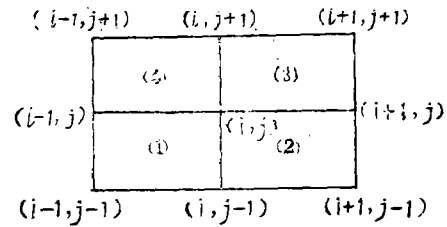
1、数学模型

$$\begin{cases}
 \mu \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \varepsilon & (I_1) \\
 h(x, y, t) \Big|_{t=0} = h_0(x, y) & (I_2) \\
 h(x, y, t) \Big|_{\Gamma_1} = h_1(x, y, t) & (I_3) \\
 T \frac{\partial h}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q(x, y, t) & (I_4) \\
 T \frac{\partial h}{\partial n} \Big|_{\Gamma_{CP}} = -\frac{Qp}{2\pi\rho_{cp}} \quad P = 1, 2, \dots, P & (I_5) \\
 \\
 \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{1}{m \cdot n} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} m n \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} m n \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right. \\
 \quad \left. - \left[\frac{\partial}{\partial x} m n (v_x c) + \frac{\partial}{\partial y} m n (v_y c) \right] \right\} - \frac{Ic}{mn} & (II_1) \\
 C(x, y, t) \Big|_{t=0} = C_0(x, y) & (II_2) \\
 C(x, y, t) \Big|_{\Gamma_1} = C_i(x, y, t) & (II_3) \\
 m \cdot n \left[(v_x c - D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x}) \cos(\vec{n}, x) \right. \\
 \left. + (v_y c - D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y}) \cos(\vec{n}, y) \right] \Big|_{\Gamma_2} = f & (II_4)
 \end{cases}$$

2、矩形网格上的双线性基函数

(1) 双线性基函数的构造: 设为矩形剖分。以 $D\alpha\beta$ 表示形心坐标为 $(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\beta)$ 的矩形单元, 单元的底和高分别为 $L\alpha\beta, H\alpha\beta$, 单元的左下、右下、右上和左上四个顶点坐标分别为 (x_1, y_1) 、 (x_2, y_2) 、 (x_3, y_3) 和 (x_4, y_4) 。则可构造出单元 $D\alpha\beta$ 上的双线性插值基函数为

$$\left. \begin{aligned} \varphi_{\alpha\beta}^{(1)}(x, y) &= \frac{(x_2 - x)(y_3 - y)}{L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}} \\ \varphi_{\alpha\beta}^{(2)}(x, y) &= \frac{(x - x_1)(y_3 - y)}{L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}} \\ \varphi_{\alpha\beta}^{(3)}(x, y) &= \frac{(x - x_1)(y - y_3)}{L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}} \\ \varphi_{\alpha\beta}^{(4)}(x, y) &= \frac{(x_2 - x)(y - y_1)}{L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta}} \end{aligned} \right\}$$



(2-14) 图 8 基函数构造示意图

而单元 $D_{\alpha\beta}$ 上的形状函数则为：

$$C_{\alpha\beta}(x, y, t) = \sum_{p=1}^4 \varphi_{\alpha\beta}^{(p)}(x, y) C_p(t) \quad (2-15)$$

其中 $C_p(t)$ 为 t 时刻 C 在单元顶点 (x_p, y_p) 处的值。

如图 3, 根据单元插值基函数(2-4), 可知节点 (i, j) 处的基函数应表示为：

$$\Phi_{ij}(x, y) = \begin{cases} \frac{(x - x_{i-1})(y - y_{j-1})}{(x_i - x_{i-1})(y_j - y_{j-1})} & \text{①区} \\ \frac{(x_{i+1} - x)(y - y_{j-1})}{(x_{i+1} - x_i)(y_j - y_{j-1})} & \text{②区} \\ \frac{(x_{i+1} - x)(y_{j+1} - y)}{(x_{i+1} - x_i)(y_{j+1} - y_j)} & \text{③区} \\ \frac{(x - x_{i-1})(y_{j+1} - y)}{(x_i - x_{i-1})(y_{j+1} - y_j)} & \text{④区} \\ 0 & \text{其他} \end{cases} \quad (2-16)$$

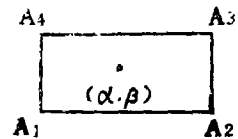


图 4 基函数积分单元

(2) 基函数的积分性质：如图 4, 设 $D_{\alpha\beta}$ 为任一单元, 在 $D_{\alpha\beta}$ 上把 $\varphi_{\alpha\beta}^{(p)}$ 简记为 φ_p 。则对任意的非负整数 r, s, t, u , 都有如下的积分公式成立：

$$\begin{aligned} I_1 &= \iint_{D_{\alpha\beta}} \varphi_1^{r_1} \varphi_2^{s_1} \varphi_3^{t_1} \varphi_4^{u_1} \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial x} \right)^{r_2} \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial x} \right)^{s_2} \left(\frac{\partial \varphi_3}{\partial x} \right)^{t_2} \left(\frac{\partial \varphi_4}{\partial x} \right)^{u_2} dx dy \\ &= (-1)^{r_2 + u_2} L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{L_{\alpha\beta}} \right)^{r_2 + s_2 + t_2 + u_2} \frac{(r_1 + u_1)! (s_1 + t_1)!}{(r_1 + s_1 + t_1 + u_1 + 1)!} \\ &\quad \cdot \frac{(r_1 + s_1 + r_2 + s_2)! (t_1 + u_1 + t_2 + u_2)!}{(r_1 + s_1 + t_1 + u_1 + r_2 + s_2 + t_2 + u_2 + 1)!} \end{aligned}$$

$$I_2 = \iint_{D_{\alpha\beta}} \varphi_1^r \varphi_2^s \varphi_3^t \varphi_4^u \left(\frac{\partial \varphi_1}{\partial y}\right)^{r_1} \left(\frac{\partial \varphi_2}{\partial y}\right)^{s_1} \left(\frac{\partial \varphi_3}{\partial y}\right)^{t_1} \left(\frac{\partial \varphi_4}{\partial y}\right)^{u_1} dx dy$$

$$= (-1)^{r_1+s_1} L_{\alpha\beta} H_{\alpha\beta} \left(\frac{1}{H_{\alpha\beta}}\right)^{r_2+s_2+t_2+u_2} \frac{(r_1+s_1)!(t_1+u_1)!}{(r_1+s_1+t_1+u_1+1)!} \cdot \frac{(r_1+u_1+r_2+u_2)!(s_1+t_1+s_2+t_2)!}{(r_1+u_1+s_1+t_1+r_2+s_2+t_2+u_2+1)!}$$

$$I_3 = \int_{A_1 A_2} \varphi_1^r \varphi_2^s ds = \frac{r!s!}{(r+s+1)!} L_{\alpha\beta}$$

$$I_4 = \int_{A_2 A_3} \varphi_2^r \varphi_3^s ds = \frac{r!s!}{(r+s+1)!} H_{\alpha\beta}$$

$$I_5 = \int_{A_1 A_3} \varphi_1^r \varphi_2^s \varphi_3^t \varphi_4^u ds = \frac{(2r+s+u)!(2t+s+u)!}{[2(r+s+t+u)+1]!} \tau_{A_2 A_3}$$

$$I_6 = \int_{A_2 A_4} \varphi_1^r \varphi_2^s \varphi_3^t \varphi_4^u ds = \frac{(2s+r+t)!(2u+r+t)!}{[2(r+s+t+u)+1]!} \tau_{A_1 A_3}$$

其中: $\tau_{A_1 A_3}$ 、 $\tau_{A_2 A_4}$ 分别为 $\overline{A_1 A_3}$ 、 $\overline{A_2 A_4}$ 的长度。

3、数学模型的有限元方程

(1) 数学模型(I)的奇点析出: 为提高水头值本身的精度, 并为以后的函数磨光提供方便, 首先对模型(I)进行奇点析出。

以井心 (x_p, y_p) 为中心, R_{bp} 为半径作圆 Γ_{bp} ($R_{bp} > P_{cp}$), 把 Γ_{bp} 与 Γ_{cp} 围成的园环形区域记为 D_p , 这些园环可以相交亦可不相交, 但不能越过边界 Γ 。假定导水系数 T 可视为分片常数, 选择 R_{bp} 使在 D_p 中 T 为常数, 令

$$u_p = \begin{cases} \frac{Q_p}{2\pi T \left(1 - \frac{\rho_{cp}}{R_{bp}}\right)^2 \left(1 + \frac{\rho_{cp}}{R_{bp}}\right)} \ln \frac{r_p}{R_{bp}} + \sum_{l=1}^3 \frac{1}{l} \left(1 - \frac{r_p}{R_{bp}}\right)^l - \left(1 - \frac{r_p}{R_{bp}}\right)^3 & \rho_{cp} < r_p < R_{bp} \\ 0 & r_p > R_{bp}, r_p < \rho_{cp} \end{cases} \quad (2-17)$$

再令, $v = \sum_{p=1}^P u_p$, $\omega = h - v$, 则边值问题(I)化为如下的等价的边值问题(I')

$$\begin{cases}
 \mu \cdot \frac{\partial \omega}{\partial t} - \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial \omega}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial \omega}{\partial y} \right) \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left(T \frac{\partial u}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(T \frac{\partial v}{\partial y} \right) = \epsilon & (I')_1 \\
 \omega \Big|_{t=0} = h_0(x, y) - u(x, y) & (I')_2 \\
 \omega \Big|_{\Gamma_1} = h_1(x, y, t) & (I')_3 \\
 T \frac{\partial \omega}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q(x, y, t) & (I')_4 \\
 T \frac{\partial \omega}{\partial n} \Big|_{\Gamma_{cp}} = 0 \quad (\rho = 1, 2, \dots, p) & (I')_5
 \end{cases}$$

而边值问题 (I')，包括井心在内，已无奇异性。

(2) 区域剖分及边界处理：如图 5，用平行于坐标轴的直线 $x = x_i$ ($i = 0, 1, 2, \dots, N$)， $y = y_j$ ($j = 0, 1, \dots, M$) 剖分求解区域 G 。沿 x 和 y 方向的步长分别为：

$$\begin{aligned}
 L_i &= x_i - x_{i-1} & (i = 1, 2, \dots, N) \\
 H_j &= y_j - y_{j-1} & (j = 1, 2, \dots, M)
 \end{aligned}$$

若剖分是等距的，则 $L = L_i$ ， $H = H_j$ 。

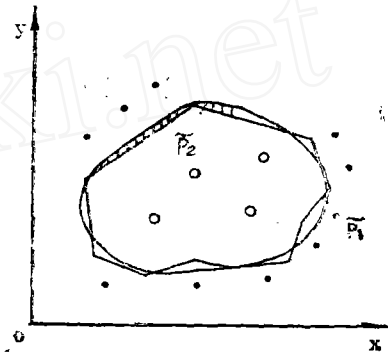


图 5 区域剖分及边界处理示意图

图中的 Γ 是由靠近边界单元的边 p_1, p_2 或对角线连成的封闭折线。

网格交点称为节点，用 (i, j) 或 (k, L) 表示， (x_i, y_j) 表示节点 (i, j) 的坐标。若在某边界单元上只有一个节点是外界点，则称正则外节点。非正则外节点的函数值一般取为零值（函数磨光时可做其他处理），边界节点的函数值采用就近迁移法处理，正则外节点的函数值采用平面三角插值法来求得。如图 6， $AEBC$ 是一边界单元， AB 在 Γ 上， A, B 为边界节点， C 为正则外节点， E 为内节点。定义 C 点的函数值为：

$$\omega_c = \frac{a \cdot \omega_A + b \cdot \omega_B}{a + b} \quad (2-18)$$

矩形单元的形心点称为格点，用 (α, β) 表示，它所在的单元记为 $D_{\alpha\beta}$ ($D_{\alpha\beta}$ 也表示单元的面积)， $D_{\alpha\beta}$ 的形心坐标记为 $(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\beta)$ ，格点与节点的坐标之间有如下关系：

$$\begin{aligned}
 \bar{x}_\alpha &= \frac{x_{\alpha-1} + x_\alpha}{2} & \alpha &= 1, 2, \dots, N \\
 \bar{y}_\beta &= \frac{y_{\beta-1} + y_\beta}{2} & \beta &= 1, 2, \dots, M
 \end{aligned}$$

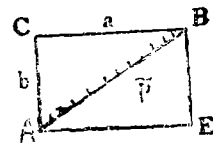


图 6 边界单元节点示意图

把格点落在 $\tilde{\Gamma}$ 内或 $\tilde{\Gamma}$ 上的 $D_{\alpha\beta}$ 的全体所组成的区域连同其周界一起记为 \tilde{G} 。用 \tilde{G} 近似地代替 G 。

(3)有限元方程: 在每个单元上做双线性插值, 再由虚功原理, 经过计算可以得到模型(I')和(II)在节点 (i, j) 处的有限元方程为:

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{k=0}^N \sum_{l=0}^M D_{ij}^{(kl)} \frac{d\omega_{kl}}{dt} + \sum_{k=0}^N \sum_{l=0}^M A_{ij}^{(kl)} \omega_{kl}(t) \\ & = E_{ij} + G_{ij} + B_{ij} \\ & \omega_{kl}(0) = h_0(x_{kl}, y_{kl}) - v \end{aligned} \right. \quad (2-19)$$

和

$$\left\{ \begin{aligned} & \sum_{k=0}^N \sum_{l=0}^M \bar{D}_{ij}^{(kl)} \frac{dc_{kl}}{dt} + \sum_{k=0}^N \sum_{l=0}^M (A_{1ij}^{(kl)} + A_{2ij}^{(kl)} + A_{3ij}^{(kl)}) c_{kl}(t) \\ & = \bar{E}_{ij} + \bar{G}_{ij} \\ & c_{kl}(0) = C_0(x_{kl}, y_{kl}) \end{aligned} \right. \quad (2-20)$$

$(i = 1, 2, \dots, N; j = 1, 2, \dots, M)$

(2-19)和(2-20)式中所含未知数的个数并不一定为 $M \times N$, 其个数为内节点、第二边界节点、第二正则外节点个数之和。为书写方便仍写成上式。

4、模型(I')和(II)的求解: 模型(I')可利用(2-15)的积分公式算出有限元方程(2-19)的系数, 然后可用隐格式求(2-19)式的近似解。模型(II)的求解过程为:

(1)函数 $\tilde{\omega}(x, y, t)$ 的磨光: 如前所述可以求出 t 时刻 ω 在 (i, j) 点处的近似值 $\omega_{ij}(t)$ 。利用节点基函数 Φ_{ij} 可于区域 \tilde{G} 上, 在节点 (i, j) 取给定的函数值 $\omega_{ij}(t)$ 的分片双线性函数:

$$\tilde{\omega}(x, y, t) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M \Phi_{ij}(x, y) \omega_{ij}(t) \quad (2-21)$$

它在每个单元上的内部光滑, 在单元边界上连续, 但其一阶偏导数在单元边界上发生间断。

为以后需要, 这里引进 K 次B样条函数

$$\Omega_k(x) = \sum_{j=0}^{k+1} (-1)^j \binom{k+1}{j} \left(x + \frac{k+1}{2} - j\right)_+^k / K!$$

$$\text{其中 } x_+^k = \begin{cases} x^k, & \text{当 } x > 0 \\ 0, & \text{当 } x < 0 \end{cases}$$

为 K 次半截单项式。

等距剖分情况下 $\tilde{\omega}$ 的一次磨光函数可写成:

$$\tilde{\omega}_1(x, y, t) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M \omega_{ij}(t) \Omega_2\left(\frac{x-x_i}{L}\right) \Omega_2\left(\frac{y-y_j}{H}\right) \quad (2-22)$$

为了提高 \tilde{G} 周界上的拟合精度,可采用周界外延法,即先固定 $j(0 < j < M)$,若 (j^*, j^*) 为 \tilde{G} 周界上的节点,则外推定义:

$$\omega_{i^*-1, j^*} = 2\omega_{i^*, j^*} - \omega_{i^*+1, j^*}$$

其它情况可类似处理。延拓以后,把(2-22)中求和上下限改成:

$$\omega_1(x, y, t) = \sum_{i=-1}^{N+1} \sum_{j=-1}^{M+1} \omega_{ij}(t) \Omega_2\left(\frac{x-x_i}{L}\right) \Omega_2\left(\frac{y-y_j}{H}\right) \quad (2-23)$$

按(2-23)式求出的 $\tilde{\omega}_1$ 经过 \tilde{G} 周界上的型值 $\omega_{ij}(t)$ 。

为了提高磨光函数逼近原型值的精度,可采用盈亏修改法,即先按(2-22)式求得 $\hat{\omega}(x_i, y_j, t) = \tilde{\omega}_{ij}(t)$ 再定义

$$\hat{\omega}_{ij}(t) = a\omega_{ij}(t) - \tilde{\omega}_{ij}(t)$$

然后用 $\hat{\omega}_{ij}(t)$ 代替(2-23)式中的 $\omega_{ij}(t)$ 按同一公式再磨光。不难证明,经过这样处理后, $\tilde{\omega}_1$ 的精度可由关于 L^2 和 H^2 价提高到 L^4 和 H^4 价。

不等距剖分的情况下,首先由(2-21)式求出 t 时刻在格点 (α, β) ($\alpha = 1, 2, \dots, N; \beta = 1, 2, \dots, M$)处的函数值

$$\tilde{\omega}_{\alpha\beta}(t) = \tilde{\omega}(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\beta, t) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^M \omega_{ij}(t) \Phi_{ij}(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\beta) \quad (2-24)$$

然后以 $(\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\beta, \tilde{\omega}_{\alpha\beta}(t))$ 为型值点进行二次磨光,经周界外延后,其磨光函数为:

$$\bar{\omega}_1(x, y, t) = \sum_{\alpha=0}^{N+1} \sum_{\beta=0}^{M+1} \tilde{\omega}_{\alpha\beta}(t) \Omega_2\left(\frac{x-\bar{x}_\alpha}{L\alpha}\right) \Omega_2\left(\frac{y-\bar{y}_\beta}{H\beta}\right) \quad (2-25)$$

(2)速度分量的表达式:因为 Ω_2 为 Ω_1 的一次磨光函数,即:

$$\Omega_2\left(\frac{x-x_i}{L}\right) = \frac{1}{L} \int_{x-\frac{L}{2}}^{x+\frac{L}{2}} \Omega_1\left(\frac{x-x_i}{L}\right) dt$$

故有

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\Omega_2\left(\frac{x-x_i}{L}\right) \right] = \frac{1}{L} \left[\Omega_1\left(\frac{x-x_i}{L} + \frac{1}{2}\right) - \Omega_1\left(\frac{x-x_i}{L} - \frac{1}{2}\right) \right]$$

于是

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial x} &= \sum_{i=-1}^{N+1} \sum_{j=-1}^{M+1} \omega_{ij}(t) \frac{1}{L} \Omega_2\left(\frac{y-y_j}{H}\right) \\ &\quad \left[\Omega_1\left(\frac{x-x_i}{L} + \frac{1}{2}\right) - \Omega_1\left(\frac{x-x_i}{L} - \frac{1}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (2-26)$$

同理

$$\frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial y} = \sum_{i=-1}^{N+1} \sum_{j=-1}^{M+1} \omega_{ij}(t) \frac{1}{H} \Omega_2 \left(\frac{x-x_i}{L} \right) \left[\Omega_1 \left(\frac{y-y_j}{H} + \frac{1}{2} \right) - \Omega_1 \left(\frac{y-y_j}{H} - \frac{1}{2} \right) \right]$$

又由析奇函数 u 的表达式可得

$$\frac{\partial u_p}{\partial r_p} = \frac{Q_p}{2\pi T \left(1 - \frac{\rho_{cp}}{R_{bp}}\right)^2 \left(1 + \frac{\rho_{cp}}{R_{bp}}\right)} \left[\frac{1}{r_p} - \frac{1}{R_{bp}} \sum_{l=1}^3 \left(1 - \frac{r_p}{R_{bp}}\right)^{l-1} + \frac{3}{R_{bp}} \left(1 - \frac{r_p}{R_{bp}}\right)^2 \right] \quad (2-28)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \sum_{p=1}^P \frac{\partial u_p}{\partial r_p} \cdot \frac{\partial r_p}{\partial x} = \sum_{p=1}^P \frac{(x-x_p)}{r_p} \cdot \frac{\partial u_p}{\partial r_p} \quad (2-29)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \sum_{p=1}^P \frac{\partial u_p}{\partial r_p} \cdot \frac{\partial r_p}{\partial y} = \sum_{p=1}^P \frac{(y-y_p)}{r_p} \cdot \frac{\partial u_p}{\partial r_p} \quad (2-30)$$

其中 $r_p = \sqrt{(x-x_p)^2 + (y-y_p)^2}$ $\rho_{cp} \leq r_p < R_{bp}$

因此
$$u_x = -\frac{K}{n} \left[\frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial x} \right] \quad (2-31)$$

$$u_y = -\frac{K}{n} \left[\frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial y} \right] \quad (2-32)$$

其中 $\frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial x}, \frac{\partial \tilde{\omega}_1}{\partial y}, \frac{\partial u}{\partial r_p}, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}$

分别由(2-26)到(2-30)式所决定。对不等距剖分,也有类似的公式。

(3) 模型(II)的有限元方程的求解:是将连续的速度分量 u_x, u_y 代入(II)中,利用(2-15)中的积分公式,可以算出有限元方程(2-20)的系数,然后可用隐格式求(2-20)的近似解。

(三)有限差分法(特征法)

1、概述:在差分法中,越流补给强度 ϵ 的计算公式为

$$\epsilon = \frac{K_z}{m_1} (H_s - h)$$

式中 K_z 为垂向渗透系数; m 为复盖层厚度; H_s 为补给层的水头。

导出承压水头偏微分方程的隐式差分格式为(如图7)

$$\begin{aligned} & T(i - \frac{1}{2}, j) \left[\frac{h_{i-\frac{1}{2}, j}^{(1)} - h_{ij}^{(1)}}{(\Delta x)^2} \right] + T(i + \frac{1}{2}, j) \left[\frac{h_{i+\frac{1}{2}, j}^{(1)} - h_{ij}^{(1)}}{(\Delta x)^2} \right] \\ & + T(i, j - \frac{1}{2}) \left[\frac{h_{i, j-\frac{1}{2}}^{(1)} - h_{ij}^{(1)}}{(\Delta y)^2} \right] + T(i, j + \frac{1}{2}) \left[\frac{h_{i, j+\frac{1}{2}}^{(1)} - h_{ij}^{(1)}}{(\Delta y)^2} \right] \\ & + \frac{K_z}{m_1} [H_s(i, j) - h_{ij}^{(1)}] - W_{oi, j} = \mu_{ij}^* \left(\frac{h_{i, j}^{(1)} - h_{i, j}^{(1-1)}}{\Delta t} \right) \end{aligned} \quad (2-33)$$

$$i = 1, 2, \dots, Nx; j = 1, 2, \dots, Ny; L = 1, 2, \dots,$$

式中 i, j, l 分别是 x, y 和 t 的号码和层次； $\Delta x, \Delta y$ 和 Δt 分别是空间和时间步长； W_{qij} 是节点 (i, j) 对单位面积、单位时间的抽水或注水量，即

$w_{qij} = q_{ij} / \Delta x \Delta y$ 。其中 q_{ij} 为节点 (i, j) 抽水或注水量， (i, j) 表示网格点 (x_i, y_j) 。

$$h_{ij}^{(L)} = h(x_i, y_j, t_e)$$

解差分方程 (2-33) 时，在 x 方向上采用交替隐格式，经整理左侧为未知项，右侧为已知项，则

$$\begin{aligned} & \frac{T(i, j - \frac{1}{2})}{\Delta y^2} h_{i, j-1}^{(1)} - \frac{1}{\Delta y^2} [T(i, j - \frac{1}{2}) + T(i, j + \frac{1}{2}) \\ & + (\frac{K_j}{m_j} + \frac{\mu_{*j}^*}{\Delta t}) \Delta y^2] h_{i, j}^{(1)} + \frac{T(i, j + \frac{1}{2})}{\Delta y^2} h_{i, j+1}^{(1)} \quad (2-34) \\ & = -\frac{T(i - \frac{1}{2}, j)}{\Delta x^2} h_{i-1, j}^{(1-1)} + \frac{1}{\Delta x^2} [T(i - \frac{1}{2}, j) + T(i + \frac{1}{2}, j) \\ & - \frac{\mu_{*j}^*}{\Delta t} \Delta x^2] h_{i, j}^{(1-1)} - \frac{K_j}{m_j} Hs(i, j) + W_{qij, j} \end{aligned}$$

方程组的个数为网格行的个数 N_y ，用 (ADI) 交替隐格式差分，并以迭代法求出方程的解。即 L 时刻的水头值。对于按行计算，同样亦可得出 y 方向上的类似形式。(如图 7)

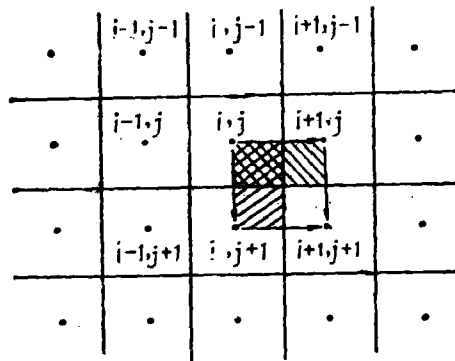


图 7 隐式差分格式图

在节点 (i, j) 的 x 、 y 方向的地下水平均孔隙速度 v 的差分格式为

$$v_x(i, j) = -\frac{K(i, j)}{n_{i, j}} \left(\frac{h_{i+1, j}^{(1)} - h_{i-1, j}^{(1)}}{2 \Delta x} \right) \quad (2-35)$$

$$v_y(i, j) = -\frac{K(i, j)}{n_{i, j}} \left(\frac{h_{i, j+1}^{(1)} - h_{i, j-1}^{(1)}}{2 \Delta y} \right) \quad (2-36)$$

在节点 (i, j) 和节点 $(i+1, j)$ 之间边界上的 x 、 y 方向速度为

$$v_{x, s}(i, j) = -\frac{K(i-\frac{1}{2}, j)}{n(i-\frac{1}{2}, j)} \left(\frac{h_{i+1, j}^{(1)} - h_{i, j}^{(1)}}{\Delta x} \right) \quad (2-37)$$

$$v_{y, s}(i, j) = -\frac{K(i, j+\frac{1}{2})}{n(i, j+\frac{1}{2})} \left(\frac{h_{i, j+1}^{(1)} - h_{i, j}^{(1)}}{\Delta y} \right) \quad (2-38)$$

其中边界上的渗透系数 K 、孔隙度 n 是根据两个邻近节点的 K 、 n 的调和均值计算出来的。

地下水水动力—弥散系数的计算，是假定地下水流所确定的分子和离子扩散的浓度，与水动力弥散相比是微不足道的。其计算公式为：

$$D_{ij} = \alpha_{ij, x, y} \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (2-39)$$

式中 $\alpha_{ij, x, y}$ 为含水层的弥散度； v_x 、 v_y 为分别在 x 、 y 方向上的速度分量； $|v|$ 为速度模。

含水层的弥散系数与其弥散度的关系为

$$D_L = \alpha_L |v| \quad D_T = \alpha_T |v| \quad (2-40)$$

在各向同性的含水层中，二维流的弥散系数分量可写成

$$\left\{ \begin{array}{l} D_{xx} = D_L \frac{(v_x)^2}{|v|^2} + D_T \frac{(v_y)^2}{|v|^2} \\ D_{yy} = D_T \frac{(v_x)^2}{|v|^2} + D_L \frac{(v_y)^2}{|v|^2} \\ D_{xy} = D_{yx} = (D_L - D_T) \frac{v_x v_y}{|v|^2} \end{array} \right. \quad (2-41)$$

对于各向异性含水层， α_L 与 α_T 不为常数。

2、特征法 假定地下水流是不可压缩的，即 $\text{div } v = 0$ ，则水动力—弥散方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} = & \frac{1}{n \cdot m} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[n \cdot m \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] \right. \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial y} \left[n \cdot m \left(D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) \right] \right\} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} + F \end{aligned} \quad (2-42)$$

$$\text{式中: } F = \frac{(\varepsilon c') - C_0 W_0 + \mu \frac{\partial h}{\partial t} \dot{C} \mu}{n \cdot m}$$

由于特征法得到的计算方法不能直接求解方程(2-42), 而是要求解一个与此方程等价的方程组,

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc}{dt} &= \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial x} \cdot \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial t} \end{aligned} \right. \quad (2-43)$$

$$\left\{ \begin{aligned} v_x &= \frac{\partial x}{\partial t} \end{aligned} \right. \quad (2-44)$$

$$\left\{ \begin{aligned} v_y &= \frac{\partial y}{\partial t} \end{aligned} \right. \quad (2-45)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{dc}{dt} &= \frac{1}{m \cdot n} \left\{ \frac{\partial}{\partial x} \left[m \cdot n (D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial c}{\partial y}) \right] \right. \\ &\left. + \frac{\partial}{\partial y} \left[m \cdot n (D_{yx} \frac{\partial c}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y}) \right] \right\} + F \end{aligned} \right. \quad (2-46)$$

由于每个时段每个特征点移动的距离、时间增量与点所在位置上的速度成正比, 故点的现在状态是用如下方程的差分形式计算:

$$x_{p,t} = x_{p,t-1} + \delta_{x,p} = x_{p,t-1} + \Delta t v_x [x_{(p,t)}, y_{(p,t)}] \quad (2-47)$$

$$y_{p,t} = y_{p,t-1} + \delta_{y,p} = y_{p,t-1} + \Delta t v_y [x_{(p,t)}, y_{(p,t)}] \quad (2-48)$$

其中, P为特征点称号; $\delta_{x,p}$ 和 $\delta_{y,p}$ 分别是特征点在x、y方向上各自移动的距离。任一特征点P位置上的x、y速度用 $v [x_{(p,t)}, y_{(p,t)}]$ 表示, 它是通过遍及半个单元区域的双线性插值, 使用在邻近节点和单元边界上计算的x、y速度而求的。

3、有限差分逼近: 含水层中浓度总的变化可由(2-44)、(2-45)和(2-46)式进行计算, 其中(2-44)和(2-45)方程是求由于对流运移产生的浓度变化, 而水动力弥散和流体源引起的浓度变化则由方程(2-46)表示。它的隐式差分方程为

$$\begin{aligned} \Delta C_{i,j}^{(1)} &= \frac{\Delta t}{m \cdot n} \left\{ \left[m D_{xx} (i + \frac{1}{2}, j) \left(\frac{C_{i+j,j}^{(1*)} - C_{i,j}^{(1*)}}{\Delta x^2} \right) - m D_{xx} (i - \frac{1}{2}, j) \right. \right. \\ &\left. \left(\frac{C_{i,j}^{(1*)} - C_{i-1,j}^{(1*)}}{(\Delta x)^2} \right) \right] + \left[m D_{xy} (i + \frac{1}{2}, j) \left(\frac{C_{i,j+1}^{(1*)} + C_{i+1,j+1}^{(1*)} - C_{i,j-1}^{(1*)} - C_{i+1,j-1}^{(1*)}}{4 \Delta x \Delta y} \right) \right. \\ &- m D_{xy} (i - \frac{1}{2}, j) \left(\frac{C_{i-1,j+1}^{(1*)} + C_{i,j+1}^{(1*)} - C_{i-1,j-1}^{(1*)} - C_{i,j-1}^{(1*)}}{4 \Delta x \Delta y} \right) \right] + \left[m D_{yy} (i, j + \frac{1}{2}) \right. \\ &\left. \left(\frac{C_{i,j+1}^{(1*)} - C_{i,j}^{(1*)}}{\Delta y^2} \right) - m D_{yy} (i, j - \frac{1}{2}) \left(\frac{C_{i,j}^{(1*)} - C_{i,j-1}^{(1*)}}{(\Delta y)^2} \right) \right] + \left[m D_{yx} (i, j + \frac{1}{2}) \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{C_{i+1,j}^{(k)} + C_{i+1,j+1}^{(k)} - C_{i-1,j}^{(k)} - C_{i-1,j+1}^{(k)}}{4 \Delta x \Delta y} \right) - m D_{yx} (i, j - \frac{1}{2}) \\
& \left(\frac{C_{i+1,j-1}^{(k)} + C_{i+1,j}^{(k)} - C_{i-1,j-1}^{(k)} - C_{i-1,j}^{(k)}}{4 \Delta x \Delta y} \right) \left. \right\} + \frac{\Delta t}{m \cdot n} \left[\varepsilon_{i,j}^{(1)} c' - W_{Q_{ij}} C_{ij}^{(1-1)} \right. \\
& \left. + C_{ij}^{(1-1)} \mu^*_{ij} \left(\frac{h_{ij}^{(1)} - h_{ij}^{(1-1)}}{\Delta t} \right) \right] \quad (2-9)
\end{aligned}$$

则位于 R_{ij} 内的特征点P在 t_{i+1} 时刻的浓度应为

$$C_p^{(i+1)} = \tilde{C}_p^{(1)} + \Delta \tilde{C}_{ij}^{(1)}$$

网格点 (i, j) 在 t_{L+1} 时刻的浓度为

$$C_{i,j}^{(i+1)} = C_{i,j}^{(i*)} + \Delta \tilde{C}_{ij}^{(1)}$$

对所有网格都这样做一遍后,就完成了—个时间步长的计算。如此反复计算直到满足精度要求为止。显然该方法是可以消除数值弥散的。

4、物质平衡:为检验模型数值解准确性的精度,引进了物质平衡的检验公式:

流入量+流出量(总通量)=物质总和

物质总累计变化量和物质总通量之间的差称为物质剩余,即

$$R = M_t - \Delta M_s \quad (2-50)$$

式中 R 为物质剩余; M_t 为物质总通量; ΔM_s 为含水层中赋存的物质变化量。

显然, R 值较小时一般数值解较精确,反之,数值解误差大或存在重大错误。因此,可以把物质剩余作为模型数值解精度的一个量度。

ΔM_s 和 M_t 分别用如下公式计算:

$$\Delta M_s = \sum_{i,j} m_{ij} n \Delta x \Delta y (C_{ij}^{(1)} - C_{ij}^{(0)}) \quad (2-51)$$

$$M_t = \sum_{i,j} \sum_1 W_{ij}^{(1)} \Delta x \Delta y \Delta t_i C_{ij}^{(1)} \quad (2-52)$$

式中 $C_{ij}^{(0)}$ 为节点 (i, j) 的初始浓度; $C_{ij}^{(L)}$ 为 L 时刻节点 (i, j) 的计算浓度;

$W_{ij}^{(L)}$ 为 L 时刻的抽水或注水量; $C'_{ij}^{(L)}$ 为 L 时刻的浓度值。

把物质剩余同总通量与贮存的物质变化量之和的平均值之比的百分比定义为第一种判别物质平衡的量度:

$$E_1 = \frac{(M_f - \Delta M_s)}{\left(\frac{M_f + \Delta M_s}{2}\right)} \times 100/100 \quad (2-53)$$

但是，这个量度只是在总通量和释放量的变化相对较大时效果才好。如果总通量与含水层中的初始物质总量相比是很小的，即使模型本身是正确的，上式也要呈现出较大的误差。因此，计算中把物质剩余与含水层初始物质质量 M_0 之百分比，定义为考察物质平衡误差的第二种方法：

$$E_2 = \frac{M_f - \Delta M_s}{M_0} \times 100/100 \quad (2-54)$$

显然，只是当总通量相对少的时候上式效果才好。如果 M_0 为零或与 ΔM_s 相比非常小，则 E_2 是无意义的。因此，又定义下式作为考察物质平衡误差的第三种方法。该方法当 M_f 很小时， E_3 接近 E_2 ，当 M_0 很小时， E_3 又与 E_1 类似。

$$E_3 = \frac{M_f - \Delta M_s}{M_0 - M_f} \times 100/100 \quad (2-55)$$

比较水量平衡亦引进如下检验公式：

流量平衡剩余 = 累计纯抽水量 - 累计越流量 - 释放量；

总通量 = 计算区累计纯抽水量 + 越流累计量；

$$\text{误差百分比} = \frac{\text{流量平衡剩余} \times 100}{0.5 \times \text{总通量}} \quad (2-56)$$

如果计算区的平衡剩余量等于总通量时，则定义下式作为水量平衡误差百分比：

$$\text{误差百分比} = \frac{(\text{流进越流量} - \text{流出越流量}) \times 100}{\text{流进越流量}} \quad (2-57)$$

(四) 参数识别计算方法简述

对于水流模型 (I) 和水质模型 (II)，通过有限元方法可离散为

$$\sum_{i=1}^{NP} (D_{ij} + \frac{A_{ij}}{2} \Delta te) h_i^{(t)} = \sum_{i=1}^{NP} (D_{ij} - \frac{A_{ij}}{2} \Delta te) h_i^{(t-1)} + \frac{K_j^{(t)} + K_j^{(t-1)}}{2} \Delta te \quad (2-58)$$

$$\text{和 } \sum_{i=1}^{NP} (\tilde{D}_{ij} + \frac{\tilde{A}_{ij}}{2} \Delta te) C_i^{(t)} = \sum_{i=1}^{NP} (\tilde{D}_{ij} - \frac{\tilde{A}_{ij}}{2} \Delta te) C_i^{(t-1)} + \frac{K_j^{(t)} + K_j^{(t-1)}}{2} \Delta te$$

$$j = 1, 2, \dots, m$$

$$\left. \begin{aligned} D_{xx} &= \alpha_L \frac{v_x v_y}{|v|} + \alpha_T \frac{v_{yy}}{|v|}, \\ D_{xy} &= D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|}, \\ D_{yy} &= \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|}, \end{aligned} \right\} \quad (2-60)$$

将(2-60)式代入(2-59)式,可知 \tilde{A}_{ij} 为 α_L 和 α_T 的线性函数, D_{ij} 为 μ^* 的线性函数, A_U 为 T 的线性函数。

现作 k 次抽水试验和弥散试验,测得每个节点上的水头 h 和污染质浓度 C 的一组数据:

$$\tilde{h}_i^{(l)}, \tilde{C}_i^{(l)} \quad i = 1, 2, \dots, n_p; \quad l = 1, 2, \dots, k。$$

构造目标函数为

$$E(\alpha_L, \alpha_T, T, \mu^*) = \sum_{l=1}^k \sum_{j=1}^{np} p_{ij} \left[(h_i^{(l)} - \tilde{h}_i^{(l)})^2 + (C_i^{(l)} - \tilde{C}_i^{(l)})^2 \right] \quad (2-61)$$

现求 α_L^* , α_T^* , T^* , μ^* 使得

$$E(\alpha_L^*, \alpha_T^*, T^*, \mu^*) = \min E(\alpha_L, \alpha_T, T, \mu^*) \quad (\alpha_L, \alpha_T, T, \mu^*) \in \Omega$$

则 α_L^* , α_T^* , T^* , μ^* 便是所求的各参数值。

式中: (Ω) 是对 α_L , α_T , T , μ^* 的变化范围限制; p_{ij} 为权因子。

$$\alpha_L = (\alpha_{L1}, \alpha_{L2}, \dots, \alpha_{Lm})', \quad \alpha_T = (\alpha_{T1}, \alpha_{T2}, \dots, \alpha_{Tm})',$$

$$\mu^* = (\mu^*_1, \mu^*_2, \dots, \mu^*_m)', \quad T = (T_1, T_2, \dots, T_m)',$$

$$\Omega: \{ a_i < \alpha_{Li} < b_i, \quad a_{Ti} < \alpha_{Ti} < b_{Ti},$$

$$l_j < T_i < d_i, \quad r_i < \mu^*_i < R_i \}$$

$$i = 1, 2, \dots, m$$

其中 a_i , b_i , a_{Ti} , b_{Ti} , L_i , d_i , r_i , R_i 由抽水试验、弥散试验及水文地质条件分析得到。采用间接法求出目标函数 E 达到极小值的点 α_L^* , α_T^* , T^* , μ^* 。具体步骤为:

先在 Ω 内取一组初值,然后解方程(2-59)和(2-60),求得计算值 $h_i^{(l)}$ 和 $C_i^{(l)}$

并代入(2-61)式,算出 E 值,再根据算得的 E 值逐次加以修正,使 E 值不断减小。如此下去,求得 E 在约束条件下达到最小值的点 α_L^* , α_T^* , T^* , μ^* 。在逐次修正参数的方法中,采用带约束的最优化方法。通过计算可知,间接法求参数是有效的。

参 考 文 献

- [1] 王秉忱、杨天行、侯印伟、许人冰、尹宝瑞, 1981, 地下水水质模拟试验研究的基本理论与计算方法。长春地质学院学报, 第3期。
- [2] R·威利斯, 地下水水质管理的规划模型(中译文)。水文地质工程地质译丛, 1982, 第3期。
- [3] 杨天行、王秉忱、侯印伟、王忠仁、尹宝瑞、许人冰, 1982, 函数磨光法在污染水文地质学中的应用。长春地质学院学报, 第4期。
- [4] 孙讷正, 1982, 地下水水质的数学模拟,(讲座)。《水文地质工程地质》, 第1期—6期。

- [5] J. Fried, 1975, 《Groundwater Pollution》. Elsevier Scientific.
- [6] J. 贝尔, 多孔介质流体动力学。中国建筑工业出版社, 1982, (中译本)。
- [7] 林学钰, 1983, 美国地下水资源管理概况。水文地质工程地质, 第2期。
- [8] L. F. Konikow, and J. D. Bredehoeft, 1978, 《Computer Model of Two-dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water》
- [9] 杨金忠, 1983, 溶质运移问题的有限元解法及其在地下水水质改良中的应用。水文地质工程地质, 第1期。
- [10] 李生彩、杨天行、朱政嘉、许人冰、侯印伟, 1984, 地下水水质模型的广义差分法的计算机求解。长春地质学院学报, 第1期。

**SIMULATION OF GROUNDWATER QUALITY AND PREDICTION
OF ITS POLLUTION TREND IN JININ CITY, SHANDONG (II)**

Xu Renbin

(Shandong Bureau of Geology and Mineral Resources)

Abstract

In this paper, the mathematical methods used in the research on the simulation of groundwater quality and prediction of its pollution trend in Jinin city, Shandong Province were discussed. A mathematical model of groundwater quality was established based on the hydrogeological and environmental geological conditions in Jinin City, and the finite element and finite difference methods were employed for its solution; the "function smoothing" technique was adopted to treat the dispersions of values in solving functions in the model. In addition, formulae to check the mass balance were used in the finite difference method that ensured the confidence and reliability of the model, the parameters and results obtained.