目　　录

第一章　水动力弥散的基本概念 …… (1)
§1-1　介质中两种流体流动的类型 …… (1)
§1-2　示踪剂 …… (2)
§1-3　水动力弥散现象 …… (2)
§1-4　水动力弥散机理 …… (4)
§1-5　研究水动力弥散的意义 …… (7)
第二章　水动力弥散方程 …… (8)
§2-1　有关参数 …… (8)
§2-1-1　流体的密度 ρ …… (8)
§2-1-2　多组分流体速度 $\vec{u}$ …… (8)
§2-1-3　流体的通量 J …… (9)
§2-2　溶液中 α 组分的质量守恒方程 …… (9)
§2-3　α 组分的对流-扩散方程 …… (11)
§2-4　水动力弥散方程 …… (12)
§2-5　源汇项 …… (14)
§2-5-1　放射性衰变与化学、生物化学反应 …… (14)
§2-5-2　吸附与解吸 …… (15)
§2-5-3　抽水与注水 …… (16)
§2-6　初始条件与边界条件 …… (17)
§2-6-1　初始条件 …… (17)
§2-6-2　边界条件 …… (17)
第三章　水动力弥散系数 …… (20)
§3-1　理论模型研究 …… (20)
§3-2　实验室研究 …… (22)
§3-3　水动力弥散的尺度效应 …… (26)
§3-3-1　尺度效应 …… (26)
§3-3-2　尺度效应与典型单元体 …… (27)
§3-3-3　尺度效应的分形特征 …… (28)
第四章　水动力弥散方程的解析解法 …… (32)
§4-1　基本解 …… (32)
§4-1-1　三维空间瞬时点源 …… (32)
§4-1-2　空间瞬时无限线源与平面瞬时点源 …… (36)
§4-1-3　空间瞬时无限面源、平面瞬时无限线源与一维瞬时点源 …… (38)
§4-1-4　有限空间（平面）问题 …… (38)

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

§4-2 一维水动力弥散问题 …… (39)
§4-2-1 无限长多孔介质柱体，示踪剂瞬时（脉冲式）注入 …… (39)
§4-2-2 无限长多孔介质柱体，初始示踪剂呈阶梯函数分布 …… (40)
§4-2-3 半无限长多孔介质柱体，一端为定浓度边界 …… (42)
§4-3 一维稳定流动二维水动力弥散问题 …… (46)
§4-3-1 瞬时注入示踪剂——平面瞬时点源 …… (46)
§4-3-2 连续注入示踪剂——平面连续点源 …… (48)
§4-3-3 注水拟稳定条件下示踪剂的径向弥散 …… (49)
§4-4 一维稳定流动三维水动力弥散问题 …… (50)
§4-4-1 空间瞬时点源 …… (50)
§4-4-2 空间稳定连续点源 …… (52)
第五章 水动力弥散系数的计算方法 …… (55)
§5-1 一维水动力弥散 …… (55)
§5-1-1 利用正态分布函数性质求参 …… (55)
§5-1-2 浓度曲线线性化求参 …… (58)
§5-2 二维水动力弥散 …… (59)
§5-2-1 瞬时投放示踪剂 …… (59)
§5-2-2 连续投放示踪剂 …… (70)
第六章 水动力弥散方程的数值解法 …… (74)
§6-1 有限差分法 …… (74)
§6-1-1 导数的有限差分近似 …… (74)
§6-1-2 一维水动力弥散的差分解法 …… (75)
§6-1-3 二维水动力弥散的差分解法 …… (77)
§6-1-4 求解差分方程的计算机程序举例 …… (80)
§6-2 有限单元法（迎辽金有限单元法） …… (86)
§6-2-1 迎辽金法 …… (86)
§6-2-2 有限单元剖分与基函数 …… (88)
§6-2-3 迎辽金有限单元法 …… (91)
§6-2-4 二维水动力弥散的迎辽金法计算机程序 …… (105)
§6-3 过量与数值弥散 …… (111)
§6-3-1 过量现象 …… (111)
§6-3-2 数值弥散 …… (111)
§6-4 对流项占主导地位时的几种数值方法 …… (114)
§6-4-1 上游加权法 …… (114)
§6-4-2 特征值方法 …… (116)
§6-4-3 动坐标系方法与网格变形方法 …… (119)
§6-4-4 随机步行法 …… (121)
§6-4-5 引入人工扩散量方法 …… (125)
§6-4-6 小结 …… (127)
第七章 地下水水质模型及其应用 …… (129)

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

§7-1 对流-弥散型水质模型 …… (129)
§7-1-1 一般情况 …… (131)
§7-1-2 示踪剂情况 …… (140)
§7-2 纯对流型水质模型 …… (141)
§7-2-1 用水流方程预测溶质运移 …… (141)
§7-2-2 水流方程与水质方程的耦合方法 …… (142)
§7-3 水质模型应用的一般过程 …… (144)
§7-4 广西北海市涠洲岛海水入侵模拟 …… (146)
§7-5 瑞士 Grimsel 核废物处置试验场弥散试验模拟分析 …… (151)
§7-6 水质模型应用的有关问题讨论 …… (161)
§7-6-1 水质模型与水量模型对比 …… (161)
§7-6-2 野外非均匀介质对水质模型的影响 …… (161)
§7-6-3 人为因素对弥散系数的影响 …… (163)
§7-6-4 水动力弥散理论的不足 …… (164)
附录一 水动力弥散室内试验 …… (166)
A. 一维水动力弥散实验 …… (166)
B. 二维水动力弥散实验 …… (168)
附录二 张量的基本概念及渗透系数张量 …… (171)
A. 张量的基本概念 …… (171)
B. 多孔介质的曲折率张量和渗透系数张量 …… (173)
主要参考文献 …… (177)

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第一章　水动力弥散的基本概念

§1-1　介质中两种流体流动的类型

以往《地下水动力学》教材中所讲的流体(水)都是均匀连续的，而实际中往往不是如此。例如，穹隆构造中的油(气)藏，存在着水油(气)共生的多相流体(图 1-1a)。又如滨海含水层中海水入侵地下淡水的过程，使咸淡水达到一个动态平衡(图 1-1b)。但稍加注意就不难发现，上述两种类型却有很大不同：前者水油(气)之间存在着明显的突变界面，水油(气)互不相溶；后者海水与淡水间却不存在突变界面，而是形成了一个由咸水到淡水渐变的过渡带。



图 1-1　多种流体体系示意图

(a)穹隆构造中油气藏；(b)滨海含水层中地下水

通常将多孔介质中两种流体的流动类型分为两类：不混溶流体的驱替和混溶流体的驱替。

不混溶流体的驱替，是指两种(或两种以上)不可混溶的流体，如水与油、气与水，在多孔介质中的流动过程。如前所述，多孔介质中油与水之间所存在的突变界面，通常不是平直的，而是弯液面(图 1-2)。弯液面向哪边弯取决于多孔介质的亲油性(或亲水性)。突变界面两侧的压力是不相等的，即压力的空间分布不连续。这种压力差称为毛细压力。不相混溶流体的驱替是油田开采中非常重要的课题。石油开采工程中喜欢多孔介质的亲水性，即空隙中油水的弯液面外法线方向指向油。通过钻孔向油藏中注水加压，使水将更多的油驱替出来，从而提高采油率。



图 1-2　油水之间弯液面示意图

可混溶流体的驱替，系指两种(或两种以上)可混溶的流体，如海水与淡水、地表污水与地下水等，在多孔介质中的流动过程。众所周知的海水入侵淡含水层问题，是最有代表性的例子。在自然状态下，陆地上的淡水以一定的水力坡度入海，使海水与淡水之间形成一个比较稳定的过渡带(图 1-1b)。随着人类活动的日益加剧，地下淡水开采量骤增，使咸淡水过渡带向内陆挺进，即海水入侵淡含水层(图 1-3)。又如，垃圾堆放对地下水的污染过程。大气降水渗入垃圾堆

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

中，溶解了某些污染成分而形成污水。污水再流经包气带并伴随着复杂的化学及生物化学过程而进入到地下水中，从而形成了明显的污染晕(图 1-4)。

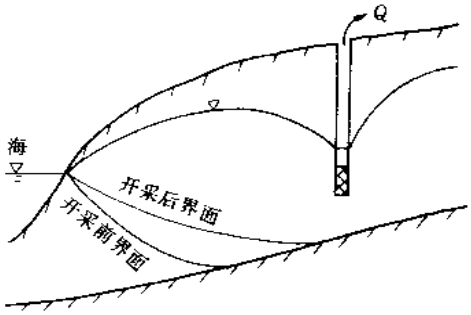


图 1-3　人工开采条件下滨海含水层中咸淡水界面的运动

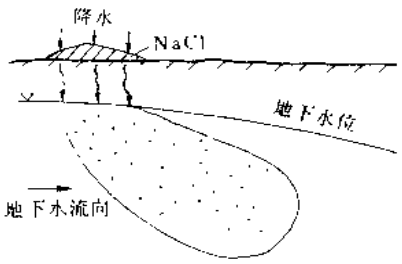


图 1-4　垃圾堆放污染地下水示意图

它们之间不存在明显的分界面，因此不存在界面张力。这种类型的驱替，常称为水动力弥散。

§1-2　示　踪　剂

本书只研究可混溶流体。

通常我们用一种可以溶解在地下水中的标志性物质，通过研究该物质的分布规律，进而研究地下水的弥散过程。我们称这种标志性物质为示踪剂。

如果示踪剂既不与地下水发生化学反应，也不与多孔介质发生化学作用，则叫做惰性示踪剂。

若示踪剂是惰性的，由于其加入而不改变地下水的物理性质，则叫做理想示踪剂。否则是非理想示踪剂。

当示踪剂的浓度较低时，将其加入地下水中后，对地下水的性质影响较小，这对大部分试验目的而言，可以近似地认为是一种理想示踪剂。

天然示踪剂主要包括天然水中的环境同位素，如氘、氚、^{18}O、^{13}C 及 ^{34}S 等，以及进入地下水中的污染物指标，如海水中的 Cl^-，污染源中的有害成分等。环境同位素作为天然示踪剂，“标记”着天然水参与地下水的形成过程，因此研究它的分布规律及分馏机理，有可能直接提供有关地下水形成和运动的信息。通过对参与地下水污染过程的污染物指标的系列测定，可以了解地下水的运动速度及弥散机理等。

人工示踪剂由于针对性和易于被检测等优点，长时间来一直被广泛使用于野外示踪剂试验，测定弥散系数，示踪地下水的流速流向等。目前人工示踪剂的种类很多，主要有：离子化合物，如氯化物、溴化物等；放射性同位素，如 ^{131}I、^{82}Br、^{60}Co 等；有机染料，如萤红素、甲基盐、伊红、苯胺盐等；碳氟化合物，如 CCl_2F_2、CCl_2F 等。

§1-3　水动力弥散现象

现在来研究含有某种溶质成分的地下水在多孔介质饱水带中运动的情况。我们可将这种

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

物质成分视为一种示踪剂，通过它的颜色、电导率、密度等很容易被识别出来。实验表明，当某种流动的液体中注入示踪剂后，示踪剂并不是按实际流速向前推进，即并非按活塞式推进，而是随着液体流动不断地传播（蔓延）开来，在流体区域内不断扩大，并超出单独根据流体的平均流速所预计的区域范围之外。这种传播（蔓延）现象称为多孔介质的水动力弥散。它是一种不稳定的、不可逆的混沌过程。在这一过程中，示踪剂的物质将与流体相混溶。

在多孔介质中，当存在两种或两种以上可溶混的流体时，在流体运动作用下，其间发生过渡带，并使浓度趋于平均化，这种现象称多孔介质水动力弥散现象。形成弥散现象的作用，称弥散作用。

下面用地下水动力学的简单实验来举例说明水动力弥散现象的存在。

实验一：用装满均质砂的圆柱状设备，饱水后来研究其中的稳定流动（图 1-5a）。在初始时刻（$t=0$），用带有颜色的示踪剂（如低浓度的生理盐水）开始驱替砂柱中的饱和水。假设在砂柱末端测出的示踪剂的浓度为 $C(t)$，并用穿透曲线的形式来表示示踪剂浓度 $C(t)$ 与时间 t 之间的关系（图 1-5b）。如果没有水动力弥散作用，浓度曲线应是图 1-5b 中虚线所示的活塞式曲线。而实际上，由于水动力弥散作用，浓度曲线却显示出如图 1-5b 中实线所示的 S 型曲线。

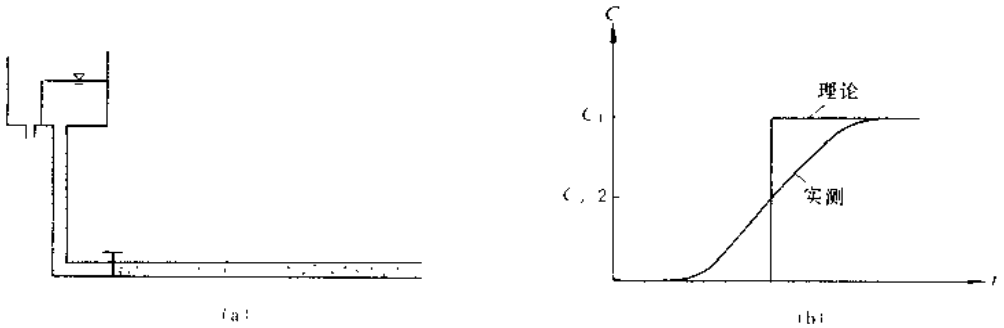


图 1-5　(a) 示踪剂驱替砂柱中饱和水试验；(b) 砂柱末端所测定的穿透曲线

实验二：在一维均匀流动的砂板上游的一口井中，连续地注入某种示踪剂溶剂（图 1-6a）。在流场中不难观测到点源投入的示踪剂沿流动方向不断扩散，形成了逐渐增大的椭圆。示踪剂在投入流体点的周围逐渐散布开来，不断地占有流动区域中越来越大的部分。自中心向外，示踪剂的浓度由大逐渐变小，并不存在突变的界面。通过足够数目的观测点，可以得到椭圆状的等浓度曲线图（图 1-6b）。

实验三：在渗流槽中通过玻璃管连续投入带颜色的示踪剂（图 1-7）。固定渗流槽两端的

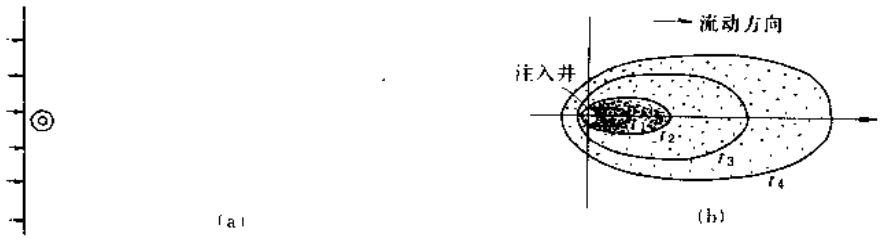


图 1-6　(a) 一维均匀流场的砂板上游点源投入示踪剂；(b) 一维均匀流场中点源投入示踪剂的扩散

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

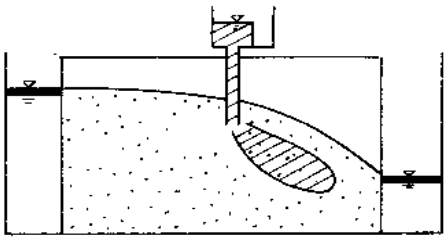


图 1-7　渗流槽中连续投入示踪剂

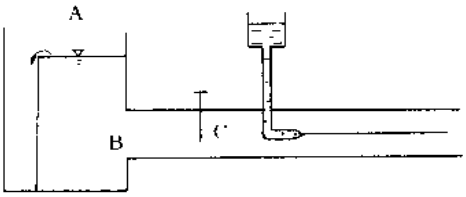


图 1-8　雷诺实验观察弥散现象

水头差，使砂槽中的清水形成稳定的流场。用一玻璃管插入砂槽中的饱水面以下，在该管上端的容器中连续地注入带颜色的示踪剂。我们可以观察到示踪剂在注入口周围逐渐散布开来，不断地占有越来越大的流动空间。而且，示踪剂不仅有沿流动方向上的纵向扩散，同时还存在着垂直于流动方向上的横向扩散。在流速较小的情况下，甚至会出现与流动方向相反的逆向扩散。

实验四：用雷诺实验装置观察弥散现象（图 1-8）。在水箱壁 A 上开一孔口 B，用水平玻璃管 BC 与孔口相连接。玻璃管末端有一截门 C。D 为一盛颜色示踪剂的小容器，有一直径非常小的管连接插入孔口的中央。水箱水位保持恒定。开始实验时，轻微地拉开截门 C，可以观察到示踪剂形成一条清晰的平滑直线，而不与周围的水相混溶。逐渐将截门 C 开大，可以观察到示踪剂溶剂出现波状摆动，进面呈现紊乱状态，直到整个玻璃管中的颜色与清水完全混溶。但这种弥散与前述的 3 个实验中的弥散机理却完全不同。

§1-4　水动力弥散机理

概括起来，水动力弥散由两部分组成：一是分子扩散；二是机械弥散。

分子扩散是由于流体中所含示踪剂的浓度不均匀而引起的一种物质运移现象。分子扩散使得示踪物质自高浓度的地方向低浓度的地方运动，以趋于浓度分布的均一。因此，即使在静止的流体中，分子扩散也会起作用，使示踪剂扩散到越来越大的范围。例如，向盛满水的验盆中滴入一滴蓝墨水，在分子扩散作用下，蓝墨水逐渐扩散开来，若时间足够长，则会形成一盆均匀的蓝颜色的水。

机械弥散主要为纯力学作用的结果。当流体在多孔介质中流动时，固相与液相之间的相互作用非常复杂，包括示踪剂颗粒在固体表面上的吸附、沉淀、溶解、离子交换、化学反应及生物过程等。但对示踪剂的运移来说，最主要的是机械作用。所谓机械作用，就是由于孔隙系统的存在，使得流速在孔隙中的分布无论其大小和方向都不均一。

我们所看到的水动力弥散是一种宏观现象，但用达西水流的平均流速是不能解释上述所有的观测资料，而必须从微观水平上，也就是从孔隙的内部去考察所发生的现象。在多孔介质内，通过任意孔隙横截面上的流速分布，其大小和方向都是不相同的（图 1-9）。一般可分为三种情况：①同一孔隙中，地下水质点流速 $\tilde{u}$ 不等于实际平均流速 $\bar{u}$。由于流体的粘滞性，使得单个孔隙通道轴处的流速大，固体表面处的流速接近于零，类似于笔直的毛细管中的流体速度的抛物线状分布。②不同孔隙中地下水质点的实际流速也是不同的（图 1-10）。单个孔隙中质点的最大流速是随着孔隙的大小而变化的。由于多孔介质微观几何结构的复杂性，实

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

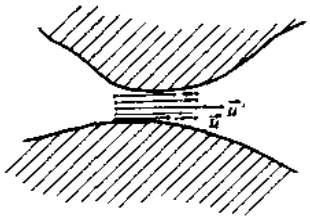


图 1-9　单孔隙中流速的分布

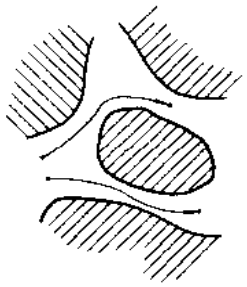


图 1-10　不同孔隙中流速的差异

际上要从微观水平上进行研究是很难做到的。因此只好从微观水平上过渡到比较粗的宏观水平上来描述地下水质点在多孔介质中发生的流动。我们引入了典型单元体* 的概念，可将多孔介质通道中地下水质点的速度（即微观的质点速度）平均化，即

$$\vec{u} = \frac{1}{\Delta V_0}\int_{\Delta V_0} \vec{u}' \mathrm{d}V \tag{1-1}$$

式中：$\vec{u}'$表示质点速度矢量；$\vec{u}$表示平均速度矢量。$\vec{u}$是一个假想的速度矢量（图 1-9），即通常所说的某点处地下水实际流速矢量。它是在典型单元体的空隙体积 ΔV_0 内取质点速度矢量的平均值，作为典型单元体形心处的地下水平均速度矢量。由此可以看到地下水质点的实际流速 $\vec{u}'$ 与平均流速 $\vec{u}$ 是完全不同的两个概念。③受相互连通的孔隙空间的形状影响，即固体骨架的阻挡，孔隙空间的流线相对于平均流动绕流（图 1-11），使地下水质点的实际运动曲折起伏。

上述 3 个现象是引起机械弥散的原因。这些现象使得最初紧密排列的地下水质点散布开来。图 1-11 中的圆点表示流体质点在 t 时刻到 $t+\Delta t$ 时刻的位置，由于孔隙中微观流速的这种不均一性，使得开始时彼此靠近的地下水质点群在地下水流动过程中不是一律按平均流动速度运动，而是不断地被分细，进入更为纤细的通道分支，从而使得地下水质点逐渐扩展开，超出仅按平均流动所预期的扩展范围。我们把流体通过多孔介质流动时，由于微观尺度上流速的不均一所造成的这种地下水质点散布的现象称为机械弥散。

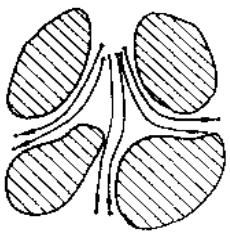


图 1-11　水质点的散布

上述地下水质点的弥散既有纵向的，又有横向的。前者为平行于平均流速方向上的弥散，叫做纵向弥散；后者垂直于平均流速方向上的弥散，叫做横向弥散。

上述 3 个引起水动力弥散的原因中：质点流速的不一样及不同孔隙中地下水质点实际流速的差异产生了纵向机械弥散；而固体骨架的阻挡作用产生了横向机械弥散。横向弥散大概可以波动一个颗粒直径大的范围。地下水质点运动速度的差异是产生水动力弥散的根本原因。

单纯的机械扩散能形成横向弥散吗？我们所见到的文献都给出了肯定的答案。如以色列的贝尔认为：由构成多孔介质微观结构的互相连接的通道形成的复杂系统，使得示踪物质在不断地被分细后进入更为纤细的通道分支；按照每个细孔中的速度分布，沿着这些弯曲的流

* 如果在多孔介质中，以某点为中心取不同大小的体积 $\Delta V^{(i)}$，于是就有相应的不同大小的孔隙率。随着 $\Delta V^{(i)}$ 的增大，开始时，空隙率的数值明显地波动，随后波动变小，直至波动值与平均值相比变得微不足道时，则可以认为空隙率趋于稳定，不再随着体积 $\Delta V^{(i)}$ 的增大而变化。这时，我们将对应的单元称为典型单元体。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

动路径以及在相邻的流动路径之间，局部速度的大小和方向都要发生变化，正是这种变化造成了在流动区域中的任何初始示踪物质逐渐传播开并占据多孔介质越来越多的体积，这种类型的输运现象通常称为机械弥散或对流扩散。

前苏联的达涅尔将这种由机械弥散形成横向弥散提出一个更加形象的“分支-合并横向弥散模型”，试图用单纯的机械弥散来说明横向弥散的形成（图 1-12）。

但对此我们持有不同意见。我们认为：单纯的机械弥散不可能形成横向弥散，它只能造成示踪剂在微观上的波动（图 1-13），即形成在颗粒直径级别上的绕流。

横向弥散必须是机械弥散与分子（横向）扩散相结合的产物。虽然，一般地讲分子扩散速度小于水质点的对流速度，但从机理上说不能忽略不计。因为，正是分子扩散，使得带示踪剂的地下水质点从一条流线跳到另一条流线上（图 1-14），从而该质点不再沿原来的具微小波动的流线前进，而是逐渐偏离原流线蔓延，这就形成了横向弥散。

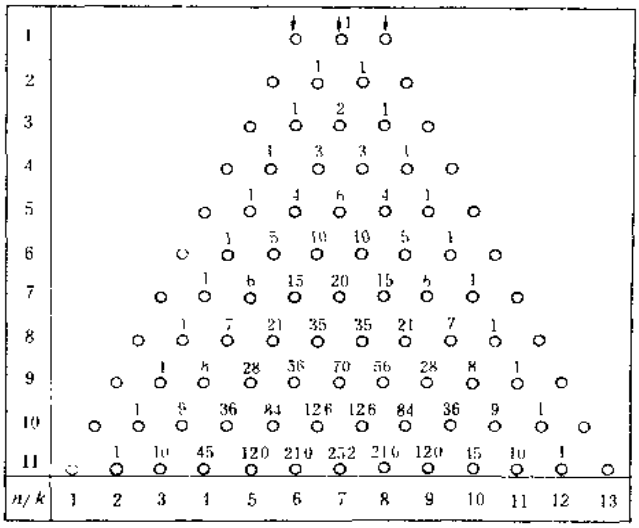


图 1-12　分支-合并模型

当流体在多孔介质中流动时，机械弥散与分子扩散以不可分开的形式同时

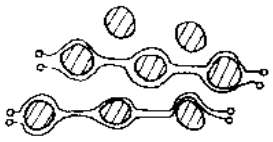


图 1-13　围绕颗粒的绕流现象



图 1-14　横向弥散示意图

起作用，共同形成了水动力弥散。当流速较大时，机械弥散在总的水动力弥散中是主要的。但当地下水流速较小时，分子扩散的作用将变得非常明显。显然，机械弥散与分子扩散共同引起了地下水质点产生纵向和横向弥散。

上述分析是基于均质的多孔介质而言的。实际上，含水层往往是非均质的，包括局部微观的非均质和宏观非均质。示踪剂沿着透水性良好的介质迁移速度更快，使得弥散晕占据更大的范围。

局部微观非均质（宏观上均质），使流体在流动区域内的不同部分渗透流速可能不一样。例如，石油流动所形成的“指进”，系微观非均质中孔隙差异所引起的流速不均一（图 1-15）。微观上的非均质还可能是引起野外实测弥散系数与室内弥散系数相差若干个数量级的主要原因（以后详细讨论）。因此，对微观非均质的研究要引起足够的重视。

水动力弥散可以存在于层流状态与紊流状态。但在紊流状态下，紊动还要对地下水质点产生一个附加的运移作用。本文只涉及多孔介质中的层流状态。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

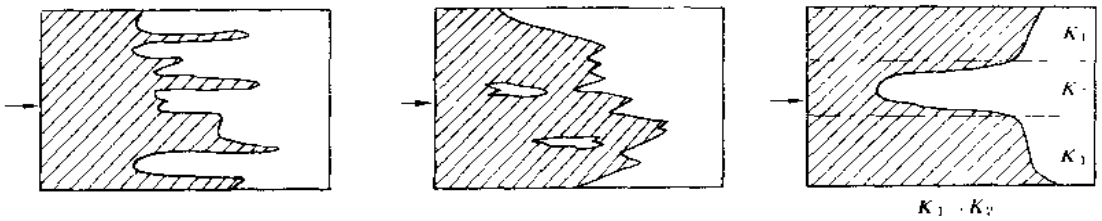


图 1-15　微观非均质中孔隙差异所引起的流速不均一情况示意图

§1-5　研究水动力弥散的意义

水动力弥散现象广泛地存在于地下水系统、化学工程及石油开采等众多问题中。因此研究水动力弥散问题不仅具有重要的理论意义，而且对国民经济很多部门的发展都有着重要的实践意义。

水动力弥散的研究有助于解决如下实际问题：

地下水污染的模拟与预测。为地下水资源管理和地下水污染的改造提供定量依据。此类问题包括：点源污染，如垃圾堆放、污水排放和油库泄露等；面源污染，如污水回灌、酸雨入渗等。

地下水污染治理方案设计。在地下水污染模拟的基础上，对拟采取的治理方案分别进行计算与比较，选择最佳治理方案。

滨海含水层中的海水入侵问题。水动力弥散的研究有助于解决咸淡水过渡带的运移规律，特别是在人工开采后的变化状况。

中深部埋藏的咸水体对上层淡水的影响问题。特别是在开采条件下咸淡水的相互作用规律。如我国华北平原为改造咸水体的“抽咸换淡”问题。

地球化学找矿中，金属矿床中的弥散晕问题。通过研究弥散晕的扩展及运移规律，协助我们找到“污染源”——金属矿床。

石油开采中“二次采油”技术问题。“二次采油”主要有两种方法：一是用水注入油田，将石油从空隙中驱替出来；二是注入可溶性溶剂，减小石油的粘滞性，将石油和溶剂一起抽出。水动力弥散的研究有助于提高采油率。

核废物处置。水动力弥散的研究有助于解决核废物永久处置场的选址问题，使核废物处置在一定时期内与人类生存空间及环境隔离。

饱气带中水盐运移问题。水动力弥散研究有助于解决农田施用化肥、农药、污水回灌对地下水水质的影响，以及了解土壤盐碱化过程，并确定排盐改碱过程。

此外，通过水动力弥散的研究，可以解决人工回灌对地下水水质的影响，找出岩溶的发育规律、地表水与地下水的相互关系等。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第二章　水动力弥散方程

地下水系统中污染物质的运移和预测，都是以水动力弥散方程为基础。水动力弥散方程是一些偏微分方程，它描述了地下水动力场中任一点处任一时刻的动力参数、介质参数与动力参数间的关系。为讨论方便起见，先介绍与水动力弥散方程有关的主要参数，从溶液中组分的质量守恒方程入手，导出溶质在溶液中的扩散方程，尔后再利用空间平均方法，将这一结果应用于多孔介质，从而推导出水动力弥散方程。

§2-1　有关参数

与水动力弥散方程有关的参数很多，其中包括流体参数、介质参数及流动参数。为进一步讨论方便起见，这里先以多相组分溶液为背景，对有关的主要参数加以介绍。

§2-1-1　流体的密度 ρ

单位流体体积的质量称为流体的密度 ρ，其量纲为〔ML^{-3}〕。对于非均质的多组分流体，其密度可随组成它的各种组分的浓度不同而变化。设有 N 种组分所组成的流体，其中某一组分称为 α。在该多组分流体体系所占据的空间中取一体积 dV，其质量为 dm。若假定其中 α 组分的质量为 dm_α，则可把 α 组分的质量密度 ρ_α 定义为

$$\rho_\alpha = \frac{dm_\alpha}{dV} \tag{2-1}$$

且有

$$\sum_{\alpha=1}^{N}\rho_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N}\left(\frac{dm_\alpha}{dV}\right) = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N} dm_\alpha}{dV} = \frac{dm}{dV} = \rho \tag{2-2}$$

这里 ρ 称为流体体系密度。多组分流体体系中 α 组分的浓度实际上就是该组分的密度 ρ_α。

§2-1-2　多组分流体速度 $\vec{u}$

α 组分质点的流速 $\vec{u}_\alpha$：即 dV 内 α 组分的各个分子的统计平均速度，也就是各个分子的速度之和除以分子的个数。一般地讲，溶液中各组分的速度是不等的。

体系的质点流速：体系的质点流速有多种表示方法，我们用质量平均速度 $\vec{u}$ 表示体系的质点流速，$\vec{u}$ 的定义为

$$\vec{u} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N}\rho_\alpha\vec{u}_\alpha}{\sum_{\alpha=1}^{N}\rho_\alpha} = \frac{\sum_{\alpha=1}^{N}\rho_\alpha\vec{u}_\alpha}{\rho} \tag{2-3}$$

α 组分的质点流速 $\vec{u}_\alpha$ 相对于体系质量平均速度 $\vec{u}$ 有一个偏差为 $\vec{\hat{u}}_\alpha$，则有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\vec{u}_\alpha = \vec{u} + \overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha \tag{2-4}$$

或

$$\overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha = \vec{u}_\alpha - \vec{u} \tag{2-4'}$$

式中：$\overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha$ 称为 α 组分质点相对于质量平均速度 $\vec{u}$ 的扩散速度。

§2-1-3 流体的通量 J

流体通过单位面积的流量称为通量。α 组分的质量通量定义为

$$J_\alpha = \rho_\alpha \vec{u}_\alpha \tag{2-5}$$

对于固定坐标系来说，它是单位时间内通过与流体方向垂直的单位面积上的 α 组分的质量。与(2-5)式相类似，α 组分相对于质量平均速度 $\vec{u}$ 的质量扩散通量 $\vec{J}_\alpha$ 定义为

$$\vec{J}_\alpha = \rho_\alpha \overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha = \rho_\alpha(\vec{u}_\alpha - \vec{u}) \tag{2-6}$$

显然有 $\sum_{\alpha=1}^{N} J_\alpha = 0$，否则会破坏水流的连续性。例如，流体体系中只有 α、β 两种组分，α 表示溶质，β 表示溶剂，溶质从高浓度向低浓度扩散，溶剂也不例外，但两者浓度梯度方向相反，扩散方向也相反。故有

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha=1}^{N} \vec{J}_\alpha &= \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha(\vec{u}_\alpha - \vec{u}) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \vec{u}_\alpha - \sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \vec{u} \\ &= \rho\vec{u} - \vec{u}\sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \\ &= 0\end{aligned} \tag{2-7}$$

即

$$\rho\vec{u} = \vec{u}\sum_{\alpha=1}^{N} \rho_\alpha \tag{2-8}$$

§2-2 溶液中 α 组分的质量守恒方程

在多组分组成的流体体系中任取一点 $P(x,y,z)$，以 P 为中心取一微小的质量均衡体，其侧面分别平行于 3 个坐标面，边长分别为 Δx、Δy 和 Δz，根据质量守恒原理，在时间 Δt 内，组分 α 在这个单元体中的净流出(或净流入)量应等于这个单元中组分 α 的质量变化(暂不考虑单元体内组分 α 的质量产生或消失)，即

$$\begin{aligned}&(\rho_\alpha u_{\alpha x}\big|_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z} - \rho_\alpha u_{\alpha x}\big|_{x+\frac{\Delta x}{2},y,z})\Delta y\Delta z\Delta t \\ &+ (\rho_\alpha u_{\alpha y}\big|_{x,y-\frac{\Delta y}{2},z} - \rho_\alpha u_{\alpha y}\big|_{x,y+\frac{\Delta y}{2},z})\Delta x\Delta z\Delta t \\ &+ (\rho_\alpha u_{\alpha z}\big|_{x,y,z-\frac{\Delta z}{2}} - \rho_\alpha u_{\alpha z}\big|_{x,y,z+\frac{\Delta z}{2}})\Delta x\Delta y\Delta t \\ &= \Delta\rho_\alpha\Delta x\Delta y\Delta z\end{aligned} \tag{2-9}$$

式中：$\Delta\rho_\alpha$ 表示经过 Δt 时间后，质量均衡体中 ρ_α 的改变量。

将上式两端同时除以 $\Delta x\Delta y\Delta z\Delta t$，得到

$$\frac{(\rho_\alpha u_{\alpha x}\big|_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z} - \rho_\alpha u_{\alpha x}\big|_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z})}{\Delta x}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

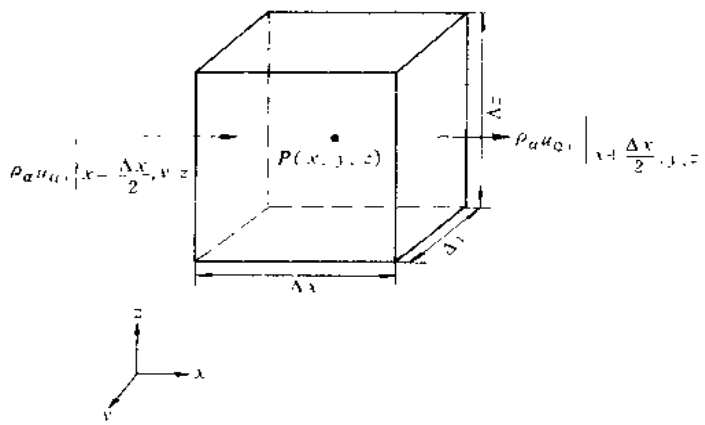


图 2-1　流体的微小质量均衡体

$$+\frac{(\rho_a u_{ay}|_{x,y\ \frac{\Delta y}{2},z}-\rho_a u_{ay}|_{x,y-\frac{\Delta y}{2},z})}{\Delta y}$$

$$+\frac{(\rho_a u_{az}|_{x,y,z\ \frac{\Delta z}{2}}-\rho_a u_{az}|_{x,y,z-\frac{\Delta z}{2}})}{\Delta z}$$

$$=\frac{\Delta\rho_a}{\Delta t} \tag{2-10}$$

在方程两端取极限，即令 $\Delta x\to 0$，$\Delta y\to 0$，$\Delta z\to 0$，$\Delta t\to 0$，并注意到关系式（按泰勒级数展开并取前两项）

$$\rho_a u_{ax}|_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z}=\rho_a u_{ax}|_{x-\frac{\Delta x}{2},y,z}+\frac{\partial(\rho_a u_{ax})}{\partial x}\Delta x \tag{2-11}$$

得到

$$-\frac{\partial(\rho_a u_{ax})}{\partial x}-\frac{\partial(\rho_a u_{ay})}{\partial y}-\frac{\partial(\rho_a u_{az})}{\partial z}=\frac{\partial\rho_a}{\partial t} \tag{2-12}$$

即

$$\frac{\partial\rho_a}{\partial t}+\mathrm{div}(\rho_a\vec{u}_a)=0\ ^* \tag{2-13}$$

若微小的质量均衡体内存在着 α 组分的源汇项，则上式改写成

$$\frac{\partial\rho_a}{\partial t}+\mathrm{div}(\rho_a\vec{u}_a)=I_a \tag{2-14}$$

式中：I_a 表示在多组分所组成流体的单位体积内，由于化学反应或其他原因所产生（或消失）的 α 组分的速率，其因次为〔$M\ L^{-3}T^{-1}$〕。该方程即为多组分流体体系中 α 组分的质量守恒方程。

上述质量守恒方程中，至少包括 ρ_a、u_{ax}、u_{ay}及 u_{az}4 个未知变量。I_a 也许可以独立给出，例如注入示踪剂，但也可能 I_a 与 ρ_a 有关（如吸附作用），不能简单地给定。因此该方程不能单独求解，还必须引入通量与驱动力之间的关系式，即质量通量与 α 组分密度间的关系式。

上述质量守恒方程类似于渗流问题中的水均衡方程式。水均衡方程中包含流速，还必须引入 Darcy 定律，方能将其转变为地下水运动的微分方程式。因此，α 组分的质量守恒方程式（2-

* 场论中，$\mathrm{div}\vec{u}=\nabla\cdot\vec{u}=(\vec{i}\frac{\partial}{\partial x}+\vec{j}\frac{\partial}{\partial y}+\vec{k}\frac{\partial}{\partial z})\times(u_x\vec{i}+u_y\vec{j}+u_z\vec{k})=\frac{\partial u_x}{\partial x}-\frac{\partial u_y}{\partial y}+\frac{\partial u_z}{\partial z}$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

14)，也必须引入 Fick 扩散定律，才能得到 α 组分的对流-扩散方程。

§2-3 α 组分的对流-扩散方程

在多组分组成的流体体系中，一种组分的运移包含两个方面的内容：一是受地下水流动的控制，即该组分按平均流速随整个流体体系的运移，叫对流；二是该组分自身的分子扩散，即由浓度梯度引起的相对于平均流速运移的分子扩散。下面在 α 组分质量守恒方程的基础上，建立 α 组分的对流-扩散方程。

前面已经定义了 α 组分的密度 ρ_α 及其质点的流速 $\vec{u}_\alpha$。一般地讲，各种组分的速度是不相等的。有多种方法表达多组分流体体系的平均流速。而对我们最重要的是质量平均速度(也称流体体系的质点速度)$\vec{u}$。流体体系中各组分的质点既参与了对流过程，又有自身的分子扩散。地下水流动对各组分流速的作用是相同的。但由于分子扩散，α 组分质点速度 $\vec{u}_\alpha$ 一般不等于质量平均速度 $\vec{u}$。

前面的(2-4)式与(2-6)式分别给出了 α 组分质点相对于质量平均流速 $\vec{u}$ 的扩散速度 $\overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha$ 及其质量扩散通量 $\vec{J}_\alpha$。将(2-4)式代入 α 组分的质量守恒方程(2-14)式中，得到

$$I_\alpha = \frac{\partial \rho_\alpha}{\alpha t} + \mathrm{div}[\rho_\alpha(\vec{u} + \overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha)]$$

$$= \frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho_\alpha \vec{u}) + \mathrm{div}(\rho_\alpha \overset{\Delta}{\vec{u}}_\alpha)$$

依(2-6)式，引入 α 组分的质量扩散通量 $\vec{J}_\alpha$，则上式写成

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \mathrm{div}(\rho_\alpha \vec{u}) + \mathrm{div}\vec{J}_\alpha = I_\alpha \tag{2-15}$$

式中：$\rho_\alpha \vec{u}$ 是 α 组分质量通量 $\rho_\alpha \vec{u}_\alpha$ 的对流分量；$\vec{J}_\alpha$ 是 α 组分质量通量 $\rho_\alpha \vec{u}_\alpha$ 的扩散分量。

对于只有溶质、溶剂两种组分(α、β)所构成的二元体系，α 组分在等温条件下(忽略热扩散)相对于质量平均速度 $\vec{u}$ 的扩散通量 $\vec{J}_\alpha$，可依 Fick 定律给出

$$\vec{J}_\alpha = -\rho \cdot D_m \cdot \mathrm{grad}\left(\frac{\rho_\alpha}{\rho}\right) \tag{2-16}$$

式中：D_m 表示溶质的分子扩散系数。

将(2-16)式代入(2-15)式中，且将 ρ_α 改写为 C，并去掉 I 的下标，则有

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathrm{div}(C\vec{u}) - \mathrm{div}\left[\rho \cdot D_m \cdot \mathrm{grad}\left(\frac{C}{\rho}\right)\right] = I \tag{2-17}$$

上式即为二元体系中 α 组分的对流-扩散方程。

对于低浓度溶液，浓度 C 的改变并不明显地影响 ρ。于是 ρ 可视为常量，D_m 也可视为常数。则 Fick 扩散定律(2-16)式可以近似地写成

$$\vec{J}_\alpha \approx -D_m \cdot \mathrm{grad}C \tag{2-18}$$

于是(2-17)式可以简写成

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mathrm{div}(C\vec{u}) - \mathrm{div}(D_m \cdot \mathrm{grad}C) = I \tag{2-19}$$

上式即为稀释的二元体系中 α 组分的对流-扩散方程。

将(2-17)与(2-19)式加上适当的边界条件和初始条件，可以用来解决流动的地表水中 α 组分的分布及变化规律。例如地表水体中污染物质的迁移。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

若直接将它们用于解决由溶液所饱和的多孔介质中 α 组分的迁移问题，则存在着两个困难：一是该方程式仅适用于多孔介质中液相的每一点，从而将固体骨架壁面视为它的边界条件，而这种边界条件是无法用数学方程式来描述的；二是此方程式描述的是微观参量（C、$\vec{u}$等），即它是相对于流体的质点而言的，而实际工作中都是取它们在典型单元体上的平均值。因此，即使该方程被解出后，还是无法用于实际。

因此，必须对上述方程的各未知变量在典型单元体上取平均值，也就是从微观水平上的研究过渡到比较粗的宏观水平上来研究多孔介质中所发生的现象。

§2-4 水动力弥散方程

前面第一章里我们曾引入了典型单元体的概念，下面对质点速度 $\vec{u}$ 和浓度 C 在宏观水平上取平均值。

已知速度 $\vec{u}$ 和浓度 C 在典型单元体的空隙体积 $(\Delta V_0)_V$ 上取平均值 $\bar{\vec{u}}$ 和 $\bar{C}$ 的定义是

$$\bar{\vec{u}} = \frac{1}{(\Delta V_0)_V}\int_{(\Delta V_0)_V}\vec{u}\,dV_V \tag{2-20}$$

和

$$\bar{C} = \frac{1}{(\Delta V_0)_V}\int_{(\Delta V_0)_V} C\,dV_V \tag{2-21}$$

于是，速度 $\vec{u}$ 和浓度 C 可分别用平均值 $\bar{\vec{u}}$、$\bar{C}$ 与偏差 $\overset{\Delta}{\vec{u}}$、$\overset{\Delta}{C}$ 之和来表示

$$\vec{u} = \bar{\vec{u}} + \overset{\Delta}{\vec{u}} \tag{2-22}$$

$$C = \bar{C} + \overset{\Delta}{C} \tag{2-23}$$

显然有

$$\overline{\overset{\Delta}{\vec{u}}} \equiv 0 \tag{2-24}$$

$$\overline{\overset{\Delta}{C}} \equiv 0 \tag{2-25}$$

将(2-22)、(2-23)式代入(2-19)式中，则有

$$\frac{\partial(\bar{C}+\overset{\Delta}{C})}{\partial t} + \mathrm{div}[(\bar{C}+\overset{\Delta}{C})(\bar{\vec{u}}+\overset{\Delta}{\vec{u}})]$$

$$-\mathrm{div}[D_m\cdot\mathrm{grad}(\bar{C}+\overset{\Delta}{C})] = I$$

展开

$$\frac{\partial\bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial\overset{\Delta}{C}}{\partial t} + \mathrm{div}(\bar{C}\bar{\vec{u}}) + \mathrm{div}(\bar{C}\overset{\Delta}{\vec{u}}) + \mathrm{div}(\overset{\Delta}{C}\bar{\vec{u}}) + \mathrm{div}(\overset{\Delta}{C}\overset{\Delta}{\vec{u}})$$

$$-\mathrm{div}(D_m\cdot\mathrm{grad}\bar{C}) - \mathrm{div}(D_m\cdot\mathrm{grad}\overset{\Delta}{C}) = I \tag{2-26}$$

该方程式的各项乘以 dV_V 后，再在 $(\Delta V_0)_V$ 上求积分并除以 $(\Delta V_0)_V$，即在典型单元体上的液相体积中取平均值。考虑到(2-24)与(2-25)式，有

$$\overline{\bar{C}\overset{\Delta}{\vec{u}}} = \bar{C}\overline{\overset{\Delta}{\vec{u}}} = 0$$

$$\overline{\overset{\Delta}{C}\bar{\vec{u}}} = \overline{\overset{\Delta}{C}}\bar{\vec{u}} = 0$$

并假定：梯度的平均等于平均的梯度；散度的平均等于平均的散度；对时间导数的平均等于平均对时间求导。这里假定积分与微分的顺序可以变换，实际上是假定积分区 $(\Delta V_0)_V$ 不变。这时

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(2-26)式可简化成

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \mathrm{div}(\bar{C}\bar{\vec{u}}) + \mathrm{div}(\overline{C\overset{\Delta}{\vec{u}}}) - \mathrm{div}(\overline{D_m \cdot \mathrm{grad}C}) = \bar{I} \tag{2-27}$$

上式左端第四项括号内实际上就是分子扩散通量 $\vec{J}$ 在典型单元体上的液体体积内取平均值 $\bar{\vec{J}}$。这就是多孔介质中溶质的分子扩散通量。

$$\begin{aligned}\bar{\vec{J}} &= -\overline{D_m \cdot \mathrm{grad}C} \\ &= -\bar{D}_m \cdot \mathrm{grad}\bar{C} \\ &= -\tilde{D}'' \cdot \mathrm{grad}\bar{C}\end{aligned} \tag{2-28}$$

原来在溶液连续体中的分子扩散系数 D_m 在多孔介质典型单元体的空隙体积上取平均之后变为 $\tilde{D}''$，称为多孔介质的分子扩散系数，它是张量。一般地讲，它在数值上要小于 D_m。

(2-27)式中 $\bar{C}\bar{\vec{u}}$ 表示溶质的对流量；$\overline{C\overset{\Delta}{\vec{u}}}$ 系在平均过程中而引入的在宏观水平上的附加通量，称为机械弥散通量，它是由于速度偏差 $\overset{\Delta}{\vec{u}}$ 而产生的弥散通量。如果不存在速度偏差 $\overset{\Delta}{\vec{u}}$，并忽略分子扩散，则溶质呈现“活塞推进”式迁移。

实验表明(某些概化了的理想模型也表明)，机械弥散通量类似于多孔介质中的分子扩散通量，也服从于类似 Fick 扩散定律的形式

$$\overline{C\overset{\Delta}{\vec{u}}} = -\tilde{D}' \cdot \mathrm{grad}\bar{C} \tag{2-29}$$

式中：$\tilde{D}'$ 是机械弥散系数(张量)。

将(2-28)式代入(2-27)式中，并将机械弥散通量与分子扩散通量合并，得到

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \mathrm{div}(\tilde{D} \cdot \mathrm{grad}\bar{C}) - \mathrm{div}(\bar{C}\bar{\vec{u}}) + \bar{I} \tag{2-30}$$

式中：$\tilde{D} = \tilde{D}'' + \tilde{D}'$，称为水动力弥散系数。从物理意义上来理解，具有相应的通量

$$\vec{J}_{\tilde{D}} = -\tilde{D} \cdot \mathrm{grad}\bar{C} \tag{2-31}$$

称为水动力弥散通量。上式(2-30)即为水动力弥散方程，也称为对流-扩散方程。

回顾一下，为了建立方程(2-30)，我们涉及了 3 个水平，即分子水平、微观水平和宏观水平。在以往的地下水动力学中，一般仅涉及宏观水平。但对于弥散问题，必须涉及到此 3 个水平。这是因为：不讲分子水平，就无法理解分子扩散；不讲微观水平，就搞不清机械弥散；但为了解决实际问题，我们最终不得不上升到宏观水平上来。

站在水动力弥散方程应用的角度，所有未知变量都是对于宏观水平而言的。为了简化起见，从现在起，将式(2-30)中的所有平均号“—”略去，即

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathrm{div}(\tilde{D} \cdot \mathrm{grad}C) - \mathrm{div}(C\vec{u}) + I^* \tag{2-32}$$

---

* 在某些文献中，水动力弥散方程形式为

$$n\frac{\partial C}{\partial t} = \mathrm{div}(\tilde{D}_0 \cdot \mathrm{grad}C) - \mathrm{div}(C\vec{V}) + I_0 \tag{A}$$

该式与(2-32)式有些差别。这是因为我们在建立水动力弥散方程(2-32)的过程中，从微观水平转换到宏观水平上时，是在典型单元体的空隙部分取各未知参量的平均值，即利用(2-20)、(2-21)式求平均值。

下面我们在整个典型单元体上(包括空隙部分和固相部分)取有关参量的平均值，从而导出(A)式

$$\begin{aligned}\frac{1}{\Delta u_0}\int_{\Delta u_0} \vec{u}\,\mathrm{d}u &= \frac{1}{(\Delta u_0)v} \cdot \frac{(\Delta u_0)v}{\Delta u_0}\int_{\Delta u_0} \vec{u}\,\mathrm{d}u \\ &= n\vec{u} = \vec{V}\end{aligned}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

这里注意：$\Delta u_0=(\Delta u_0)_V+(\Delta u_0)_S$，在$(\Delta u_0)_S$上，$\vec{u}=0$。

同理，有

$$\frac{1}{\Delta u_0}\int_{\Delta u_0} C\mathrm{d}u = n\bar{C} \tag{B}$$

再将(2-27)式两端各项乘以有效孔隙率n，则有

$$n\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \mathrm{div}(n\bar{C}\bar{\vec{u}}) + \mathrm{div}(n\overline{C\vec{u}})$$

$$-\mathrm{div}(n\tilde{D}''\cdot\mathrm{grad}\bar{C}) = nI$$

即

$$n\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \mathrm{div}(\bar{C}\bar{V}) - \mathrm{div}[n\tilde{D}'\cdot\mathrm{grad}\bar{C}]$$

$$-\mathrm{div}[n\tilde{D}''\cdot\mathrm{grad}\bar{C}] = nI$$

记$\tilde{D}_0=n\tilde{D}'+n\tilde{D}''$，$I_0=nI$，并略去平均号"—"，则上式即变成(A)式。

注意(A)式与(2-32)式的差别：$\tilde{D}_0$与$\tilde{D}$相差一个有效孔隙率n；I是指单位液相体积中由于化学反应而产生的α组分质量的速率，而$I_0=nI$却表示单位多孔介质体积中由于化学反应而产生的α组分质量的速度；浓度C都是指液相的浓度。

若散度、梯度均采用直角坐标系来表示，并利用爱因斯坦求和约定，则上式可写成

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(Cu_i) + I$$

$$(i,j=1,2,3) \tag{2-33}$$

展开后

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} = {} & \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y} + D_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\ & + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y} + D_{yz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\ & + \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{zy}\frac{\partial C}{\partial y} + D_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\ & - \frac{\partial}{\partial x}(C\cdot u_x) - \frac{\partial}{\partial y}(C\cdot u_y) - \frac{\partial}{\partial z}(C\cdot u_z) + I\end{aligned} \tag{2-34}$$

特别地，对于一维流动二维水动力弥散，上式简化成

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial t} = {} & \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\ & + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\ & - \frac{\partial}{\partial x}(C\cdot u_x) + I\end{aligned} \tag{2-35}$$

对于一维流动一维水动力弥散，可进一步简化

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}(C\cdot u_x) + I \tag{2-36}$$

§2-5 源 汇 项

源汇项系指在单位液相体积中由于化学反应、生物化学作用或抽注水作用等而产生α组分质量的速率。

§2-5-1 放射性衰变与化学、生物化学反应

若研究对象是地下水中某种放射性物质或以放射性物质作为示踪剂，则它的浓度分布除

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

了受对流和弥散作用的影响之外，还将受到其自身的放射性衰变的影响。因此，在微分方程式中必须考虑这一因素的作用，它也属于源汇项的组成部分。

放射性衰变服从下列规律

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \tag{2-37}$$

式中：λ 系该放射性物质的衰变系数，量纲为〔T^{-1}〕；C_0 是该物质在 $t=0$ 时刻的浓度；C 则表示 t 时刻的放射性物质的浓度。

依上式，相应的衰变速率为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = C_0 e^{-\lambda t}(-\lambda) = -\lambda C \tag{2-38}$$

上式表明：衰变速率与当时浓度成正比。

由于放射性衰变发生在溶液中，而源汇项 I 的定义也正是针对液相的单位体积而言的，因此有

$$I = -\lambda C \tag{2-39}$$

于是(2-33)式变为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}\right) - \frac{\partial}{\partial x_i}(Cu_i) - \lambda C$$

$$(i, j = 1, 2, 3) \tag{2-40}$$

若由于化学反应或生物化学反应而使示踪剂在单位体积溶液中的消耗速率或产生速率与其浓度成正比，则此因素也可以以上式的形式归并入 I 中。

§2-5-2 吸附与解吸

在一定条件下，溶液中某些溶质在多孔介质的固相表面产生吸附、解吸或离子交换等物理化学作用。如果这些溶质属于我们的研究对象，则这些作用的结果应该综合到源汇项中去。如果固相表面吸附示踪剂，则视为汇；否则，若固相表面所含的示踪剂被解吸，则视为源。而离子交换既可视成汇，又可视为源，依示踪剂离子交换的方向而定。

尽管这些作用并非发生在溶液内部的每一点处，而产生在液相与固相的接触面上，这似乎与源汇项 I 的定义不十分相符，但对于典型单元体而言，完全可将其视为源汇项。

为了建立表达式，要同时考虑液相与固相中示踪剂的质量守恒。

固相的吸附收入，正是液相解析支出。我们知道，在建立水动力弥散方程时，是以液相为对象的，即以单位液相体积为均衡区段。单位液相体积单位时间内支出的示踪剂质量，这正是源汇项 I 的定义。

考虑如下所示溶解相 A 与吸附相 $\overline{A}$ 之间的吸附-解析作用：

$$A \rightleftharpoons \overline{A}$$

单位液相体积在单位时间内支出的示踪剂质量为

$$I = \theta\frac{\partial C}{\partial t} = -\rho_b\frac{\partial \overline{C}}{\partial t} \tag{2-41}$$

式中：θ 与 ρ_b 分别表示多孔介质的孔隙率与骨架密度；C 表示溶解相 A 的浓度(单位体积地下水中溶质的质量)；$\overline{C}$ 表示吸附相 $\overline{A}$ 的浓度(单位多孔介质干容重中溶质的质量)。上式也可以写成

$$I = -K_f C + K_r \overline{C} \tag{2-42}$$

式中：K_f 表示吸附作用常数($A \rightarrow \overline{A}$)；$K_r$ 表示解析作用常数($\overline{A} \rightarrow A$)。该式为非均衡吸附表示

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

式。该式适用的条件是，吸附过程可用一阶可逆反应来描述或者用线性扩散与线性等温平衡耦合的方法来描述。

如果是均衡吸附，由式(2-42)可直接写出吸附相 $\bar{A}$ 的浓度，即

$$\bar{C} = \frac{K_f}{K_r} C = K_d C \tag{2-43}$$

式中：K_d 称为平衡分布系数(L^3M^{-1})，或称平衡常数。根据式(2-41)与(2-43)，在溶液与固体骨架之间吸附与解析作用所产生的示踪剂速率可写成

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C) = -\rho_b K_d \frac{\partial C}{\partial t} \tag{2-44}$$

对于饱水多孔介质，$\theta = n$，则有

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\rho_b}{n} K_d \frac{\partial C}{\partial t} \tag{2-45}$$

将上式代入对流-弥散方程式中，整理得

$$(1 + \frac{\rho_b}{n} K_d) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(C u_i)$$
$$(i, j = 1, 2, 3) \tag{2-46}$$

记

$$R_d = 1 + \frac{\rho_b}{n} K_d \tag{2-47}$$

则上式变为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(\frac{D_{ij}}{R_d} \frac{\partial C}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(C \frac{u_i}{R_d})$$
$$(i, j = 1, 2, 3) \tag{2-48}$$

此方程在形式上不再包含源汇项，只是用 R_d 去除水动力弥散系数 $\tilde{D}$ 和流速 $\vec{u}$。由于 $R_d > 1$，因此吸附所产生的后果，相当于 $\tilde{D}$ 和 $\vec{u}$ 均减小到 $\frac{1}{R_d}$，起到减缓弥散的作用。故 R_d 称为减缓因子。

§2-5-3 抽水与注水

若向含水层中注入含有示踪剂浓度为 C_0 的水，并设单位时间内对单位体积的含水层注水量为 W，其量纲为[T^{-1}]，则有

$$I = \frac{W}{n}(C_0 - C) \tag{2-49}$$

式中：n 表示多孔介质的有效孔隙率。抽水时则有

$$I = -\frac{W}{n} C \tag{2-50}$$

式中：W 表示单位时间内对单位体积含水层的抽水量；C 是抽水点处的溶质浓度。将(2-50)式代入(2-33)式中得到

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i}(D_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j}) - \frac{\partial}{\partial x_i}(C u_i) - \frac{W}{n} C$$
$$(i, j = 1, 2, 3) \tag{2-51}$$

上式即为抽水条件下的弥散方程。注意 W 是时间和位置的函数，在不抽水处 $W = 0$。

当抽水、注水，放射性衰变及吸附现象同时存在时，它们的作用可以合并到同一个方程中。例如，向含水层注入含示踪剂浓度为 C_0 的水，示踪剂发生放射性衰变，而吸附服从线性均衡等温关系时，可以得到下列水动力弥散方程

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{D_{ij}}{R_d}\cdot\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(C\frac{u_i}{R_d}\right)-\lambda C-\frac{W}{n}(C_0-C)$$

$$(i,j=1,2,3) \tag{2-52}$$

若含水量 θ 不等于常数，则上式可改写成：

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\frac{\theta D_{ij}}{R_d}\cdot\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)-\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta C\frac{u_i}{R_d}\right)-\lambda\theta C-W(C_0-C)$$

$$(i,j=1,2,3) \tag{2-53}$$

上式可用于研究非饱和带中的溶质输运现象。

§2-6 初始条件与边界条件

水动力弥散方程可用于描述溶质在地下水中运移的一般规律，如果要确定某一特定区域内地下水中溶质的分布规律，还必须知道溶质浓度分布的初始状态以及在该区域边界上的浓度分布规律，即初始条件与边界条件。初始条件与边界条件构成定解条件。定解条件与水动力弥散方程一起构成的特定区域上的问题称为定解问题。

对于某一个具体的水动力弥散问题，初始条件与边界条件刻画了溶质运移的特殊之处。也就是说，不同的初始条件与边界条件可以给出不同的溶质运移规律。因此，根据已有的水文地质资料及野外调查资料，正确地确定研究区的初始条件和边界条件是非常重要的。

§2-6-1 初始条件

描述给定初始时刻研究区 D 内各点 (x,y,z) 处的浓度分布状态的条件，称为初始条件。设给定初始时刻研究区 D 内各点的浓度值已知为 $C_0(x,y,z)$，则初始条件可写成

$$C(x,y,z,0)=C_0(x,y,z)$$

$$(x,y,z)\in D \tag{2-54}$$

例如，$t=0$ 时向某区域注入含示踪剂的水，若在此之前研究区 D 内不含该示踪剂，则 $C(x,y,z,0)=0$。

从原则上讲，只要已知那个时刻的浓度分布，初始时刻是可以任意选取的。不要以为初始条件一定是研究区的原始状态，即没有注入示踪剂或没有污染前的状态。初始条件如何选取，应该根据研究问题的需要、资料状况及计算与模拟方法等因素而定。例如做弥散试验时，可将示踪剂注入前浓度分布视为初始状态。又如设计治理地下水污染方案时，可将现状污染物分布视为初始条件。

§2-6-2 边界条件

边界条件是指研究区边界上的溶质浓度分布和变化情况或边界上流入（或流出）研究区的浓度分布和变化情况。边界条件可分为下列三种类型。

1. 第一类边界条件——给定浓度边界

指已知边界上浓度分布的边界。若在边界 B_1 上 (x,y,z) 点处 t 时刻的浓度值为 $f_1(x,y,z,t)$，则第一类边界条件可表示成

$$C|_{B_1}=f_1(x,y,z,t)$$

$$(x,y,z)\in B_1 \qquad t>0 \tag{2-55}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

式中：B_1 为研究区 D 的第一类边界；$f_1(x,y,z,t)$为 B_1 上的已知函数。

此类边界常出现在研究区与地表水体的连接处。若 $f_1(x,y,z,t)$不随时间 t 变化，则它描述的是通常所指的定浓度边界条件。

2. 第二类边界条件——给定弥散通量边界

指已知边界上弥散通量随时间变化规律的边界条件，或称之为 Neumann 边界条件，即已知

$$-D \cdot \mathrm{grad}C \cdot \vec{n}|_{B_2} = f_2(x,y,z,t)$$
$$(x,y,z) \in B_2 \qquad t > 0 \tag{2-56}$$

式中：B_2 为研究区上的第二类边界；$\vec{n}$为边界 B_2 上某点(x,y,z)处的外法线方向上单位向量；D 为水动力弥散系数；$f_2(x,y,z,t)$是已知函数。

3. 第三类边界条件——给定溶质通量边界

指已知边界上溶质通量随时间变化规律的边界条件，或称之为 Cauchy 边界条件，即已知：

$$(C\vec{u} - D \cdot \mathrm{grad}C) \cdot \vec{n}|_{B_3} = f_3(x,y,z,t)$$
$$(x,y,z) \in B_3 \qquad t > 0 \tag{2-57}$$

式中：B_3 为研究区上的第三类边界条件；$\vec{u}$为孔隙平均流速；$f_3(x,y,z,t)$为已知函数。

图 2-2 表示研究区域及其边界。为了便于理解，下面列举几种与一维弥散问题相联系的边界条件的具体形式。

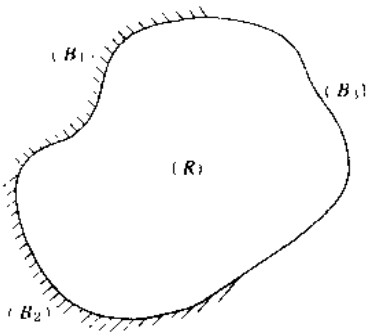


图 2-2　弥散区域及其边界

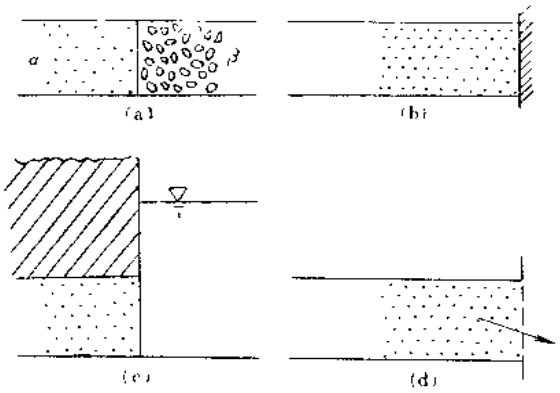


图 2-3　一维弥散问题的几种边界条件

图 2-3a，多孔介质 α 的边界外为另一种多孔介质 β。穿过稳定边界的溶质通量应保持连续，即

$$n(Cu_x - D_L \frac{\partial C}{\partial x})|_\alpha = n(Cu_x - D_L \frac{\partial C}{\partial x})|_\beta \tag{2-58}$$

式中：n 为空隙率。

图 2-3b，多孔介质的外边为无孔隙介质。此时通过边界的流量与溶质通量均为零。由于在边界上有 $Cu_x - D_L \frac{\partial C}{\partial x} = 0$ 及 $u_x = 0$，故有

$$\frac{\partial C}{\partial x}|_{B_2} = 0 \tag{2-59}$$

图 2-3c，多孔介质的边界外浓度固定为 C_r 的河水。由于通量的连续性，在边界点上应成立

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\left[n\left(Cu_x - D_L\frac{\partial C}{\partial x}\right) - \left(C_r u_x - D_d\frac{\partial C}{\partial x}\right)\right]\Big|_{B_3} = 0 \tag{2-60}$$

若忽略分子扩散，则有

$$\left(Cu_x - C_r u - D_L\frac{\partial C}{\partial x}\right)\Big|_{B_3} = 0 \tag{2-61}$$

图 2-3d，出流边界，即多孔介质边界外为空气。此时边界两侧的溶质浓度相等，仍有边界条件(2-59)式成立。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第三章　水动力弥散系数

水动力弥散系数是表征在一定流速下，多孔介质对某种污染物质弥散能力的参数。我们在建立水动力弥散方程的过程中，将有关物理量在典型单元体上进行平均，这样就回避了水动力弥散系数的微观情况，不利于深刻理解弥散系数的结构及其影响因素。在实际的多孔介质中，影响水动力弥散系数的因素很多，且相互之间的关系也非常复杂，通常采取理想模型的研究方法，即将实际的多孔介质用一个假想的、简化的模型来代替，从而将在该模型中发生的弥散现象用精确的数学方法来分析。这样才能对弥散系数的主要影响因素逐项进行讨论，然后将其结果类推到实际的多孔介质中。本章还对实际地质介质中弥散系数的尺度效应进行了分析与讨论。

§3-1　理论模型研究

前面建立水动力弥散方程的方法，是在典型单元体上一次求平均后而建立的。此方法建立的微分方程比较简单。但是，对其中的水动力弥散系数，特别是机械弥散系数的结构不能给出。机械弥散系数取决于哪些因素，要从理想模型的研究才能得出。

关于弥散系数结构的探讨，最早始于 1953 年，自此之后，在许多专业期刊上出现了大量的文章。这些文章从不同的角度、在不同的程度上讨论了弥散系数与孔隙骨架、水流参数及分子扩散系数之间的关系。本节只将具代表性的模型基本思路及主要结论进行简要的介绍与分析。

1953 年，Taylor 提出了一个最简单的圆柱状毛管模型，圆管中有 $C=0$ 的溶液被 $C=C_0$ 的液体所驱替（图 3-1）。依水力学知识，流速呈抛物线型分布，并由此产生分子扩散。于是示踪剂的迁移受对流和分子扩散的支配。对此，Taylor 导出了如下弥散系数表达式，即

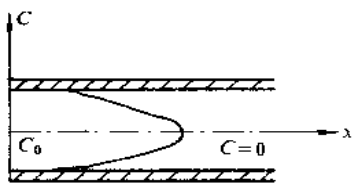


图 3-1　圆柱状毛管模型

$$D=\frac{r^2}{48D_m}\bar{u}^2 \tag{3-1}$$

式中：r 为毛管半径；D_m 为分子扩散系数；$\bar{u}$ 为平均流速。

Taylor 毛管模型中 D_m 与 $\bar{u}^2$ 成正比，这是最初的也是最简单的模型。后来大量的实验表明，这种弥散系数的结构失真，其原因大概是过于简化，从而失去了多孔介质中弥散现象的基本特征了。

Bear 和 Bachmat（1966、1967）后来将多孔介质概化为相互连通的空间毛管网络，毛管的长度、方位和断面的大小都是随机变化的，毛管的接头处至少有 3 根毛管互连，且假定模型中的水流属于层流运动。

他们采用两次平均的方法：第一步先在毛管横截面上求平均，并将所得的平均值放在毛管横截面的轴心上；第二步是沿毛管轴在典型单元体上进行平均，作为典型单元体的平均值。依

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

此所求出的结果是

$$D'_{ij}=a_{ijmn}\frac{u_m u_n}{u}f(P_e,\delta) \tag{3-2}$$

式中：a_{ijmn}为多孔介质的弥散度；u 为地下水流速〔LT^{-1}〕；u_m、u_n 为地下水流速分量〔LT^{-1}〕；P_e 为分子扩散的 Peclet 数〔无因次〕；$\delta=\frac{\bar{l}}{R}$，其中，$\bar{l}$ 为毛管的平均长度〔L〕；R 为毛管的平均水力半径〔无因次〕。

上式表明机械弥散系数 D'_{ij}涉及 3 个因素：

(1)多孔介质的弥散度 a_{ijmn}纯粹由多孔介质的空隙性所决定(类似于渗透系数 K 取决于渗透率 k 一样)，它包括毛管的传导系数 B，毛管的平均长度 $\bar{l}$ 和曲折率 $\bar{T}^*$；

(2)由速度所组成的一个二阶张量$\frac{u_m u_n}{u}$；

(3)函数 $f(P_e,\delta)$，其中 Peclet 数

$$P_e=\frac{\bar{u}_l}{D_m} \tag{3-3}$$

式中：$\bar{u}_l$ 是平均线性孔隙水速度〔LT^{-1}〕。在热迁移研究中，也使用 Peclet 数，$P_e=\frac{u_l}{D_h}$(式中 D_h 是热扩散系数)，因此也将它称为热扩散的 Peclet 数。函数 $f(P_e,\delta)$具有如下关系式

$$f(P_e,\delta)=\frac{P_e}{P_e+4\delta^2+2} \tag{3-4}$$

显然，当 Peclet 数较大时，$f(P_e,\delta)$近似等于 1。

a_{ijmn}是四阶张量。在三维空间中，多孔介质弥散度张量 a_{ijmn}共有 $3^4=81$ 个分量。但是，对于各向同性介质，则只有 36 个非零分量，而且仅涉及两个数 α_L 和 α_T，即

$$a_{ijmn}=\alpha_T\delta_{ij}\delta_{mn}+\frac{\alpha_L-\alpha_T}{2}(\delta_{im}\delta_{jn}+\delta_{in}\delta_{jm}) \tag{3-5}$$

式中：α_L为各向同性多孔介质纵向弥散度；α_T为各向同性多孔介质横向弥散度；δ_{ij}为Kronecker δ 符号，即

$$\delta_{ij}=\begin{cases}1 & i=j\\ 0 & i\neq j\end{cases} \tag{3-6}$$

将(3-5)式代入(3-2)式中，并取 $f(P_e,\delta)\approx 1$，得到

$$D'_{ij}=\alpha_T u\delta_{ij}+(\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_i u_j}{u}$$
$$(i,j=1,2,3) \tag{3-7}$$

在三维空间直角坐标系中，u 的 3 个分量为 u_x、u_y 和 u_z，则机械弥散系数张量具有 9 个分量，即

$$\left.\begin{aligned}
D'_{xx}&=\alpha_T u+(\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_x^2}{u}\\
&=\frac{1}{u}[\alpha_T(u_y^2+u_z^2)+\alpha_L u_x^2]\\
D'_{xy}&=(\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_x u_y}{u}=D'_{yx}\\
D'_{xz}&=(\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_x u_z}{u}=D'_{zx}\\
D'_{yy}&=\alpha_T u+(\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_y^2}{u}
\end{aligned}\right\} \tag{3-8}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$
\left.
\begin{aligned}
&= \frac{1}{u}\left[\alpha_L(u_x^2+u_z^2)+\alpha_L u_y^2\right] \\
D'_{yz} &= (\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_y u_z}{u} = D'_{zy} \\
D'_{zz} &= \alpha_T u + (\alpha_L-\alpha_T)\frac{u_z^2}{u} \\
&= \frac{1}{u}\left[\alpha_L(u_x^2+u_y^2)+\alpha_L u_z^2\right]
\end{aligned}
\right\} \quad \text{续(3-8)}
$$

注意：在三维空间中，流动处处是水平的，即 $u_z=0$，那么仅有 $D'_{xz}(=D'_{zx})$ 和 $D'_{yz}(=D'_{zy})$ 变为零，而 $D_{zz}=\alpha_T u$，这意味着，在 z 方向上仍然存在着横向弥散。

如果在某点处，选择 x 轴与该点平均孔隙流速的方向一致，即 $u_x=u$，$u_y=u_z=0$，则机械弥散系数张量为

$$
\tilde{D}' = \begin{bmatrix} D'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & D'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & D'_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_L u & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_T u & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_T u \end{bmatrix} \tag{3-9}
$$

在如此选择的坐标系统中，3 个坐标轴均为弥散主轴。D'_{xx} 称为纵向机械弥散系数，D'_{yy}、D'_{zz} 称为横向机械弥散系数；D'_{xx}、D'_{yy}、D'_{zz} 统称为机械弥散系数主值。当地下水总体呈均匀流动（即满足处处 $u_x=$常量，$u_y=u_z=0$）时，上式关系才对整个流场有效。一般情况下，即便是各向同性介质，弥散主轴对于不同的点是不同的，它随平均孔隙流速方向的变化而变化。

多孔介质分子扩散系数 $\tilde{D}'$ 也是二阶对称张量，其分量为

$$
D'_{ij}=D_m T'_{ij} \tag{3-10}
$$

式中：T'_{ij} 为多孔介质曲折率张量的分量。

显然 $T'_{ij}<1$，所以 $D'_{ij}<D_m$，即多孔介质中溶液的分子扩散系数小于纯溶液中的分子扩散系数。正如以前曾分析的，这是因为多孔介质中通道曲折，从而减少了分子扩散的有效性。

从前面介绍的关于理想模型所导出的(3-9)式可知，当略去函数 $f(P_e,\delta)$ 的影响时〔即令 $f(P_e,\delta)=1$〕，机械弥散系数 D' 与平均孔隙速度成线性关系。作为一般情况，函数 $f(P_e,\delta)$ 应被考虑进来。由于 $P_e=\bar{u}_l/D_m$，式中包含着平均速度 u，所以机械弥散系数 D' 与 u 是非线性关系。通常用下列式子来表达（二维水动力弥散）

$$
\begin{aligned}
D'_{xx} &= \alpha_L u(P_e)^{m_1} \\
D'_{yy} &= \alpha_T u(P_e)^{m_2}
\end{aligned} \tag{3-11}
$$

式中：m_1 和 m_2 为常数。

§3-2 实验室研究

在 50 年代中后期，许多研究者在实验室做了大量的一维水动力弥散实验，来研究 D_L 与各个因素之间的关系。

在实验室确定纵向水动力弥散系数 D_L，一般采用一维弥散试验。通常在充满均质砂的砂柱中预先用不含示踪剂的流体饱和，并将其控制在某个流速水平上。在砂柱的一端引入定浓度的示踪剂，以驱替原有的不含示踪剂的液体，并在另一端测量出流体的示踪剂浓度，或在中间插入若干个浓度传感器测出流体的示踪剂浓度（如对于 NaCl 示踪剂常用电极测其电阻率），便可通过一定的公式计算出 D_L。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

通过因次分析可以证明：在一般情况下，水动力弥散系数 $\tilde{D}(=\tilde{D}'+\tilde{D}^*)$ 是关于分子扩散的 Peclet 数的函数。P_e 是无因次参数，$\tilde{D}$ 是有因次参数。为了将它们转化成无因次参数与无因次参数间的关系，故将纵坐标取 $\frac{D_L}{D_m}$ 或 $\frac{D_T}{D_m}$，横坐标取 P_e。这是因为，无因次参数间的关系可以使试验工作量大大地减少，同时其使用范围比有因次坐标更加广泛。

Perkins 与 Johnston(1963)将多组试验结果绘在双对数坐标上(图 3-2)，横坐标取 P_e，纵坐标分别取 $\frac{D_L}{D_m}$ 与 $\frac{D_T}{D_m}$。通过分析，提出了经验公式，即

$$\frac{D_L}{D_m}=\frac{D^*}{D_m}+1.75\frac{u_d}{D_m} \tag{3-12}$$

及

$$\frac{D_T}{D_m}=\frac{D^*}{D_m}+0.055\frac{u_d}{D_m} \tag{3-13}$$

依上两式，当 $P_e(=\frac{u_d}{D_m})$ 较大时，上式中 $\frac{D^*}{D_m}$ 可以忽略，得出关系式

$$\frac{D_L}{D_T}\approx\frac{1.75}{0.055}\approx 30$$

即纵向弥散系数是横向弥散系数的 30 倍左右。

Pfannkuch(1965)综合了 20 个样品(平均粒径 0.01～0.686mm)175 次一维水动力弥散

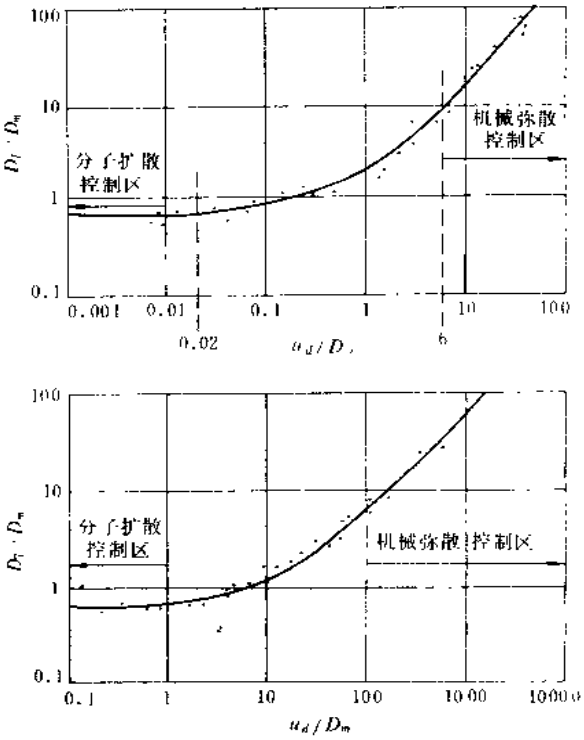


图 3-2 $\frac{D_L}{D_m}$、$\frac{D_T}{D_m}$ 与 $\frac{u_d}{D_m}$ 实验曲线

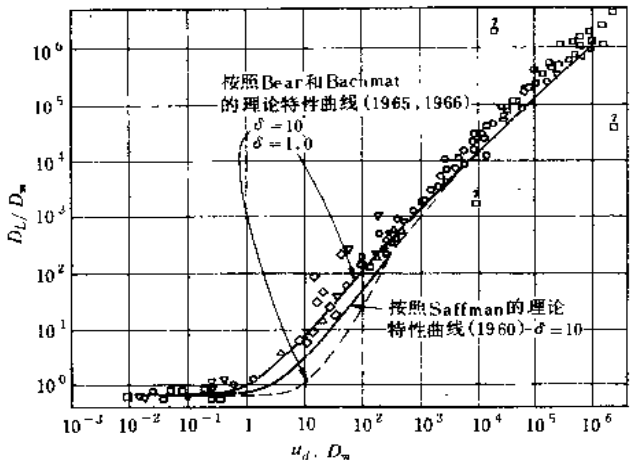


图 3-3 纵向弥散与 Peclet 数实验曲线

(改变流速 u_d)的数据，并将其绘在以 $\frac{D_L}{D_m}$ 为纵坐标，$P_e(=\frac{u_d}{D_m})$ 为横坐标的双对数坐标纸上，得出了图 3-3。

后来 Fried(1971)将同一批数据点绘在以 $\frac{D_L}{u_d}$ 为纵坐标，以 $P_e(=\frac{u_d}{D_m})$ 为横坐标的双对数坐标纸上，得到了图 3-4。

图 3-4 的分区性显得比图 3-3 更清楚，它可以分为 5 个区：

第 I 区：纯分子扩散状态。此区 P_e 数很小，大体上 $P_e<0.4$，即速度 u 较小。

在图 3-3 中此区呈水平线，即 $\frac{D_L}{D_m}$ 接近一常数。因为 $D_L=D_L'+D^*=D_L'+D_mT^*$(此中 T^* 是多孔介质的曲折率)，

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

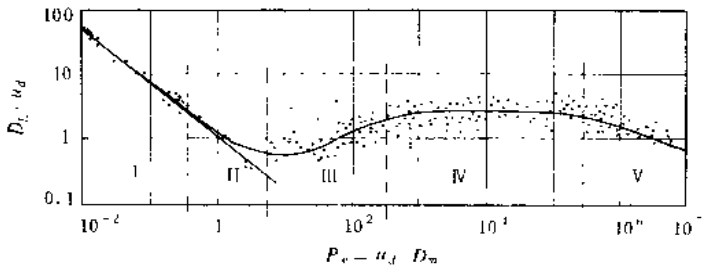


图 3-4 $\frac{D_L}{u_d}$ 与 $\frac{u_d}{D_m}$ 实验曲线

则有

$$\frac{D_L}{D_m} = \frac{D_L'}{D_m} + T^* \tag{3-14}$$

该比例几乎不随 P_e 数增大而变化，而在各向同性介质中 T^* 是常量，这必有

$$\frac{D_L'}{D_m} \to 0$$

即 $D_L' \ll D_m$，故称此区为纯分子扩散状态区。

从图 3-4 中不难看出，实验曲线在该区呈 45°直线下降，故有

$$\lg \frac{D_L}{u_d} = -\lg \frac{u_d}{D_d} + \lg B \tag{3-15}$$

由实验曲线看出 $B \approx 0.67$，则

$$\lg \frac{D_L}{u_d} \approx \lg 0.67 \times \frac{D_d}{u_d} \tag{3-16}$$

即

$$D_L \approx 0.67 D_d \tag{3-17}$$

$$T^* \approx 0.67$$

另外，可以利用 $u=0$（即 $P_e=0$）时，来确定多孔介质的曲折率 T^*。依不同的试验结果，有

$$\frac{1}{3} < T^* < \frac{2}{3} \tag{3-18}$$

Fried 认为，对于由等径的球状颗粒组成的均质介质，曲折率近似地等于 0.67。

第 I 区：机械弥散与分子扩散重叠状态。此区大体位于 $0.4 < P_e < 5$。该区内，随着 P_e 的增加，在图 3-3 中，曲线开始上翘，机械弥散作用变得明显起来，分子扩散作用和机械弥散作用大体上具有相同的数量级。因此该区内 D_L 应考虑两者之和。

第 II 区：机械弥散优势状态。Fried 认为该区内分子扩散作用相对减弱，但仍不能将其忽略不计。图 3-3 中显示该区的实验结果有

$$\frac{D_L}{D_m} = \alpha \left(\frac{u_d}{D_m}\right)^m; \alpha \approx 0.5; m = 1 \sim 1.2 \tag{3-19}$$

当取 $m=1.2$ 时，有

$$D_L = 0.5 \frac{u_d^{1.2}}{D_m^{1.2}}$$

即纵向弥散系数 D_L 随着分子扩散系数 D_m 的增大而减小，与平均速度的 1.2 次方成正比。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

Bear 认为，此区溶质迁移主要是机械弥散和横向分子扩散的相互控制，并认为横向分子扩散将导致纵向物质迁移的减弱。因此，既不能忽略分子扩散的作用，也不应该将分子扩散作为相加项来处理。

第Ⅳ区：纯机械弥散状态。该区内，分子扩散作用已可忽略不计，流动仍然遵守 Darcy 定律。

该区在图 3-3 中呈现 45°的直线，可给出关系式

$$\lg \frac{D_L}{D_m} = \lg \frac{u_d}{D_m} + \lg B \tag{3-20}$$

从图 3-3 中看出 $B \approx 1.8$，则上式变成

$$\lg \frac{D_L}{D_m} = \lg 1.8 \frac{u_d}{D_m} \tag{3-21}$$

即

$$D_L = 1.8 u_d \tag{3-22}$$

即纵向弥散系数与平均速度成正比。

上述关系式也可从图 3-4 中获得。在图 3-4 中，该区呈水平曲线，则

$$\lg \frac{D_L}{u_d} = \lg B \tag{3-23}$$

即 $D_L = 1.8 u_d$。

此区呈现的范围较大，$Pe \approx 3\times10^{2} \sim 3\times10^{5}$。若取 $d = 1\text{mm}$，$D_m = 3\times10^{-5}\text{cm}^2/\text{s}$，则平均速度 $u \approx 0.09 \sim 90\text{cm/s}$。

第Ⅴ区：超越 Darcy 流动的机械弥散状态。该区反映出，由于平均流速增大形成非线性层流状态（惯性力起主要作用）或紊流状态。紊流的脉动作用已明显地反映进来，其作用类似于第Ⅳ区的横向分子扩散作用加强，使得图 3-3 中的曲线斜率变小（<1），图 3-4 中的曲线向下弯。

Klotz 和 Moser（1974）在实验室做了 2500 次关于人工介质和天然介质的一维弥散试验。他们对 D_L 与孔隙平均流速 u、运动粘滞系数 υ 及多孔介质的特征指标〔包括平均粒径 d_{50}、颗粒的不均匀系数 $\eta(=\frac{d_{50}}{d_{10}})$、孔隙度、颗粒的磨圆度等〕之间的关系作了系统分析。他们认为，除了平均速度 u 外，颗粒的大小和颗粒的不均匀系数 η 对 D_L 的影响很大。而颗粒的形状、粗糙度、棱角度及夯实程度对 D_L 的影响则不那么显著。下面简要介绍颗粒不均匀系数 η 对 D_L 的影响。

实验表明，D_L 随着 η 的增大而增大。对于 $d_{50} = 1\text{mm}$ 的介质，有下列实验数据：

$$\frac{D_{L|_{\eta=2}}}{D_{L|_{\eta=1.1}}} = 1.2, \quad \frac{D_{L|_{\eta=10}}}{D_{L|_{\eta=5}}} = 2, \quad \frac{D_{L|_{\eta=20}}}{D_{L|_{\eta=10}}} = 5$$

显然，其中不能使多孔介质的有效孔隙率 n 保持常量，n 对 D_L 的影响实际上也反映进去了。通常情况下，不均匀程度 η 增大，即较小的颗粒充填了较大颗粒形成的空隙时，介质的有效孔隙率 n 变小。因此，随着 η 增大、n 减小，D_L 增大。

Klotz 等认为前述关于 D_L 依赖于 $P_e(u_d/D_m)$ 的变化规律，由于 P_e 数中仅考虑多孔介质的平均粒径 d 而未考虑颗粒的不均匀系数 η，因此是不全面的。η 对 D_L 产生明显影响，这点是用来解释野外弥散试验求出的 D_L 较室内实验所求 D_L 大几个数量级的原因之一，因为实验常用较均匀的颗粒级配。

用于确定横向弥散系数的实验做得较少，已做的 P_e 数的范围多是 $10^{-2} \sim 10^{4}$。将数值点绘

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

在以$\frac{D_T}{D_m}$为纵坐标、$\frac{u_d}{D_m}$为横坐标的双对数纸上，其曲线形状和分区均与纵向弥散系数实验相类似。只是在同一 P_e 数的情况下，横向弥散系数 D_T 小于纵向弥散系数(第 I 区除外，该区内两曲线相重合)，见图 3-5 所示。

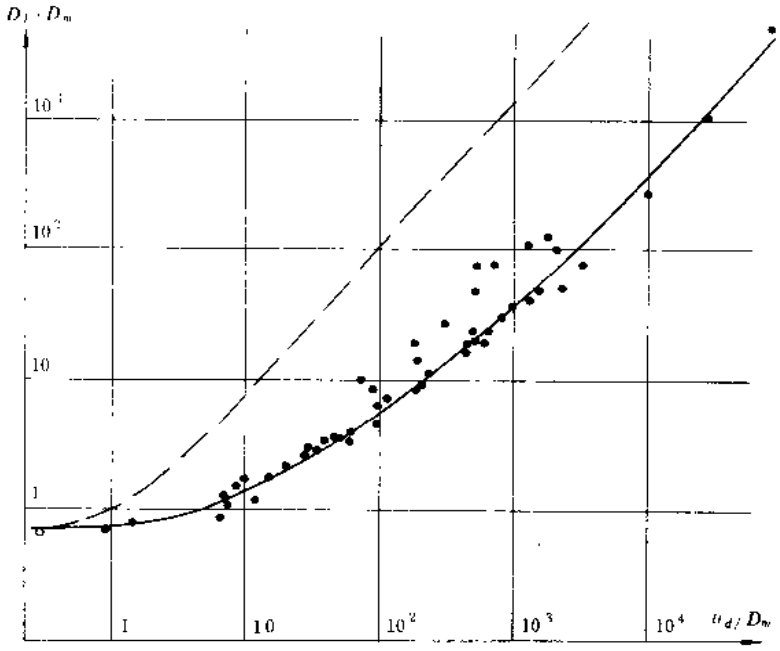


图 3-5 $\frac{D_T}{D_m}$与$\frac{u_d}{D_m}$实验曲线

§3-3 水动力弥散的尺度效应

§3-3-1 尺度效应

多孔介质水动力弥散尺度效应是指空隙介质中弥散度随着溶质运移距离增加而增大的现象。其具体表现是：野外弥散试验所求出的弥散度远远大于在实验室所测出的值，相差可达 4～5 个数量级；即使是同一含水层，溶质运移距离越大，所计算出的弥散度也越大。越来越多的室内外弥散试验不断地证实了空隙介质中水动力弥散尺度效应的存在。

为了克服这一障碍，阐明多孔介质中水动力弥散尺度效应的机制及其规律，吸引了众多学者对该问题进行广泛和深入的研究。归纳起来包括四个方面：一是确定性方法。从微观尺度研究溶质在空隙介质中运移的物理机制，重新检验对流-弥散基本方程的可行性，尤其是空隙介质中引入 Fick 扩散定律的可靠性。二是随机方法。其基本依据是含水层非均质的事实。在非均质含水层的物理性质、水力性质和溶质运移性质按某种随机模型分布的假定下，建立溶质运移随机方程和水动力弥散系数的表达式。三是室内与野外试验。通过设计专项的水动力弥散试验，如空隙介质的非均质结构，深入研究尺度效应的影响因素。四是为避免或减小尺度效应而进行的方法性探讨。如用低维的对流-弥散模型去模拟高维的溶质运移问题，可使计算出的

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

弥散度偏大。

§3-3-2 尺度效应与典型单元体

对尺度效应的恰当解释，离不开从微观的尺度上讨论地下水质点的运动。水动力弥散包括机械弥散和分子扩散。机械弥散是指微观尺度上质点流速相对于孔隙平均流速的差异所引起的溶质分散现象。机械弥散产生的原因是：同一空隙断面上水质点流速不等于平均空隙流速，不同空隙中水质点流速不同以及空隙骨架的阻碍使流线相对于平均流速产生起伏。机械弥散反映了空隙介质骨架结构的特征，但单纯的机械弥散不能形成横向弥散。

在地下水动力弥散理论中，用弥散度(α)或弥散系数(D)来表示空隙介质的弥散特征。根据 Bear(1972)的定义，弥散度是反映空隙介质骨架结构的特征长度(量纲为[L])，也就是说这一"特征长度"反映了对弥散作用起决定性影响的空隙介质性质，即孔隙度、颗粒形状、颗粒不均匀系数、颗粒大小、孔隙连通性与弯曲性等。对于理想的均匀介质，弥散度是一个常数。而实际含水层都不存在绝对的均质，如局部的沉积韵律变化、微层理、细裂隙到区域地层的透镜体夹层等。

Klotz 等(1974)在室内做了 2500 次关于人工介质和天然介质的一维弥散试验，对弥散系数与空隙介质特征指标进行了系统分析。结果表明：弥散度受颗粒不均匀系数与颗粒大小的影响最大。大量室内外弥散试验也证明了水动力弥散主要受空隙介质空间上变化特征的影响。

通过微观水平分析，虽然可以弄清机械弥散的机理，但仍无法解决实际的地下水溶质运移问题，因此必须从微观水平上升到宏观水平。一般的作法是，将单组分的对流-扩散方程中各未知量在典型单元体上取空间平均。典型单元体是假定存在的，无法测量其大小，它表示能够反映空隙介质特征在宏观上"均匀"的最小单位。

通常将研究空隙介质水动力弥散划分为 4 种尺度：空隙、实验室、单含水层与区域含水层。实验室所有的介质，多是由均匀的砂组成。但即使与室内同样粒径的多孔介质，由于野外地层往往具有明显的非均质性，如沉积韵律变化、透镜体夹层等，故野外所测得的弥散度要比室内大。野外弥散试验规模越大，弥散度也越大。即水动力弥散具有尺度效应。对尺度效应的准确数学表达式或解释必须以空隙介质空间非均质变化的概念为基础，这一概念要求同时考虑连续的各种尺度。这是因为在一个天然含水层中，不同介质尺度对现场的溶质运移起作用，空隙介质在空间上的非均质表现为以较远的运动距离来取代。

图 3-6 说明局部非均质对溶质运移的影响。渗透系数为 K_2 的介质中夹有一层渗透系数 K_1 的介质，$K_1>K_2$，溶质在 K_1 介质中运移速度更快，使得弥散晕占据更大的范围。在下游较早地观测到浓度锋面，所计算出的弥散度较按 K_2 均匀介质计算值偏大。

下面以多孔介质为例进行分析。

从微观尺度到宏观尺度，多孔介质的非均质性都是普遍存在的。孔隙尺度中的非均质主要表现为孔隙大小的变化；实验室尺度中的非均质，是细砂(或细砾)到粗砂(或中砾)大小的变化及更细粒的充填分布；在单含水层尺度下则表现为细砂—粗砂(或砾)沉积韵律的变化；而在区域尺度下则表现为不同成因所形成含水层的分布与变化。将上述概念概化为图 3-7 所示的图形。其中非均质性具有自相似性，或更保险地说，多孔介质的非均质性具有随机统计意义上的自相似性。

对于孔隙尺度的多孔介质，如果存在着一个包含一定数量的颗粒及空隙面能得到一个稳定的孔隙度值，这种介质是均匀的，可以得出相应的渗透系数与弥散度值；当所研究的范围是

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

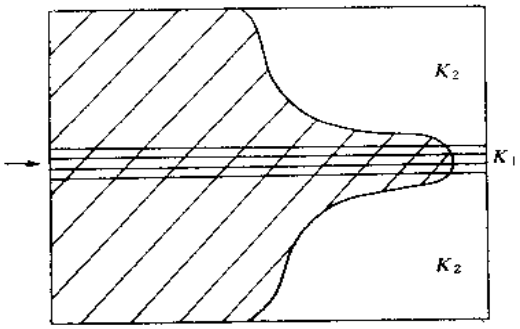


图 3-6　局部非均质对溶质运移的影响
$K_1>K_2$

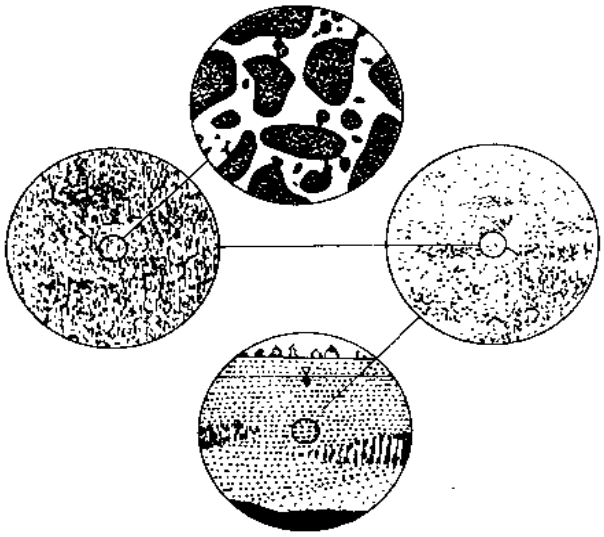


图 3-7　不同尺度下非均质的空间变化概念模型
（据 Spitz 修改）

一个含水层，具有一定沉积韵律并包含各种透镜体时，存在着体积较大的典型单元体，即该含水层在宏观上是“均质”的；当所研究的范围大到包含各种成因、不同时代的地层时，也存在着更大的典型单元体，也可以认为这种介质为巨观上“均质”的。传统的观点以典型单元体的假定为前提，认为对于不同尺度的多孔介质，在相应的典型单元体上定义弥散与渗透参数，得到一个相对稳定的弥散度。只是随着研究范围扩大，相应的典型单元体增大，所计算出的弥散度也增大。这种观点存在两个缺陷：一是典型单元体不稳定，即一定尺度下的“均质”是不稳定的。同一含水层中，从微观尺度到宏观尺度的连续变化过程中，所定义的典型单元体大小是连续变化的。二是典型单元体没有定量信息，只是为了解释需要而引入的虚设量，无法具体测量其大小，也就无法定量描述尺度效应。

§3-3-3　尺度效应的分形特征

宏观弥散与微观弥散的机制是相同的，即多孔介质的非均匀性进而造成流速不均匀为产生水动力弥散的主要因素（图 3-6）。弥散度反映了多孔介质骨架结构的特征长度，它随着研究尺度的增加而增大。不同尺度下多孔介质结构具有自相似性（图 3-7），故尺度效应也具有自相似性。这为定量解释尺度效应奠定了基础。

前面讨论了使十多年来不断完善的水动力弥散理论在研究地下水污染等环境问题中遇到了难以解决的困难——尺度效应。既然弥散度随着研究尺度增加而不断增大，这不得不提出这样一个问题：弥散度还能否作为合理描述多孔介质水动力弥散的定量指标？由于传统理论所引入的典型单元体是假定的一个抽象概念，它不但不稳定，而且还缺乏定量信息。多孔介质的非均质性及弥散度尺度效应自相似性的存在预示着分形将是描述多孔介质水动力弥散尺度效应的合理概念。

分维是分形的定量表示，有多种定义方法。在实际工作中，常根据测度关系确定维数。若把立方体一边的长度扩大到 2 倍，那么 2 维测度的表面积即为 2^2 倍，3 维测度的体积即为 2^3 倍。因此，若把单位长度扩大到 2 倍，并假定它能成为具有 2^D 倍的量，那么此量也称之为 D 维数的量。若把具有 D 维测度的量假定为 X，长度为 L，则有如下关系式

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$L \propto X^{\frac{1}{D}} \tag{3-24}$$

多孔介质中水动力弥散尺度效应的具体表现是弥散度随着溶质运移距离的增加而增大。可将溶质运移距离 L, 视为度量弥散度的基准尺度。根据上述分维的定义，可将弥散度与基准尺度的关系标绘在双对数坐标纸上。若为直线则从另一角度说明尺度效应具有分形特征，直线的斜率即为尺度效应的分维。

对世界范围内所收集到的百余个水质模型中所使用的纵向弥散度 α_L 绘在双对数坐标纸上(图 3-8)，从图上可以看出纵向弥散度 α_L 从整体上随着尺度的增加而增大。许多研究者都曾用类似的图说明水动力弥散的尺度效应。Gelhar 等(1992)将 59 个不同现场所获得的弥散度按含水层类型、水力学特征、地下水流动状态、观测网类别、示踪剂、数据的获取方法、水质模型的尺度等整理后，对弥散度增大的规律进行了讨论。Neuman(1990)根据前人文献中所记载的 130 余个纵向弥散度进行了线性回归分析，综合该作者等人发展的准线性扩散理论，对尺度效应进行了解释与讨论。还有众多学者指出了弥散尺度效应的事实(Pickens 等，1981；Silliman 等，1987a，1987b；Yeh，1987；Gelhar，1986；等等)。

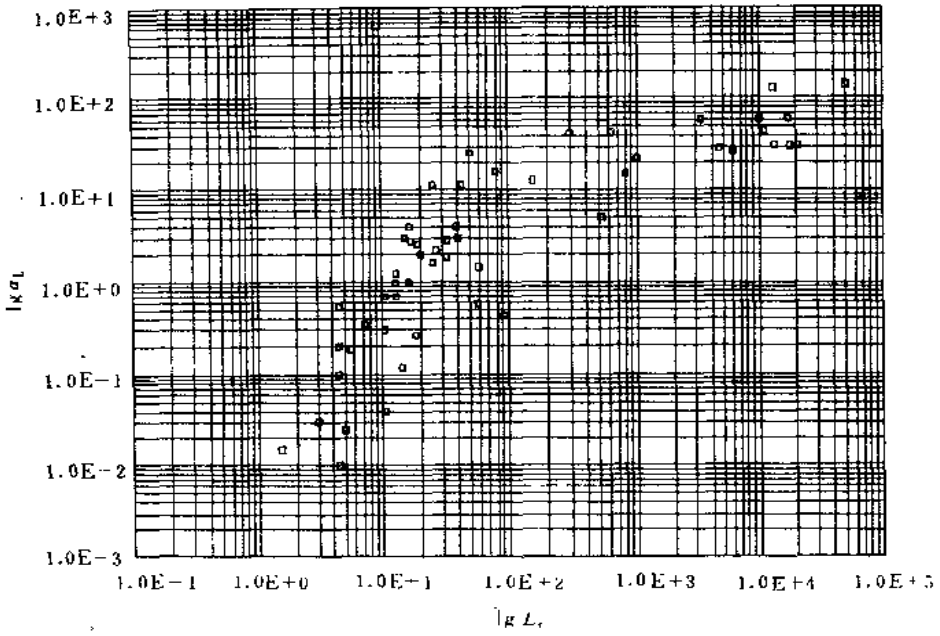


图 3-8　据所有弥散度 α_L 与尺度 L_s 所作出的 $\lg\alpha_L$-L_s 图

前人在解释弥散度尺度效应时，偏重于在整体上列举事实。我们将前人文献中记录的弥散度数值〔大部分取自 Gelhar(1992)的文献〕，按介质类型(孔隙与非孔隙的裂隙等介质)、模型类别(解析模型与数值模型)等分别作出弥散度与基准尺度的双对数分布，并分别给出不同介质中使用不同模型所求出参数的分维数。基准尺度是指研究区大小的度量，一般用污染物运移到观测孔的最大距离表示，或研究区的近似最大内径长度代替。表 3-1 列出了一系列纵向弥散度尺度效应的分维数。

由表 3-1 及相对应的 $\lg\alpha_L$-$\lg L_s$ 图所反映的纵向弥散度尺度效应具有如下变化特征：

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

表 3-1　不同模型中纵向弥散度尺度效应分维数

模型分类 / 岩性	解析模型				数值模型
	综合	一维	二维	三维	
孔隙介质	1.627	4.173	1.778	1.548	0.563
非孔隙介质	1.098				0.817

(1)数值模型所计算出的尺度效应较解析模型变弱了，即由数值模型所得出的纵向弥散度随研究尺度增加而增大的速度小于用解析模型所求出的相应值。可能的主要原因是在污染带运移(尤其是区域含水层中)的数值模型中，通常根据已有的钻孔资料或地质资料对水流及水质参数进行分区，给出不同的参数值。换言之是在远小于整体尺度的数值剖分单元上给出含水层参数的变化信息。由此可推知，在一个给定的溶质运移模型中，控制纵向弥散度变化的因素——尺度效应的分维数，将随着介质中非均质信息的增加而减小。Neuman(1990)在解释"数值校正模型所求出的弥散度随尺度增加而增大的速度远远小于用其他方法(如解析法)所求出的值"这一现象时认为，可能是数值模型常在超过模拟子域的尺度上给出了渗透系数的变化信息，而在子域内保持不变或其变化很缓慢，因此模型校正相当于从随机的渗透系数中过滤出低频(尺度变化幅度小)模式，使数值模型中弥散度的尺度效应不敏感。

(2)从解析模型按维数不同所计算出的尺度效应分维数结果看出，随着模型维数的增加，分维数减少，即随着维数的增加纵向弥散度随尺度增加而增大的速度渐小。正如上节所指出的那样：由于地质介质局部非均质的普遍性，使地下水运移具有三维特点(严格地讲)。由于水量模型是基于渗透流速来研究水头差作用下的水量的转化关系，虽然局部非均质的存在，但尚能构成具有统一水力联系的渗流场，因此局部非均质对水头的分布不致于产生明显的影响。而水质运移模型是研究在孔隙流速起主要作用下的质点的运移，其运移速度是非常缓慢的，水质点总是绕开相对透水性差的部分而有选择性地沿透水性好的部分运移。因此，即使是微小的非均质都有可能对水质的运移和分布起着明显的控制作用。依据上述分析，当用低维的对流-弥散模型去模拟实际上高维的水质运移问题时，将实际上高维的对流-弥散作用所引起的全部运移结果视为低维对流-弥散的作用，从而人为地高估了低维方向上实际存在的对流-弥散作用，即求出的弥散度偏大。

(3)利用解析模型和数值模型所求出的非孔隙介质中尺度效应分维数与孔隙介质中相应的值不同。可能得借助于在建立水流方程及对流-弥散方程所假设的典型单元体来理解。对孔隙介质而言(如前所述，特指松散的孔隙介质)，从实验室砂柱到野外现场的区域含水层，尺度范围从数米到数百公里，非均质的变化经历了从较均匀的砂(非均质体现为颗粒形状、充填等变化)、野外含水层中个别钻孔所揭露的局部含水层(非均质体现为地层压密、胶结、充填、层理的变化)、由多个钻孔所控制的单位含水层(非均质体现在沉积韵律的变化，局部弱透水或强透水透镜体的存在)，到包含多个含水层的区域含水层系统(非均质体现在不同成因含水层的分布与变化)。从各图中纵向弥散度围绕直线的分布来看，孔隙介质的非均质性具有比较强的自相似性。显然对子非孔隙介质来说，却不像松散孔隙介质那样受沉积因素的影响那么大，而是受到各种地应力的控制与影响。松散孔隙岩层中，空隙的分布是均匀的，构成具有统一水力联系、水量分布均匀的孔隙含水层系统。基岩中裂隙分布不均匀且具有方向性，通常只在岩层中局部范围相互连通而构成若干互不联系或联系很差的脉状含水系统。在成岩过程中所产生的成岩裂隙，比较均匀，如玄武岩成岩裂隙大多张开且密集均匀，连通较好。风化裂隙在原生裂隙

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

与构造裂隙的基础上进一步发育，形成密集均匀、相互连通的裂隙网络。构造裂隙具有较强的方向性，控制着区域非孔隙介质渗透性空间上的变化，如在向斜盆地的底部渗透性一般较好。对碳酸盐岩而言，在上述裂隙的基础上还会进一步发展到因化学溶蚀而形成的溶孔、溶洞。因而非孔隙介质的渗透性，从局部岩块到区域构造含水层也具有自相似律，这种自相似律受到构造、岩性、气候、地形等多种因素的控制，与孔隙介质渗透性变化的自相似律不同，所求出的尺度效应的分维数会有差别。

综上所述，产生空隙介质水动力弥散尺度效应的主要原因是空隙介质的非均质性，这种非均质性具有自相似性。传统的观点也承认空隙介质的非均质性是产生尺度效应的主要原因，并引入典型单元体的抽象概念。从以上的讨论可知，尽管传统观点认为不同尺度的空隙介质对应着不同大小的典型单元体，但典型单元体既不稳定，又不具有可测性，无法定量解释尺度效应的变化规律。分形理论提供了一个新的视角，正像测量海岸线的长度，用航测与卫测得出不同长度结果一样，用不同尺度（溶质运移距离）去测量空隙介质中的水动力弥散过程可得出不同的弥散度。分维则提出了尺度效应定量变化的指标。

由图 3-8 中看出，纵向弥散度的对数值并非严格地按直线分布。可能的原因：一是实际含水层中的非均质性很难具有严格自相似性；二是在所有示踪试验或污染带数值模拟中，很难用同一标准选择基准尺度与纵向弥散度，如污染带数值模拟中的不同时间段纵向弥散度可能不一样（因溶质运移距离不同）；另外数据来自世界各地，即使都是孔隙含水层，也不能保证具有相同的沉积条件，即统一的自相似规律。但随着研究工作的深入，资料的不断积累，可按岩性（如沉积层、冰积层、洪积物等孔隙介质）作出更具有代表性的分布，求出多孔介质水动力弥散尺度效应更精确的分维。

上述求出的尺度效应分维，对研究空隙介质中水动力弥散具有重要意义。尺度效应分维作为一种定量指标，描述纵向弥散度随尺度增加而增大的规律，为地下水污染的模拟与治理提供了新的概念与方便的参数初步估计方法。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第四章　水动力弥散方程的解析解法

求解复杂的水动力弥散方程定解问题非常困难，实际问题中多靠数值方法求解。但各种数值解法要靠解析解进行检验和比较，而且常根据解析解的实用条件来设计室内或野外试验，并用解析解去拟合观测资料以求得水动力弥散系数。因此解析解法仍是分析水动力弥散现象的一种基本手段。

§4-1　基 本 解

多孔介质中水动力弥散方程与溶液中的对流-扩散方程具有相类似的形式，因此可以把对流-扩散方程的一些解法放到水动力弥散方程的求解中去。我们将瞬时注入点源问题的解称为基本解。由基本解出发，利用叠加原理可以导出线源、面源、多点源以及连续注入问题的解。

§4-1-1　三维空间瞬时点源

我们首先考虑最简单的条件：①均质各向同性介质；②静止流场 $u=0$，弥散系数为常数，即 $D_{xx}=D_{yy}=D_{zz}=D=T^*D_m$，流体密度为常数（$\rho=$常量）；③$t=0$ 时，在原点处瞬时注入质量为 m 的溶质。这里我们将瞬时点源的位置取为坐标原点。显然在该条件下，浓度 C 的分布是对称于原点的。这时在直角坐标系中，对流-弥散方程(2-34)式可写成下列简式（纯弥散方程）

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}\right) \tag{4-1}$$

其中，D 表示多孔介质的分子扩散系数。由于上式的球对称性，故建立球坐标系下的纯弥散方式，讨论起来更方便。

取半径为 R 和 $R+\mathrm{d}R$ 的两个球面所构成的单元体为均衡段，根据质量均衡得到

$$W\cdot n\cdot J_D|_R-W\cdot n\cdot J_D|_{R+\mathrm{d}R}=V_v\frac{\partial C}{\partial t}$$

式中：W 为球面积；n 为有效孔隙率；J_D 为弥散通量（包括分子扩散通量和机械弥散通量），$J_D=-D\dfrac{\partial C}{\partial R}$；$V_v$ 为均衡段空隙体积。

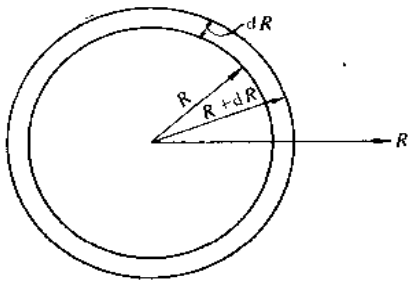


图 4-1　两球面构成的均衡段

上式可写成

$$4\pi R^2\cdot n\cdot\left(-D\frac{\partial C}{\partial R}\right)-4\pi(R+\mathrm{d}R)^2\cdot n\left[-D\left(\frac{\partial C}{\partial R}+\frac{\partial^2 C}{\partial R^2}\cdot\mathrm{d}R\right)\right]$$

$$=\frac{4}{3}\pi\left[(R+\mathrm{d}R)^3-R^3\right]\cdot n\cdot\frac{\partial C}{\partial t}$$

略去高阶微量，化简后

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\left(\frac{\partial^2 C}{\partial R^2}+\frac{2}{R}\cdot\frac{\partial C}{\partial R}\right)=D\cdot\frac{1}{R^2}\cdot\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial C}{\partial R}\right)$$

于是，该定解问题可以写成

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{D}{R^2}\cdot\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial C}{\partial R}\right)\qquad(R\geqslant 0,t>0)\qquad(4\text{-}2)$$

$$C(R,t)|_{t=0}=0\qquad(R>0)\qquad(4\text{-}3)$$

$$C(R,t)|_{R\to\infty}=0\qquad(t>0)\qquad(4\text{-}4)$$

$$C(R,t)|_{R=0}<\infty\qquad(t>0)\qquad(4\text{-}5)$$

$$\int_0^\infty C\cdot n\cdot 4\pi R^2\mathrm{d}R=m\qquad(t>0)\qquad(4\text{-}6)$$

式(4-5)是保证点源处浓度为有限值。某些文献中，(4-6)式中没有有效空隙率 n，是错误的。

利用 Boltzmann 变换可将此问题变为常微分方程问题，然后再求解。

在上述微分方程和定解条件式(4-2)至(4-6)中，共有 5 个变量，即 C〔ML^{-3}〕、R〔L〕、t〔T〕、D〔L^2T^{-1}〕、$\frac{m}{n}$〔M〕(将 m 和 n 合并为 $\frac{m}{n}$，视为一个变量，以减少变量数)，即有

$$C=C(R,t,D,\frac{m}{n})$$

或

$$f(C,R,t,D,\frac{m}{n})=0$$

这 5 个变量涉及有 3 个基本因次：M、L 和 T。根据因次分析中的 π 定理*，可设两个无因次变量组合：

$$\xi=\frac{R^2}{Dt}\qquad(4\text{-}7)$$

和

$$f(\xi)=\frac{C(Dt)^{\frac{3}{2}}}{m/n}\qquad(4\text{-}8)$$

不难证明(4-8)式是 ξ 的函数。下面分析用 π 定理寻找无因次的变量组合过程。

对于该问题而言，有两个独立的 π 参数，依 π 定理有

$$F(\pi_1,\pi_2)=0$$

其中，π 是无因次的变量组合。所谓独立的参数不能由其他参数相乘、除而得。例如，对于两个 π，若 $\pi_2=\frac{3}{2\pi_1}$，则说 π_1、π_2 不是互为独立的。另外，还要求 π_1 和 π_2 包含所有的基本因次。

实际上，π_1 和 π_2 可以各有许多组合。例如，从(4-2)式看出，t 与 $\frac{R^2}{D}$ 是同因次的，因此它们之比是一种无因次的变量组合 $\frac{Dt}{R^2}$(即 π 参数)。另外，由(4-6)式可见，$\frac{CR^3}{m/n}$ 也是无因次的变量组合(π 参数)。而且这两个 π 参数都是独立的，并包含了所有 5 个变量中的基本因次。故依 π 定理有

$$F_1\left(\frac{Dt}{R^2},\frac{CR^3}{m/n}\right)=0$$

---

* π 定理是指，如果某一物理现象涉及的变量有 n 个，其所包含的基本因次为 m 个，则可用($n-m$)个独立的无因次的变量组合(称为 π)构成的一般函数关系，即 $F(\pi_1,\pi_2,\cdots,\pi_{n-m})=0$ 来刻划这一物理现象中各变量间的关系。当然，这些无因次变量组合应包含全部变量。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

我们还可以找出许多 π_1、π_2 的不同组合形式，只要满足上述的条件即可。这些组合形式有：①π_1、π_2 都是无因次的变量组合；②π_1、π_2 彼此独立；③π_1、π_2 包含了全部的变量及基本因次。但我们发现，如果取两个无因次的变量组合为

$$\xi = \frac{R^2}{Dt}$$

和

$$f(\xi) = \frac{C(Dt)^{\frac{3}{2}}}{m/n}$$〔因为 R^3 与 $(Dt)^{\frac{3}{2}}$ 同因次〕

将得到最简单的常微分方程，这时

$$F\left(\frac{R^2}{Dt}, \frac{C(Dt)^{\frac{3}{2}}}{m/n}\right) = 0$$

$$\frac{C(Dt)^{\frac{3}{2}}}{m/n} = f\left(\frac{R^2}{Dt}\right) = f(\xi)$$

可将(4-8)式写成〔方便起见，记 $f(\xi)$ 为 f〕

$$C = \frac{fm}{n(Dt)^{\frac{3}{2}}} \qquad (*)$$

(4-2)式左端项

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{m}{nD^{\frac{3}{2}}}\left[f\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}t^{-\frac{3}{2}} + t^{-\frac{3}{2}}\frac{\partial f}{\partial t}\right]$$

$$= -\frac{m}{nD^{\frac{3}{2}}t^{\frac{5}{2}}}\left[\frac{3}{2}f + \frac{R^2}{Dt}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}\right] \qquad (4\text{-}9)$$

(4-2)式右端项

$$\frac{D}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{\partial C}{\partial R}\right)$$

$$\overset{(*)}{=} \frac{D}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2\frac{fm}{n(Dt)^{\frac{3}{2}}}\right)$$

$$= \frac{m}{nD^{\frac{3}{2}}t^{\frac{5}{2}}}\left[\frac{4R^2}{Dt}\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}\xi^2} + 6\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}\right] \qquad (4\text{-}10)$$

将(4-9)和(4-10)式代入(4-2)式中，整理后得到

$$\frac{\mathrm{d}^2f}{\mathrm{d}\xi^2} + \left(\frac{3}{2\xi} + \frac{1}{4}\right)\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + \frac{3}{8\xi}f = 0 \qquad (4\text{-}11)$$

定解条件也作相应的变换。(4-3)与(4-4)式可归并为〔注意(4-7)和(4-8)〕

$$f(\xi)|_{t\to\infty} = 0 \qquad (4\text{-}12)$$

(4-5)式变为

$$f(\xi)|_{t=0} < \infty \qquad (4\text{-}13)$$

(4-6)式改写成

$$4\pi\int_0^\infty \frac{nCR^2}{m}\mathrm{d}R = 1$$

再变换上式：

已知 $\xi = \frac{R^2}{Dt}$，$(Dt\xi)^{\frac{1}{2}} = R$，$\mathrm{d}R = (Dt)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}(\sqrt{\xi})$，故

$$4\pi\int_0^\infty \frac{nCR^2}{m}(Dt)^{\frac{1}{2}}\mathrm{d}(\sqrt{\xi})$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= 4\pi\int_0^{\infty} f \cdot \xi \mathrm{d}(\sqrt{\xi}) = 1 \tag{4-14}$$

这样，原来的偏微分方程定解问题，通过 Boltzmann 变换，转变为常微分方程定解问题。

虽然(4-11)式是变系数微分方程，但可以通过变换使其易于求解，令

$$\eta = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + \frac{1}{4}f \tag{4-15}$$

则有

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\xi} = \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\xi^2} + \frac{1}{4}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}$$

于是(4-11)式变成

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\mathrm{d}\xi} + \frac{3}{2\xi}\eta = 0 \tag{4-16}$$

现在来解上述方程。移项并分离变量

$$\frac{\mathrm{d}\eta}{\eta} = -\frac{3}{2}\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi}$$

积分

$$\ln\eta = \ln\xi^{-\frac{3}{2}} + C$$

即

$$\eta = \xi^{-\frac{3}{2}} \cdot \mathrm{e}^{C} \approx C_1 \cdot \xi^{-\frac{3}{2}}$$

代入(4-15)中，这时由(4-11)式的二阶常微分方程变为一阶微分方程

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + \frac{1}{4}f = \frac{C_1}{\xi^{\frac{3}{2}}} \tag{4-17}'$$

上两式中，C'和 C_1 均为积分常数，下面确定 C_1。

依(4-13)式，当 $\xi=0$ 时，$f<\infty$，即 f 为有限值；据(4-11)式可知，$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\xi^2}$存在，则$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}$必存在，即$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}$必为有限值。由(4-17)′可知：$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi}$为无限值，当 $\xi=0$ 时，f 也是有限值，故必有 $C_1=0$。于是，(4-17)′式改写成

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\xi} + \frac{1}{4}f = 0 \tag{4-17}$$

至此，(4-11)式已变为一阶常微分方程。

求解(4-17)式。将上式移项、分离变量后得

$$\frac{\mathrm{d}f}{f} = -\frac{1}{4}\mathrm{d}\xi$$

积分后整理得

$$f = \mathrm{e}^{-\frac{\xi}{4}} \cdot \mathrm{e}^{C} \approx C_2 \mathrm{e}^{-\frac{\xi}{4}} \tag{4-18}$$

现在来确定积分常数 C_2。先将(4-18)、(4-14)式换元，令

$$\lambda = \frac{\sqrt{\xi}}{2}, \quad \mathrm{d}\lambda = \frac{1}{2}\mathrm{d}(\sqrt{\xi})$$

(4-18)式变为

$$f = C_2 \cdot \mathrm{e}^{-\lambda^2} \tag{4-19}$$

(4-14)式变为

$$4\pi\int_0^{\infty} 4\lambda^2 \cdot C_2 \mathrm{e}^{-\lambda^2} \cdot 2\mathrm{d}\lambda$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= 32\pi C_2 \int_0^{\infty} \lambda^2 e^{-\lambda^2} d\lambda$$

$$= 1 \qquad (**)$$

先看积分项：

$$\int_0^{\infty} \lambda^2 e^{-\lambda^2} d\lambda = -\frac{1}{2}\int_0^{\infty} \lambda d(e^{-\lambda^2})$$

$$= -\frac{1}{2}(\lambda e^{-\lambda^2}\Big|_0^{\infty} - \int_0^{\infty} e^{-\lambda^2} d\lambda)$$

$$= -\frac{1}{2}(0 - \frac{\sqrt{\pi}}{2})$$

$$= \frac{\sqrt{\pi}}{4}$$

代回式(**)中，有

$$32\pi C_2 \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{4} = 1$$

即 $$C_2 = \frac{1}{8}\pi^{-\frac{3}{2}}$$

将上式代入(4-18)中

$$f = \frac{\pi^{-\frac{3}{2}}}{8} e^{-\frac{\xi^2}{4}}$$

再将(4-7)、(4-8)式代入上式中，得到

$$\frac{C(Dt)^{\frac{3}{2}}}{m/n} = \frac{1}{8\pi^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{R^2}{4Dt}}$$

于是得到

$$C(R,t) = \frac{m}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{R^2}{4Dt}} \qquad (4\text{-}20)$$

上式即为空间瞬时点源的解。该解非常重要，其他许多问题的解均由此解导出。

分析(4-20)式不难得出：①等浓度面为圆心位于原点处的球面；②浓度 $C(R,t)$ 在空间上的分布如图4-2所示。图4-2说明，任何时刻的浓度最大值皆在原点处，其浓度为

$$C(0,t) = \frac{m}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}}$$

表示 $C(0,t)$ 与 $t^{\frac{3}{2}}$ 成反比，即随着时间的增加，原点处的浓度减小。

由于 $e^{-4.62} \approx 0.01$，即当 $\frac{R^2}{4Dt} = 4.62$ 时，或者说在 $R = 4.3\sqrt{Dt}$ 处，其浓度为原点处的1%。该值可视为弥散晕的边界。不难看出，随着时间的推移，弥散晕的范围不断增大。

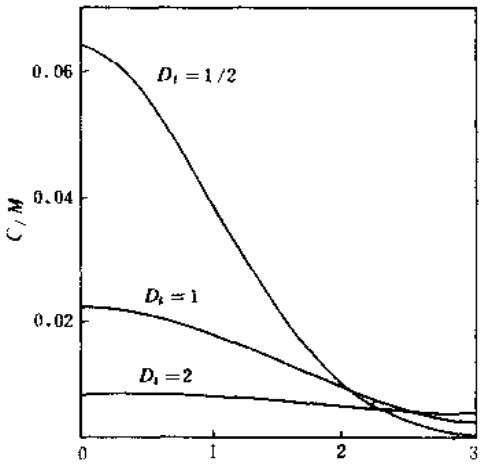


图 4-2　空间瞬时点源浓度分布曲线

§4-1-2　空间瞬时无限线源与平面瞬时点源

我们来考虑向一口承压完整井中瞬时注入示踪剂，求浓度在时空上的分布规律(图4-

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

3a)。通过映射后，可将该问题转化成三维空间上的一条无限长瞬时线源(图 4-3b)。

取三维空间上 z 轴与瞬时线源重合。假定单位长度线源瞬时注入示踪剂的质量为 m_l(图 4-3c)。

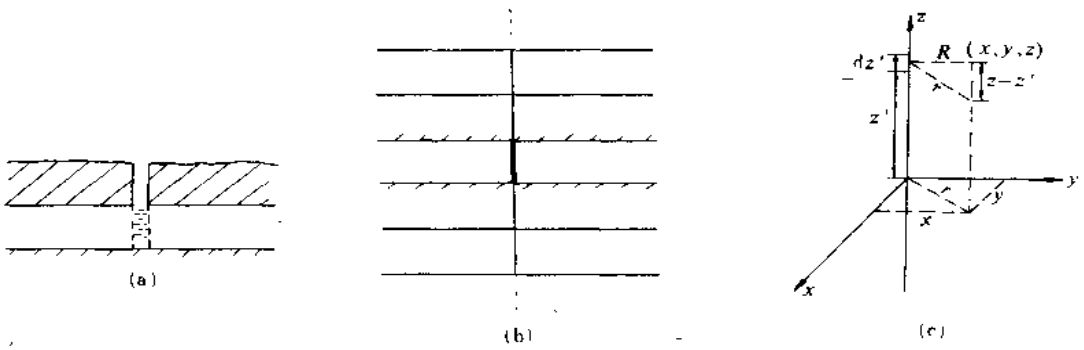


图 4-3　平面瞬时点源

在线源上任意位置 z' 处取一微分线源段 dz'，将其视为点源的作用，其瞬时注入示踪剂的质量为 $m_l dz'$。该瞬时点源对空间上任意点(x,y,z)处所产生的微分浓度可利用(4-20)式来表示，即

$$dC = \frac{m_l dz'}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{x^2+y^2+(z-z')^2}{4Dt}}$$

于是无限长瞬时线源对点(x,y,z)处所产生的浓度，因考虑到微分方程(4-1)式是线性的，故可以采用叠加方法，在此处线源的作用可视为点源的连续分布，因此可采用积分法，即

$$C = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{m_l}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2+(z-z')^2}{4Dt}} dz'$$

$$= \frac{m_l}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-z')^2}{4Dt}} dz'$$

其中，$r^2 = x^2 + y^2$，配元后上式变成

$$C = \frac{m_l}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} (-2\sqrt{Dt}) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{(z-z')^2}{4Dt}} d\left(\frac{z-z'}{2\sqrt{Dt}}\right)$$

$$= \frac{m_l}{8n(\pi Dt)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} (-2\sqrt{Dt})\left(-2\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right)$$

即

$$C(r,t) = \frac{m_l}{4\pi nDt} e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \tag{4-21}$$

上式即为空间瞬时无限线源的基本解。不难看出，浓度 C 与 z 无关，即在 z 方向上不产生弥散。也就是说空间上的无限线源弥散问题转化成 xy 平面上的二维弥散问题。因此，该问题也可称为平面瞬时点源问题的基本解。

现在再回头考虑在厚度为 M 的承压完整井中瞬时注入示踪剂的情况。

前面的 m_l 是指单位长度线源瞬时注入示踪剂的质量，对于厚度为 M 的含水层，其线源长度也是 M。因此，若其瞬时注入示踪剂的质量为 m_M，则

$$m_l = \frac{m_M}{M}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

于是，(4-21)式写成

$$C(r,t)=\frac{m_M}{4\pi nMDt}\,e^{-\frac{r^2}{4Dt}} \tag{4-22}$$

这就是在承压完整井中瞬时注入示踪剂条件下的浓度分布公式。某些二维弥散问题也可以上式为基础，通过叠加，很容易获得有关的解。

§4-1-3 空间瞬时无限面源、平面瞬时无限线源与一维瞬时点源

在空间直角坐标系中，取 yoz 坐标面与面源重合，并设单位面源瞬时注入质量为 m_f 的示踪剂(图 4-4)。

无限面源可视为由无数连续排列的无限线源所组成。

从无限面源中分割出一根平行于 z 轴、在 y' 处、宽度为 dy' 的窄长形微分面源，它对空间上任意点(x,y,z)处的作用，与空间瞬时无限线源相当。后者的单位长度注入质量 m_l 与前者的 $m_f dy'$ 对应。于是，利用(4-21)式得

$$dC=\frac{m_f dy'}{4\pi nDt}\,e^{-\frac{x^2+(y-y')^2}{4Dt}}$$

对于整个瞬时无限面源，有

$$\begin{aligned}C&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{m_f}{4\pi nDt}\,e^{-\frac{x^2+(y-y')^2}{4Dt}}dy'\\&=\frac{m_f}{4\pi nDt}\,e^{-\frac{x^2}{4Dt}}(2\sqrt{Dt})\\&\quad\cdot\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\frac{(y-y')^2}{4Dt}}d\left(\frac{y-y'}{2\sqrt{Dt}}\right)\\&=\frac{m_f}{2\pi n\sqrt{Dt}}\,e^{-\frac{x^2}{4Dt}}\left(2\frac{\sqrt{\pi}}{2}\right)\end{aligned}$$

即

$$C(x,t)=\frac{m_f}{2n\sqrt{\pi Dt}}\,e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \tag{4-23}$$

上式中浓度与 y 和 z 无关，也就是说上述定解问题实质上是一维弥散问题。

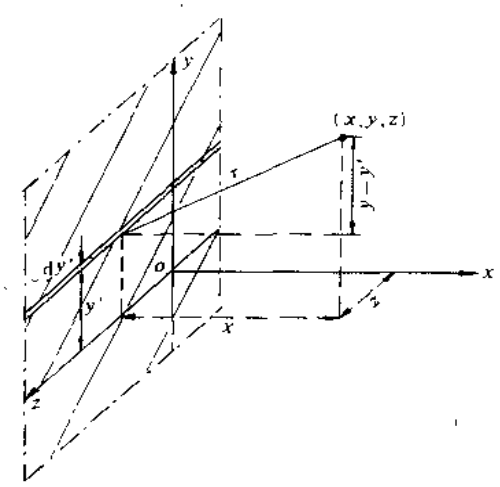


图 4-4 一维瞬时点源

§4-1-4 有限空间(平面)问题

上述讨论的均属于无限边界问题。对于有限边界问题，如果边界简单，如 $\frac{\partial C}{\partial n}=0$，则可以利用类似于水流问题中的反映法，将其变成为无界问题，然后再采用叠加方法求出所需要的解。

这里，$\frac{\partial C}{\partial n}=0$ 相当于水流问题中的隔水边界。假设在点(x_0,y_0)对半无限含水层中瞬时注入质量为 m 的示踪剂，可以设想在 $\partial C/\partial n=0$ 边界的另一侧有一个与该点相对称的井且具有相同强度的另一个源(图 4-5a)。这样，含水层中的示踪剂浓度分布可由这两个源(包括一个虚源)的解叠加后求得其解，即

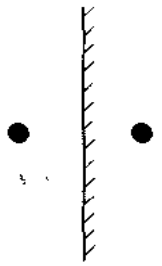


图 4-5 "隔水"边界示意图

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$C=\frac{m}{4\pi nDt}\left(e^{-\frac{x^2+(y-y_0)^2}{4Dt}}+e^{-\frac{x^2+(y+y_0)^2}{4Dt}}\right)$$

当然，和地下水流中的反映法一样，上述基本的反映类型可以推广到带状含水层、矩形含水层、一定角度的扇形含水层及区域中含有多个源的问题。只不过是将有限含水层变成无限含水层后，将反映后的虚源与原有的源叠加后，求出实际含水层中的示踪剂浓度分布。具体的反映法使用，可以参考《地下水不稳定井流计算方法》一书中的有关章节。

§4-2 一维水动力弥散问题

§4-2-1 无限长多孔介质柱体，示踪剂瞬时(脉冲式)注入

设有一无限长均质砂柱，其中原有溶液浓度$C_0=0$，并以速度u稳定流动。在$t=0$时，在$x=0$处瞬时注入质量为m的示踪剂。取砂柱的中心轴线为x轴，且以流速方向为正，求浓度$C(x,t)$的分布(图 4-6)。

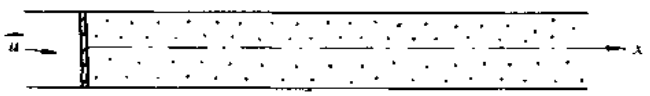


图 4-6 无限长砂柱中瞬时注入示踪剂

与水动力弥散方程(2-34)式相比，此时有

$$u_x=u,\qquad u_y=u_z=0$$

$$D_{xx}=D_L,\qquad \frac{\partial C}{\partial y}=\frac{\partial C}{\partial z}=0$$

于是，(2-34)式可化简成

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4-24}$$

上式即为我们所要研究问题的水动力弥散方程。

(4-24)与前节中一维瞬时点源问题相比，两者都是一维弥散，且初始条件与边界条件均相同。其差别仅是前面课题中系静止流场$u=0$，而这里多了一个对流项，即差别在于微分方程。

我们知道，前节中一维瞬时点源问题已有现成的解，现在能否直接利用它的解呢？

回答是肯定的。但我们要做适当的变换，即采取动坐标(令$X=x-ut$)的办法，让坐标原点跟着流速u一起前进。这样，该系统相对于静止坐标而言，它存在着对流；但相对于这种动坐标而言，运动速度却为零($u=0$)。通过上述变换，就可以直接利用上节中一维瞬时点源问题的解(4-23)式。

下面证明：通过这种变换，可消去(4-24)式中的对流项。

令 $$X=x-ut,T=t$$

依复合函数求导法则有

$$\frac{\partial C}{\partial T}=\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial t}\cdot\frac{dt}{dT}+\frac{\partial C}{\partial t}\cdot\frac{dt}{dT}$$

$$=\frac{\partial C}{\partial x}u+\frac{\partial C}{\partial t} \tag{4-25}$$

及

$$\frac{\partial C}{\partial X}=\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial x}{\partial X}=\frac{\partial C}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial X^2}=\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{4-26}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

上两式代回(4-24)式中

$$\frac{\partial C}{\partial T}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial X^2} \tag{4-27}$$

从新的坐标系统来看，此微分方程没有对流项了，因此可以直接利用前节中的基本解(4-23)式。将新变量 X、T 反变换后得到

$$C(x,t)=\frac{m/w}{2n\sqrt{\pi D_L t}}\,e^{-\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}} \tag{4-28}$$

式中：$m/w=m_f$，表示单位横截面积上瞬时注入示踪剂的质量；w 表示砂柱横截面积。

从概率论可知，正态分布密度函数：

$$f(x)=\frac{m/(wn)}{\sqrt{2\pi}\cdot\sigma}\,e^{\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{4-29}$$

式中：x 为正态变量；μ 为正态变量的数学期望(或正态变量的均值)；σ^2 为正态变量的方差；σ 为正态变量的均方差，或标准差。

将(4-28)式与正态分布密度函数(4-29)式相比较，可以看出：

(1)该问题的浓度 $C(x,t)$ 是按正态分布的单峰曲线，其数学期望为 $\mu=ut$，即浓度曲线出现峰值的 x 坐标。

(2)曲线是对称的，对称点在 $x=ut$ 处。

(3)当 $x\to\infty$ 或 $x\to-\infty$ 时，$C\to 0$。

(4)方差 $\sigma^2=2D_L t$，均方差 $\sigma=\sqrt{2D_L t}$，它反映了浓度的分散程度。σ 越大，分布越分散。显然，随着 t 的增大，浓度越分散(图 4-7)。同样随着 D_L 的增大，浓度也将越分散。

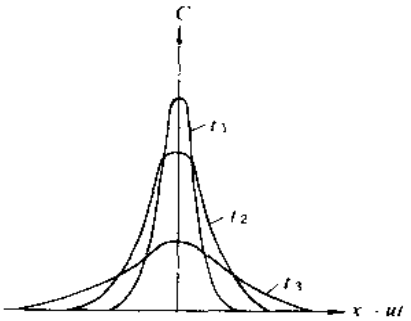


图 4-7 一维砂柱中瞬时注入示踪剂后浓度的分布

(5)曲线在 $x=\mu\pm\sigma$ 处为拐点，拐点处的浓度 $C(\mu\pm\sigma)=0.607C_{max}$。

(6)从(4-28)式看出，$C_{max}\propto\frac{1}{\sqrt{t}}$，即 t 增大 4 倍，C_{max} 减至一半。一维弥散 C_{max} 的衰减比二、三维弥散要慢，这是容易理解的。

§4-2-2 无限长多孔介质柱体，初始示踪剂呈阶梯函数分布

设有一无限长均质砂柱，以速度 u 做稳定流动，且初始浓度呈阶梯状分布(图 4-8)。该问题属于一维稳定流动一维水动力弥散问题，其数学模型可写成

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4-30}$$

$$C(x,0)=\begin{cases}C_0 & x<0\\ C_1 & x\geqslant 0\end{cases} \tag{4-31}$$

$$C(-\infty,t)=C_0 \qquad t>0 \tag{4-32}$$

$$C(\infty,t)=C_1 \qquad t>0 \tag{4-33}$$

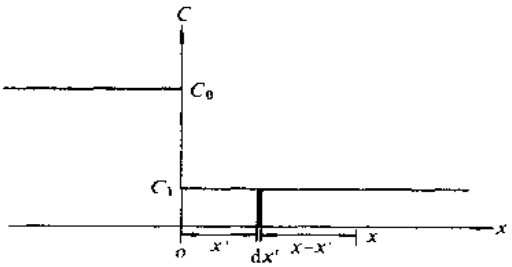


图 4-8 一维砂柱中初始示踪剂浓度呈阶梯函数分布问题

Bear 和 Todd(1960)曾用 Laplace 变换求解该问题。现在我们用另一种简单的方法求解。

初始浓度的分布可视为沿 x 轴连续分布的瞬

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

时点源。我们已经在前面求出了一维瞬时点源的解(4-23)式。这里所研究的问题可看成是一维瞬时线源，但它是变强度(浓度)的线源，于是可以利用点源的基本解，通过积分而求出此问题的解。

取坐标系如图 4-8 所示，浓度坐标与阶梯相重合，线源的坐标用 x' 来表示。点源基本解中〔式(4-23)〕的 m_f(单位截面积上的示踪剂质量)，对于本课题相当于

$$\mathrm{d}m_f = \frac{C \cdot n \cdot w\mathrm{d}x'}{w} = C \cdot n \cdot \mathrm{d}x' \tag{4-34}$$

式中：C 为示踪剂浓度；n 为有效孔隙率；w 为砂柱的横截面积。

于是，依(4-23)式，并考虑与 u 等速的动坐标系 $X=x-ut$，在位于 x' 处强度为 $\mathrm{d}m_f=C \cdot n \cdot \mathrm{d}x'$ 的瞬时点源作用下，任意点处的微分浓度为

$$\mathrm{d}C = \frac{C\mathrm{d}x'}{2\sqrt{\pi D_L t}} \mathrm{e}^{\frac{(x-ut-x')^2}{4D_L t}}$$

由于初始浓度 C 的分布呈阶梯状，故分解该积分为两段(为分析问题起见，这里取一个阶梯，其原理可以推广到多个阶梯的情况)，即

$$C = \frac{C_0}{2\sqrt{\pi D_L t}}\int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{-\frac{(x-x'-ut)^2}{4D_L t}}\mathrm{d}x' + \frac{C_1}{2\sqrt{\pi D_L t}}\int_{0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{(x-x'-ut)^2}{4D_L t}}\mathrm{d}x' \tag{4-35}$$

用换元法求解上述积分。令

$$\eta = \frac{x - x' - ut}{2\sqrt{D_L t}}$$

$$\mathrm{d}\eta = -\frac{1}{2\sqrt{D_L t}}\mathrm{d}x'$$

代入(4-35)中，有

$$C = -C_0 \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{\infty}^{\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}} \mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta - C_1 \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}}^{\infty} \mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta \tag{4-36}$$

上式中：

$$\text{右端第一项} = \frac{C_0}{2} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}}^{\infty} \mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta = \frac{C_0}{2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}\right)$$

$$\text{右端第二项} = \frac{C_1}{2}\left[\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{0}^{\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}} \mathrm{e}^{-\eta^2}\mathrm{d}\eta\right] = \frac{C_1}{2}\left[1 + \mathrm{erf}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}\right)\right] = C_1 - \frac{C_1}{2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}\right)$$

于是式(4-36)可写成

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$C = C_1 + \frac{C_0 - C_1}{2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x - ut}{2\sqrt{D_L t}}\right) \tag{4-37}$$

或相对浓度 ϵ

$$\epsilon(x,t) = \frac{C(x,t) - C_1}{C_0 - C_1} = \frac{1}{2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x - ut}{2\sqrt{D_L t}}\right) \tag{4-38}$$

上面式子中，erf 及 erfc 分别表示误差函数及余补误差函数。

从上两式不难看出：对应子(4-37)式的 C-x 分布见图 4-9 所示；由于 $\mathrm{erfc}(0)=1$，故在 $x=ut$ 处，相对浓度 $\epsilon=1/2$，这意味着 $\epsilon=1/2$ 的点与 u 同速度推进。

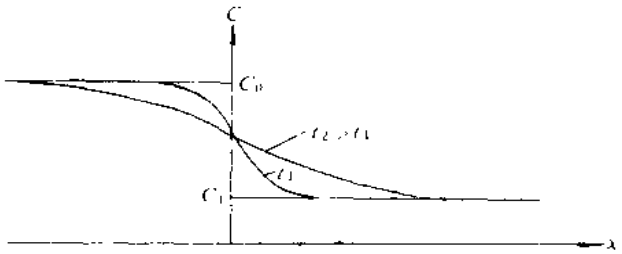


图 4-9 初始浓度呈阶梯状分布的一维砂柱中在 $t>0$ 之后浓度分布趋势

§4-2-3 半无限长多孔介质柱体，一端为定浓度边界

设有一半无限长均质砂柱，一维稳定流动，孔隙平均流速为 u，其一端为定浓度边界，求其浓度分布。

取坐标系如图 4-10 所示。该问题的数学模型可描述如下

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4-39}$$

$$C(x,0) = 0 \quad x \geqslant 0 \tag{4-40}$$

$$C(0,t) = C_0 \quad t > 0 \tag{4-41}$$

$$C(\infty,t) = 0 \quad t > 0 \tag{4-42}$$



图 4-10 一维砂柱中一端为定浓度边界问题

下面用 Laplace 变换求解该定解问题。先回忆一下 Laplace 变换的定义及基本性质。

已知 Laplace 变换的定义

$$L(f) = F(p) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt} f(t)\mathrm{d}t$$

式中：$f(t)$和 $F(p)$分别表示原函数和象函数。导函数的 Laplace 变换具有下列性质

$$L(f') = pF(p) - f(0)$$

$$L(f'') = p^2F(p) - pf(0) - f'(0)$$

及

$$L(A) = \frac{A}{p}$$

式中：A 为常数。

令

$$L[C(x,t)] = C(x,p) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt}C(x,t)\mathrm{d}t$$

上式即为对 t 的 Laplace 变换。其中，x 为参变量。

现在对(4-39)式两端作关于 t 的 Laplace 变换，左端项为

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-pt}\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}\mathrm{d}t = p\bar{C}(x,p) - C(x,0)$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= p\bar{C}(x,p)$$

右端第一项为

$$D_L\int_0^\infty e^{-pt}\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}dt = D_L\frac{d^2}{dx^2}\int_0^\infty e^{-pt}C(x,t)dt$$

$$= D_L\frac{d^2\bar{C}(x,p)}{dx^2}$$

右端第二项为

$$u\int_0^\infty e^{-pt}\frac{\partial C}{\partial x}dt = u\frac{d}{dx}\int_0^\infty e^{-pt}C(x,t)dt$$

$$= u\frac{d\bar{C}(x,p)}{dx}$$

于是，(4-39)式两端对 t 作 Laplace 变换后，可写成

$$D_L\frac{d^2\bar{C}}{dx^2} - u\frac{d\bar{C}}{dx} = p\bar{C} \tag{4-43}$$

(4-41)变换为

$$\bar{C}(0,p) = \frac{C_0}{p} \tag{4-44}$$

(4-42)变换成

$$\bar{C}(\infty,p) = 0 \tag{4-45}$$

式中：$\bar{C}(x,p)$是 x 的函数，p 可视为参变量。这样，原定解问题通过对 t 的 Laplace 变换后，转变为常微分方程的定解问题。解常微分方程(4-43)式，即

$$D_L\frac{d^2\bar{C}}{dx^2} - u\frac{d\bar{C}}{dx} - p\bar{C} = 0$$

上式是二阶齐次线性常微分方程，其特征方程为

$$D_L r^2 - ur - p = 0$$

因为 $u^2+4D_Lp>0$，所以它存在两个相异的实根

$$r_1 = \frac{u + \sqrt{u^2 + 4D_Lp}}{2D_L}$$

$$r_2 = \frac{u - \sqrt{u^2 + 4D_Lp}}{2D_L}$$

显然 $r_1>0, r_2<0$。于是，常微分方程的通解为

$$\bar{C}(x,p) = A(p)e^{r_1x} + B(p)e^{r_2x} \tag{4-46'}$$

即

$$\bar{C}(x,p) = A(p)\exp\left(\frac{u}{2D_L}x + x\sqrt{\frac{u^2}{4D_L^2} + \frac{p}{D_L}}\right)$$

$$+ B(p)\exp\left(\frac{u}{2D_L}x - x\sqrt{\frac{u^2}{4D_L^2} + \frac{p}{D_L}}\right) \tag{4-46}$$

现利用边界条件确定系数 A、B。将(4-45)代入(4-46')中，得

$$0 = A\cdot e^{r_1\infty} + B\cdot e^{r_2\infty}$$

因为 $r_1>0, r_2<0$，则上式右端第二项为零，且 $e^{r_1\infty}\to\infty$，必有 $A=0$。

将边界条件(4-44)代入(4-46')中，并考虑到 $A=0$，则有

$$\frac{C_0}{p} = B\cdot e^{r_2\cdot 0} = B$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

即

$$B = \frac{C_0}{p}$$

再将 A、B 代入通解(4-46)中

$$\bar{C}(x,p) = \frac{C_0}{p}\exp\left\{\frac{u}{2D_L}x - \frac{x}{\sqrt{D_L}}\sqrt{\frac{u^2}{4D_L} + p}\right\} \tag{4-47}$$

对上式作关于 t 的 Laplace 逆变换后得到

$$C(x,t) = L^{-1}[\bar{C}(x,p)]$$

$$= C_0\exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right)L^{-1}\left\{\frac{1}{p}\cdot\exp\left[-\frac{x}{\sqrt{D_L}}\sqrt{\frac{u^2}{4D_L} + p}\right]\right\} \tag{4-48}$$

我们知道,$L^{-1}[F(x,p)]=f(x,t)$。如果能在 Laplace 变换表中找到形如

$$F(p) = \frac{1}{p}\exp\left[-\frac{x}{\sqrt{D_L}}\sqrt{\frac{u^2}{4D_L} + p}\right]$$

的象函数,则能直接解出我们所需要的原函数。但一般表中找不到,还必须通过适当的运算变形。

为了方便起见,视上式中 $\frac{x}{\sqrt{D_L}}$ 为 a,$\frac{u^2}{4D_L}$ 为 b^2。

查 Laplace 变换表得知

$$L\left[\frac{a}{2\sqrt{\pi t^3}}e^{-\frac{a^2}{4t}}\right] = e^{-a\sqrt{p}} \qquad (a > 0)$$

即

$$L^{-1}[e^{-a\sqrt{p}}] = \frac{a}{2\sqrt{\pi t^3}}\cdot e^{-\frac{a^2}{4t}} \tag{4-49}$$

对比(4-48)式,其象函数形如

$$L^{-1}\left[\frac{1}{p}e^{-a\sqrt{b^2+p}}\right]$$

依 Laplace 变换的平移性质有

$$L[e^{-b^2t}f(t)] = F(p + b^2)$$

即

$$L^{-1}[F(p + b^2)] = e^{-b^2t}f(t) \tag{4-50}$$

结合(4-49)与(4-50)式,有

$$L^{-1}[e^{-a\sqrt{p+b^2}}] = e^{-b^2t}\cdot\frac{a}{2\sqrt{\pi t^3}}\cdot e^{-\frac{a^2}{4t}} \tag{4-51}$$

再与(4-47)式相对比,原来的象函数还多一个因子 $1/p$。依 Laplace 的积分性质

$$L\left[\int_0^t f(\tau)d\tau\right] = \frac{1}{p}L[f(t)] = \frac{1}{p}F(p)$$

即

$$L^{-1}\left[\frac{F(p)}{p}\right] = \int_0^t f(\tau)d\tau \tag{4-52}$$

同时考虑上式与(4-51)式得到

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$L^{-1}\left\{\frac{1}{p}e^{-a\sqrt{b^2+p}}\right\}=\int_0^t\frac{a}{2\sqrt{\pi\tau^3}}e^{-\left(\frac{a^2}{4\tau}+b^2\tau\right)}d\tau$$

$$=e^{-ab}\int_0^t\frac{a}{2\sqrt{\pi\tau^3}}e^{-\frac{(a-2b\tau)^2}{4\tau}}d\tau$$

$$=e^{ab}\int_0^t\frac{a}{4\sqrt{\pi\tau^3}}e^{-\frac{(a-2b\tau)^2}{4\tau}}d\tau+e^{ab}\int_0^t\frac{a}{4\sqrt{\pi\tau^3}}e^{-\frac{(a+2b\tau)^2}{4\tau}}d\tau \qquad (4\text{-}53)$$

下面利用换元法求上述积分。记

$$\xi=\frac{a-2b\tau}{\sqrt{4\tau}}\qquad \zeta=\frac{a+2b\tau}{\sqrt{4\tau}}$$

有

$$d\xi=-\frac{a+2b\tau}{4\tau^{\frac{3}{2}}}d\tau$$

$$d\zeta=-\frac{a-2b\tau}{4\tau^{\frac{3}{2}}}d\tau$$

代入前式(4-53)中，得到

$$L^{-1}\left\{\frac{1}{p}e^{-a\sqrt{b^2+p}}\right\}$$

$$=-\frac{e^{ab}}{\sqrt{\pi}}\int_{\infty}^{\frac{a-2bt}{\sqrt{4t}}}e^{-\xi^2}d\xi-\frac{e^{ab}}{\sqrt{\pi}}\int_{\infty}^{\frac{a+2bt}{\sqrt{4t}}}e^{-\zeta^2}d\zeta$$

$$=\frac{e^{-ab}}{2}\cdot\operatorname{erfc}\left(\frac{a-2bt}{2\sqrt{t}}\right)+\frac{e^{ab}}{2}\cdot\operatorname{erfc}\left(\frac{a+2bt}{2\sqrt{t}}\right)$$

将此式与(4-48)相比看出

$$a=\frac{x}{\sqrt{D_L}},\quad b^2=\frac{u^2}{4D_L},\quad b=-\frac{u}{2\sqrt{D_L}}$$

代入上式中，于是(4-48)式可写成

$$\frac{C}{C_0}=e^{\frac{ux}{2D_L}}\left[\frac{1}{2}\cdot e^{-\frac{ux}{2D_L}}\cdot\operatorname{erfc}\left(\frac{\frac{x}{\sqrt{D_L}}-\frac{u}{\sqrt{D_L}}t}{2\sqrt{t}}\right)\right.$$

$$\left.+\frac{1}{2}\cdot e^{\frac{ux}{2D_L}}\cdot\operatorname{erfc}\left(\frac{\frac{u}{\sqrt{D_L}}+\frac{u}{\sqrt{D_L}}t}{2\sqrt{t}}\right)\right] \qquad (4\text{-}54)$$

即

$$\frac{C}{C_0}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_Lt}}\right)+\frac{1}{2}e^{\frac{ux}{D_L}}\operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{2\sqrt{D_Lt}}\right) \qquad (4\text{-}54')$$

上式即为该定解问题的解。上式右端第一项表示在 $x=ut$ 处“锋面”的散布；第二项是满足边界条件所必需的。

方程(4-54′)式也可以用于地表水体。如一条均匀的长渠道，在 $x=0$ 处(例如被污染的河、或污水排放池等)定浓度 C_0，并以稳定速度 u 流动，这时只需将式中的 D_L 改成 D_m。

我们知道余补误差函数 $\operatorname{erfc}(\eta)$ 随着 η 的增大而减小，因此，当 x 足够大或 t 足够长时，上式右端第二项可以忽略不计，即有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{C}{C_0}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}\right) \tag{4-55}$$

该式与(4-38)式相同。实验室常用此条件下的一维流动来确定纵向弥散系数 D_L(或纵向弥散度 α_L)。

§4-3 一维稳定流动二维水动力弥散问题

在均质各向同性、等厚的承压含水层中存在着一维稳定流动,孔隙平均流速为 u,取 x 坐标轴平行地下水流向(图 4-11)。这时,对于水动力弥散系数而言却是均质各向异性的,在 x 方向为纵向弥散系数 D_L,而在 y 方向为横向弥散系数 D_T。

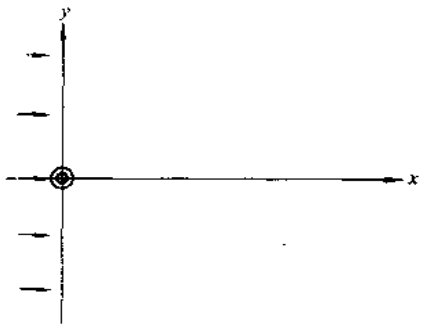


图 4-11 一维稳定流动二维水动力弥散问题

§4-3-1 瞬时注入示踪剂——平面瞬时点源

假定示踪剂的注入不改变地下水渗流的状态,即 ρ、μ 不变(也就是 Bear 的理想示踪剂),并要求示踪剂在整个含水层厚度范围内均匀注入,以保证二维水动力弥散。若此要求未能满足,则取样点应离注入井足够远,使得垂直的横向弥散作用有足够的时间,以消除垂向上浓度的差异。

该问题的数学模型为

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4-56}$$

$$C(x,y,0)=0 \qquad x^2+y^2>0 \tag{4-57}$$

$$C(\pm\infty,y,t)=C(x,\pm\infty,t)=0 \quad t>0 \tag{4-58}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}C\cdot n\cdot M\mathrm{d}x\mathrm{d}y=m_M \quad t>0 \tag{4-59}$$

式中:$m_M=m_l\cdot M$,m_l 表示单位线源瞬时注入示踪剂的质量;m_M 表示长度为 M 的线源瞬时注入示踪剂的质量;M 是含水层的厚度。

前面我们已经获得平面瞬时点源的基本解(4-21)式

$$C(r,t)=\frac{m_l}{4\pi nDt}\mathrm{e}^{\frac{r^2}{4Dt}}$$

但是,它的假定条件有两点与本问题有区别:①前面假定流体是静止的,即 $u=0$,而这里 u 为定值,这可以采用动坐标的办法处理;②前面假定水动力弥散系数 D 是各向同性的,而这里却是各向异性,这可采用类似于各向异性渗透系数 K 的处理办法,即通过变换 x、y 坐标的尺度,从而使其转变为各向同性。

令

$$\bar{x}=\sqrt{\frac{D_T}{D_L}}x \qquad \bar{y}=\sqrt{\frac{D_L}{D_T}}y \tag{4-60}$$

则

$$\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}\cdot\frac{\mathrm{d}\bar{x}}{\mathrm{d}x}=\sqrt{\frac{D_T}{D_L}}\cdot\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\sqrt[4]{\frac{D_T}{D_L}}\cdot\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}\right)=\sqrt[4]{\frac{D_T}{D_L}}\cdot\frac{\partial}{\partial \bar{x}}\cdot\left(\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}\right)\cdot\frac{\mathrm{d}\bar{x}}{\mathrm{d}x}$$

$$=\sqrt{\frac{D_T}{D_L}}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{x}^2}$$

同理

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}=\sqrt{\frac{D_L}{D_T}}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{y}^2}$$

于是(4-56)式变换成

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\sqrt{D_L D_T}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{x}^2}+\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{y}^2}\right)-\left(u\sqrt[4]{\frac{D_T}{D_L}}\right)\frac{\partial C}{\partial \bar{x}} \tag{4-61}$$

这样，经过坐标尺度变换之后，水动力弥散系数成为各向同性的了，其平均值 $\bar{D}$ 为

$$\bar{D}=\sqrt{D_L D_T}\quad 记\quad \bar{u}=u\sqrt[4]{\frac{D_T}{D_L}} \tag{4-62}$$

由于坐标尺度变换(x 轴尺度缩小了)，因而流速 u 也相应变化(变小)。

对流项的处理，如同一维稳定流动的一维弥散问题，引入动坐标 $\bar{X}$，即

$$\bar{X}=\bar{x}-\bar{u}t \tag{4-63}$$

这样就可以直接利用(4-21)或(4-22)的解，只不过是还要考虑(4-62)与(4-63)式的关系

$$C(x,y,t)=\frac{m_M/M}{4\pi n\sqrt{D_L D_T t}}\,\mathrm{e}^{\frac{(\bar{x}-\bar{u}t)^2+\bar{y}^2}{4\sqrt{D_L D_T}t}} \tag{4-64}$$

于是，上式的反变换为

$$C(x,y,t)=\frac{m_M/M}{4\pi n\sqrt{D_L D_T t}}\,\mathrm{e}^{-\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2}{4D_T t}\right]} \tag{4-65}$$

上式即为所要研究问题的解。

现在我们来看浓度的空间分布。由(4-65)式得

$$\frac{4\pi n\sqrt{D_L D_T}tC}{m_l}=\mathrm{e}^{\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2}{4D_T t}\right]}$$

上式两侧取对数

$$-\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2}{4D_T t}\right]=\ln\frac{4\pi n\sqrt{D_L D_T}tC}{m_l} \tag{4-66}$$

显然，当 t 与 C 为定值时，上式为常数，记为 $-A$，并设 $X=x-ut$，则上式变为

$$\frac{X^2}{4AD_L t}+\frac{y^2}{4AD_T t}=1 \tag{4-67}$$

不难看出，上式即为椭圆方程，其中心坐标为 $(ut,0)$，与标准椭圆方程 $\frac{x^2}{a^2}+\frac{y^2}{b^2}=1$ 对比可得

$$a=2\sqrt{AD_L t}\qquad b=2\sqrt{AD_T t}$$

因为 $D_L>D_T$，故 a 是沿一维流动方向 x 的长半轴，即

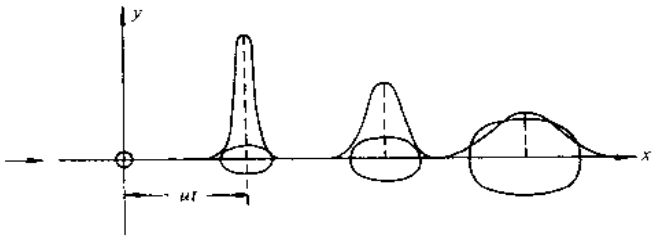


图 4-12　一维稳定平面流场中瞬时注入示踪剂后浓度发展趋势

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{a}{b}=\sqrt{\frac{D_L}{D_T}} \tag{4-68}$$

从图 4-12 看出，某浓度等值线所围面积随 t 的变化，先是增大，然后变小。低浓度等值线所围面积随时间增大的持续时间长，而高浓度等值线所围面积随时间增大的持续时间短。

§4-3-2 连续注入示踪剂——平面连续点源

我们可将连续点源的作用视为无数瞬时点源作用之和。面瞬时点源的结果已有现成的解〔(4-65)式〕，因面可通过积分得到所要求的解。

设单位时间注入示踪剂的质量为 $m_t(=C_0Q)$，则瞬时$(\mathrm{d}t')$注入示踪剂的质量为 $m_t\mathrm{d}t'$，依(4-65)式有

$$\mathrm{d}C=\frac{m_t\mathrm{d}t'}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T(t-t')}}\mathrm{e}^{-\left\{\frac{(x-u(t-t'))^2}{4D_L(t-t')}+\frac{y^2}{4D_T(t-t')}\right\}}$$

积分

$$C=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}\int_0^t\mathrm{e}^{-\left\{\frac{(x-u(t-t'))^2}{4D_L(t-t')}+\frac{y^2}{4D_T(t-t')}\right\}}\cdot\frac{\mathrm{d}t'}{t-t'}$$

换元，记

$$\eta=t-t'$$

有 $\mathrm{d}\eta=-\mathrm{d}t'$

则上式变成

$$C=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}\int_0^t\mathrm{e}^{\left[\frac{(x-u\eta)^2}{4D_L\eta}-\frac{y^2}{4D_T\eta}\right]}\cdot\frac{\mathrm{d}\eta}{\eta}$$

化简后

$$C=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}\mathrm{e}^{\frac{xu}{2D_L}}\int_0^t\mathrm{e}^{\left[\frac{u^2\eta}{4D_L}+\left(\frac{x^2}{4D_L\eta}-\frac{y^2}{4D_T\eta}\right)\right]}\cdot\frac{\mathrm{d}\eta}{\eta} \tag{4-69}$$

再换元，令

$$\xi=\frac{u^2\eta}{4D_L},\quad \mathrm{d}\xi=\frac{u^2}{4D_L}\mathrm{d}\eta$$

并记

$$\beta^2=\frac{u^2x^2}{4D_L^2}+\frac{u^2y^2}{4D_TD_L}$$

则(4-69)式指数第二项可写成

$$\frac{x^2}{4D_L\cdot\frac{4D_L\xi}{u^2}}+\frac{y^2}{4D_T\cdot\frac{4D_L\xi}{u^2}}=\frac{u^2x^2}{16D_L^2\xi}+\frac{u^2y^2}{16D_LD_T\xi}=\frac{\beta^2}{4\xi}$$

故(4-69)式写成

$$C=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}\mathrm{e}^{\frac{xu}{2D_L}}\int_0^{\frac{u^2t}{4D_L}}\mathrm{e}^{\left(\xi-\frac{\beta^2}{4\xi}\right)}\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi}$$

$$=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}\mathrm{e}^{\frac{xu}{2D_L}}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{\left(\xi-\frac{\beta^2}{4\xi}\right)}\frac{\mathrm{d}\xi}{\xi}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$-\int_{\frac{u^2t}{4D_L}}^{\infty} e^{\left(\xi-\frac{\beta^2}{4\xi}\right)}\frac{d\xi}{\xi}$$

化简后，得到

$$C(x,y,t)=\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}e^{\frac{xu}{2D_L}}\left[2K_0(\beta)-W\left(\frac{u^2t}{4D_L},\beta\right)\right] \tag{4-70}$$

$$\beta=\sqrt{\frac{u^2x^2}{4D_L^2}+\frac{u^2y^2}{4D_LD_T}}$$

式中：$K_0(\beta)$为第二类零阶修正贝塞尔函数；$W\left(\frac{u^2t}{4D_L},\beta\right)$为第一类越流系统井函数。

上式即为平面稳定连续注入点源的解。当 t 较长时，上式简化为

$$C(x,y)=\frac{m_t}{2\pi Mn\sqrt{D_LD_T}}e^{\frac{xu}{2D_L}}K_0\left(\sqrt{\frac{u^2x^2}{4D_L^2}+\frac{u^2y^2}{4D_LD_T}}\right) \tag{4-71}$$

常用此式计算水动力弥散系数。

§4-3-3 注水拟稳定条件下示踪剂的径向弥散

设在水平、等厚、无限展布的均质各向同性承压含水层中有一口完整井，井径为 r_w。通过井向其连续注入定流量 Q 且示踪剂浓度为 C_0 的水。在无天然流速的情况下，在井的附近很快形成或接近拟稳定的二维径向流。

这时，通过以井为中心，任意半径为 r 的圆周通量为

$$2\pi KBr\frac{\partial h}{\partial r}=-Q$$

式中：K 为水力传导系数；B 为含水层的厚度。根据达西定律可求出平均流速

$$V(r)=\frac{q}{n}=-\frac{K}{n}\cdot\frac{\partial h}{\partial r}=\frac{Q}{2\pi Bnr}=\frac{A}{r}$$

式中：$A=\frac{Q}{2\pi Bn}$；q 表示半径 r 处的单位面积流量；n 表示有效孔隙率。

现在我们再来看极坐标下的二维水动力弥散方程。将坐标变换 $x=r\cos\theta$，$y=r\sin\theta$ 代入直角坐标系下的二维水动力弥散方程(2-35)式，并令 $I=0$，$u_x=V(r)$，$D_{xy}=D_{yx}=0$(即直角坐标系中坐标轴取向与弥散系数主轴同向)，则有

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(rD\frac{\partial C}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\cdot\frac{\partial}{\partial\theta}\left(D\frac{\partial C}{\partial\theta}\right)-\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}(rCV)$$

因为介质均质各向同性，无天然流速，则弥散是对称的，即 $\frac{\partial C}{\partial\theta}=0$，故有

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left(rD\frac{\partial C}{\partial r}\right)-\frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}(rCV)$$

其中 $D=D'+D''=\alpha_LV+D''$，若忽略分子扩散可将上式进一步简化，并求出该问题的数学模型

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\alpha_L\frac{A}{r}\cdot\frac{\partial^2C}{\partial r^2}-\frac{A}{r}\cdot\frac{\partial C}{\partial r} \tag{4-72}$$

$$C(r,0)=0\qquad r\geqslant r_w \tag{4-73}$$

$$C(r_w,t)=C_0\qquad t>0 \tag{4-74}$$

$$C(\infty,t)=0\qquad t>0 \tag{4-75}$$

可利用复变函数理论求出该定解问题的精确解。

贝尔(1972)给出过该定解问题的近似解，即

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{C(r,t)}{C_0}=\frac{1}{2}\operatorname{erfc}\left(\frac{r^2/2-At}{\sqrt{\frac{4}{3}\cdot\alpha_L\cdot r^3}}\right) \tag{4-76}$$

该式常用于确定实测的纵向弥散度 α_L。

§4-4 一维稳定流动三维水动力弥散问题

§4-4-1 空间瞬时点源

在渗透系数 K 为均质各向同性的多孔介质中，若存在一维稳定流动，流速为 $\hat{u}$。在某点 o 处（相当于球状井）瞬时注入示踪剂 m，研究空间上示踪剂浓度的分布规律及随时间的变化规律。

取 o 点为坐标原点，x 轴平行于 $\hat{u}$，且方向相同（图 4-13）。

这时，对于弥散系数 D 来说是各向异性的，它属于二度各向异性，即 $D_{xx}=D_L$，$D_{yy}=D_{zz}=D_T$。于是水动力弥散方程可写成

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}-u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{4-77}$$

$$C(x,y,z,0)=0 \qquad x^2+y^2+z^2>0 \tag{4-78}$$

$$C(\pm\infty,y,z,t)=C(x,\pm\infty,z,t)=C(x,y\pm\infty,t)=0 \qquad t>0 \tag{4-79}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{\infty}^{\infty}\int_{\infty}^{\infty}C\cdot n\cdot \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=m \qquad t>0 \tag{4-80}$$

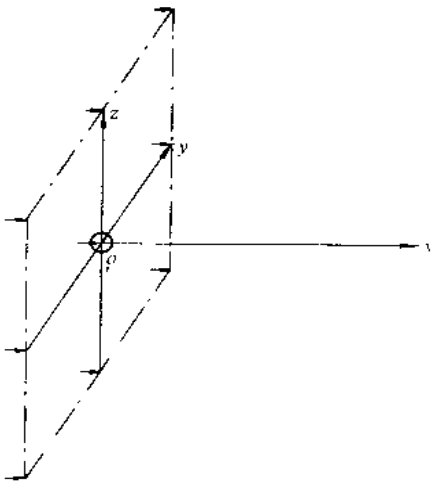


图 4-13 一维稳定流动空间瞬时点源问题

式中：m 表示瞬时注入示踪剂的质量。

我们希望利用式(4-20)的结果，那里水动力弥散系数是各向同性的。事实上可通过坐标变换使上式变为 D 是各向同性的问题。

令

$$\bar{x}=\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}}x \qquad \bar{y}=\left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{6}}y \qquad \bar{z}=\left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{6}}z \tag{4-81}$$

则有

$$\frac{\partial C}{\partial x}=\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}\cdot\frac{\mathrm{d}\bar{x}}{\mathrm{d}x}=\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}=\frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\partial C}{\partial \bar{x}}\right]=\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{2}{3}}\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{x}^2}$$

同理

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}=\left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{3}}\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{y}^2}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial^2 C}{\partial \bar{x}^2}$$

另外

$$u = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}\bar{x}} \cdot \frac{\mathrm{d}\bar{x}}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{3}} \bar{u}$$

故

$$u \frac{\partial C}{\partial x} = \left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{3}} \bar{u} \left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\partial C}{\partial \bar{x}} = \bar{u} \frac{\partial C}{\partial \bar{x}}$$

将上述关系式代入原来的微分方程(4-77)中，得到

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L^{\frac{1}{3}} D_T^{\frac{2}{3}} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{x}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \bar{z}^2}\right) - \bar{u} \frac{\partial C}{\partial \bar{x}} \tag{4-82}$$

取动坐标，即将自变量采用下述变换

$$\bar{X} = \bar{x} - ut$$

并记

$$\bar{D} = D_L^{\frac{1}{3}} D_T^{\frac{2}{3}} \tag{4-83}$$

则将微分方程(4-82)改写成

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \bar{D}\left(\frac{\partial^2 C}{\partial \bar{X}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \bar{y}^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial \bar{z}^2}\right) \tag{4-84}$$

上式与(4-1)式〔或(4-2)式〕相当，于是可直接利用它的解(4-20)式，即

$$C(\bar{X}, \bar{y}, \bar{z}, t) = \frac{m}{8n(\pi \bar{D} t)^{\frac{3}{2}}} \mathrm{e}^{-\frac{\bar{X}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2}{4\bar{D}t}} \tag{4-85}$$

坐标反变换

$$C(x, y, z, t) = \frac{m}{8n\pi^{\frac{3}{2}} D_L^{\frac{1}{2}} D_T t^{\frac{3}{2}}} \cdot \exp\left\{ - \frac{\left[\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}} x - u\left(\frac{D_T}{D_L}\right)^{\frac{1}{3}} t\right]^2}{4(D_L^{\frac{1}{3}} D_T^{\frac{2}{3}}) t} + \frac{\left[\left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{6}} y\right]^2 + \left[\left(\frac{D_L}{D_T}\right)^{\frac{1}{6}} z\right]^2}{4(D_L^{\frac{1}{3}} D_T^{\frac{1}{3}}) t} \right\}$$

即

$$C(x, y, z, t) = \frac{m}{8n\pi^{\frac{3}{2}} D_L^{\frac{1}{2}} D_T t^{\frac{3}{2}}} \mathrm{e}^{-\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t} + \frac{y^2 + z^2}{4D_T t}\right]} \tag{4-86}$$

上式即为该问题的解。

讨论：

(1)浓度 C 与时间 t 的二分之三次方成反比，即 $C \propto \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}$。对于一、二、三维水动力弥散瞬时点源的情况，有

一维弥散　　$C \propto \frac{1}{t^{\frac{1}{2}}}$

二维弥散　　$C \propto \frac{1}{t}$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

三维弥散　　$C \propto \frac{1}{t^{\frac{3}{2}}}$

不难看出，随着弥散维数的增加，浓度 C 的衰减速度也加快，这是容易理解的。

(2)浓度的空间分布 $C\text{-}p(x,y,z)$

由(4-86)式取任意时刻，有

$$\frac{8n\pi^{\frac{3}{2}}D_L^{\frac{1}{2}}D_T t^{\frac{3}{2}}C}{m} = e^{-\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2+z^2}{4D_T t}\right]}$$

两边取对数

$$\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2}{4D_T t}+\frac{z^2}{4D_T t} = \ln\frac{m}{8n\pi^{\frac{3}{2}}D_L^{\frac{1}{2}}D_T t^{\frac{3}{2}}C} \triangleq A \tag{4-87}$$

式中：A 是时间的函数

$$A = \ln\frac{m}{8n\pi^{\frac{3}{2}}D_L^{\frac{1}{2}}D_T t^{\frac{3}{2}}C}$$

显然，(4-87)式是椭球方程，其中心坐标为 $(ut,0,0)$。其 t 时刻的球半轴为 $2\sqrt{AD_L t}$，$2\sqrt{AD_T t}$ 与 $2\sqrt{AD_T t}$。因此，等浓度面是一个旋转椭球面，它呈橄榄球状，其长轴沿 x 方向。

§4-4-2　空间稳定连续点源

假定：示踪剂的注入并不改变渗流场的原始特征，即示踪剂是理想的，且保持原来的一维稳定流动。

设单位时间注入示踪剂的质量为 m_t，则对于稳定连续点源而言，其注入示踪剂的质量速率 m_t 的过程线为一水平直线(图 4-14)。

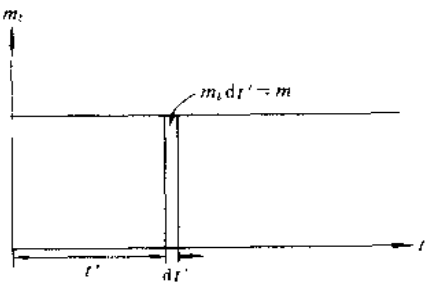


图 4-14

将连续点源视为由无数的瞬时点源所组成。每个瞬时点源的注入时间不同，记为 t'。那么在 t' 时刻于坐标原点处注入示踪剂的质量为

$$m = m_t dt' \tag{4-88}$$

注意取坐标轴为水动力弥散的主轴方向，且 x 方向与流速方向一致，并取坐标原点为点源所在点。

(4-86)式在 $t(>t')$ 时刻对空间上任一点 (x,y,z,t) 处所产生的浓度，可直接利用上节中空间瞬时点源的解，即

$$dC = \frac{m_t dt'}{8n[\pi\overline{D}(t-t')]^{\frac{3}{2}}} e^{-\left\{\frac{(x-u(t-t'))^2+y^2+z^2}{4\overline{D}(t-t')}\right\}} \tag{4-89}$$

因为

$$[\bar{x}-\bar{u}(t-t')]^2 = \bar{x}^2 - 2\bar{x}\bar{u}(t-t') + \bar{u}^2(t-t')^2$$

记

$$\bar{R}^2 = \bar{x}^2+\bar{y}^2+\bar{z}^2 \tag{4-90}$$

对(4-89)式两端求积分

$$C = \frac{m_t}{8n(\pi\overline{D})^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{\bar{x}\bar{u}}{\overline{D}}}\int_0^t e^{-\left[\frac{\bar{R}^2}{4\overline{D}(t-t')}+\frac{\bar{u}^2(t-t')}{4\overline{D}}\right]}\frac{dt'}{(t-t')^{\frac{3}{2}}} \tag{4-91}$$

换元。令

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\eta = \frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}(t-t')}}$$

则(4-91)式右端积分项可写成

$$P = 4\frac{\sqrt{\overline{D}}}{\overline{R}}\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty} e^{-\left[\eta^2+\left(\frac{\overline{R}\overline{u}}{4\overline{D}}\right)^2\cdot\frac{1}{\eta^2}\right]}d\eta \qquad (4\text{-}92)$$

记

$$a = \frac{\overline{R}\overline{u}}{2\overline{D}} \qquad (4\ 93)$$

则

$$P = \int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty} e^{-\left(\eta^2+\frac{a^2}{4\eta^2}\right)}d\eta$$

$$= \frac{1}{2}\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty}\left[\left(1-\frac{a}{2\eta^2}\right)+\left(1+\frac{a}{2\eta^2}\right)\right]e^{-\left(\eta^2+\frac{a^2}{4\eta^2}\right)}d\eta$$

因为

$$e^{-\left(\eta^2-\frac{a^2}{4\eta^2}\right)} = e^{-\left[\left(\eta+\frac{a}{2\eta}\right)^2-a\right]}$$

又

$$e^{-\left(\eta^2+\frac{a^2}{4\eta^2}\right)} = e^{-\left[\left(\eta-\frac{a}{2\eta}\right)^2+a\right]}$$

则

$$P = \frac{1}{2}\left\{\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty}\left(1-\frac{a}{2\eta^2}\right)e^{-\left[\left(\eta+\frac{a}{2\eta}\right)^2-a\right]}d\eta\right.$$

$$\left.+\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty}\left(1+\frac{a}{2\eta^2}\right)e^{-\left[\left(\eta-\frac{a}{2\eta}\right)^2+a\right]}d\eta\right\}$$

$$= \frac{1}{2}\left\{\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty} e^{a}\left(1-\frac{a}{2\eta^2}\right)e^{-\left(\eta+\frac{a}{2\eta}\right)^2}d\eta\right.$$

$$\left.+\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}^{\infty} e^{-a}\left(1+\frac{a}{2\eta^2}\right)e^{-\left(\eta-\frac{a}{2\eta}\right)^2}d\eta\right\} \qquad (4\text{-}94)$$

再进行换元。令右端第一项积分中

$$\xi = \eta + \frac{a}{2\eta} \qquad d\xi = \left(1-\frac{a}{2\eta^2}\right)d\eta$$

再令右端第二项积分中

$$\zeta = \eta - \frac{a}{2\eta} \qquad d\zeta = \left(1+\frac{a}{2\eta^2}\right)d\eta$$

故(4-94)式写成：

$$P = \frac{1}{2}\cdot\frac{\sqrt{\pi}}{2}\left\{e^{a}\cdot\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}+\frac{a}{2\frac{\overline{R}}{\sqrt{4\overline{D}t}}}}^{\infty} e^{-\xi^2}d\xi\right.$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$+ e^{-a} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{\bar{R}}{\sqrt{4\bar{D}t}}}^{\infty} \quad e^{-\zeta^2} d\zeta$$

因为 $$a = \frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}$$

所以 $$\frac{a}{2\frac{\bar{R}}{\sqrt{4\bar{D}t}}} = \frac{\bar{u}\,\bar{t}}{\sqrt{4\bar{D}t}} \tag{4-95}$$

将(4-94)与(4-95)代入上式积分

$$P = \frac{\sqrt{\pi}}{4}\left\{ e^{\frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\bar{R}+\bar{u}\,\bar{t}}{\sqrt{4\bar{D}t}}\right) + e^{-\frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\bar{R}-\bar{u}\,\bar{t}}{\sqrt{4\bar{D}t}}\right)\right\} \tag{4-96}$$

将上式代回(4-91)式，则其系数项为

$$\frac{m_t}{8n(\pi\bar{D})^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{\bar{x}\bar{u}}{2\bar{D}}} 4 \frac{\sqrt{\bar{D}}}{\bar{R}} \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{4} = \frac{m_t}{8n\pi\bar{D}\,\bar{R}} e^{\frac{\bar{x}\bar{u}}{2\bar{D}}}$$

于是式(4-91)改写成

$$C(\bar{x},\bar{y},\bar{z},t) = \frac{m_t}{8n\pi\bar{D}\,\bar{R}} e^{\frac{\bar{x}\bar{u}}{2\bar{D}}}\left[e^{\frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\bar{R}+\bar{u}\,\bar{t}}{\sqrt{4\bar{D}t}}\right) + e^{-\frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\bar{R}-\bar{u}\,\bar{t}}{\sqrt{4\bar{D}t}}\right)\right] \tag{4-97}$$

式中：$\bar{D} = D_L^{\frac{1}{2}} D_T^{\frac{2}{3}}$；$\bar{u} = (\frac{D_T}{D_L})^{\frac{1}{3}} u$；$\bar{R}^2 = \bar{x}^2 + \bar{y}^2 + \bar{z}^2$；$\bar{x} = (\frac{D_T}{D_L})^{\frac{1}{3}} x$；$\bar{y} = (\frac{D_L}{D_T})^{\frac{1}{6}} y$；$\bar{z} = (\frac{D_L}{D_T})^{\frac{1}{6}} z$。

我们知道，当 $t \to \infty$ 时，$\operatorname{erfc}(\infty)$ 等于零，$\operatorname{erf}(\infty)$ 等于 1，故

$$\operatorname{erfc}(-\infty) = 1 - \operatorname{erf}(-\infty) = 1 + \operatorname{erf}(\infty) = 2$$

所以(4-97)式变成

$$C(\bar{x},\bar{y},\bar{z}) = \frac{m_t}{4n\pi\bar{D}\,\bar{R}} e^{\frac{\bar{x}\bar{u}}{2\bar{D}}} \cdot e^{-\frac{\bar{R}\bar{u}}{2\bar{D}}}$$

即

$$C(\bar{x},\bar{y},\bar{z}) = \frac{m_t}{4n\pi\bar{D}\,\bar{R}} e^{\frac{\bar{u}(\bar{R}-\bar{x})}{2\bar{D}}} \tag{4-98}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第五章　水动力弥散系数的计算方法

用水动力弥散理论解决实际的环境地质问题，首先要获取水动力弥散系数等有关参数。这可以通过数值法对现有的污染质分布运移拟合而求出，或在特定条件下用解析法计算现场的水动力弥散而获得。本章将介绍以第四章的水动力弥散的解析解为基础的弥散系数的计算方法。

水动力弥散系数是一个与流速及多孔介质有关的张量，即使几何上均质，且有均匀的水力传导系数的多孔介质，就弥散而论，仍然是有方向性的。若涉及到各向异性介质时，这一问题就变得更加复杂。但我们常假设介质是均质各向同性的，且所选的坐标轴正好是弥散的主轴。

一般地说，水动力弥散系数包括机械弥散系数与分子扩散系数。当地下水流速较大以致于可以忽略分子扩散系数，同时假设弥散系数与孔隙平均流速呈线性关系，这样可先求出弥散系数再除以孔隙平均流速便可获取弥散度或反之。

鉴于三维水动力弥散的复杂性及试验的困难，这里只限于讨论一维和二维水动力弥散。

弥散系数的计算方法一般分两类：一是利用解析公式直接或间接求解；二是采用标准曲线对比法。

§5-1　一维水动力弥散

§5-1-1　利用正态分布函数性质求参

1. 瞬时注入示踪剂

上一章中我们已经求出了该问题的解

$$C(x,t)=\frac{m/w}{2n\sqrt{\pi D_L t}}\cdot e^{-\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}}$$

不难看出，它是正态分布密度函数，即浓度是按正态分布的单峰曲线(如图 5-1)，其数学期望

$$\mu=ut$$

即在 $x=ut$ 处，浓度曲线出现峰值 C_{max}。该浓度曲线的方差与均方差为

$$\sigma^2=2D_L t$$

$$\sigma=\sqrt{2D_L t}$$

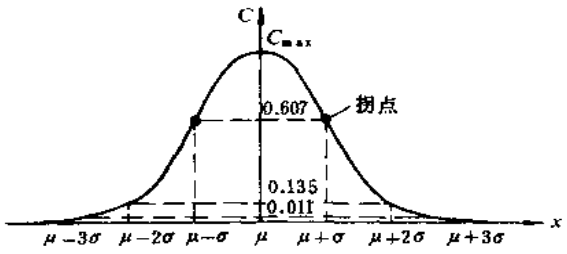


图 5-1　一维砂柱中瞬时注入示踪剂后浓度分布

曲线在 $x=ut\pm\sqrt{2D_L t}$ 处有拐点，且在拐点处

$$C(ut\pm\sqrt{2D_L t})=0.607C_{max}$$

有了以上正态分布密度函数的一般概念，我们可以依下列步骤确定一维水动力弥散系数

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

D_L：

(1)先确定 C_{max}的值及其所对应的数学期望，即 $x=\mu=ut$；

(2)取 $0.607C_{max}$，从浓度曲线上找出拐点所在的位置，求出对应的 $x=ut+\sigma$，并由此求出均方差 σ 值；

(3)依均方差公式 $\sigma=\sqrt{2D_Lt}$得到

$$D_L=\frac{\sigma^2}{4t}$$

当在浓度曲线上确定出现均方差 σ 的时间 t，并代入上式即可计算出纵向弥散系数 D_L。

另外，利用正态分布密度函数的性质

$$C(\mu\pm 2\sigma)=0.135C_{max}$$

及

$$C(\mu\pm 3\sigma)=0.011C_{max}$$

也可计算出纵向水动力弥散系数 D_L。

2. 连续注入示踪剂

当在水流呈一维稳定流动的半无限长砂柱的一端连续地注入定浓度示踪剂时，该问题的解为

$$\frac{C(x,t)}{C_0}=\frac{1}{2}\mathrm{erfc}\left[\frac{x-ut}{2\sqrt{D_Lt}}\right]+\frac{1}{2}e^{\frac{ux}{D_L}}\mathrm{erfc}\left[\frac{x+ut}{2\sqrt{D_Lt}}\right]$$

我们知道当 x 较大或时间 t 较长时，右端第二项可以忽略不计，则

$$\frac{C(x,t)}{C_0}=\frac{1}{2}\mathrm{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_Lt}}\right)=\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{\frac{x-ut}{2\sqrt{D_Lt}}}^{\infty}e^{-\xi^2}d\xi \tag{5 1}$$

式中：erfc 为余补误差函数，并有

$$\mathrm{erfc}(u)=1-\mathrm{erf}(u)$$

$$\mathrm{erf}(u)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^u e^{-\xi^2}d\xi$$

erf 为误差函数。

换元。令

$$\xi^2=\frac{\eta^2}{2},d\xi=\frac{1}{\sqrt{2}}d\eta \tag{5-2}$$

则

$$\frac{C(x,t)}{C_0}=1-\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\frac{x-ut}{\sqrt{2D_Lt}}}e^{-\frac{\eta^2}{2}}d\eta=1-N\left[\frac{x-ut}{\sqrt{2D_Lt}}\right] \tag{5-3}$$

对于给定的 t，上式是关于 x 的正态分布的分布函数。其数学期望

$$\mu=ut \tag{5 4}$$

均方差

$$\sigma=\sqrt{2D_Lt} \tag{5 5}$$

根据正态分布的分布函数的性质，有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$N(1) \approx 0.8413$$
$$N(0) = 0.5$$
$$N(-1) \approx 0.1587$$

首先，对于固定的时刻 t，绘制如图 5-2 所示的 $\frac{C}{C_0}$-x 曲线。我们把相对浓度 $\frac{C}{C_0}=0.8413$ 处的点 $x_{0.8413}$ 与相对浓度 $\frac{C}{C_0}=0.1587$ 处的点 $x_{0.1587}$ 之间的距离定义为 e，因为

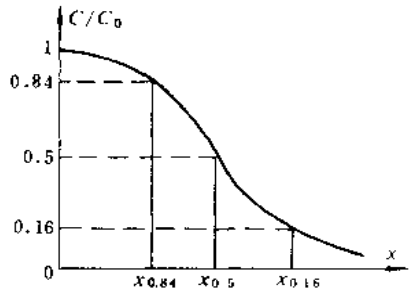


图 5-2 一维砂柱中连续注入示踪剂后浓度分布

$$x_{0.5} = ut$$
$$x_{0.8413} = ut - \sigma$$
$$x_{0.1587} = ut + \sigma$$

显然 $e=2\sigma$。再从图上找到 $x_{0.8413}$ 与 $x_{0.1587}$，于是

$$\sigma = \frac{1}{2}(x_{0.1587} - x_{0.8413}) \qquad (5\text{-}6)$$

利用(5-5)式得到

$$D_L = \frac{1}{8t}(x_{0.1587} - x_{0.8413})^2 \qquad (5\text{-}7)$$

上面讨论的是固定时间 t，在不同 x 处测定 C，从而确定水动力弥散系数。

另外，还可以固定 x（通常在砂柱的末端），在不同的时刻测定浓度 C，再利用正态分布的分布函数求参。该法在测试上更简便一些。图 5-3 表示实验曲线。

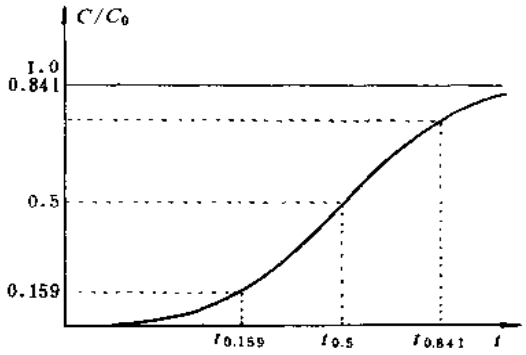


图 5-3 一维砂柱中连续注入示踪剂后某点处浓度历时曲线

依(5-3)式

$$\frac{C(x,t)}{C_0} = 1 - N\left[\frac{x-ut}{\sqrt{2D_Lt}}\right]$$

有

$$0.1587 = 1 - N\left[\frac{x-ut_{0.1587}}{\sqrt{2D_Lt_{0.1587}}}\right]$$

即

$$N\left[\frac{x-ut_{0.1587}}{\sqrt{2D_Lt_{0.1587}}}\right] = 0.8413$$

据正态分布的分布函数的性质

$$N[-1] = 0.1587, N(1) = 0.8413$$

有

$$\frac{x-ut_{0.1587}}{\sqrt{2D_Lt_{0.1587}}} = 1 \qquad (5\text{-}8)$$

同理

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{x - ut_{0.8413}}{\sqrt{2D_L t_{0.8413}}} = -1 \tag{5-9}$$

上两式相减后取平方

$$\left(\frac{x - ut_{0.1587}}{\sqrt{2D_L t_{0.1587}}} - \frac{x - ut_{0.8413}}{\sqrt{2D_L t_{0.8413}}}\right)^2 = 4$$

则得出计算 D_L 的基本公式

$$D_L = \frac{1}{8}\left(\frac{x - ut_{0.1587}}{\sqrt{t_{0.1587}}} - \frac{x - ut_{0.8413}}{\sqrt{t_{0.8413}}}\right)^2 \tag{5-10}$$

由(5-1)式可知，当 $x=ut$ 时，$\frac{C}{C_0}=\frac{1}{2}$，即 $\frac{C}{C_0}=0.5$ 的点以平均速度 u 推进。

在一般情况下，过渡带的宽度和砂柱长相比很小，则有

$$t_{0.5} - t_{0.1587} \ll t_{0.5}$$

$$t_{0.8413} - t_{0.5} \ll t_{0.5}$$

则(5-10)中的 $\sqrt{t_{0.1587}}$ 与 $\sqrt{t_{0.8413}}$ 可近似地由 $\sqrt{t_{0.5}}$ 代替，这时(5-10)式改写成

$$D_L = \frac{u^2}{8t_{0.5}}(t_{0.8413} - t_{0.1587})^2 \tag{5-11}$$

这种试验通常在砂柱末端取样测定浓度 C，而该处还可以测量水出流的体积 V，又

$$V = u \cdot nw \cdot t$$

则 t 可用出流水的体积表示，即

$$t = \frac{V}{u \cdot nw}$$

代入(5-11)式，并记 $V_{0.1587}$、$V_{0.5}$ 和 $V_{0.8413}$ 分别表示出现 $\frac{C}{C_0}=0.1587$、0.5 和 0.8413 的时间，则式(5-11)还可以写成

$$D_L = \frac{u}{8nwV_{0.5}}(V_{0.8413} - V_{0.1587})^2 \tag{5-12}$$

§5-1-2 浓度曲线线性化求参

式(5-1)可以写成

$$1 - 2\frac{C}{C_0} = \operatorname{erf}\left(\frac{x - ut}{2\sqrt{D_L t}}\right)$$

有

$$\operatorname{arc\,erf}\left(1 - 2\frac{C}{C_0}\right) = \frac{x - ut}{2\sqrt{D_L t}} = \frac{x}{2\sqrt{D_L t}} - \frac{u}{2\sqrt{D_L t}}t$$

则

$$\zeta = \sqrt{t}\operatorname{arc\,erf}\left(1 - 2\frac{C}{C_0}\right) = \frac{x}{2\sqrt{D_L}} - \frac{u}{2\sqrt{D_L}}t \tag{5-13}$$

在具体试验中，有了对应时刻 t 的浓度数据，则可计算出 ζ 来。上式表明，ζ 与时间 t 呈线性关系。绘出 ζ-t 的曲线图后(图 5-4)，弥散系数 D_L 可按下式计算

$$D_L = \frac{u^2}{4K^2} \tag{5-14}$$

或

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$D_L = (\frac{x}{2B})^2 \tag{5-15}$$

式中：$K=\frac{u}{2\sqrt{D_L}}$，表示直线 $\zeta(t)$ 的斜率；B 表示该直线在纵坐标轴上的截距，它们均可从图 5-4 上直接量取。

由于该方法运用了全部的试验资料，因而可以得到较好的计算结果。

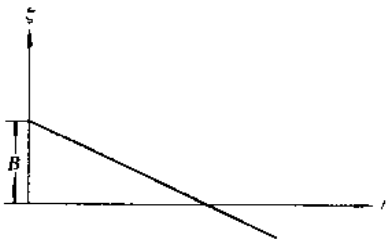


图 5-4 ζ-t 曲线

§5-2 二维水动力弥散

在一维流动二维水动力弥散条件下，若瞬时投放示踪剂，则有解为

$$C(x,y,t) = \frac{m_M/M}{4\pi n\sqrt{D_L D_T t}} e^{-\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}+\frac{y^2}{4D_T t}\right]}$$

若稳定连续地投放示踪剂，则解为

$$C(x,y,t) = \frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_L D_T}} e^{\frac{xu}{2D_L}} \cdot [2K_0(\beta) - w(A,B)]$$

其中

$$\beta = \sqrt{\frac{u^2x^2}{4D_L^2}+\frac{u^2y^2}{4D_L D_T}}, A = \frac{u^2 t}{4D_L}$$

式中：其他符号意义见前而有关章节。

§5-2-1 瞬时投放示踪剂

下面以(4-65)式为基础介绍水动力弥散系数的各种计算方法。

1. 逐点求参法

设有 3 个时刻 t_1、t_2、t_3，对应的浓度为 C_1、C_2、C_3，由(4-65)式出发，当 $y=0$，即在 x 轴上时，可得到下述式子

$$\frac{C_1 t_1}{C_2 t_2} = e^{-\left[\frac{(x-ut_1)^2}{4D_L t_1}-\frac{(x-ut_2)^2}{4D_L t_2}\right]} \tag{5-16}$$

$$\frac{C_2 t_2}{C_3 t_3} = e^{-\left[\frac{(x-ut_2)^2}{4D_L t_2}-\frac{(x-ut_3)^2}{4D_L t_3}\right]} \tag{5-17}$$

上两式取自然对数后再相除

$$\frac{x^2(\frac{1}{t_1}-\frac{1}{t_2})+u^2(t_1-t_2)}{x^2(\frac{1}{t_2}-\frac{1}{t_3})+u^2(t_2-t_3)} = \frac{\ln C_1 t_1 - \ln C_2 t_2}{\ln C_2 t_2 - \ln C_3 t_3} = A \tag{5-18}$$

不难导出

$$u = \frac{x}{t_2}\sqrt{\frac{A(\frac{t_2}{t_3}-1)+(\frac{t_2}{t_1}-1)}{A(1-\frac{t_3}{t_2})+(1-\frac{t_1}{t_2})}} \tag{5-19}$$

只考虑(5-16)式有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\ln\frac{C_1t_1}{C_2t_2}=-\frac{(x-ut_1)^2}{4D_Lt_1}+\frac{(x-ut_2)^2}{4D_Lt_2} \tag{5-20}$$

则

$$D_L=\frac{(t_1-t_2)(x^2-u^2t_1t_2)}{4t_1t_2\ln(\frac{C_1t_1}{C_2t_2})} \tag{5-21}$$

横向弥散系数可直接由(4-65)式导出(设 $y=0$)

$$D_T=\left\{\frac{m_M/M}{2\pi nC_1t_1\sqrt{D_L}}e^{-\left[\frac{(x-ut_1)^2}{4D_Lt_1}\right]}\right\}^2 \tag{5-22}$$

于是,每 3 组浓度-时间数据即可求出 u、D_L 与 D_T。由于多孔介质条件不一定严格符合定解问题的假设或由于观测误差,有可能使相邻的 3 组数据杂乱,从而使求出的参数有一定的随意性,甚至完全失去物理意义。但由一系列 C-t 数据求出的若干组参数能反映出一定的统计规律。因此可以去掉不符合物理意义的数值(例如求出的值为负值或 $D_L<D_T$),再将其余的参数值算术平均即可视作待求参数的近似值。表 5-1 为用该方法计算出的实验室弥散参数。

表 5-1 利用逐点求参法计算出的参数结果

实验次数	电极 / 参数	No. 9	No. 13	No. 17	No. 21	No. 25
E_1	D_L	0.04050	0.02202	0.02891	0.04837	0.03860
	D_T	0.01737	0.01627	0.01457	0.01402	0.01326
	u	0.4829	0.4475	0.4916	0.5062	0.5115
E_2	D_L	0.01811	0.01852	0.01670	0.02249	0.01697
	D_T	0.00474	0.00416	0.00334	0.00614	0.00603
	u	0.2620	0.2529	0.2763	0.2746	0.2840
E_3	D_L	0.01399	0.01466	0.01435	0.01920	0.01959
	D_T	0.00442	0.00640	0.01144	0.01207	0.00543
	u	0.1633	0.1611	0.1727	0.1715	0.1740

有时,可由 u、D_L、D_T 的变化情况来判断和分析实际模型与理论模型的偏离程度和偏离方向。

2. 直线图解法

对(4-65)式求一阶导数

$$C'(x,y,t)=-\frac{m_M/M}{4\pi nt^2\sqrt{D_LD_T}}\left[\frac{x^2-u^2t^2}{4D_Lt}+\frac{y^2}{4D_Tt}-1\right]\cdot e^{\left[\frac{(x-ut)^2}{4D_Lt}+\frac{y^2}{4D_Tt}\right]}$$

令 $C'=0$,对应的 t 为 t_m,有

$$\frac{x^2-u^2t_m^2}{4D_Lt_m}+\frac{y^2}{4D_Tt_m}-1=0 \tag{5-23}$$

解出 t_m,得到

$$t_m=\frac{D}{u^2}\left[\sqrt{4+u^2\left(\frac{x^2}{D_L^2}+\frac{y^2}{D_LD_T}\right)}-2\right] \tag{5-24}$$

显然,这时浓度达到最大值 C_m,即

$$C_m=\frac{m_i}{4\pi n\sqrt{D_LD_Tt_m}}\exp\left[-\frac{(x-ut_m)^2}{4D_Lt_m}-\frac{y^2}{4D_Tt_m}\right] \tag{5-25}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

其中，$m_i=\frac{m_M}{M}$。

若观测孔位于 x 轴上，则(5-23)式可化简成

$$x^2-u^2t_m^2-4t_mD_L=0 \tag{5-26}$$

则有

$$D_L=\frac{x^2-u^2t_m^2}{4t_m} \tag{5-27}$$

若用某种方法求出了 u，则可直接用上式计算出 D_L。

在不知流速的情况下，可用下述方法求参。

(5-27)式可改写成

$$D_L=\frac{x^2}{4t_m\left[\frac{u^2t_m^2}{x^2-u^2t_m^2}+1\right]}$$

令

$$R=\frac{u^2t_m}{x^2-u^2t_m^2} \tag{5-28}$$

则

$$D_L=\frac{x^2}{4t_m(Rt_m+1)} \tag{5-29}$$

再由(5-28)式得

$$u=\sqrt{\frac{R(x^2-u^2t_m^2)}{t_m}} \tag{5-30}$$

将(5-27)式代入(5-30)式，有

$$u=2\sqrt{D_LR} \tag{5-31}$$

不难看出，若知道了 R 值，即可通过(5-29)式与(5-31)式求出 D_L 与 u 值。下面讨论求 R 的方法。

作些变换即可得到下式

$$\ln\frac{C_mt_m}{Ct}+\frac{t-t_m}{t}=\frac{u^2t_m}{x^2-u^2t_m^2}\cdot\frac{(t-t_m)^2}{t} \tag{5-32}$$

只需将(4-65)与(5-25)式代入上式，并取 $y=0$，然后注意到(5-26)式成立，经过一定运算即可证明(5-32)式成立。

若取

$$X=\frac{(t-t_m)^2}{t} \tag{5-33}$$

$$Y=\frac{(t-t_m)}{t}+\ln\left(\frac{C_mt_m}{Ct}\right) \tag{5-34}$$

则(5-32)式可写成

$$Y=RX$$

上式即化为直角坐标系中的一条直线，其斜率为 R。

参数计算的具体步骤：

(1)从实测的 C-t 数据序列中找出 C_m、t_m 值。当观测数据较少时，可先作出 C-t 曲线后，从曲线上查出 C_m、t_m 值。

(2)按(5-33)、(5-34)式计算出两组数据 X、Y，并将其绘在直角坐标系中，两轴比例要一致，然后量取斜率 R；

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(3)据(5-29)、(5 31)式先后计算出 D_L 与 u 值；

(4)最后再利用不在 x 轴上的观测孔资料，求出其 t'_m，即可据(5-23)式计算 D_T。

$$D_T = -\frac{y'^2 D_L}{x'^2 - u^2 t'^2_m - 4t'_m D_L} \tag{5-35}$$

其中，x'、y'为该点的坐标。

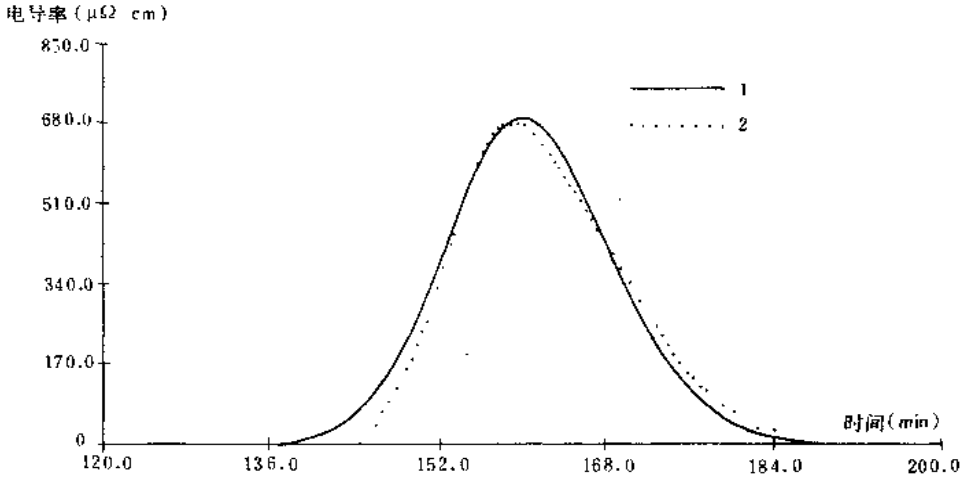


图 5-5 电导率随时间变化的理论曲线与实测曲线

1—拟合曲线；2—实测数据

〔**算例**〕 在某次瞬时投放示踪剂(NaCl)的室内弥散试验中，测得一距投放井 80cm 且位于 x 轴上的观测点处的电导率和时间数据(表 5-2)，相应的实测曲线见图 5-5 所示。鉴于式(5-32)中的浓度是以比例形式出现的，因此不必将电导率转化为浓度(因为电导率与浓度近似呈

表 5-2 原始观测数据序列和变换后数据序列

时间(min)	电导率 ($\mu\Omega$/cm×10^3)	X	Y	时间(min)	电导率 ($\mu\Omega$/cm×10^3)	X	Y
146.17	0.04	1.28	2.81	165.50	0.53	0.19	0.23
146.67	0.07	1.18	2.26	166.00	0.51	0.23	0.27
147.33	0.09	1.06	2.00	166.50	0.49	0.27	0.31
148.17	0.12	0.92	1.72	167.00	0.47	0.31	0.35
149.00	0.16	0.79	1.43	167.50	0.45	0.35	0.40
149.55	0.18	0.71	1.31	168.00	0.44	0.40	0.42
150.00	0.21	0.64	1.16	169.05	0.40	0.50	0.51
150.50	0.24	0.58	1.03	169.87	0.37	0.59	0.59
151.00	0.26	0.52	0.95	170.67	0.34	0.67	0.68
151.95	0.33	0.41	0.71	171.50	0.30	0.79	0.80
152.50	0.37	0.35	0.59	172.33	0.27	0.91	0.91
153.18	0.42	0.29	0.47	173.00	0.25	1.00	0.98
153.50	0.44	0.26	0.42	173.50	0.23	1.08	1.07
154.07	0.48	0.22	0.33	174.00	0.21	1.15	1.16
155.18	0.54	0.14	0.22	174.50	0.19	1.23	1.26
156.00	0.59	0.09	0.13	175.00	0.17	1.32	1.37
156.50	0.61	0.71	0.09	175.83	0.15	1.46	1.49
157.00	0.63	0.05	0.06	176.33	0.14	1.54	1.56
158.00	0.66	0.02	0.02	177.00	0.12	1.67	1.72
160.00	0.67	0.00	0.00	177.67	0.11	1.79	1.80
161.50	0.65	0.02	0.03	179.10	0.08	2.07	2.12
163.67	0.59	0.09	0.13	180.23	0.07	2.31	2.25
164.50	0.56	0.13	0.18	182.52	0.03	2.82	3.10
165.00	0.54	0.16	0.22	184.10	0.03	3.20	3.10

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

线性关系），而直接采用电导率 ρ 进行计算。在表 5-2 中得出如下特征数据

$$t_m = 159.83(\text{min}) \qquad \rho_m = 0.67 \quad (\mu\Omega/\text{cm} \times 10^3)$$

然后依(5-33)式与(5-34)式将实测的 ρ-t 数据转化为 X、Y 数据。从表 5-2 中看出，随着 t 和 ρ 的增加，X、Y 线性地减小，当 t、ρ 分别增至 t_m、ρ_m 时，X、Y 减小为零；随之，t 继续增加，ρ 由 ρ_m 渐减至零，而相应的 X、Y 自零点线性地增加（图 5-6）。也就是说，ρ-t 曲线的上升段与下降段分别对应着 X-Y 曲线的两条直线段。若这些数据均源自一理想模型，则两条直线是重合的。但实际模型与理想模型的差异，曲线的下降段常有“拖尾”现象，且 t_m、ρ_m 的取值不一定很准确，使得 X-Y 坐标上的两条直线不重合，其交角的大小反映了理论模型与实际模型偏离的程度。这时分别量取斜率 R_1 与 R_2，分别求出 D_L 与 u 后，再取其平均值。从图 5-6 中得到 $R_1=1.8625$，$R_2=1.00$，则

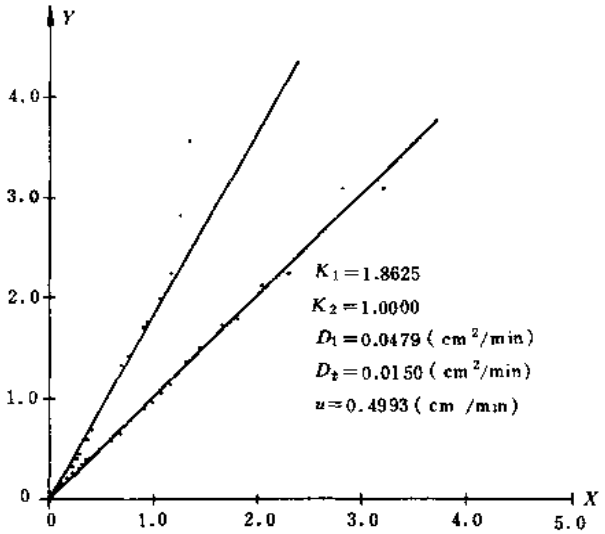


图 5-6　对应于图 5-5 的 X-Y 直线

$$D_{L_1} = \frac{80^2}{4 \times 159.83(159.83R_1 + 1)}$$
$$= 0.03352 \quad (\text{cm}^2/\text{min})$$
$$u_1 = 2\sqrt{0.03352 \times K_1}$$
$$= 0.49969 \quad (\text{cm}/\text{min})$$

同理有 $D_{L_2}=0.06224(\text{cm}^2/\text{min})$，$u_2=0.49897(\text{cm}/\text{min})$，于是

$$D_L = \frac{1}{2}(D_{L_1} + D_{L_2})$$
$$= 0.0479(\text{cm}^2/\text{min})$$
$$u = \frac{1}{2}(u_1 + u_2)$$
$$= 0.4993(\text{cm}/\text{min})$$

有了以上参数后，再利用不在主流线上的观测资料代入(5-35)式计算 D_T。由于这次室内弥散试验中横向弥散宽度较小，未能从横向布置的测点中测得数据，因此无法由(5-35)式求出 D_T。但用其他方法求得 $D_T=0.0150\text{cm}^2/\text{min}$。图 5-5 为实测曲线与拟合曲线的结果。图上反映所求参数比较理想。

直线法将高斯型的浓度曲线转化为简单的直线，它要求两个观测孔的资料，并且其中之一位于 x 轴上。该法的不足是，在转化为 X、Y 数据时，需要一定的计算工作量。

3. 标准曲线法

直线法中已经导出了浓度达到最大值 C_m 及相应时间 t_m 的表达式。

若弥散试验处于纯机械弥散状态，即分子扩散可忽略不计的条件下，有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$D_L \approx \alpha_L u \qquad D_T \approx \alpha_T u \tag{5-36}$$

则(5-25)式可改写成

$$t_m = \frac{\alpha_L}{u}\left(\sqrt{4 + \frac{x^2}{\alpha_L^2} + \frac{y^2}{\alpha_L \alpha_T}} - 2\right) \tag{5-37}$$

若在主流线上，$y=0$，则上式简化为

$$u = \frac{1}{t_m}\left(\sqrt{4\alpha_L^2 + x^2} - 2\alpha_L\right) \tag{5-38}$$

可见，只有当 $\alpha_L \ll x$ 时，才有下列近似关系式

$$u \approx \frac{x}{t_m} \tag{5-39}$$

因为 $\sqrt{4\alpha_L^2+x^2}-2\alpha_L<x$，故按上式计算出的速度 u 值偏大。x 是测得 C_m 的位置。

这时(5-25)式改写成

$$C_m = \frac{m_t}{4\pi n\sqrt{\alpha_L \alpha_T}\cdot u t_m}\exp\left[-\frac{(x-ut_m)^2}{4\alpha_L u t_m} - \frac{y^2}{4\alpha_T u t_m}\right] \tag{5-40}$$

引入无因次变量

$$C_D = \frac{C}{C_m} \tag{5-41}$$

$$t_D = \frac{ut}{\alpha_L} \tag{5-42}$$

$$x_D = \frac{x}{\alpha_L} \tag{5-43}$$

$$y_D = \frac{y}{\sqrt{\alpha_L \alpha_T}} \tag{5-44}$$

无量纲径距

$$r_D = \sqrt{x_D^2 + y_D^2} = \sqrt{\frac{x^2}{\alpha_L^2} + \frac{y^2}{\alpha_L \alpha_T}} \tag{5-45}$$

则(5-40)式可写成

$$C_D(r_D, t_D) = \frac{t_{Dm}}{t_D}\exp\left[\frac{r_D^2 + t_{Dm}^2}{4t_{Dm}}\right]\cdot\exp\left[-\frac{r_D^2 + t_D^2}{4t_D}\right] \tag{5-46}$$

式中：$t_{Dm}=\sqrt{r_D^2+4}-2$，t_{Dm}是出现 C_m 的 t_D 值。

由(5-46)式可知，C_D 是 r_D 和 t_D 的函数，据此可作一组关于 $\lg C_D$-$\lg t_D$ 的标准曲线(图 5-7)。下面介绍标准曲线的求参原理。

由(5-42)式得到

$$t = \frac{\alpha_L}{u} t_D \tag{5-48}$$

两边取对数

$$\lg t = \lg\frac{\alpha_L}{u} + \lg t_D \tag{5-49}$$

记

$$W(r_D, t_D) = \frac{1}{t_D}\exp\left[-\frac{r_D^2 + t_D^2}{4t_D}\right]$$

$$K(r_D) = t_{Dm}\cdot\exp\left[\frac{r_D^2 + t_{Dm}^2}{4t_{Dm}}\right]$$

则(5-46)式改写为

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

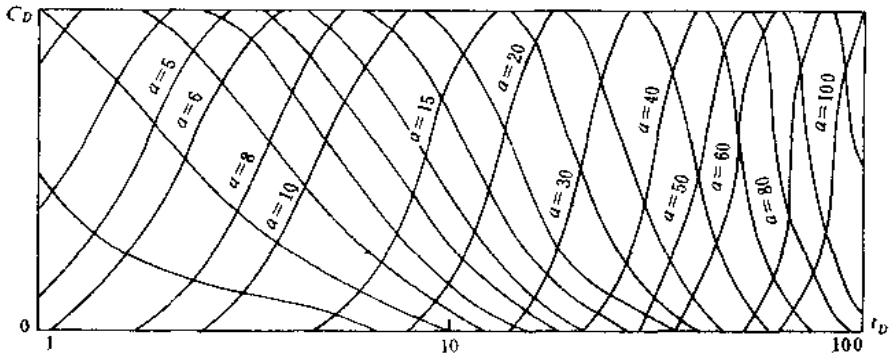


图 5-7　$\lg C_D$-$\lg t_D$ 标准曲线

$$C_D(r_D,t_D) = K(r_D) \cdot W(r_D,t_D) \tag{5-50}$$

两边取对数

$$\lg C_D = \lg K + \lg W \tag{5-51}$$

对于给定的 r_D 值，K 为定值。可见在对数坐标系中，C_D-t 与 W-t_D 两曲线相似，其中 W-t_D 为标准曲线，而 C_D-t 为实测曲线，我们可利用曲线拟合求参。

参数计算步骤：

(1)若已知流向

在注入孔正下游设一取样孔$(x_1,0)$，偏离正下游设孔(x_2,y_2)(图 5-8)。

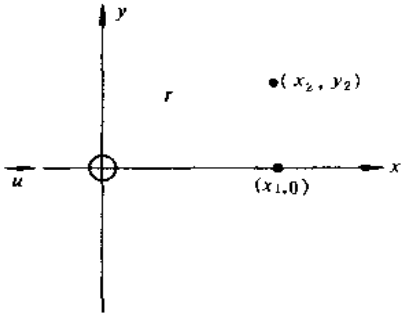


图 5-8　已知流向时观测孔布置

①作 $\lg C_D$-$\lg t$ 实测曲线；

②与标准曲线拟合，分别得 r_{D_1} 和 r_{D_2}；

③据(5-45)式与(5-43)式得

$$r_{D_1} = x_D = \frac{x_1}{\alpha_L}$$

即

$$\alpha_L = \frac{x_1}{r_{D_1}} \tag{5-52}$$

④依(5-45)式，利用(x_2,y_2)观测孔资料

$$r_{D_2}^2 = \frac{x_2^2}{\alpha_L^2} + \frac{y_2^2}{\alpha_L \alpha_T}$$

则

$$\alpha_T = \frac{y_2^2}{\alpha_L\left(r_{D_2}^2 - \frac{x_2^2}{\alpha_L^2}\right)} \tag{5-53}$$

⑤依(5-42)式，利用$(x_1,0)$观测孔

$$u = \alpha_L \frac{t_{D_1}}{t} \tag{5-54}$$

式中：t_{D_1}与 t 可在任一配点处取值。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

注意：如果观测孔偏离流向，又要按照在流向上的公式计算，会使计算的弥散度偏低。Sauty(1980)提供了表 5-3 的计算误差。

表 5-3　观测孔偏离时计算误差

x_D	y_D	偏角 θ(°)		$\frac{C_m(x_D=10,y_D)}{C_m(x_D=10,y_D=0)}$	弥散度误差(%)
		$\frac{\alpha_L}{\alpha_T}=10$	$\frac{\alpha_L}{\alpha_T}=20$		
10	0	0	0	1.0	0
10	2.7	5	3.5	0.8	3
10	5.6	10	7.1	0.41	11
10	11.5	20	14	0.05	30
10	32	45	35	0.000002	57

(2)若流向未知(仅知大体流向)

步骤①、②同前。参数计算方法如下：

依(5-45)式，分别用于(x_1,y_1)、(x_2,y_2)两个观测孔

$$r_{D_1}^2=\frac{x_1^2}{\alpha_L^2}+\frac{y_1^2}{\alpha_L\alpha_T}$$

$$r_{D_2}^2=\frac{x_2^2}{\alpha_L^2}+\frac{y_2^2}{\alpha_L\alpha_T}$$

上面两方程中含有两个未知数 α_L 与 α_T，可求解出

$$\alpha_L=\sqrt{\frac{x_1^2y_2^2-x_2^2y_1^2}{r_{D_1}^2y_2^2-r_{D_2}^2y_1^2}} \tag{5-55}$$

$$\alpha_T=\sqrt{\frac{y_1^2x_2^2-y_2^2x_1^2}{r_{D_1}^2x_2^2-r_{D_2}^2x_1^2}} \tag{5-56}$$

标准曲线对比法利用了全部的观测数据，因此，即使局部观测数据产生了波动或错误也不致于严重影响计算的结果。当实测曲线的曲率较小时，在寻找两曲线重叠的位置时有一定的随意性，这是此法的缺陷。

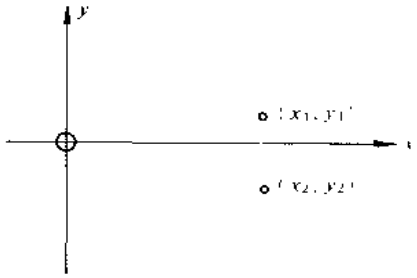


图 5-9　流向未知时观测孔布置

4. 弥散晕面积求参法

在上一章中曾讨论过，式(4-65)可化成椭圆方程，即

$$\frac{(x-ut)^2}{4D_Lt}+\frac{y^2}{4D_Tt}=\ln\frac{m_t}{4\pi n\sqrt{D_LD_T}\cdot t\cdot C} \tag{5-57}$$

上式表明，弥散晕为椭圆，其圆心坐标为$(ut,0)$，它以孔隙平均流速向前移动。

由上式求出椭圆的长轴 a、短轴 b 分别为

$$a=\sqrt{4D_Lt\ln\frac{m_t}{4\pi n\sqrt{D_LD_T}\cdot t\cdot C}} \tag{5-58}$$

$$b=\sqrt{4D_Tt\ln\frac{m_t}{4\pi n\sqrt{D_LD_T}\cdot t\cdot C}} \tag{5-59}$$

且有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{a}{b}=\sqrt{\frac{D_L}{D_T}}$$

即两轴之比为常数，其比值大小反映了纵、横弥散系数的差别程度。

以浓度 C 为等值线的椭圆面积为

$$S=\pi\cdot a\cdot b=4\pi t\sqrt{D_LD_T}\ln\frac{m_t}{4\pi n\sqrt{D_LD_Tt}C} \tag{5-60}$$

即

$$S=4\pi t\sqrt{D_LD_T}\ln\frac{m_t}{4\pi tn\sqrt{D_LD_T}}-4\pi t\sqrt{D_LD_T}\ln C \tag{5-61}$$

该式表明，在某时刻 t 的一系列浓度与其对应的椭圆面积在半对数坐标上为一直线，设其斜率为 K，即

$$K=-4\pi t\sqrt{D_LD_T} \tag{5-62}$$

联立(4-68)式便可求出 D_L 与 D_T。

若同时又求出横轴上的截距为 d，则由(5-61)式得出

$$-K\ln\frac{m_t}{nK}+Kd=0$$

即

$$n=-\frac{m_t}{K}\cdot e^d \tag{5-63}$$

可见，该法还能求出有效孔隙度 n。

(5-60)式还可以写成

$$\frac{S}{t}=4\pi\sqrt{D_LD_T}\ln\frac{m_t}{4\pi n\sqrt{D_LD_T}\cdot C}-4\pi\sqrt{D_LD_T}\ln t \tag{5-64}$$

上式表明，若能求出某浓度 C 等值线围成的椭圆面积随时间变化值，则 S/t 与 t 在半对数坐标中呈直线关系。同理可通过求出斜率、截距来计算水动力弥散系数与孔隙度。

〔**算例**〕 在加拿大某地的砂层含水层中曾进行了一次弥散试验。示踪剂溶液中氯化物浓度为 580.7mg/L，体积共 0.7m³，分 5 井瞬时注入。示踪剂注入后，由于含水层的非均质，示踪剂依流速不同分为快、慢两带移动。慢带移动的实际平均速度为 2.9×10^{-6}m/s，121d 后，分布如图 5-10 所示，试求慢带参数。

在图 5-10 上先量取对应不同浓度的椭圆长、短轴，按比例换算成实际长度，再算出相应的面积，同时计算两轴的比值。表 5-4 列出了有关的数据。从该表中看出，$\frac{a}{b}$ 值除了第一个数偏大外，其余的接近相等，平均后值 $\frac{a}{b}=1.7614$。

表 5-4 由图 5-10 获取的有关浓度晕的数据

a/b	浓度 C(mg/L)	长轴 a(m)	短轴 b(m)	ln$C$	面积 S(m²)
2.239	100	1.119	0.500	4.605	1.758
1.732	80	1.642	0.948	4.382	4.890
1.667	60	2.239	1.343	4.094	9.447
1.604	40	3.172	1.978	3.689	19.711
1.565	20	4.030	2.575	2.996	32.601

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

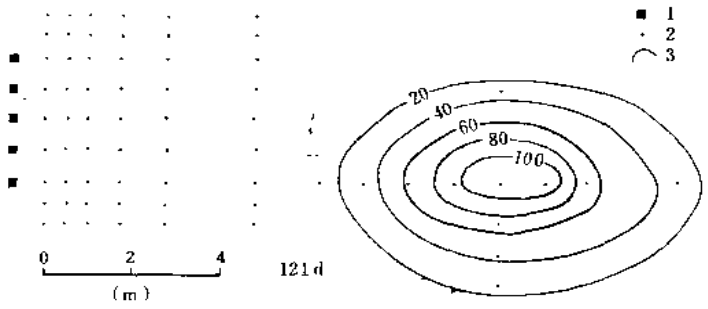


图 5-10　示踪剂注入 121d 后浓度分布

1—投放孔；2—观测孔；3—等值线

然后将 $\ln C$ 与 S 标在普通坐标中，若两坐标轴比例不同，则要经过换算后才能确定斜率。本例中，求得直线斜率 $K=-18.453$（见图 5-11）。于是由式(4-68)与式(5-62)有

$$\frac{D_L}{D_T}=\left(\frac{a}{b}\right)^2=1.7614^2$$
$$=3.1025$$
$$D_L D_T=\left(-\frac{K}{4\pi t}\right)^2$$
$$=\left(\frac{18.453}{4\times 121\times \pi}\right)^2$$
$$=0.000147$$

解出

$$D_L=0.02138(\mathrm{m^2/d})$$
$$D_T=0.00689(\mathrm{m^2/d})$$

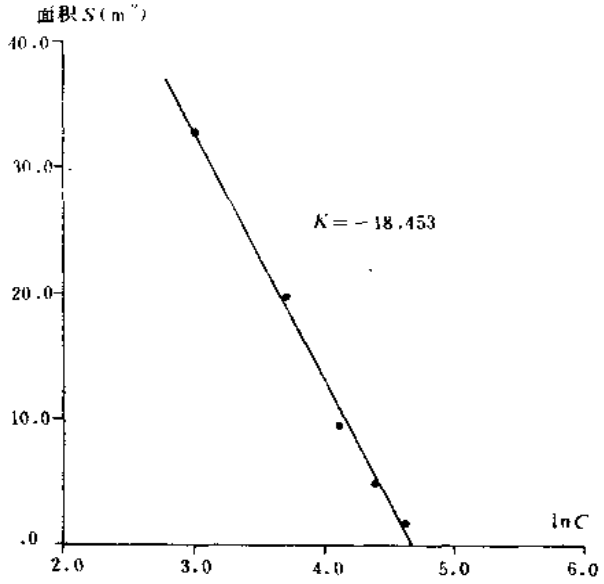


图 5-11　$\ln C$-S 关系图

又已知平均实际流速

$$u=2.9\times 10^{-6}(\mathrm{m/s})$$
$$=0.2506(\mathrm{m/d})$$

则

$$a_L\approx\frac{D_L}{u}=0.085(\mathrm{m})$$
$$a_T\approx\frac{D_T}{u}=0.027(\mathrm{m})$$

原文献中将之看作瞬时投放的三维问题，用数值方法研究了该问题，求出的纵向、横向弥散度为

$$a_L=0.08(\mathrm{m}),\quad a_T=0.03(\mathrm{m})$$

垂向弥散系数 $D_v=8.64\times 10^{-6}(\mathrm{m^2/d})$，它实际上相当于氯化物在砂层中的分子扩散系数。

将其视为二维问题，用面积法所计算参数与原文中结果基本一致，而面积法要简便得多。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

弥散晕面积法计算参数的优点是不一定要求观测孔在主流线上，但要求有较多的观测孔使之能圈定浓度等值线，以便能确定 a、b 值。它不仅可在不知流速的情况下计算水动力弥散系数，而且还可求出孔隙度。所用数据都是在时间上有一定延伸、在空间上有一定范围的数据，因而所求参数具有较好的代表性。

5. $\ln C$-t 曲线拐点法

对(4-65)式两边取自然对数

$$\ln C = \ln \frac{m_t}{4\pi n \sqrt{D_L D_T}} - \ln t - \frac{(x-ut)^2}{4D_L t} - \frac{y^2}{4D_T t}$$

两次对时间求导数为

$$\frac{\partial^2(\ln C)}{\partial t^2} = \frac{1}{t^2} - \frac{x^2}{2D_L t^3} - \frac{y^2}{2D_T t^3}$$

令 $\frac{\partial^2(\ln C)}{\partial t^2} = 0$，则有

$$\frac{x^2}{D_L} + \frac{y^2}{D_T} = 2t_i \tag{5-65}$$

式中：t_i 表示 $\ln C$-t 曲线上出现拐点时相应的时间。

若位于(x', y')处的另一观测孔中出现拐点的时间为 t_i'，则有下列关系式

$$\frac{x'^2}{D_L} + \frac{y'^2}{D_T} = 2t_i' \tag{5-66}$$

联立(5-65)与(5-66)式，可分别求出 D_L 与 D_T。

该方法比较简单。它可在不知道流速的情况下求得 D_L 与 D_T，并且不一定要求观测点位于主流线上。不足之处是有时拐点的选择有一定的任意性。

6. 优选拟合法

上述不同方法所计算出的参数基本上代表了实际参数。为了充分利用每一个数据，得到最优的水动力弥散系数(度)，可将上述方法所计算出的参数视作初值，再据弥散试验中某孔的观测资料去和由上述解析解(5-65)式的计算值相拟合，从而通过计算机进行参数优选，并采用目标函数

$$F(\alpha_L, \alpha_T, u) = \sum_{i=1}^{N} (C_{测i} - C_{计i})^2 \tag{5-67}$$

来体现计算浓度值和实测浓度值之间的拟合程度。

式中：$C_{测i}$与 $C_{计i}$分别表示第 i 个观测浓度值与计算浓度值；N 为所有观测数据个数。

不难看出，目标函数 $F(\alpha_L, \alpha_T, u)$有一最小值，其极小点即某一组参数使得 $C_{测i}$与 $C_{计i}$最为接近，因此 F 的极小点即某一组参数 α_L、α_T、u 必然是较真实值。

在一般情况下，应从具体的水文地质条件出发，若观测数据准确，加上所选择的初始试探值又是从实际资料和经验中给出，那么经过上述优化所得到的极小值点与实际参数相差不会太大。

〔**算例**〕 以室内某次瞬时投放示踪剂(NaCl)的弥散试验中，在一组观测孔中所测得的电导率数据为基础，采用优选拟合法计算水动力弥散参数。前面提过，鉴于电导率与浓度近似呈线性关系，因而直接采用电导率 ρ 进行拟合计算，图 5-12 为实测曲线与计算曲线的拟合结果，表 5-5 是优选拟合所获得的水动力弥散参数表。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

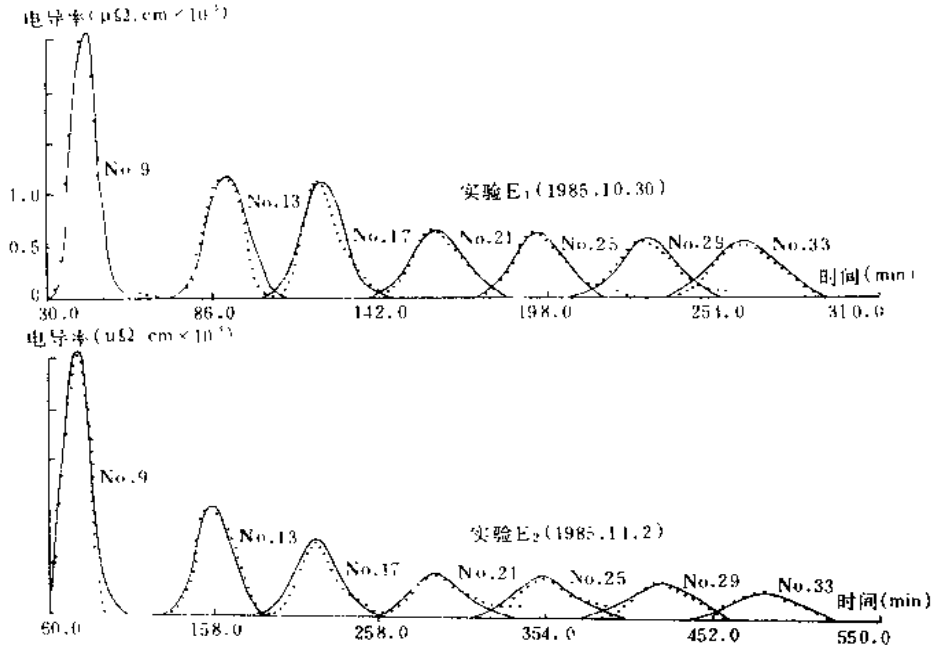


图 5-12　理论(实线)与实测(点线)对比

表 5-5　优选拟合法计算结果

实　验	电极 / 参数	No. 9	No. 13	No. 17	No. 21	No. 25	No. 29
E_1	D_L	0.0376	0.0442	0.0420	0.0495	0.0454	0.0539
	D_T	0.0156	0.0142	0.0121	0.0150	0.0128	0.0117
	u	0.4709	0.4477	0.4911	0.4972	0.5150	0.5200
	α_L	0.0799	0.0991	0.0856	0.0995	0.0882	0.1036
	α_T	0.0332	0.0318	0.0247	0.0302	0.0248	0.0225
	D_L/D_T	2.387	3.120	3.459	3.293	3.557	4.595
E_2	D_L	0.0251	0.0211	0.0259	0.0285	0.0299	0.0336
	D_T	0.0059	0.0096	0.0112	0.0152	0.0131	0.0156
	u	0.2636	0.2567	0.2752	0.2784	0.2850	0.2866
	α_L	0.0951	0.0821	0.0940	0.1024	0.1050	0.1174
	α_T	0.0223	0.0375	0.0407	0.0545	0.0461	0.0544
	D_L/D_T	4.377	2.191	2.310	1.880	2.277	2.158

上述通过计算机而实现的优选拟合法，有关参数的优选过程可以自动完成，用起来简单、方便，计算结果具有代表性。

§5-2-2　连续投放示踪剂

若在(4-70)式的两边对时间 t 求一阶导数，可将其化成与(4-65)式相同的式子。换言之，对于连续投放示踪剂的情况，若能求得浓度随时间的变化率 C'，则可以借用上述瞬时投放示

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

踪剂的水动力弥散系数计算方法。下面着重介绍连续投放示踪剂的两种标准曲线对比法。

1. $\lg W_c(A,\beta)$-$\lg A$ 标准曲线法

记

$$W_c(A,\beta) = 2K_0(\beta) - W(A,\beta) \tag{5-68}$$

$$A = \frac{u^2 t}{4D_L} \tag{5-68'}$$

对(4-70)式两边取对数

$$\lg C = \lg\left[\frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_L D_T}}\exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right)\right] + \lg W_c(A,\beta) \tag{5-69}$$

再由(5-68')式得到

$$\lg t = \lg\left(\frac{4D_L}{u^2}\right) + \lg A \tag{5-70}$$

上两式表明，实测曲线 $\lg C$-$\lg t$ 与理论曲线 $\lg W_c(A,\beta)$-$\lg A$ 形状相同，只是坐标平移而已。

我们可事先作出对应不同 β 值的标准曲线族(图 5-13)，然后再作出实测的 $\lg C$-$\lg t$ 曲线并与标准曲线族拟合，找出拟合最好的 β 值(记为 β_0)，然后再找出与 $A=1, W_c=1$ 相对应的 C_0、t_0 值，则有

$$t_0 = \frac{4D_L}{u^2} \tag{5-71}$$

$$C_0 = \frac{m_t}{4\pi Mn\sqrt{D_L D_T}}\exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \tag{5-72}$$

$$\beta_0 = \sqrt{\frac{u^2x^2}{4D_L^2} + \frac{u^2y^2}{4D_L D_T}} \tag{5-73}$$

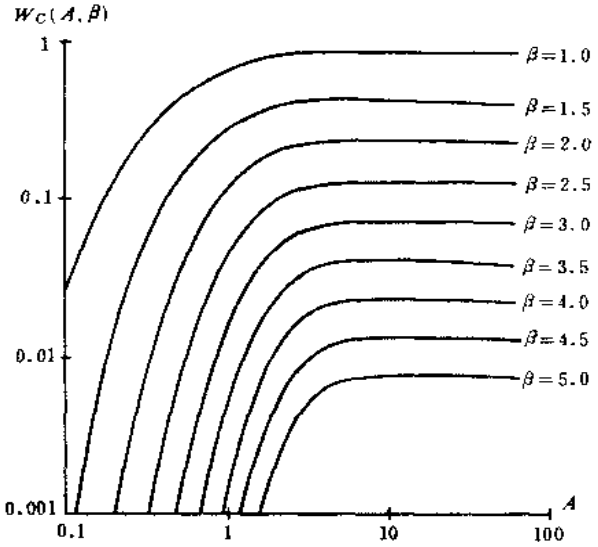


图 5-13 $\lg W_c$-$\lg A$ 标准曲线族

可将 u、D_L、D_T 视作待求参数，有了上述 3 式即可分别求出 3 个参数。为了使计算过程简化，一般选择特殊位置的观测孔，如位于 x 轴上(即 $y=0$)，先由(5-71)式与(5-73)式计算出 D_L 与 u，再代入(5-72)式即可计算出 D_T 值。若已知 u 值，则可直接利用(5-71)、(5-72)式确定出 D_L、D_T 来。

〔算例〕 为了验证上述方法的可靠性，可取一组理论数据

$u = 0.2\text{cm/s}$　　$D_L = 1.6\text{cm}^2/\text{s}$

$D_T = 0.1\text{cm}^2/\text{s}$　　$n = 0.4$

$C_0 = 1.0\text{mg/cm}^3$　　$Q = 1.0\text{cm}^3/\text{s}\cdot\text{cm}$

注意 C_0 与 Q 分别表示注入示踪剂的浓度和注入流量，不难证明 C_0Q 等于 $\frac{m_t}{M}$，即可用 C_0Q 代替(5-72)中的 $\frac{m_t}{M}$。另外设观测点离投放点距离 $x=40\text{cm}$，并且 $y=0$。据此计算出观测点处的时间、浓度数据如表5-6 所示，并得到相应的 C-t 曲线(图 5-14)。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

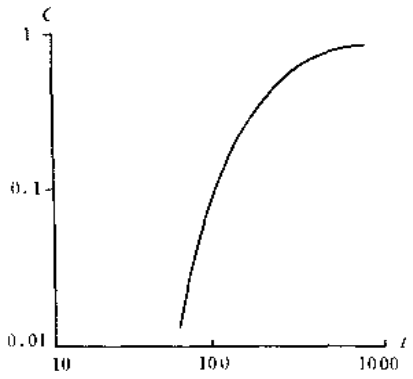


图 5-14　与算例对应的 C-t 曲线

表 5-6　观测点处时间、浓度计算数据

时间(s)	浓度(mg/cm³)	时间(s)	浓度(mg/cm³)
60	0.0137	170	0.2979
70	0.0267	200	0.3778
80	0.0449	250	0.4865
90	0.0670	300	0.5664
100	0.0923	400	0.6633
120	0.1491	500	0.7107
140	0.2094	600	0.7337
150	0.2395	800	0.7503

将图 5-14 与图 5-13 拟合，所得到最佳的 β_0 值为 2.5，相对应的 $A=1, W_c=1$ 的匹配点处：$t_0=170\text{s}$，$C_0=6\text{mg/cm}^3$，于是由(5-71)、(5-73)式有

$$D_L=\frac{x^2}{\beta_0^2 t_0}=1.506$$

$$u=\frac{2x}{t_0\beta_0}=0.188$$

再代入(5-72)式中得到 $D_T=0.108$。

可见上述计算值与真值相比，基本上准确。

注意，该计算方法只用到了一个观测孔的资料，可同时求出 D_L、D_T 与 u 值，并且也不一定要求观测点位于 x 轴上，但在计算前必须制作标准曲线。一般地，野外弥散试验中 D_L 与 D_T 较大，而 β 值较小，则可利用现有的 Huntush 函数表来制作标准曲线；而就室内弥散数据，D_L、D_T 较小，β 值都比较大，这时一般不能查现成的函数表，要专门编制程序计算出 $K_0(\beta)$和 $W(A,\beta)$值，再制成标准曲线族。

2. $\lg[e^B K_0(B)]$-$\lg B$ 标准曲线法

我们在第四章曾讨论过，当 $t\to\infty$时，即时间较长时，(4-70)式可以简化成：

$$C(x,y)=\frac{m_i}{2\pi Mn\sqrt{D_L D_T}}e^{\frac{ux}{2D_L}}K_0\left[\sqrt{\frac{u^2x^2}{4D_L^2}+\frac{u^2y^2}{4D_L D_T}}\right]$$

若观测孔位于 x 轴上，则有

$$C(x,0)=\frac{m_i}{2\pi Mn\sqrt{D_L D_T}}e^B K_0(B) \tag{5-74}$$

其中，

$$B=\frac{ux}{2D_L} \tag{5-75}$$

对(5-74)式两侧求对数

$$\lg C=\lg\frac{m_i}{2\pi Mn\sqrt{D_L D_T}}+\lg[e^B K_0(B)] \tag{5-76}$$

变换(5-75)式

$$x=\frac{2D_L}{u}\cdot B$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

再对上式两端取对数

$$\lg x = \lg \frac{2D_L}{u} + \lg B \tag{5-77}$$

(5-76)式与(5-77)式表明，实测的 $\lg C$-$\lg x$ 曲线与理论的 $\lg[e^B K_0(B)]$-$\lg B$ 曲线形状是相同的，只是存在坐标平移问题。

因此，只需将实测曲线与标准曲线(图 5-15)相匹配，并找出 $B=1$，$e^B K_0(B)=1$ 所对应的 x_0、C_0 值，可得

$$D_L = \frac{1}{2} u x_0$$

$$D_T = \frac{m_i^2}{2\pi^2 M^2 n^2 \cdot u x_0}$$

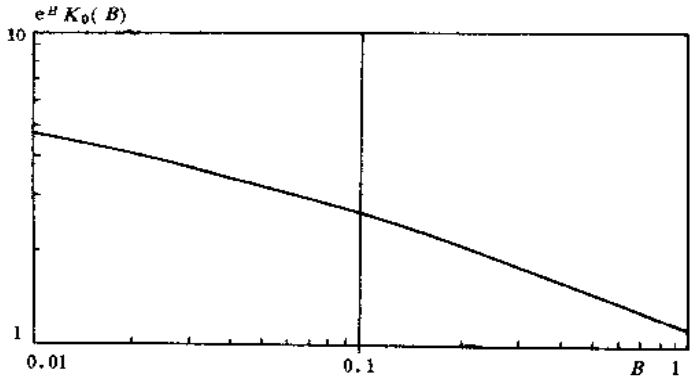


图 5-15 $\lg[e^B K_0(B)]$-$\lg B$ 标准曲线

该计算方法的求解步骤与上节中的 $\lg W_c(A,\beta)$-$\lg A$ 标准曲线对比法很相似，这里不再赘述。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第六章　水动力弥散方程的数值解法

第四章介绍的解析解法，只能用于非常简单的条件，它们通常只有在某些理论研究或实验室中人为给定的条件下才能严格地满足。在野外现场往往要经过不同程度的简化之后才能满足解析解的应用条件。其中许多情况复杂到不允许简化解析解的适用条件，如果勉强使用，其结果已经改变了实现情况的基本条件。对于这些条件，不得不求助于数值方法等。

§6-1　有限差分法

有限差分法的基本思想是：将空间划分成许多小网格，把时间也分成许多小时段 Δt，每一网格中心点（格点）处的未知变量（H 或 C）视为该网格上的平均值。然后利用差商（$\frac{\Delta H}{\Delta x}$ 或 $\frac{\Delta C}{\Delta x}$）近似地代替微商，从而把描述未知变量在整个研究区域上连续分布的偏微分方程转变为描述未知变量在研究区域上离散分布的有限个代数方程。求解代数方程组，便得到该 Δt 末时刻的各格点上的未知变量的计算结果。就这样一个 Δt 一个 Δt 地往前求解。我们将这些在空间上和时间上离散分布的已求得变量（H，C）近似地视为连续函数在各格点上的取值。

与求解地下水流动问题一样*，用差分法求解地下水水动力弥散问题，具有如下基本步骤：

（1）剖分渗流区，确定离散点。将所研究的水动力弥散区域按某种几何形状（如矩形、任意多边形等）剖分成网络系统。研究区域的边界可以用最接近它的网格线近似地表示。当网格划分的足够小时，曲折的格线也能够刻画出边界的形状。将区域剖分好之后，就可以确定离散点。

（2）建立水动力弥散问题的差分方程组。根据建立差分方程的途径不同，可分两种方法：一种是根据达西定律及质量均衡原理，建立水动力弥散的定解问题，然后用差商代替微商，从而将定解问题的求解转化为差分方程的求解；另一种方法是根据达西定律和质量均衡原理直接对格点或结点的均衡区，建立有限差分方程，并不涉及微分方程定解问题。

（3）求解差分方程组。在求解地下水流动问题时常采用各种迭代法，如点逐次超松驰方法（SOR）、线逐次超松驰方法（LSOR）、迭代的交替方向隐式方法（IADI）及强隐式方法（SID）等。这些方法同样可用于求解水动力弥散的差分方程组。

§6-1-1　导数的有限差分近似

有限差分法的基本原理是将某点处的浓度函数的导数用该点处和其 n 个相邻点处的浓度值及其间距近似地表示。建立浓度导数的有限差分近似式最常用的方法是通过泰勒展开式引

---

* 详见《地下水流动问题数值方法》，1990，陈崇希、唐仲华编著，中国地质大学出版社。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

开。

在图 6-1 中取 x 轴上任一点 i，其坐标为 $x_i=i\Delta x$。在该点的左、右相距为 Δx 处分别取点 $(i-1)$和$(i+1)$，其坐标分别为 $x_{i-1}=(i-1)\Delta x$ 及 $x_{i+1}=(i+1)\Delta x$。以 i 为中心，将浓度 $C(x)$ 按泰勒级数展开

$$C_{i-1}=C_i+\Delta x\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i+\cdots \quad (6\ 1)$$

$$C_{i+1}=C_i-\Delta x\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i-\cdots \quad (6\text{-}2)$$

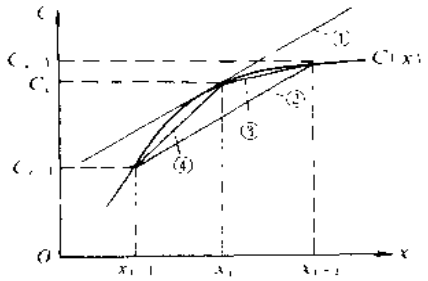


图 1　一阶导数的有限差分逼近示意图

①—$K=\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i$；②—$K=\frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta x}$；

③—$K=\frac{C_{i+1}-C_i}{\Delta x}$；④—$K=\frac{C_i-C_{i-1}}{\Delta x}$

（注：K 为直线斜率）

其中，$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i$ 表示浓度导数在 i 点(x_i)的取值。

对(6-1)式整理后得到

$$\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i=\frac{C_{i-1}-C_i}{\Delta x}+o(\Delta x)$$

其中，$o(\Delta x)$表示余项，它是当 $\Delta x\to 0$ 时与 Δx 同阶的无穷小量。若略去余项，则一阶导数的有限差分近似式为

$$\left.\frac{\partial C_i}{\partial x}\right|_i\approx\frac{C_{i+1}-C_i}{\Delta x} \quad (6\ 3)$$

同理，由(6-2)式得到

$$\left.\frac{\partial C_i}{\partial x}\right|_i\approx\frac{C_i-C_{i-1}}{\Delta x} \quad (6\text{-}4)$$

由(6-1)式减去(6-2)式，再除以 $2\Delta x$ 得到

$$\left.\frac{\partial C_i}{\partial x}\right|_i=\frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta x}+o[(\Delta x)^2]$$

其中 $o[(\Delta x)^2]$是当 $\Delta x\to 0$ 时与$(\Delta x)^2$ 同阶的无穷小量，若略去余项则有

$$\left.\frac{\partial C_i}{\partial x}\right|_i=\frac{C_{i+1}-C_{i-1}}{2\Delta x} \quad (6\text{-}5)$$

(6-3)、(6-4)式与(6-5)式分别表示一阶导数的向前差分、向后差分及中心差分。

将(6-1)式与(6-2)式相加再除以$(\Delta x)^2$，则有

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i=\frac{C_{i-1}-2C_i+C_{i+1}}{(\Delta x)^2}+o[(\Delta x)^2]$$

略去余项后有

$$\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i=\frac{C_{i-1}-2C_i+C_{i+1}}{(\Delta x)^2} \quad (6\text{-}6)$$

上式即为二阶导数的中心差分公式，其截断误差是二阶的。

上述导数的差分公式是针对自变量 x 而言的。用类似的方法可以得到偏导数$\frac{\partial C}{\partial t}$、$\frac{\partial C}{\partial y}$、$\frac{\partial C}{\partial z}$、$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}$、$\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}$等的差分近似表达式。

§6-1-2　一维水动力弥散的差分解法

考虑一维水动力弥散方程

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}\quad(0\leqslant x\leqslant L,0\leqslant t\leqslant T) \quad (6\ 7)$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

在时间区间[0,T]和空间区间[0,L]上都作等距剖分。取时间步长为 Δt，空间步长为 Δx，由此得到时空网络。并设 $C_{i,n}$ 表示第 i 个网络点 x_i 处在时刻 t_n 的浓度值。方程(6-7)式的右端 $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 可用差分公式(6-6)，而 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 则可以采用向前、向后和中心差分 3 种不同的差分格式。与解地下水流动问题一样，按照时间 t 取 t_n、t_{n-1} 以及介于两者之间的情况，分别可得到显式、隐式和 Grank-Nicolson 等 3 种不同的差分格式。

1. 显格式

式(6-7)中的对流项取中心差分

$$\frac{C_{i,n+1}-C_{i,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C_{i+1,n}-2C_{i,n}+C_{i-1,n}}{(\Delta x)^2}-u\frac{C_{i+1,n}-C_{i-1,n}}{2\Delta x} \tag{6-8}$$

式中仅有一个未知数 $C_{i,n+1}$，解得

$$C_{i,n+1}=\left\{\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}+\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right\}C_{i-1,n}+\left\{1-\frac{2D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right\}C_{i,n}+\left\{\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right\}C_{i+1,n} \tag{6-9}$$

可以证明，稳定性准则要求

(1) $\frac{2D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\leqslant 1$　　即　$\Delta t\leqslant\frac{(\Delta x)^2}{2D_L}$；

(2) $\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\leqslant\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}$　　即　$\Delta x\leqslant\frac{2D_L}{u}\xrightarrow{(D_L\approx\alpha_L u)}2\alpha_L$。

由条件(2)$\Delta x\leqslant 2\alpha_L$，格矩要求很小；由(2)可知，鉴于 Δx 较小，导致 Δt 不能太大，将(2)代入(1)式中，得到

$$\Delta t\leqslant\frac{(\Delta x)^2}{2D_L}=\frac{2D_L}{u^2}\xrightarrow{D_L\approx\alpha_L u}\frac{2\alpha_L}{u}$$

若对流项改为向后差分

$$\frac{C_{i,n+1}-C_{i,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C_{i+1,n}-2C_{i,n}+C_{i-1,n}}{(\Delta x)^2}-u\frac{C_{i,n}-C_{i-1,n}}{\Delta x} \tag{6-10}$$

解得

$$C_{i,n+1}=\left\{\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{\Delta x}\right\}C_{i-1,n}+\left\{1-\frac{u\Delta t}{\Delta x}-2\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right\}C_{i,n}+\left\{\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right\}C_{i+1,n} \tag{6-11}$$

稳定性要求

$$\Delta t<\frac{\Delta x}{2\frac{D_L}{\Delta x}+u}=\frac{\Delta x}{u(\frac{2\alpha_L}{\Delta x}+1)}\approx\frac{\Delta x}{u}\quad(\because\frac{2\alpha_L}{\Delta x}\ll 1)$$

不难看出，稳定性限制比对流项取中心差分有所改善。

2. 隐格式

只要(6-8)式中右端的对流项取中心差分，右端各 C 的时阶均取 $n+1$ 水平，即变为隐格式

$$\frac{C_{i,n+1}-C_{i,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C_{i-1,n-1}-2C_{i,n-1}-C_{i+1,n-1}}{(\Delta x)^2}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$- u\frac{C_{i+1,n-1} - C_{i-1,n-1}}{2\Delta x} \tag{6-12}$$

整理后得到

$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n-1} + \left(1 - \frac{2D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,n+1}$$
$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n-1} = C_{i,n} \tag{6-13}$$

对每一个格点都列出(6-13)式，可得到一个三对角线方程组，可用“追赶法”求解。

隐格式是无条件稳定的，但这并不意味着此方程组通过数值计算所得的解与真解一致。对于某种给定的网格大小和时间步长来说，数值计算的精度取决于初始条件和边界条件的平滑程度。这些解连续地依赖于这些函数。如果初始、边界条件变化十分缓慢，那么离散化不会带来很大误差。

3. Crank-Nicolson 格式

取显式和隐式的平均，就是 Crank-Nicolson 差分格式，即

$$\frac{C_{i,n-1} - C_{i,n}}{\Delta t} = \frac{1}{2}\left\{D_L\frac{C_{i-1,n} - 2C_{i,n} + C_{i+1,n}}{(\Delta x)^2} - u\frac{C_{i-1,n} - C_{i+1,n}}{2\Delta x} + D_L\frac{C_{i-1,n-1} - 2C_{i,n-1} + C_{i+1,n-1}}{(\Delta x)^2} - u\frac{C_{i-1,n-1} - C_{i+1,n-1}}{2\Delta x}\right\}$$

整理后得到

$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n-1} + 2\left(1 + \frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,n-1} - \left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n-1} = \left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} + \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i+1,n} - 2\left(1 - \frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,n} + \left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2} - \frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n} \tag{6-14}$$

上式右端只包含 t_n 时刻的浓度，设其为已知，则它在形式上与隐格式(6-13)式完全相同，仍然可以利用“追赶法”解三对角线方程组，求得 t_{n-1} 时刻的浓度值。该差分格式也是无条件稳定的。

显格式(6-9)式与隐格式(6-13)式的截断误差均为 $o[(\Delta t)-(\Delta x)^2]$，Grank-Nicolson 格式(6-14)式的截断误差则为 $o[(\Delta t)^2+(\Delta x)^2]$。一维水动力弥散的上述 3 种差分格式的具体解法、初始条件和边界条件的用法等均与地下水流动问题的情形相同，详细内容可参考《地下水流动问题数值方法》一书，这里不再赘述。

§6-1-3 二维水动力弥散的差分解法

考虑一维流动二维水动力弥散方程[式(4-56)]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u\frac{\partial C}{\partial x}$$

与一维水动力弥散相类似，用差分近似代替上述方程中的偏导数，按空间偏导数所取的时间水平不同，同样可以得到二维水动力弥散方程的显式、隐式和 Grank Nicolson 等 3 种格式。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

1. 显格式

式(4-56)中的对流项取中心差分

$$\frac{C_{i,j,n+1}-C_{i,j,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C_{i+1,j,n}-2C_{i,j,n}+C_{i-1,j,n}}{(\Delta x)^2}+D_T\frac{C_{i,j+1,n}-2C_{i,j,n}+C_{i,j-1,n}}{(\Delta y)^2}-u\frac{C_{i-1,j,n}-C_{i-1,j,n}}{2\Delta x} \tag{6-15}$$

其中,将区域剖分成矩形网格,$C_{i,j,n}$表示 $C(x_i,y_j,t_n)$。

化简后有

$$C_{i,j,n-1}=\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i+1,j,n}+\left(1-2\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-2\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n}+\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i\ 1,j,n}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j+1,n}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n} \tag{6-16}$$

上式涉及到图 6-2 中以(i,j)为中心的 5 个网格点在 t_n 时刻的已知浓度,即 $C_{i-1,j,n}$、$C_{i,j,n}$、$C_{i\ 1,j,n}$、$C_{i,j+1,n}$、$C_{i,j-1,n}$。对全部内容网格点都列出方程(6-16),并利用已知的初始条件与边界条件,结果得到五对角线的方程组。

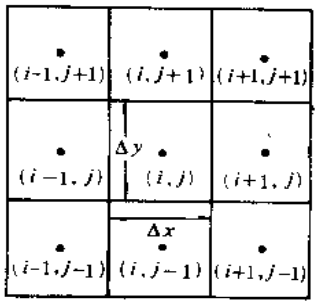


图 6-2 二维差分格式联系到的网格点

2. 隐格式

对(4-56)式中右端对流项取中心差分,右端各 C 的时阶均取 $n+1$ 水平,即有隐格式

$$\frac{C_{i,j,n+1}-C_{i,j,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C_{i+1,j,n+1}-2C_{i,j,n+1}+C_{i\ 1,j,n+1}}{(\Delta x)^2}+D_T\frac{C_{i,j-1,n+1}-2C_{i,j,n+1}+C_{i,j-1,n+1}}{(\Delta y)^2}-u\frac{C_{i-1,j,n+1}-C_{i-1,j,n+1}}{2\Delta x} \tag{6-17}$$

整理后有

$$\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i+1,j,n+1}-\left(1+\frac{2D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}+\frac{2D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n+1}+\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n+1}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n-1}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n+1}=-C_{i,j,n} \tag{6-18}$$

上述的差分格式是收敛且无条件稳定的。与二维水动力弥散的显格式相似,它也构成了五对角线方程组。不同的是涉及到以(i,j)为中心的 5 个网格点在 t_{n-1}时刻的未知浓度,即 $C_{i-1,j,n+1}$、$C_{i,j,n+1}$、$C_{i\ 1,j,n+1}$、$C_{i,j-1,n-1}$及 $C_{i,j-1,n+1}$。

3. Crank-Nicolson 格式

将(6-16)与(6-18)相加并除以 2,即为 Crank-Nicolson 格式

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{C_{i,j,n+1}-C_{i,j,n}}{\Delta t}=\frac{1}{2}\left[D_L\frac{C_{i+1,j,n}-2C_{i,j,n}+C_{i-1,j,n}}{(\Delta x)^2}\right.$$
$$+D_T\frac{C_{i,j+1,n}-2C_{i,j,n}+C_{i,j-1,n}}{(\Delta y)^2}$$
$$-u\frac{C_{i-1,j,n}-C_{i-1,j,n}}{2\Delta x}$$
$$+D_L\frac{C_{i-1,j,n+1}-2C_{i,j,n-1}+C_{i-1,j,n+1}}{(\Delta x)^2}$$
$$+D_L\frac{C_{i,j-1,n-1}-2C_{i,j,n+1}+C_{i,j-1,n+1}}{(\Delta y)^2}$$
$$\left.-u\frac{C_{i+1,j,n+1}-C_{i-1,j,n-1}}{2\Delta x}\right] \tag{6-19}$$

整理后有

$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i+1,j,n-1}+2\left(1+\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n+1}$$
$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n+1}$$
$$-\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j+1,n+1}-\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n+1}$$
$$=\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n}$$
$$+2\left(1-\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n}$$
$$+\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n}$$
$$+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n}+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n} \tag{6-20}$$

上式右端只包含 t_n 时刻的浓度，故它在形式上与隐格式(6-18)相同，也构成了五对角线方程组。

4. 交替方向隐式法(ADI 方法)

上述的 3 种差分格式与一维水动力弥散的 3 种格式不同。区别是，在一维条件下 3 种格式所需求解的是三对角线方程组，很容易用"追赶法"求解；而在二维条件下所给出的三种格式所组成的方程组，远比一维情况下庞大，是五对角线方程组。

为了避免解五对角线方程组的困难，在地下水流动问题数值方法一书中曾提出过用交替方向隐式方法(即 ADI 方法)。该方法是 Peaceman 等于 1955 年提出的。该方法的优点是，它不是一次对整体矩阵求逆，而是分两次对三对角线矩阵求逆，把解二维问题化为多次解一维问题。因此其计算速度要比隐式法快得多，并且节约计算机内存。

ADI 方法照样可用于二维水动力弥散方程求解。当渗流区域的形状接近矩形时，其效果更好。

ADI 法的基本思想是将一个 Δt 分为两步计算，每一步为 $\Delta t/2$。

第一个半时间步长，对于 x 方向上的偏导数采用隐式差分，对于 y 方向上的偏导数采用显式差分，得到相应的差分方程

$$D_L\frac{C_{i+1,j,n-\frac{1}{2}}-2C_{i,j,n-\frac{1}{2}}+C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2}$$
$$+D_T\frac{C_{i,j+1,n}-2C_{i,j,n}+C_{i,j-1,n}}{(\Delta y)^2}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$-u\frac{C_{i,j,n-\frac{1}{2}}-C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}}{\Delta x}=\frac{C_{i,j,n+\frac{1}{2}}-C_{i,j,n}}{\frac{\Delta t}{2}} \tag{6-21}$$

整理后有

$$\left(\frac{D_L\Delta t}{2(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n+\frac{1}{2}}-\left(1+\frac{u\Delta t}{2\Delta x}+\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,j,n-\frac{1}{2}}+\frac{D_L\Delta t}{2(\Delta x)^2}C_{i-1,j,n+\frac{1}{2}}$$
$$=-\frac{D_T\Delta t}{2(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n}-\left(1-\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n}-\frac{D_T\Delta t}{2(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n} \tag{6-22}$$

显然该方程式中仅包含 3 个未知量：$C_{i+1,j,n-\frac{1}{2}}$、$C_{i,j,n-\frac{1}{2}}$及 $C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}$，其余则为 n 时刻的已知浓度，对每一个固定的 j，由式(6-22)可得到一个三对角线方程组，全部求解后就得到所有网格点上的过渡解 $C_{i,j,n-\frac{1}{2}}$。

第二个半时间步长则反过来，即对于 x 的偏导数采用显式差分，而对于 y 的偏导数采用隐式差分，得到相应的差分方程

$$D_L\frac{C_{i+1,j,n+\frac{1}{2}}-2C_{i,j,n-\frac{1}{2}}+C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}}{(\Delta x)^2}+D_T\frac{C_{i,j+1,n+1}-2C_{i,j,n+1}+C_{i,j-1,n+1}}{(\Delta y)^2}$$
$$-u\frac{C_{i,j,n+\frac{1}{2}}-C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}}{\Delta x}=\frac{C_{i,j,n+1}-C_{i,j,n-\frac{1}{2}}}{\frac{\Delta t}{2}} \tag{6-23}$$

整理后有

$$\frac{D_T\Delta t}{2(\Delta y)^2}C_{i,j-1,n+1}-\left(1+\frac{D_T\Delta t}{(\Delta y)^2}\right)C_{i,j,n+1}+\frac{D_T\Delta t}{2(\Delta y)^2}C_{i,j+1,n+1}$$
$$=-\left(\frac{D_T\Delta t}{2(\Delta x)^2}+\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,j,n-\frac{1}{2}}-\left(1-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}-\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,j,n-\frac{1}{2}}$$
$$-\frac{D_L\Delta t}{2(\Delta x)^2}C_{i+1,j,n-\frac{1}{2}} \tag{6-24}$$

式(6-24)中也只包含 3 个未知变量：$C_{i,j+1,n+1}$、$C_{i,j,n+1}$及 $C_{i,j-1,n+1}$其余的浓度变量可由(6-22)式计算出。对于每个固定的 i，由上式可以得到一个三对角线方程组，全部求解后就得到了各网格点上的浓度，从而推进了一个时间步长。

可以证明这一算法是收敛的并且是无条件稳定的。

§6-1-4 求解差分方程的计算机程序举例

程序 1 是求解矩形含水层中地下水溶质运移的二维交替方向隐式差分法的计算机程序。其数学模型可写成

$$\begin{cases}\dfrac{\partial C}{\partial t}=D_L\dfrac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\dfrac{\partial^2 C}{\partial y^2}-u\dfrac{\partial C}{\partial x} & 0\leqslant\begin{matrix}x\\y\end{matrix}\leqslant 200\\ C(x,y,0)=0 & 0\leqslant\begin{matrix}x\\y\end{matrix}\leqslant 200\\ C(200,y,0)=1 & 0\leqslant y\leqslant 200\\ C(x,200,0)=1 & 0\leqslant y\leqslant 200\end{cases}$$

地下水呈稳定流动，孔隙平均流速为 0.005m/d，流动方向平行于 x 轴并与 x 方向相反。网格

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

剖分如图 6-3 所示，其中取 $\Delta x=\Delta y=20\text{m}$，$\Delta t=5\text{d}$。

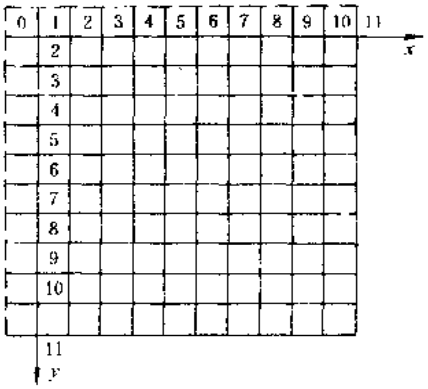


图 6-3　有限差分网格剖分图

程序 1 中标识符如下：

NI、NJ 为 x，y 方向结点个数；DX、DY 为 x、y 方向步长 Δx、Δy(m)；DT 为时间步长 Δt(d)；NDT 为拟计算时间段；DLL 为纵向弥散系数 $\alpha_L(\text{m}^2/\text{d})$；DTT 为横向弥散系数 $\alpha_T(\text{m}^2/\text{d})$；TIME 为时间 t(d)；C0 为已知浓度数组；CC0 为过渡时阶 $(n+\frac{1}{2})$ 浓度数组；CC 为待求浓度数组；A1，B1，C1，F1，A2，B2，C2，F2，D 为方程组系数数值。

程序 1 运行过程如下：

1～6 行是说明部分；7～27 行是输入基本数据；28～64 行是输入初始值与边界条件值，以及方程组系数；65～98 行是按时段逐步计算各时阶浓度值，其中 71～82 是由 n 时阶浓度值计算 $(n+1)/2$ 时阶的浓度，83～98 是由 $(n+1)/2$ 时阶浓度值计算 $n+1$ 时阶的浓度值；99～115 行是控制打印语句；116～142 行是求解三对角方程组的“追赶法”子程序。

程序 1 的计算结果如表 6-1 所示。

程序 1：

```
1:
2:C Finite difference 2-D ADI method for groundwater transport simulation
3:
4:       DIMENSION C0(11,11),CC0(11,11),A1(11),B1(11),C1(11),
5:     J          A2(11),B2(11),C2(11),D(11),CSTOR(11)
6:
7: C Choosing input date
8:
9:              NI=11
10:             NJ=11
11:             NI01=NI-1
12:             NJ01=NJ-1
13:
14:             DX=20.
15:             DY=DX
16:
17:             DT=0.2
18:             NDT=400
19:
20:             DLL=10.
21:             DTT=1.
22:             UX=-0.005
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
23:
24:       AAA=DLL*DT/(2.*DX*DX)
25:       aaaa=DTT*DT/(2.*DX*DX)
26:       BBB=UX*DT/(2.*DX)
27:
28:   C Input initial and boundaral data
29:
30:       DO I=1,NI01
31:         C0(I,NJ)=1.
32:         DO J=1,NJ01
33:           C0(I,J)=0.0
34:         END DO
35:       END DO
36:
37:         DO J=1,NJ
38:           C0(NI,J)=1.0
39:         END DO
40:
41:         DO I=1,NI
42:           DO J=1,NJ
43:             CC0(I,J)=C0(I,J)
44:           END DO
45:         END DO
46:
47:         B1(1)=1+BBB+2.0*AAA
48:         F1=1-2.0*aaaa
49:         B2(1)=1.+2.*aaaa
50:         F2=1.-BBB-2.*AAA
51:
52:         DO I=2,NI01
53:           A1(I)=-(AAA-BBB)
54:           B1(I)=B1(1)
55:           C1(I)=-AAA
56:           A2(I)=-aaaa
57:           B2(I)=B2(1)
58:           C2(I)=-aaaa
59:         END DO
60:
61:         ICOUNT=0
62:         IPRINT=100
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
63:         TIME=0.
64:
65:C Caculating matrix element
66:
67:30       DO 80 MDT=1,NDT
68:         TIME=TIME+DT
69:         ICOUNT=ICOUNT+1
70:
71:         DO 40 J=1,NJ01
72:           DO 38 I=1,NI01
73:             IF(J. NE. 1)GOTO 34
74:             D(I)=2. 0 * aaaa * C0(I,2)+F1 * C0(I,1)
75:             GO TO 38
76:34       D(I)=aaaa * C0(I,J+1)+F1 * C0(I,J)+aaaa * C0(I,J-1)
77:38     D(NI01)=D(NI01)+aaaa * C0(NI,J)
78:
79:         CALL TRIDAG(1,NI01,A1,B1,C1,D,HSTOR)
80:
81:         DO 40 I=1,NI01
82:40       CC0(I,J)=CSTOR(I)
83:
84:       DO 50 I=1,NI01
85:       DO 48 J=1,NJ01
86:       IF(I. NE. 1)GOTO 44
87:       D(J)=(2. 0 * AAA+BBB) * CC0(2,J)+F2 * CC0(I,J)
88:       GOTO 48
89:44     D(J)=AAA * CC0(I+1,J)+F2 * CC0(I,J)+(AAA+BBB) * CC0(I-1,J)
90:48     D(NJ01)=D(NJ01)+AAA * CC0(I,NJ)
91:
92:       CALL TRIDAG(1,NJ01,A2,B2,C2,D,CSTOR)
93:
94:       DO 55 J=1,NJ01
95:       C0(I,J)=CSTOR(J)
96:55     CONTINUE
97:50     CONTINUE
98:
99: C     Output control
100:
101:      IF(ICOUNT. NE. IPRINT)GOTO 80
102:
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
      WRITE( * ,60) TIME
60    FORMAT(5X,'TIME=',F8.2)

      WRITE( * ,70)((C0(I,J),I=1,NJ),J=1,NI)
70    FORMAT(1X,'H(NI,NJ)=',/,11(11F7.4,/))

      ICOUNT=0
80    CONTINUE

      STOP
      END
C  Ending the main program

C  Solver

      SUBROUTINE TRIDAG(IF,L,A,B,C,D,CC)

      DIMENSION A(11),B(11),C(11),D(11),CC(11),BETA(11),
     J  GAMMA(11)
      BETA(IF)=B(IF)
      GAMMA(IF)=D(IF)/BETA(IF)
      IF1=IF+1

      DO I=IF 1,L
      BETA(I)=B(I)-A(I) * C(I-1)/BETA(I-1)
      GAMMA(I)=(D(I)-A(I) * GAMMA(I-1))/BETA(1)
      END DO

      CC(L)=GAMMA(L)
      II=L -IF

      DO J=1,II
        I=L  J
        CC(I)=GAMMA(I)-C(I) * CC(I-1)/BETA(I)
      END DO

      RETURN
      END

C     Ending the subroutine
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

表 6-1　程序 1 计算结果

TIME= 20.00

H(NI,NJ)=

0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0006	0.0055	0.0364	0.1767	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0375	0.1805	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0376	0.1805	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0376	0.1805	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0376	0.1805	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0376	0.1805	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0007	0.0057	0.0376	0.1805	1.0000
0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0001	0.0002	0.0008	0.0058	0.0377	0.1806	1.0000
0.0049	0.0062	0.0064	0.0065	0.0065	0.0065	0.0071	0.0121	0.0437	0.1854	1.0000
0.2144	0.2556	0.2617	0.2624	0.2624	0.2625	0.2630	0.2672	0.2922	0.3912	1.0000
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

TIME= 40.00

H(NI,NJ)=

0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0009	0.0051	0.0236	0.0876	0.2544	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0251	0.0924	0.2635	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0252	0.0926	0.2638	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0252	0.0926	0.2638	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0252	0.0926	0.2638	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0252	0.0926	0.2638	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0010	0.0055	0.0252	0.0926	0.2638	1.0000
0.0005	0.0007	0.0008	0.0008	0.0010	0.0018	0.0063	0.0260	0.0933	0.2643	1.0000
0.0153	0.0218	0.0238	0.0242	0.0244	0.0253	0.0297	0.0489	0.1142	0.2789	1.0000
0.3560	0.4665	0.4946	0.5005	0.5016	0.5024	0.5056	0.5183	0.5545	0.6106	1.0000
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

TIME= 60.00

H(NI,NJ)=

0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0008	0.0036	0.0140	0.0465	0.1292	0.2961	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0009	0.0040	0.0154	0.0508	0.1388	0.3101	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0009	0.0040	0.0155	0.0510	0.1393	0.3106	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0009	0.0040	0.0155	0.0510	0.1393	0.3106	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0009	0.0040	0.0155	0.0510	0.1393	0.3106	1.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0002	0.0009	0.0040	0.0155	0.0510	0.1393	0.3106	1.0000
0.0000	0.0001	0.0001	0.0003	0.0010	0.0041	0.0156	0.0511	0.1394	0.3107	1.0000
0.0013	0.0020	0.0024	0.0026	0.0034	0.0065	0.0180	0.0533	0.1413	0.3119	1.0000
0.0283	0.0432	0.0491	0.0510	0.0522	0.0553	0.0663	0.0998	0.1821	0.3383	1.0000
0.4607	0.6389	0.6983	0.7153	0.7199	0.7227	0.7292	0.7450	0.7688	0.7571	1.0000
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

TIME= 80.00

H(NI,NJ)=

0.0000	0.0000	0.0001	0.0006	0.0023	0.0082	0.0255	0.0690	0.1609	0.3220	1.0000
0.0000	0.0000	0.0002	0.0007	0.0026	0.0093	0.0287	0.0768	0.1755	0.3400	1.0000
0.0000	0.0000	0.0002	0.0007	0.0027	0.0094	0.0290	0.0773	0.1764	0.3409	1.0000
0.0000	0.0000	0.0002	0.0007	0.0027	0.0094	0.0290	0.0774	0.1764	0.3409	1.0000
0.0000	0.0000	0.0002	0.0007	0.0027	0.0094	0.0290	0.0774	0.1764	0.3409	1.0000
0.0000	0.0000	0.0002	0.0007	0.0027	0.0094	0.0290	0.0774	0.1764	0.3409	1.0000
0.0001	0.0002	0.0004	0.0009	0.0029	0.0097	0.0292	0.0776	0.1766	0.3411	1.0000
0.0025	0.0042	0.0052	0.0061	0.0082	0.0149	0.0344	0.0824	0.1806	0.3434	1.0000
0.0425	0.0680	0.0799	0.0849	0.0882	0.0949	0.1130	0.1566	0.2436	0.3826	1.0000
0.5431	0.7818	0.8755	0.9079	0.9188	0.9247	0.9329	0.9447	0.9436	0.8654	1.0000
1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

§6-2 有限单元法（迦辽金有限单元法）

与有限差分法相同，用有限元法求解水动力弥散问题时，也是通过区域剖分和插值方法将描述水动力弥散的定解问题化为代数方程组进行求解。根据建立代数方程组的途径不同，有限单元法又可分为迦辽金法和里兹法，限于篇幅，本节只介绍一维稳定流场中二维水动力弥散问题迦辽金有限单元法。

§6-2-1 迦辽金法

前面已经获得，对于均匀多孔介质，一维稳定流场中二维水动力弥散方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}$$

其中取 x 轴方向与地下水流向相同，可记上式为

$$L(C)\overset{\Delta}{=}D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}+D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}-\frac{\partial C}{\partial t}=0 \tag{6-25}$$

式中：$L(C)$是微分算子。

迦辽金法是寻找一个级数形式的试探函数作为微分方程的近似解，并使其满足给定的边界条件，即

$$\tilde{C}(x,y,t)=\sum_{L=1}^{n}C_L(t)N_L(x,y) \tag{6-26}$$

式中：$\tilde{C}(x,y,t)$为浓度的近似解或试探解；$C_L(t)$为 t 时刻结点 L 的浓度；$N_L(x,y)$为关于结点 L 的基函数，它是(x,y)的函数，如果 $n\to\infty$，则 $\tilde{C}$ 趋于微分方程(6-25)的精确解。

将(6-26)式中的 $\tilde{C}$ 代入(6-25)，一般不会满足，即

$$L(\tilde{C})\neq 0 \tag{6-27}$$

这是因为 $\tilde{C}$ 是近似解，而不是精确解，从而得到一个误差函数 $R(x,y)$，这个误差函数称为剩余。显然，对于准确解而言，剩余为零。

我们在平均意义下迫使该误差为零，即

$$\iint_D R(x,y)W_L(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y=0 \qquad (L=1,2,\cdots n) \tag{6-28}$$

为了使该问题在提法上更有普遍性，我们加以权，即令剩余的加权积分等于零。上式中，D 表示研究的区域，W 是一组权函数。

如果我们事先按某种方法确定基函数组 N_L 和权函数组 W_L，那么(6 28)式中所示的由 n 个方程构成的方程组中只含有 n 个待求的结点浓度 C_L。这种方法称为加权剩余法。

迦辽金法是加权剩余法中的一种。加权剩余法还包括其他多种，例如：

(1)于区法。该法定义区域 D 划分为 n 个子区 $D_L(L=1,2,\cdots,n)$，并定义权函数为

$$W_L=\begin{cases}1 & \text{当}(x,y)\in D_L\\ 0 & \text{当}(x,y)\notin D_L\end{cases}$$

(2)最小二乘法。该法取剩余作为权函数，即 $W=R$，并使所得的剩余加权积分为最小值，即

$$\iint_D R\cdot R\cdot\mathrm{d}x\mathrm{d}y=\iint_D L(\tilde{C})L(\tilde{C})\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= \iint_D L\left(\sum_{L=1}^{n} C_L N_L\right) L\left(\sum_{L=1}^{n} C_L N_L\right) \mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$\triangleq F > 0$$

和

$$\frac{\partial F(C_1, C_2, \cdots, C_n)}{\partial C_L} = 0 \qquad L = 1, 2, \cdots, n$$

由这 n 个方程解出所含的 n 个未知量 C_L。

迦辽金法是另一种加权剩余法，其取基函数 N_L 作为权函数 W_L，这时，(6-28)式改写成

$$\iint_D R N_L \mathrm{d}x\mathrm{d}y = 0 \qquad L = 1, 2, \cdots, n$$

即

$$\iint_D \left(D_L \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial y^2} - u \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{C}}{\partial t}\right) N_L(x, y) \mathrm{d}x\mathrm{d}y = 0 \qquad L = 1, 2, \cdots, n \tag{6-29}$$

与其他加权剩余法相比，迦辽金法在工程技术中应用得更普遍。主要的一个理由是：由(6-29)式所表示的方程组与按照变分原理所导出的方程组是相同的，并且变分原理并非对于所有的控制方程都是存在的，而迦辽金法和其他加权剩余法却都仍可以使用；另外迦辽金法也适用于非线性问题。

后面将会看到，在整个研究区域 D 上，基函数 $N_L(x, y)$ 通常是分段定义的，它在整个区域上是连续的，而 N_L 的一阶导数可以不连续。由于 $\tilde{C}(x, y)$ 是 N_L 的线性组合，其一阶导数是不连续的(图 6-4)。因此，它的二阶导数 $\frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial x^2}$ 不易确定。这给(6-29)式中积分的计算带来困难。因此，我们设法使被积函数中的二阶导数降阶。可以采用分部积分法。

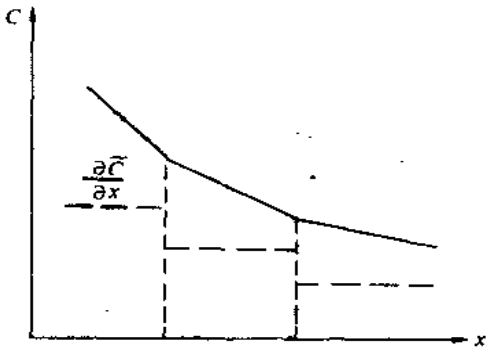


图 6-4 $\tilde{C}$ 的一阶导数沿 x 方向变化

我们比较熟悉的分部积分法是一维形式的，因此首先讨论一维的公式，然后再将其推广到二维形式。

现在来考虑一维积分

$$\int_a^b D_L \frac{\mathrm{d}^2 \tilde{C}}{\mathrm{d}x^2} N_L(x) \mathrm{d}x \tag{6-30}$$

将上式整理后，采用分部积分后有

$$\int_a^b N_L \mathrm{d}\left(D_L \frac{\mathrm{d}\tilde{C}}{\mathrm{d}x}\right) = N_L D_L \frac{\mathrm{d}\tilde{C}}{\mathrm{d}x}\Big|_a^b - \int_a^b D_L \frac{\mathrm{d}\tilde{C}}{\mathrm{d}x} \mathrm{d}N_L \tag{6-31}$$

此方程右端第二项的被积函数只包含一阶导数，达到预期的效果。方程右端第一项是边界点处以 N_L 加权的弥散通量 J_D。现将上述方程推广到二维问题

$$\iint_D \left(D_L \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial y^2}\right) N_L \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_\Gamma \left(D_L \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x} n_x + D_T \frac{\partial \tilde{C}}{\partial y} n_y\right) N_L \mathrm{d}\Gamma$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$-\iint_D\left(D_L\frac{\partial\tilde{C}}{\partial x}\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_T\frac{\partial\tilde{C}}{\partial y}\frac{\partial N_L}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{6-32}$$

式中：Γ 是 D 的边界（沿逆时针方向为正）；n_x、n_y 是边界 Γ 的外法线方向上单位矢量的分量。该方程右端第一项是边界线处以 N_L 加权的弥散通量 J_D。若边界上的弥散通量为零或权 N_L 为零，则此线积分为零。

将(6-32)式代入(6-29)中，得到

$$\iint_D\left(D_L\frac{\partial\tilde{C}}{\partial x}\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_T\frac{\partial\tilde{C}}{\partial y}\frac{\partial N_L}{\partial y}+u\frac{\partial\tilde{C}}{\partial x}N_L+\frac{\partial\tilde{C}}{\partial t}N_L\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$=\int_\Gamma J_D N_L\mathrm{d}\Gamma \qquad L=1,2,\cdots,n \tag{6-33}$$

上式即为一维稳定流动二维水动力弥散问题的迦辽金方程。其中

$$J_D=D_L\frac{\partial\tilde{C}}{\partial x}n_x+D_T\frac{\partial\tilde{C}}{\partial y}n_y$$

§6-2-2 有限单元剖分与基函数

1. 单元剖分

用有限单元法求解地下水流动问题或水动力弥散问题，要将区域剖分成许多小区，这些

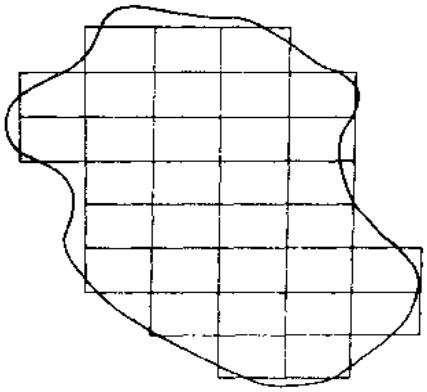


图 6-5 渗流区 D 剖分示意图

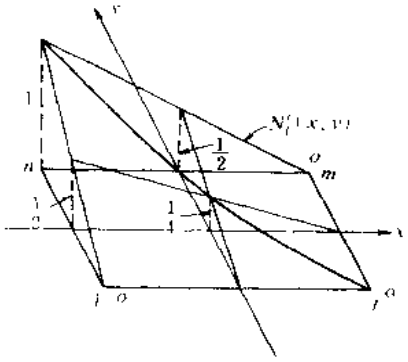


图 6-6 矩形单元上的基函数

小区称为单元，每个单元都要求是均质的，即 T、μ、α_L、α_T 均为常量。单元的形状可以是多种多样的。常用的有三角形单元和矩形单元。在求解地下水流动问题时，常用三角形单元。

介于三角形单元已在《地下水流动问题数值方法》中有详细介绍，下面介绍在求解水动力弥散问题中广泛应用的矩形有限元。

设渗流区域为 D，将其剖分成一系列的矩形，矩形边界线平行于坐标轴。将这种剖分一直到边界，当边界为平行于坐标轴的直线段时，边界的直线段就作为矩阵的一边。否则就用矩阵边界折线来逼近渗流区的边界。这样渗流区 D 就由一个多边形区域来代替（图 6-5）。不妨将这个多边形区域仍记为 D，其边界记为 B。剖分时，通常要求每个单元内均质、等厚，即 T、μ 为常数。矩形单元的 4 个角点称为结点。根据结点的位置常分为内结点与边界结点。边界结点又分为第一类边界结点和第二类边界结点。

2. 构造单元基函数 N_L

类似于三角形单元的基函数，矩形单元也要求

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$N_L=\begin{cases}1 & \text{在 } L \text{ 结点处}\\ 0 & \text{在其他结点处}\end{cases}$$

另外我们知道，对于三角形单元，基函数在单元内是线性变化的，即基函数在三角形单元内的几何图形是一个平面。

对于矩阵单元，在满足上述要求的前提下，基函数在矩形单元内的几何图形不可能是一个平面(图 6-6)。与三角形单元中的线性插值相类似，这里基函数取为“双线性插值”。所谓“双线性插值”是指该函数分别沿 x 和 y 方向都是线性变化的，沿其他方向则不是线性的。

上面是针对一个矩形单元而言的，对于整个研究区，基函数 N_L 在各个单元是分段确定的，即在结点 L 处 $N_L=1$，在其他结点处 $N_L=0$。每个矩形单元上的 $N_L(x,y)$都按双线性插值规律变化。因此，在整个研究区域 D 上，基函数 $N_L(x,y)$的几何形状如同一顶高等于 1、有 4 条直线斜边和 4 条下凹形曲边的尖顶斗笠(图 6-7)。

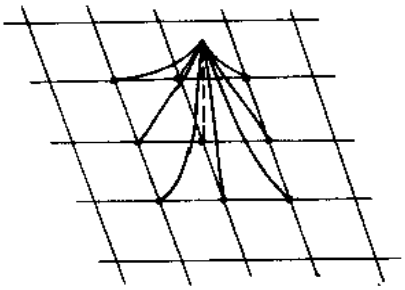


图 6-7　整个研究区 D 上的基函数

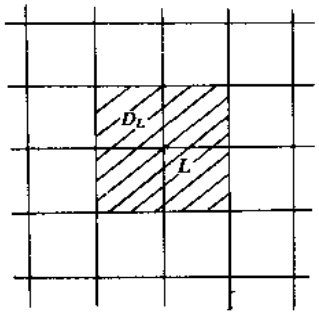


图 6-8　结点 L 的子区 D_L

关于子区 D_L 的概念：以结点 L 为其共同结点的所有矩形单元(≤4)构成的区域，称为结点 L 的子区(图 6-8)，记为 D_L。注意基函数 N_L 仅仅在子区 D_L 上不为零，在非 D_L 区上均为零，即

$$N_L(x,y)\begin{cases}>0 & (x,y)\in D_L\\ =0 & (x,y)\notin D_L\end{cases}$$

我们把属于子区 D_L 的单元 e 的单元基函数 N_L，称为单元基函数，用 N_L^e 表示。显然 $N_L^e>0$。

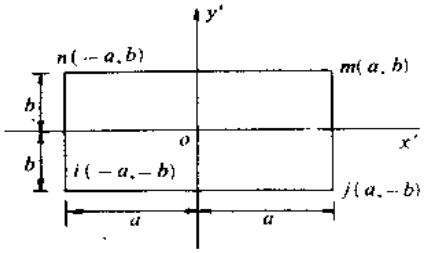


图 6-9　典型矩形单元

为了计算上的方便，我们引入典型矩形单元的概念。该单元的中心位于坐标原点处，且 4 条边分别平行 x,y 轴，结点从左下角开始按逆时针方向标以 i,j,m,n 的编号。沿 x 方向长 $2a$，沿 y 方向宽 $2b$(图 6-9)。

按上述的两个要求所构造的单元基函数 N_L^e(即插值函数)，其形式为

$$\left.\begin{aligned}N_i^e(x,y)&=\frac{1}{4}\left(1-\frac{x-x_0}{a}\right)\left(1-\frac{y-y_0}{b}\right)\\ N_j^e(x,y)&=\frac{1}{4}\left(1+\frac{x-x_0}{a}\right)\left(1-\frac{y-y_0}{b}\right)\\ N_m^e(x,y)&=\frac{1}{4}\left(1+\frac{x-x_0}{a}\right)\left(1+\frac{y-y_0}{b}\right)\\ N_n^e(x,y)&=\frac{1}{4}\left(1-\frac{x-x_0}{a}\right)\left(1+\frac{y-y_0}{b}\right)\end{aligned}\right\}\qquad(6\text{-}34)$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

对于典型单元来说，可令

$$x' = x - x_0$$

$$y' = y - y_0$$

则(6-34)式改写成

$$\left.\begin{aligned} N'_i(x',y') &= \frac{1}{4}(1-\frac{x'}{a})(1-\frac{y'}{b}) \\ N'_j(x',y') &= \frac{1}{4}(1+\frac{x'}{a})(1-\frac{y'}{b}) \\ N'_m(x',y') &= \frac{1}{4}(1+\frac{x'}{a})(1+\frac{y'}{b}) \\ N'_n(x',y') &= \frac{1}{4}(1-\frac{x'}{a})(1+\frac{y'}{b}) \end{aligned}\right\} \tag{6-34}$$

其中

$$\left.\begin{aligned} 2a &= x_j - x_i = x_m - x_n \\ 2b &= y_n - y_i = y_m - y_j \end{aligned}\right\} \tag{6-35}$$

并有关系式

$$N'_i + N'_j + N'_m + N'_n = 1$$

可以证明，(6-34)式所示的单元基函数 $N'_i(x,y)$ 是满足上述两个要求的，因为

$$N'_i(x_i,y_i) = N'_i(x_0-a,y_0-b) = \frac{1}{4}(1-\frac{(-a)}{a})(1-\frac{(-b)}{b}) = 1$$

$$N'_i(x_j,y_j) = N'_i(x_0+a,y_0-b) = \frac{1}{4}(1-\frac{a}{a})(1-\frac{(-b)}{b}) = 0$$

$$N'_i(x_m,y_m) = N'_i(x_0+a,y_0+b) = \frac{1}{4}(1-\frac{a}{a})(1-\frac{b}{b}) = 0$$

$$N'_i(x_n,y_n) = N'_i(x_0-a,y_0+b) = \frac{1}{4}(1-\frac{(-a)}{a})(1-\frac{b}{b}) = 0$$

即

$$N'_i(x'_i,y'_i) = N'_i(-a,-b) = \frac{1}{4}(1-\frac{(-a)}{a})(1-\frac{(-b)}{b}) = 1$$

$$N'_i(x'_j,y'_j) = N'_i(a,-b) = \frac{1}{4}(1-\frac{a}{a})(1-\frac{(-b)}{b}) = 0$$

$$N'_i(x'_m,y'_m) - N'_i(a,b) = \frac{1}{4}(1-\frac{a}{a})(1-\frac{b}{b}) = 0$$

$$N'_i(x'_n,y'_n) = N'_i(-a,b) = \frac{1}{4}(1-\frac{(-a)}{a})(1-\frac{b}{b}) = 0$$

所以，$N'_i(x,y)$ 在节点 i 处为 1，在其他 3 个结点处为零。$N'_j(x,y)$、$N'_m(x,y)$ 与 $N'_n(x,y)$ 也有类似的性质。

另外，依(6-34)式有

$$\frac{\partial N'_i}{\partial x} = -\frac{1}{4a} + \frac{y-y_0}{4ab}$$

$$\frac{\partial N'_i}{\partial y} = -\frac{1}{4b} + \frac{x-x_0}{4ab}$$

由上两式看出，在平行 x 或 y 方向上，$N'_i(x,y)$ 是线性变化的，其他单元基函数也有类似的性质。因此我们说，单元基函数是双线性插值函数。

关于 $N'_i(x,y)$[或 $N'_i(x',y')$]各方程括号中的正负号是不难记忆的，因为它们与结点所

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

在坐标象限的 x,y(或 x',y')的符号一致。

若结点的坐标分别用(x_i,y_i)、(x_j,y_j)、(x_m,y_m)和(x_n,y_n)表示,结点的浓度分别用 $C_i=C(x_i,y_i)$,$C_j=C(x_j,y_j)$,$C_m=C(x_m,y_m)$和 $C_n=C(x_n,y_n)$表示。则依(6-26)式,我们用结点的浓度 $C_L(t)$和单元基函数 $N_L^e(x,y)$来确定该单元内的近似解 $\tilde{C}^e(x,y,t)$,即

$$\tilde{C}^e(x,y,t) = N_i^e(x,y)C_i(t) + N_j^e(x,y)C_j(t) + N_m^e(x,y)C_m(t) + N_n^e(x,y)C_n(t) \tag{6-36}$$

其中,$N_L(L=i,j,m,n)\neq 0$。式中:$\tilde{C}^e$ 为浓度在单元 e 内的近似解,即试探解;N_i^e 为关于结点 i 的基函数(是 x,y 的函数)。

这里基函数取插值函数为权函数,即 $N_i^e(x,y)$、$N_j^e(x,y)$、$N_m^e(x,y)$与 $N_n^e(x,y)$称为矩形单元 e 上的基函数。

上面是针对一个矩形单元定义了各结点的基函数。对于整个区域 D,结点 L 的基函数 $N_L(x,y)$是在结点 L 的子区 D_L 内各单元上分块确定的。设结点 L 的子区内有 $n_L(\leqslant 4)$个矩形单元,则我们定义

$$N_L(x,y) = \begin{cases} N_L^{e_1}(x,y) & (x,y)\in e_1 \\ \vdots & \\ N_L^{e_{nL}}(x,y) & (x,y)\in e_{nL} \\ 0 & (x,y)\notin D_L \end{cases} \tag{6-37}$$

其中,$N_L^{e_1}(x,y),\cdots,N_L^{e_{nL}}(x,y)$分别为 $e_1,\cdots,e_{nL}$上结点 L 的基函数。

显然,这样定义的基函数有如下性质:

(1)$N_L(x,y)$在结点 L 处取值为 1,在其他结点上取值为零。在子区 D_L 内非零,在子区 D_L 之外均为零。

(2)对于某个单元 e 而言,只有其 4 个结点的基函数 $N_i(x,y)$、$N_j(x,y)$、$N_m(x,y)$、$N_n(x,y)$在该单元内不为零,其他所有结点的基函数 $N_L(x,y)(L=i,j,m,n)$在此矩形单元 e 内均取零值。于是我们可以将(6-36)式扩充到整个区域 D 上,即

$$\tilde{C}^e(x,y,t) = \sum_{p=1}^{N} C_p(t)N_p(x,y) \tag{6-38}$$

式中:N 表示区域 D 上的结点总数。

§6-2-3 迦辽金有限单元法

将上述的迦辽金方程(6-33)式与上述的有限元剖分思想结合起来,就可以建立矩形单元的迦辽金有限元方程。

(6-33)式的左端项是在 D 范围内积分,由于在$(x,y)\notin D_L$ 的区域上 $N_L=0$,因此可以改写在子区 D_L 上积分。

由于在子区 D_L 的不同单元上,含水层参数可以不同,C 与 N_L 也具有不同形式,因此在子区 D_L 范围内的积分必须对矩形单元逐个进行积分,然后求和。

设子区 D_L 内有 n_{eL}个单元($n_{eL}\leqslant 4$),则(6-33)式可改写成

$$\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e\left(D_L\frac{\partial\tilde{C}^e}{\partial x}\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_T\frac{\partial\tilde{C}^e}{\partial y}\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\} + \sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e u\frac{\partial\tilde{C}^e}{\partial x}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}+\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e\frac{\partial\tilde{C}^e}{\partial t}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= \int_{\Gamma_e} J_D N_L^e d\Gamma \qquad L = 1,2,\cdots,n \tag{6-39}$$

在上述方程式中，原 $\tilde{C}$ 已被第 e 号单元的近似解 $\tilde{C}^e$ 所代替，N_L 与 Γ 也分别改写成 N_L^e、Γ_e。

下面分别用(6-36)式与(6-34)式来确定 $\frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial x}$、$\frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial y}$、$\frac{\partial N^e}{\partial x}$、$\frac{\partial N^e}{\partial y}$ 和 $\frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial t}$。依(6-36)式有

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial x} &= \frac{\partial N_i^e}{\partial x}C_i(t) + \frac{\partial N_j^e}{\partial x}C_j(t) + \frac{\partial N_m^e}{\partial x}C_m(t) + \frac{\partial N_n^e}{\partial x}C_n(t)\\ \frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial y} &= \frac{\partial N_i^e}{\partial y}C_i(t) + \frac{\partial N_j^e}{\partial y}C_j(t) + \frac{\partial N_m^e}{\partial y}C_m(t) + \frac{\partial N_n^e}{\partial y}C_n(t)\end{aligned}\right\} \tag{6-40}$$

依(6-34)式及(6-34)′式有

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial N_i^e}{\partial x} &= -\frac{1}{4a}\left(1-\frac{y-y_0}{b}\right) & \frac{\partial N_i^e}{\partial y} &= -\frac{1}{4b}\left(1-\frac{x-x_0}{a}\right)\\ \frac{\partial N_j^e}{\partial x} &= \frac{1}{4a}\left(1-\frac{y-y_0}{b}\right) & \frac{\partial N_j^e}{\partial y} &= -\frac{1}{4b}\left(1+\frac{x-x_0}{a}\right)\\ \frac{\partial N_m^e}{\partial x} &= \frac{1}{4a}\left(1+\frac{y-y_0}{b}\right) & \frac{\partial N_m^e}{\partial y} &= \frac{1}{4b}\left(1+\frac{x-x_0}{a}\right)\\ \frac{\partial N_n^e}{\partial x} &= -\frac{1}{4a}\left(1+\frac{y-y_0}{b}\right) & \frac{\partial N_n^e}{\partial y} &= \frac{1}{4b}\left(1-\frac{x-x_0}{a}\right)\end{aligned}\right\} \tag{6-41}$$

及

$$\left.\begin{aligned}\frac{\partial N_i'^e}{\partial x} &= -\frac{1}{4a}\left(1-\frac{y'}{b}\right) & \frac{\partial N_i'^e}{\partial y} &= -\frac{1}{4b}\left(1-\frac{x'}{a}\right)\\ \frac{\partial N_j'^e}{\partial x} &= \frac{1}{4a}\left(1-\frac{y'}{b}\right) & \frac{\partial N_j'^e}{\partial y} &= -\frac{1}{4b}\left(1+\frac{x'}{a}\right)\\ \frac{\partial N_m'^e}{\partial x} &= \frac{1}{4a}\left(1+\frac{y'}{b}\right) & \frac{\partial N_m'^e}{\partial y} &= \frac{1}{4b}\left(1+\frac{x'}{a}\right)\\ \frac{\partial N_n'^e}{\partial x} &= -\frac{1}{4a}\left(1+\frac{y'}{b}\right) & \frac{\partial N_n'^e}{\partial y} &= \frac{1}{4b}\left(1-\frac{x'}{a}\right)\end{aligned}\right\} \tag{6-41)'}$$

再根据(6-36)式

$$\frac{\partial \tilde{C}^e}{\partial t} = N_i^e\frac{\partial C_i}{\partial t} + N_j^e\frac{\partial C_j}{\partial t} + N_m^e\frac{\partial C_m}{\partial t} + N_n^e\frac{\partial C_n}{\partial t} \tag{6-42}$$

将(6-40)式和(6-42)式代入(6-39)式中，得到

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e\left[D_L\left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x}C_i + \frac{\partial N_j^e}{\partial x}C_j + \frac{\partial N_m^e}{\partial x}C_m + \frac{\partial N_n^e}{\partial x}C_n\right)\frac{\partial N_L^e}{\partial x}\right.\right.\\ &\quad\left.\left. + D_T\left(\frac{\partial N_i^e}{\partial y}C_i + \frac{\partial N_j^e}{\partial y}C_j + \frac{\partial N_m^e}{\partial y}C_m + \frac{\partial N_n^e}{\partial y}C_n\right)\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right]dxdy\right\}\\ &\quad + \sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e\left[u\left(\frac{\partial N_i^e}{\partial x}C_i + \frac{\partial N_j^e}{\partial x}C_j + \frac{\partial N_m^e}{\partial x}C_m + \frac{\partial N_n^e}{\partial x}C_n\right)N_L^e\right]dxdy\right\}\\ &\quad + \sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_e\left[N_i^e\frac{\partial C_i}{\partial t} + N_j^e\frac{\partial C_j}{\partial t} + N_m^e\frac{\partial C_m}{\partial t} + N_n^e\frac{\partial C_n}{\partial t}\right)N_L^e\right]dxdy\right\}\\ &= \sum_{e=1}^{n_{eL}}\int_{\Gamma_e} J_D N_L^e d\Gamma \qquad L = 1,2,\cdots,n\end{aligned} \tag{6-43}$$

分别按 C 和 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 归类

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_{e}\left[\left(D_L\frac{\partial N_i^e}{\partial x}\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_T\frac{\partial N_i^e}{\partial y}\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)C_i\right.\right.$$
$$+\left(D_L\frac{\partial N_j^e}{\partial x}\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_T\frac{\partial N_j^e}{\partial y}\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)C_j$$
$$+\left(D_L\frac{\partial N_m^e}{\partial x}\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_T\frac{\partial N_m^e}{\partial y}\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)C_m$$
$$\left.+\left(D_L\frac{\partial N_n^e}{\partial x}\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_T\frac{\partial N_n^e}{\partial y}\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)C_n\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\Bigg\}$$
$$+\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_{e}\left[\left(u\frac{\partial N_i^e}{\partial x}N_L^e\right)C_i+\left(u\frac{\partial N_j^e}{\partial x}N_L^e\right)C_j\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left(u\frac{\partial N_m^e}{\partial x}N_L^e\right)C_m+\left(u\frac{\partial N_n^e}{\partial x}N_L^e\right)C_n\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}$$
$$+\sum_{e=1}^{n_{eL}}\left\{\iint_{e}\left[\left(N_i^eN_L^e\right)\frac{\partial C_i}{\partial t}+\left(N_j^eN_L^e\right)\frac{\partial C_j}{\partial t}\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left(N_m^eN_L^e\right)\frac{\partial C_m}{\partial t}+\left(N_n^eN_L^e\right)\frac{\partial C_n}{\partial t}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}$$
$$=\sum_{e=1}^{n_{eL}}\int_{\Gamma_e}J_DN_L^e\mathrm{d}\Gamma\qquad L=1,2,\cdots,n \tag{6-44}$$

由(6-41)式和(6-34)式可知，上述各双重积分，若将被积函数中的常量 D_L、D_T、u、C_i、C_j、C_m、C_n 以及 $\frac{\partial C_i}{\partial t}$、$\frac{\partial C_j}{\partial t}$、$\frac{\partial C_m}{\partial t}$和$\frac{\partial C_n}{\partial t}$提到积分号之外，剩余的被积函数是 x、y 的多项式，是可以获得其积分值的。上式所表示的一阶微分方程组可用如下矩阵形式表示，即

$$[D]\{C\}+[U]\{C\}+[S]\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}=\{F\} \tag{6-45}$$

式中：$\{C\}$为结点示踪剂浓度的列矩阵；$\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}$为结点示踪剂浓度对于时间导数的列矩阵；$[D]$、$[U]$和$[S]$为系数方阵，分别与方程左端第一、二、三求和项的系数对应；$\{F\}$为表示边界条件的系数列矩阵。

(6-45)式即为用矩阵形式表示的一阶微分方程组，为了求解，需将一阶导数用差分形式表示

$$\frac{\partial C_L}{\partial t}=\frac{C_L^{t+\Delta t}-C_L^t}{\Delta t}$$

按矩阵符号有

$$\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}=\frac{1}{\Delta t}\left(\{C\}^{t+\Delta t}-\{C\}^t\right)$$

此外，为了求解矩阵方程(6-45)式，还需要确定在什么时间水平上计算$[D]\{C\}$和$[U]\{C\}$，这完全与有限差分法中关于二阶空间导数$\frac{\partial^2C}{\partial x^2}$和$\frac{\partial^2C}{\partial y^2}$的有限差分化后需选择其时间水平一样。如果这里的$\{C\}$在新的时间水平 $t+\Delta t$ 上取值，则(6-45)式可写为

$$[D]\{C\}^{t+\Delta t}+[U]\{C\}^{t+\Delta t}+\frac{1}{\Delta t}[S]\left(\{C\}^{t+\Delta t}-\{C\}^t\right)=\{F\}$$

这种格式是全隐式的。我们将含有老时间水平的浓度(已知浓度)各项移到方程的右端，其左端保留新时间水平的浓度(待求浓度)各项，于是上述方程改写成

$$\left([D]+[U]+\frac{1}{\Delta t}[S]\right)\{C\}^{t+\Delta t}=\{B\}+\{F\} \tag{6-46}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

其中，$\{B\}=\frac{1}{\Delta t}[S]\{C\}^t$

$$B_L=\frac{1}{\Delta t}\sum_{p=1}^{N}S_{L,p}\cdot C_p^t \qquad L=1,2,\cdots,N \tag{6-47}$$

式中：N 为区域 D 上的结点总数。

在给定的初始条件和边界条件下，我们可以计算出(6-46)式中各个系数矩阵，于是可解得第一个 Δt_1 末时刻各结点的浓度 $\{C\}^{\Delta t_1}$。再以此浓度为已知浓度 $\{C\}^t$（注意，这里 $t=\Delta t_1$），计算出新的系数列矩阵 $\{B\}$，而系数方阵 $[D]$、$[U]$ 和 $[S]$ 在整个计算中保持不变（编制程序时应注意到此特点，否则会作不必要的重复计算），再次求解，得到第二个时间步长末时刻各结点的浓度 $\{C\}^{t+\Delta t_2}$。

前面我们导出了全隐式矩阵方程，实际上，浓度 $\{C\}$ 可以在 t 与 $t+\Delta t$ 之间任一位置近似表示，即

$$\{C\}=(1-\alpha)\{C\}^t+\alpha\{C\}^{t+\Delta t} \tag{6-48}$$

其中，$0\leqslant\alpha\leqslant1$，

$$\alpha=\begin{cases}0 & \text{全显式}\\ \dfrac{1}{2} & \text{Crank-Nicolson 格式}\\ 1 & \text{全隐式}\end{cases}$$

现在剩下的问题是如何建立各个系数矩阵。

(6-46)式是以矩阵形式表示的线性代数方程组（共有 n 个方程）。我们可以按结点 L 的顺序号，一次建立一个方程，或者说一次建立系数矩阵 $[D]$、$[U]$ 和 $[S]$ 的一行的诸元素。但是，这么计算在计算机程序上实现起来比较复杂，它涉及各子区 D_L 的有关信息（每个子区包括哪几个单元）。实际上，按单元顺序计算会更方便些。

每个矩阵单元涉及 4 个结点 i、j、m 和 n。这些结点的作用涉及 $L=i$，$L=j$，$L=m$ 和 $L=n$ 共 4 个方程。而且在每个方程中，单元 e 仅仅对 C_i、C_j、C_m 和 C_n 共 4 项的系数起作用。因此，一个单元（由内结点和二类边界结点组成的单元）影响到系数矩阵 $[D]$、$[U]$ 和 $[S]$ 的 4 行与 4 列，共计 16 个元素。所以单元 e 的作用，可以用 4 行与 4 列的矩阵来表示，这样的矩阵称为单元矩阵。对于 $[D]$ 而言，有

$$[D^e]=\begin{bmatrix}D_{ii}^e & D_{ij}^e & D_{im}^e & D_{in}^e\\ D_{ji}^e & D_{jj}^e & D_{jm}^e & D_{jn}^e\\ D_{mi}^e & D_{mj}^e & D_{mm}^e & D_{mn}^e\\ D_{ni}^e & D_{nj}^e & D_{nm}^e & D_{nn}^e\end{bmatrix} \tag{6-49}$$

式中：$[D^e]$ 表示单元弥散矩阵。

下面举例说明单元弥散矩阵与整体弥散矩阵的构成。

设某研究区划分为 8 个单元，16 个结点，四周皆为隔水边界（图 6-10），首先对单元和结点进行编号，并将各单元的 4 个结点按逆时针次序编号（即 i、j、m、n 编号）列于表 6-2 中。

将每个单元弥散矩阵计算出来，并按双下标一致，将单元弥散矩阵安放到总体弥散矩阵的相应位置上，然后相加，从而得到总体弥散矩阵。图 6-11 直观地说明了这一过程。

从图 6-11 看出，总体弥散矩阵是高度稀疏矩阵，其阶数等于内结点个数与第二类边界结点个数之和。就非零元素的位置而言，它是对称的。是否为对称矩阵，还得看元素的数值。

由(6-44)式可知

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

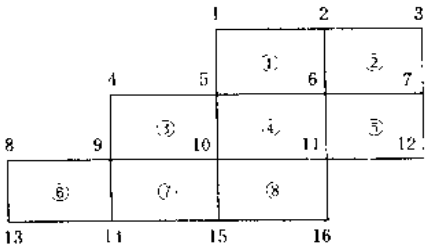
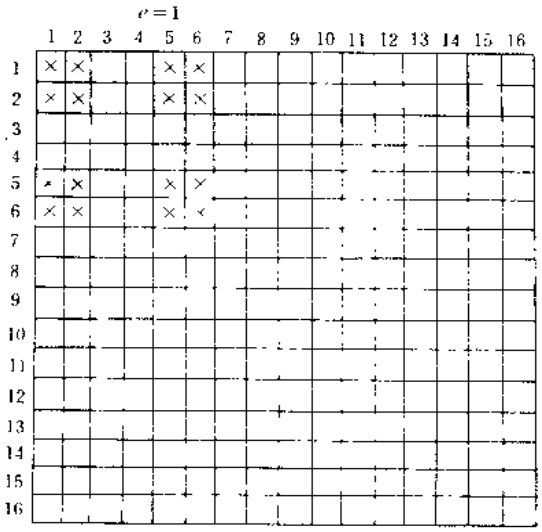


图 6-10　剖分与结点、单元编号

表 6-2　单元编号

单元号 e	结点号			
	i	j	m	n
1	1	5	6	2
2	2	6	7	3
3	4	9	10	5
4	5	10	11	6
5	6	11	12	7
6	8	13	14	9
7	9	14	15	10
8	10	15	16	11



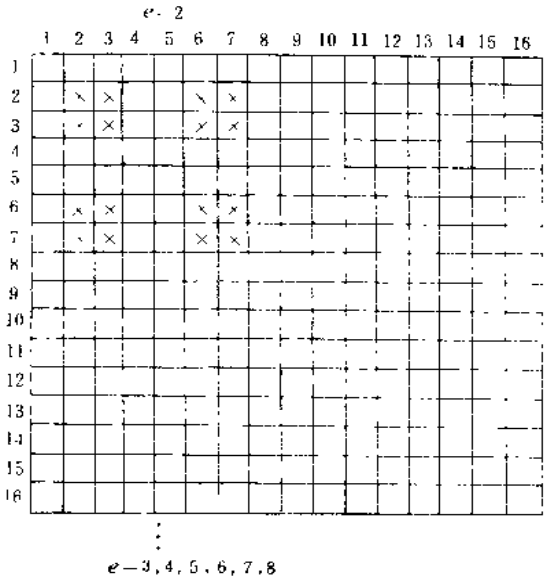


图 6-11　单元矩阵与整体矩阵的关系

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$D^e_{Li} = \iint_e \left(D_L \frac{\partial N^e_i}{\partial x}\frac{\partial N^e_L}{\partial x} + D_T \frac{\partial N^e_i}{\partial y}\frac{\partial N^e_L}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

$$= \int_{x_0-a}^{x_0+a}\int_{y_0-b}^{y_0+b}\left(D_L \frac{\partial N^e_i}{\partial x}\frac{\partial N^e_L}{\partial x} + D_T \frac{\partial N^e_i}{\partial y}\frac{\partial N^e_L}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$

其中的 x、y 是整体坐标。

我们将坐标作平移，即将坐标原点移到矩形单元的中心处，这时的坐标称局部坐标 x'、y'：

$$x' = x - x_0 \qquad \mathrm{d}x' = \mathrm{d}x$$

$$y' = y - y_0 \qquad \mathrm{d}y' = \mathrm{d}y$$

这种移动并不改变矩形单元的积分值。于是有

$$\left.\begin{aligned}
D^e_{Li} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left(D_L \frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial x'} + D_T \frac{\partial N'^e_i}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial y'}\right)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
D^e_{Lj} &= \int_{-a}^{a}\int_{b}^{b}\left(D_L \frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial x'} + D_T \frac{\partial N'^e_j}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial y'}\right)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
D^e_{Lm} &= \int_{-a}^{a}\int_{b}^{b}\left(D_L \frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial x'} + D_T \frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial y'}\right)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
D^e_{Ln} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left(D_L \frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial x'} + D_T \frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_L}{\partial y'}\right)\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'
\end{aligned}\right\} L = i,j,m,n \tag{6-50}$$

求得各个单元弥散矩阵的诸元素之后，则可通过双下标一致的元素求和，得到总体弥散矩阵[D]的诸元素，即

$$G_{Li} = \sum_e G^e_{Li} \qquad L,i = 1,2,\cdots,n \tag{6-51}$$

关于[U^e]，有

$$[U^e] = \begin{bmatrix} U^e_{ii} & U^e_{ij} & U^e_{im} & U^e_{in} \\ U^e_{ji} & U^e_{jj} & U^e_{jm} & U^e_{jn} \\ U^e_{mi} & U^e_{mj} & U^e_{mm} & U^e_{mn} \\ U^e_{ni} & U^e_{nj} & U^e_{nm} & U^e_{nn} \end{bmatrix} \tag{6-52}$$

式中：[U^e]表示单元对流矩阵，由(6-44)式可知

$$\left.\begin{aligned}
U^e_{Li} &= u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_L\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
U^e_{Lj} &= u\int_{a}^{a}\int_{-b}^{b}\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}N'^e_L\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
U^e_{Lm} &= u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}N'^e_L\mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\
U^e_{Ln} &= u\int_{a}^{a}\int_{-b}^{b}\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}N'^e_L\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'
\end{aligned}\right\} L = i,j,m,n \tag{6 53}$$

同样，总体对流矩阵的诸元素为

$$U_{Li} = \sum_e U^e_{Li} \qquad L,i = 1,2,\cdots,n \tag{6-54}$$

关于[S]，有

$$[S^e] = \begin{bmatrix} S^e_{ii} & S^e_{ij} & S^e_{im} & S^e_{in} \\ S^e_{ji} & S^e_{jj} & S^e_{jm} & S^e_{jn} \\ S^e_{mi} & S^e_{mj} & S^e_{mm} & S^e_{mn} \\ S^e_{ni} & S^e_{nj} & S^e_{nm} & S^e_{nn} \end{bmatrix} \tag{6-55}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

式中：$[S^e]$表示单元储存矩阵。

由(6-44)式可知

$$\left.\begin{aligned} S^e_{Li} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b} N'_i N'_L \mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\ S^e_{Lj} &= \int_{a}^{a}\int_{b}^{b} N'_j N'_L \mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\ S^e_{Lm} &= \int_{a}^{a}\int_{-b}^{b} N'_m N'_L \mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \\ S^e_{Ln} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b} N'_n N'_L \mathrm{d}x'\mathrm{d}y' \end{aligned}\right\} L = i,j,m,n \qquad (6\text{-}56)$$

于是，总体储存矩阵$[S]$的诸元素为

$$S_{L,i} = \sum_e S^e_{Li} \qquad L,i = 1,2,\cdots,n \qquad (6\ 57)$$

上面剩下的问题是，(6-50)、(6-53)与(6-56)式中的积分如何求得。与三角形单元类似，它也可以用解析法导出其积分的解析表达式。这里的被积函数是x、y的多项式，只是其表达式比较长。人们更多地采用高斯求积的数值方法，此法容易编制程序，且可以得到精确的积分值。

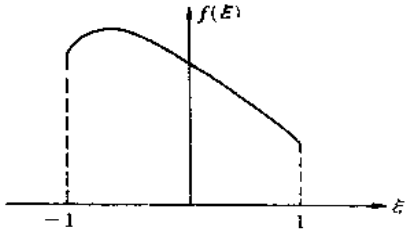


图 6-12　区间(−1,1)上的函数 $f(\xi)$

首先考虑一维的高斯积分。

设$f(\xi)$是在区间$-1\leqslant\xi\leqslant1$内的某函数(图 6-12)，高斯积分方法是使定积分等于被积函数在有限个点上取值之后再加权求积，即

$$\int_{-1}^{1} f(\xi)\mathrm{d}\xi = \sum_{i=1}^{n} W_i f(\xi_i) \qquad (6\text{-}58)$$

式中：W_i是在高斯点i处的权因子。

若$f(\xi)$是一个带有最高项为ξ^2的多项式，则

$$n = 2 \quad \xi_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}} = -0.57735 \quad \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} = 0.57735$$

其权因子$W_1=W_2=1$。这时(6-58)式是精确的等式。

对于二维多项式$f(\xi,\eta)$的重积分，可推广为

$$\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} f(\xi,\eta)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta = f(\xi_1,\eta_1) + f(\xi_1,\eta_2) + f(\xi_2,\eta_1) + f(\xi_2,\eta_2) \qquad (6\text{-}59)$$

这里$n=4$，4 个高斯点对称，其坐标为

$$\xi_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \xi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\eta_1 = -\frac{1}{\sqrt{3}}, \eta_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

4 个权系数均为 1。

通过换元法，可将(6-50)、(6-53)与(6-56)式中的积分(积分限从$-a$和$+a$和自$-b$到$+b$)转化成上述的高斯求积法(积分限从-1到$+1$，图 6-13)。即令

$$\xi = \frac{x'}{a} = \frac{x - x_0}{a}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\eta = \frac{y'}{b} = \frac{y - y_0}{b}$$

则有

$$dx' = a d\xi \qquad dy' = b d\eta$$

由此，可使有关式中的积分限改写为自－1到＋1。而单元基函数(插值函数)(6-34)′式，按(ξ,η)坐标系则改写为

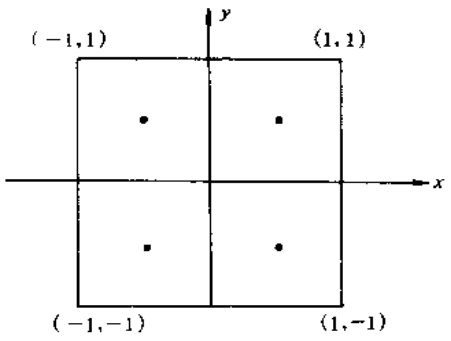


图 6-13　二维高斯点的分布

$$\left.\begin{aligned}
\hat{N}_i'(\xi,\eta) &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\\
\hat{N}_j'(\xi,\eta) &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\\
\hat{N}_m'(\xi,\eta) &= \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\\
\hat{N}_n'(\xi,\eta) &= \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)
\end{aligned}\right\} \qquad (6\text{-}60)$$

而(6-41)′式关于单元基函数对于x、y的一阶导数，按(ξ,η)坐标系可改写为

$$\left.\begin{aligned}
\frac{\partial N_i'}{\partial x'} &= -\frac{1}{4a}(1-\eta) & \frac{\partial N_i'}{\partial y'} &= -\frac{1}{4b}(1-\xi)\\
\frac{\partial N_j'}{\partial x'} &= \frac{1}{4a}(1-\eta) & \frac{\partial N_j'}{\partial y'} &= -\frac{1}{4b}(1+\xi)\\
\frac{\partial N_m'}{\partial x'} &= \frac{1}{4a}(1+\eta) & \frac{\partial N_m'}{\partial y'} &= \frac{1}{4b}(1+\xi)\\
\frac{\partial N_n'}{\partial x'} &= -\frac{1}{4a}(1+\eta) & \frac{\partial N_n'}{\partial y'} &= \frac{1}{4b}(1-\xi)
\end{aligned}\right\} \qquad (6\text{-}61)$$

将上述换元公式用于(6-50)式，并利用(6-61)式和高斯求积公式，则有

$$\begin{aligned}
D_{ii}' &= \int_{-a}^{a}\int_{b}^{b}\left(D_L\frac{\partial N_i'}{\partial x'}\frac{\partial N_i'}{\partial x'} + D_T\frac{\partial N_i'}{\partial y'}\frac{\partial N_i'}{\partial y'}\right)dx'dy'\\
&= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{-1}{4a}(1-\eta)\frac{-1}{4a}(1-\eta)\right.\\
&\quad \left. + D_T\frac{-1}{4b}(1-\xi)\frac{-1}{4b}(1-\xi)\right]d\xi d\eta\\
&= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\
&\quad + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}
\end{aligned} \qquad (6\text{-}62\text{-}1)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1-\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1-\xi)^2$。

$$\begin{aligned}
D_{ij}' &= \int_{a}^{a}\int_{b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N_j'}{\partial x'}\frac{\partial N_i'}{\partial x'} + D_T\frac{\partial N_j'}{\partial y'}\frac{\partial N_i'}{\partial y'}\right]dx'dy'\\
&= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{1}{4a}(1-\eta)\frac{-1}{4a}(1-\eta)\right.\\
&\quad \left. + D_T\frac{-1}{4b}(1+\xi)\frac{-1}{4b}(1-\xi)\right]d\xi d\eta\\
&= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\
&\quad + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}
\end{aligned} \qquad (6\text{-}62\text{-}2)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{-1}{16a^2}(1-\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1-\xi^2)$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$D^e_{im}=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_i}{\partial y'}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

$$=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{1}{4a}(1+\eta)\frac{-1}{4a}(1-\eta)+D_T\frac{1}{4b}(1+\xi)\frac{-1}{4b}(1-\xi)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$

$$=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\qquad(6\text{-}62\text{-}3)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{-1}{16a^2}(1-\eta^2)+D_T\frac{-1}{16b^2}(1-\xi^2)$。

$$D^e_{in}=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_i}{\partial y'}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

$$=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{-1}{4a}(1-\eta)+D_T\frac{1}{4b}(1-\xi)\frac{-1}{4b}(1-\xi)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$

$$=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\qquad(6\text{-}62\text{-}4)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1-\eta^2)+D_T\frac{-1}{16b^2}(1-\xi)^2$。

$$D^e_{jn}=D^e_{ij}\qquad(6\text{-}62\text{-}5)$$

$$D^e_{jj}=\int_{a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_j}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial y'}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

$$=ab\int_{1}^{1}\int_{1}^{1}\left[D_L\frac{1}{4a}(1-\eta)\frac{1}{4a}(1-\eta)+D_T\frac{-1}{4b}(1+\xi)\frac{-1}{4b}(1+\xi)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$

$$=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\qquad(6\text{-}62\text{-}6)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1-\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1+\xi)^2$。

$$D^e_{jm}=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial y'}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

$$=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4a}(1-\eta)+D_T\frac{1}{4b}(1+\xi)\frac{-1}{4b}(1+\xi)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$

$$=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\qquad(6\text{-}62\text{-}7)$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1-\eta^2)+D_T\frac{-1}{16b^2}(1+\xi)^2$。

$$D^e_{jn}=\int_{-a}^{a}\int_{b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_j}{\partial y'}\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

$$=ab\int_{1}^{1}\int_{1}^{1}\left[D_L\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4a}(1-\eta)+D_T\frac{1}{4b}(1-\xi)\frac{-1}{4b}(1+\xi)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$

$$=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \tag{6-62-8}$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{-1}{16a^2}(1-\eta^2)+D_T\frac{-1}{16b^2}(1-\xi^2)$。

$$D^e_{mi}=D^e_{im} \tag{6-62-9}$$

$$D^e_{mj}=D^e_{jm} \tag{6-62-10}$$

$$\begin{aligned}D^e_{mm}&=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\right]dx'dy'\\&=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4a}(1+\eta)\right.\\&\quad\left.+D_T\frac{1}{4b}(1+\xi)\frac{1}{4b}(1+\xi)\right]d\xi d\eta\\&=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\&\quad+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-62-11}$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1+\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1+\xi)^2$。

$$\begin{aligned}D^e_{mn}&=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_m}{\partial y'}\right]dx'dy'\\&=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4a}(1+\eta)\right.\\&\quad\left.+D_T\frac{1}{4b}(1-\xi)\frac{1}{4b}(1+\xi)\right]d\xi d\eta\\&=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\&\quad+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-62-12}$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{-1}{16a^2}(1+\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1-\xi^2)$。

$$D^e_{ni}=D^e_{in} \tag{6-62-13}$$

$$D^e_{nj}=D^e_{jn} \tag{6-62-14}$$

$$D^e_{nm}=D^e_{mn} \tag{6-62-15}$$

$$\begin{aligned}D^e_{nn}&=\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[D_L\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}+D_T\frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\frac{\partial N'^e_n}{\partial y'}\right]dx'dy'\\&=ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[D_L\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{-1}{4a}(1+\eta)\right.\\&\quad\left.+D_T\frac{1}{4b}(1-\xi)\frac{1}{4b}(1-\xi)\right]d\xi d\eta\\&=ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\&\quad+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-62-16}$$

式中：$f(\xi,\eta)=D_L\frac{1}{16a^2}(1+\eta)^2+D_T\frac{1}{16b^2}(1-\xi)^2$。

同理，将上述换元公式用于(6-53)式，再利用(6-60)和(6-61)式以及高斯求积公式，有

$$\begin{aligned}U^e_{ii}&=u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_i\right]dx'dy'\\&=uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1-\eta)\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]d\xi d\eta\\&=uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}\\&\quad+[f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-63-1}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1-\xi)(1-\eta)^2$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$U'_{ij} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_i}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1-\eta)\,\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}2)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1-\xi)(1-\eta)^2$。

$$U'_{im} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_m}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1+\eta)\,\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}3)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1-\xi)(1-\eta^2)$。

$$U'_{in} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_n}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1+\eta)\,\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}4)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1-\xi)(1-\eta^2)$。

$$U'_{jr} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_r}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1-\eta)\,\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}5)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1+\xi)(1-\eta)^2$。

$$U'_{jj} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_j}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1-\eta)\,\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}6)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1+\xi)(1-\eta)^2$。

$$U'_{jm} = u\int_{a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'_m}{\partial x'}N'_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1+\eta)\,\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}7)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1+\xi)(1-\eta^2)$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$U^e_{jn} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}N'^e_n\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{1}^{1}\int_{1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}8)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1+\xi)(1-\eta^2)$。

$$U^e_{mi} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_m\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1-\eta)\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}9)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1+\xi)(1-\eta^2)$。

$$U^e_{mj} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_j}{\partial x'}N'^e_m\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{1}^{1}\int_{1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1-\eta)\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}10)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1+\xi)(1-\eta^2)$。

$$U^e_{mm} = u\int_{-a}^{a}\int_{b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}N'^e_m\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}11)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1+\xi)(1+\eta)^2$。

$$U^e_{mn} = u\int_{a}^{a}\int_{b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_n}{\partial x'}N'^e_m\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1+\eta)\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}12)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1+\xi)(1+\eta)^2$。

$$U^e_{ni} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_n\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1-\eta)\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}63\text{-}13)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1-\xi)(1-\eta^2)$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$U^e_{ij} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_j\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1-\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}14)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1-\xi)(1-\eta^2)$。

$$U^e_{im} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_i}{\partial x'}N'^e_m\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4a}(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}15)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16a}(1-\xi)(1+\eta)^2$。

$$U^e_{mn} = u\int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}\left[\frac{\partial N'^e_m}{\partial x'}N'^e_n\right]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= uab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{-1}{4a}(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= uab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}63\text{-}16)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{-1}{16a}(1-\xi)(1+\eta)^2$。

不难看出，$U^e_{ij}\neq U^e_{ji}$，$U^e_{im}\neq U^e_{mi}$，$U^e_{jm}\neq U^e_{mj}$，$U^e_{in}\neq U^e_{ni}$，$U^e_{jn}\neq U^e_{nj}$，$U^e_{mn}\neq U^e_{nm}$。

同理，让上述换元公式用于(6-56)式，再利用(6-60)式和高斯求积公式，有

$$S^e_{ii} = \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_i N'^e_i]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}64\text{-}1)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1\quad\xi)^2(1-\eta)^2$。

$$S^e_{ij} = \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_i N'^e_j]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \qquad (6\text{-}64\text{-}2)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi^2)(1-\eta)^2$。

$$S^e_{im} = \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_m N'^e_i]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$
$$= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta$$
$$= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\} \tag{6-64-3}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi^2)(1-\eta^2)$。

$$\begin{aligned}S^e_{in} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_i N'^e_n]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\\ &= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}[\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\\ &= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}\\ &\quad +[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-64-4}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi)^2(1-\eta^2)$。

$$S^e_{ji}=S^e_{ij} \tag{6-64-5}$$

$$\begin{aligned}S^e_{jj} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_j N'^e_j]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\\ &= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}[\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)\ \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\\ &= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}\\ &\quad +[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-64-6}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1+\xi)^2(1-\eta)^2$。

$$\begin{aligned}S^e_{jm} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_m N'^e_j]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\\ &= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}[\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\\ &= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}\\ &\quad +[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-64-7}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1+\xi)^2(1-\eta^2)$。

$$\begin{aligned}S^e_{jn} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_n N'^e_j]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\\ &= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}[\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\\ &= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}\\ &\quad +[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-64-8}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi^2)(1-\eta^2)$。

$$S^e_{mi}=S^e_{im} \tag{6-64-9}$$

$$S^e_{mj}=S^e_{jm} \tag{6-64-10}$$

$$\begin{aligned}S^e_{mm} &= \int_{-a}^{a}\int_{-b}^{b}[N'^e_m N'^e_m]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'\\ &= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}[\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\\ &= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_1}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_1\eta_2}+[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_1}\\ &\quad +[f(\xi,\eta)]_{\varepsilon_2\eta_2}\}\end{aligned} \tag{6-64-11}$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1+\xi)^2(1+\eta)^2$。

$$S^e_{mn}=\int_{a}^{a}\int_{b}^{b}[N'^e_n N'^e_m]\mathrm{d}x'\mathrm{d}y'$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)\right]d\xi d\eta$$
$$= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}64\text{-}12)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi^2)(1+\eta)^2$。

$$S^e_{ni} = S^e_{in} \quad (6\text{-}64\text{-}13)$$
$$S^e_{nj} = S^e_{jn} \quad (6\text{-}64\text{-}14)$$
$$S^e_{nm} = S^e_{mn} \quad (6\text{-}64\text{-}15)$$
$$S^e_{nn} = \int_a\int_{-b}^{b}[N'^e_n N'^e_n]dx'dy'$$
$$= ab\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}\left[\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\ \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)\right]d\xi d\eta$$
$$= ab\{[f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_1\eta_2} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_1} + [f(\xi,\eta)]_{\xi_2\eta_2}\} \quad (6\text{-}64\text{-}16)$$

式中：$f(\xi,\eta)=\frac{1}{16}(1-\xi)^2(1+\eta)^2$。

现在剩下的是方程(6-46)式右端第二项列矩阵$\{F\}$(因为右端第一项$\{B\}$可由$[S]$导出)，它取决于边界条件〔见方程(6-44)右端〕

$$F_L = \sum_{e=1}^{n_{eL}}\int_{\Gamma_e} J_D N'^e_L d\Gamma \qquad L=1,2,\cdots,n \quad (6\text{-}65)$$

分两种情况讨论：

(1)若 L 是内结点，依 N'^e_L 的定义，在结点 L 的对边上有 $N_L=0$，故 $F_L=0$；

(2)若 L 是第二类边界结点(图 6-14)，依(6-44)式

$$F_L = \sum_{e=1}^{n_{eL}}\int_{\Gamma_e} J_D N'^e_L d\Gamma$$
$$= \int_{\overline{iL}} J_{D,iL} N'^e_L d\Gamma + \int_{\overline{Lj}} J_{D,Lj} N'^e_L d\Gamma$$
$$= \frac{1}{2}\overline{iL} J_{D,iL} + \frac{1}{2}\overline{Lj} J_{D,Lj}$$

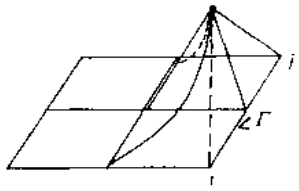


图 6-14　边界结点的基函数

式中：$J_{D,iL}$为边界 iL 段上的弥散通量；$J_{D,Lj}$为边界 Lj 段上的弥散通量。

§6-2-4　二维水动力弥散的迦辽金法计算机程序

二维水动力弥散问题的数学模型可以写成：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u\frac{\partial C}{\partial x}$$
$$C(x,y,0) = 0 \qquad 10 \geqslant y \geqslant 0 \quad 90 \geqslant x \geqslant 0$$
$$C(0,y,t) = C_0 \qquad t > 0 \quad 10 \geqslant y \geqslant 0$$
$$C(L,y,t) = 0 \qquad t > 0 \quad 10 \geqslant y \geqslant 0$$

将其剖分成如图 6-15 的矩形单元。共计单元 9 个，结点 20 个，空间步长取 $\Delta x=\Delta y=10$m，时间步长 $\Delta t=5$d，渗透流速 $u=0.01$m/d。

下列程序 2 中的标识符如下：

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

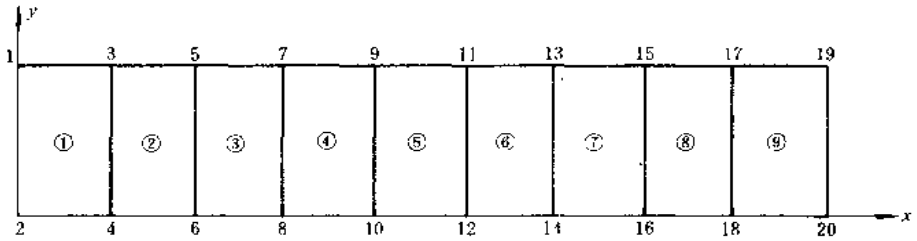


图 6-15　矩形单元剖分示意图

NP 为结点总数；NE 为单元总数；XSI 为 ξ，单元基函数中的 $\pm\frac{x-x_0}{a}$ 项；ETA 为 η，单元基函数中的 $\pm\frac{y-y_0}{b}$ 项；CNEW、COLD 为新、老浓度；VX 为 u，孔隙平均流速；DXX、DYY 为纵、横向弥散系数；KODE 为结点性质代数；IJMN 为单元编号；DT 为时间步长。

程序 2 的运行过程说明如下：

1～10 行是说明部分，说明变量类型和数组维数；11～27 行是输入基本数据；28～38 行是赋初始示踪剂浓度和其他初值；39～99 行是按单元循环所建立的系数方阵[D]、[U]和[S]；100～146 行是逐个时段递推求解有限元方程组。

程序 2 计算结果如表 6-3。

程序 2

```
1:
2:   C 2-D finite element method for groundwater transport simulation
3:
4:         INTEGER E, P, PP
5:         REAL NN
6:         DIMENSION X(20),Y(20),COLD(20),CNEW(20),G(20,20),
7:        J  ST(20,20),U(20,20),B(20)
8:         DIMENSION XSI(4),ETA(4),NN(4),DNDX(4),DNDY(4),MP(4)
9:         DIMENSION IJMN(9,4),KODE(20)
10:
11:   C Input data
12:
13:          DATA NE, NP/9,20/
14:          DATA XSI/-0.57735,0.57735,0.57735, -0.57735/
15:          DATA ETA/-0.57735, -0.57735,0.57735,0.57735/
16:          DATA Y/10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,10. ,0. ,
17:         J       10. ,0. ,10. ,0. /
18:          DATA X/2 * 0. ,2 * 10. ,2 * 20. ,2 * 30. ,2 * 40. ,2 * 50. ,2 * 60. ,2 * 70. ,
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
      J       2*80.,2*90./
    DATA CNEW/2*10.,18*0.0/
    DATA VX, DXX, DYY/0.01,1.0,0.1/
    DATA KODE/2*1,16*0,2*1/
    DATA IJMN/2,4,6,8,10,12,14,16,18,
    J              4,6,8,10,12,14,16,18,20,
    J              3,5,7,9,11,13,15,17,19,
    J              1,3,5,7,9,11,13,15,17/

C Input initial and boundaral data

    DO P=1,NP
        COLD(P)=CNEW(P)
    DO PP=1,NP
        G(P,PP)=0.0
        ST(P,PP)=0.0
        U(P,PP)=0.0
    END DO
        END DO

C Calculating matrix element

    DO 100 E=1, NE

    I=IJMN(E,1)
    J=IJMN(E,2)
    M=IJMN(E,3)
    N=IJMN(E,4)

    MP(1)=I
    MP(2)=J
    MP(3)=M
    MP(4)=N

    AA=ABS(X(J)-X(I))/2.
    BB=ABS(Y(N)-Y(I))/2.

    DO 40 P=1,4

    L=MP(P)
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
59:
60:     DO 30 PP=1,4
61:
62:         NN(1)=0.25*(1-XSI(PP))*(1-ETA(PP))
63:         NN(2)=0.25*(1+XSI(PP))*(1-ETA(PP))
64:         NN(3)=0.25*(1+XSI(PP))*(1+ETA(PP))
65:         NN(4)=0.25*(1-XSI(PP))*(1+ETA(PP))
66:
67:         DNDX(1)=-0.25*(1-ETA(PP))/AA
68:         DNDX(2)=0.25*(1-ETA(PP))/AA
69:         DNDX(3)=0.25*(1+ETA(PP))/AA
70:         DNDX(4)=-0.25*(1+ETA(PP))/AA
71:
72:         DNDY(1)=-0.25*(1-XSI(PP))/BB
73:         DNDY(2)=-0.25*(1+XSI(PP))/BB
74:         DNDY(3)=0.25*(1+XSI(PP))/BB
75:         DNDY(4)=0.25*(1-XSI(PP))/BB
76:
77:         G(L,I)=G(L,I)+(DXX*DNDX(1)*DNDX(P)+DYY*DNDY(1)
78:    J      *DNDY(P))*AA*BB
79:         G(L,J)=G(L,J)+(DXX*DNDX(2)*DNDX(P)+DYY*DNDY(2)
80:    J      *DNDY(P))*AA*BB
81:         G(L,M)=G(L,M)+(DXX*DNDX(3)*DNDX(P)+DYY*DNDY(3)
82:    J      *DNDY(P))*AA*BB
83:         G(L,N)=G(L,N)+(DXX*DNDX(4)*DNDX(P)+DYY*DNDY(4)
84:    J      *DNDY(P))*AA*BB
85:
86:     U(L,I)=U(L,I)+VX*DNDX(1)*NN(P)*AA*BB
87:     U(L,J)=U(L,J)+VX*DNDX(2)*NN(P)*AA*BB
88:     U(L,M)=U(L,M)+VX*DNDX(3)*NN(P)*AA*BB
89:     U(L,N)=U(L,N)+VX*DNDX(4)*NN(P)*AA*BB
90:
91:     ST(L,I)=ST(L,I)+NN(1)*NN(P)*AA*BB
92:     ST(L,J)=ST(L,J)+NN(2)*NN(P)*AA*BB
93:     ST(L,M)=ST(L,M)+NN(3)*NN(P)*AA*BB
94:     ST(L,N)=ST(L,N)+NN(4)*NN(P)*AA*BB
95:
96:  30     CONTINUE
97:  40     CONTINUE
98:  100    CONTINUE
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
99:
100:  C     Solving and printing
101:
102:        DT=5.0
103:        KOUNT=1
104:        KPRINT=2
105:        T=DT
106:
107:        WRITE(*,120)
108:  120    FORMAT(/,32X,'CONCENTRATION',28X,'TIME',/)
109:
110:        DO 500 NSTEP=1,100
111:        DO 150 L=1,NP
112:        B(L)=0.0
113:        DO 150 P=1,NP
114:        B(L)=B(L)+ST(L,P)*COLD(P)/DT
115:  150    CONTINUE
116:  200    ERMAX=0.0
117:        DO 400 L=1,NP
118:        IF(KODE(L).EQ.1)GO TO 400
119:        OLDVAL=CNEW(L)
120:        SUM=0.0
121:        DO  300  P=1,NP
122:        IF(P.EQ.L)GO TO 300
123:        SUM=SUM+(G(L,P)+U(L,P)+ST(L,P)/DT)*CNEW(P)
124:  300      CONTINUE
125:           CNEW(L)=(-SUM+B(L))/(G(L,L)+U(L,L)+ST(L,L)/DT)
126:           ER=ABS(OLDVAL-CNEW(L))
127:           IF(ER. GT. ERMAX)ERMAX=ER
128:  400    CONTINUE
129:        IF(ERMAX. GT. 0.001)GO TO 200
130:        DO 450 L=1,NP
131:  450    COLD(L)=CNEW(L)
132:
133:        IF(KOUNT. NE. KPRINT)GO TO 490
134:        WRITE(*,401) (CNEW(I),I=1,19,2), T
135:  401    FORMAT(1X,10F7.3,1F9.2)
136:
137:        KOUNT=0
138:  490    T=T+DT
```


PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

```
139:          KOUNT=KOUNT+1
140:  500     CONTINUE
141:
142:          STOP
143:          END
144:
145:  C   End program
146:
```

表 6-3　程序 2 计算结果

CONCENTRATION										TIME
1,2	3,4	5,6	7,8	9,10	11,12	13,14	15,16	17,18	19,20	
10.000	1.292	−0.131	0.010	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	10.00
10.000	2.229	−0.024	−0.023	0.005	−0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	20.00
10.000	2.937	0.194	−0.048	0.002	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	30.00
10.000	3.493	0.460	−0.035	−0.005	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	40.00
10.000	3.942	0.740	0.003	−0.012	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	50.00
10.000	4.315	1.019	0.067	−0.016	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	60.00
10.000	4.630	1.289	0.151	−0.012	−0.003	0.000	0.000	0.000	0.000	70.00
10.000	4.901	1.545	0.249	0.000	−0.005	0.000	0.000	0.000	0.000	80.00
10.000	5.137	1.788	0.359	0.020	−0.006	0.000	0.000	0.000	0.000	90.00
10.000	5.345	2.017	0.476	0.048	−0.005	−0.001	0.001	0.000	0.000	100.00
10.000	5.531	2.231	0.597	0.083	−0.001	−0.002	0.001	0.000	0.000	110.00
10.000	5.698	2.433	0.721	0.125	0.005	−0.002	0.000	0.000	0.000	120.00
10.000	5.848	2.623	0.846	0.174	0.014	−0.002	0.000	0.000	0.000	130.00
10.000	5.986	2.802	0.971	0.227	0.027	−0.001	−0.001	0.000	0.000	140.00
10.000	6.111	2.970	1.095	0.284	0.043	0.001	−0.001	0.000	0.000	150.00
10.000	6.227	3.129	1.218	0.345	0.062	0.004	−0.001	0.000	0.000	160.00
10.000	6.334	3.279	1.338	0.409	0.084	0.009	−0.001	0.000	0.000	170.00
10.000	6.433	3.422	1.457	0.475	0.110	0.014	0.000	0.000	0.000	180.00
10.000	6.525	3.557	1.573	0.543	0.137	0.022	0.001	0.000	0.000	190.00
10.000	6.611	3.685	1.686	0.613	0.168	0.031	0.003	0.000	0.000	200.00
10.000	6.692	3.807	1.797	0.683	0.200	0.041	0.005	0.000	0.000	210.00
10.000	6.768	3.923	1.905	0.755	0.235	0.053	0.007	0.000	0.000	220.00
10.000	6.840	4.034	2.010	0.826	0.271	0.067	0.011	0.001	0.000	230.00
10.000	6.907	4.140	2.113	0.899	0.309	0.082	0.015	0.001	0.000	240.00
10.000	6.971	4.242	2.213	0.971	0.349	0.099	0.020	0.003	0.000	250.00

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

续表 6-3

CONCENTRATION										TIME
1,2	3,4	5,6	7,8	9,10	11,12	13,14	15,16	17,18	19,20	
10.000	7.031	4.339	2.310	1.043	0.390	0.117	0.026	0.004	0.000	260.00
10.000	7.089	4.432	2.405	1.115	0.432	0.136	0.033	0.006	0.000	270.00
10.000	7.143	4.521	2.498	1.186	0.475	0.157	0.041	0.008	0.000	280.00
10.000	7.195	4.606	2.588	1.257	0.520	0.178	0.049	0.010	0.000	290.00
10.000	7.245	4.689	2.675	1.328	0.564	0.201	0.058	0.013	0.000	300.00
10.000	7.293	4.768	2.761	1.398	0.610	0.225	0.069	0.016	0.000	310.00
10.000	7.338	4.845	2.844	1.467	0.656	0.250	0.079	0.020	0.000	320.00
10.000	7.381	4.918	2.925	1.536	0.703	0.276	0.091	0.024	0.000	330.00
10.000	7.423	4.989	3.004	1.603	0.750	0.303	0.104	0.028	0.000	340.00
10.000	7.463	5.058	3.081	1.670	0.797	0.331	0.117	0.033	0.000	350.00
10.000	7.502	5.124	3.156	1.737	0.845	0.359	0.131	0.039	0.000	360.00
10.000	7.539	5.189	3.230	1.802	0.893	0.388	0.146	0.045	0.000	370.00
10.000	7.574	5.251	3.301	1.866	0.940	0.418	0.161	0.051	0.000	380.00
10.000	7.609	5.311	3.371	1.930	0.988	0.448	0.177	0.057	0.000	390.00
10.000	7.642	5.369	3.439	1.993	1.036	0.479	0.194	0.064	0.000	400.00
10.000	7.674	5.426	3.506	2.055	1.084	0.510	0.211	0.072	0.000	410.00
10.000	7.705	5.480	3.571	2.116	1.132	0.542	0.229	0.079	0.000	420.00
10.000	7.735	5.534	3.634	2.176	1.180	0.574	0.248	0.088	0.000	430.00
10.000	7.764	5.585	3.696	2.235	1.227	0.607	0.267	0.096	0.000	440.00
10.000	7.792	5.636	3.757	2.294	1.274	0.640	0.286	0.105	0.000	450.00
10.000	7.819	5.684	3.816	2.352	1.322	0.673	0.306	0.114	0.000	460.00
10.000	7.846	5.732	3.874	2.408	1.369	0.706	0.326	0.123	0.000	470.00
10.000	7.871	5.778	3.931	2.464	1.415	0.740	0.346	0.133	0.000	480.00
10.000	7.896	5.823	3.987	2.519	1.462	0.773	0.367	0.142	0.000	490.00
10.000	7.920	5.867	4.041	2.574	1.508	0.807	0.389	0.153	0.000	500.00

§6-3 过量与数值弥散

我们知道，有限差分法处理地下水流动及水动力弥散问题比较容易，某些格式计算也较快。但是对于水动力弥散模型，出现了两个困难——过量与数值弥散。

§6 3-1 过量现象

考察一维流动一维水动力弥散问题中单位浓度阶梯函数注入的情况。图 6-16 中表示了某时刻浓度的解析解与有限差分数值解两结果 C-x 曲线的对比图，经常显示出：在浓度锋面附近数值计算的浓度超过最大浓度值 1 和小于最小浓度 0。这种计算结果违背了基本的物理意义。这一矛盾称为“过量现象”。

§6-3-2 数值弥散

仍然研究一维流动一维水动力弥散问题中的单位浓度阶梯函数注入情况。该对流-弥散方

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

程式为

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}$$

某时刻 t 的解析解如图 6-16。但如果上述纯对流方程采取第一节中的有限差分逼近，其解的结果却呈现似有弥散的存在，这不是水动力弥散所致，而是有限差分逼近而形成的“数值弥散”。

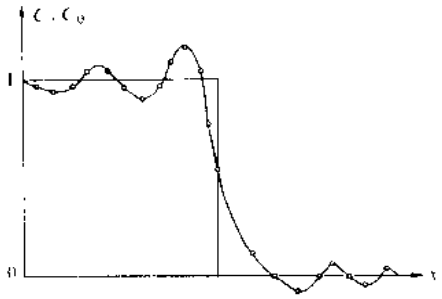


图 6-16 纯对流问题的数值解与解析解的比较
$P_e=\infty$：—解析解；—o—数值解

Fried(1975)认为，出现过量现象是由于时间步长与空间尺度匹配不佳，因而含水层在数值上不能“吸收”注入的污染物所引起的。并且指出，时间步长应当小心地选择，使其适应于所研究的问题。通常发现，将时间增量选择为几何级数的子项($\Delta t_n=a\Delta t_{n-1}$，其中 $1<a<2$)，可以消除过量。因此 Fried 还建议：对任何一个具有单位浓度阶梯函数的模型，在使用该模型之前，要做试验，以校正时间步长和差分网格格距。

Lantz(1969,1970)曾对数值弥散现象给予解释：数值弥散是截断误差引起的。下面具体分析。

若对流项一阶空间导数采用向后差分逼近，浓度 C_{i-1} 依 Taylor 级数展开

$$C_{i-1}=C_i-\Delta x\left.\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i+\frac{(\Delta x)^2}{2}\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i-\cdots$$

两端除以 Δx，再移项，整理后有

$$\left.u\frac{\partial C}{\partial x}\right|_i=u\frac{C_i-C_{i-1}}{\Delta x}+u\frac{\Delta x}{2}\left.\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}\right|_i-\cdots$$

可见，若微分方程中的对流项 $u\frac{\partial C}{\partial x}$ 用向后差分近似表示，则其截断误差主部为 $u\frac{\Delta x}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$。分析其结构可以发现，此截断误差主部相当于弥散系数($u\frac{\Delta x}{2}$)的弥散项。因此，纯对流方程用有限差分近似表示后，其计算结果如同对流-弥散方程的结果，它是截断误差引起的。因此记

$$D_n=u\frac{\Delta x}{2}$$

其中，D_n 是此条件下的数值弥散系数。

对于对流-弥散方程，如果数值弥散系数 D_n 远远小于物理弥散系数(即水动力弥散系数) D_L，则数值弥散的影响可忽略不计，否则数值弥散系数就要不同程度地干扰物理弥散系数，甚至数值弥散系数起控制作用。我们可以用两个弥散系数之比来评价数值弥散对物理弥散的干涉程度，即

$$\frac{D_n}{D_L}=\frac{u\Delta x}{2D_L}=\frac{P_e}{2}$$

即

$$P_e=\frac{u\Delta x}{D_L}\tag{6-66}$$

其中，P_e 定义为 Peclet 数。当 $P_e\leqslant 2$ 时，可称弥散占优势；当 $P_e>2$ 时，称对流占优势。上式说明速度 u 与物理弥散系数 D_L 的比越大，P_e 越大。计算经验表明，对于小 Peclet 数的情形，数值解与精确解非常接近。但对于大 Peclet 数的情况，数值解的过渡带变宽，浓度锋面变平缓，在锋面的前后还出现解的振动——过量现象。

(6-66)式说明，可以通过适当控制 Δx，以减小数值弥散的作用。另外，我们还可以以(D_n

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$\frac{u\Delta x}{2}$)* 作为"弥散系数"以减小数值弥散的作用。

另外，对于纯对流方程

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u\frac{\partial C}{\partial x} \tag{6-67}$$

$\frac{\partial C}{\partial t}$采用有限差分表示，它所产生的截断误差主部为

$$\frac{\Delta t}{2}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} \tag{6-68}$$

上式类似于前面的$\frac{\Delta x}{2}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$。将(6-67)式对 t 求导

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = -u\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial t}$$

再将(6-67)式对 x 求导

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t\partial x} = -u\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

假定 $\frac{\partial^2 C}{\partial x\partial t}$ 和 $\frac{\partial^2 C}{\partial t\partial x}$ 在研究区上连续，则微分运算与微分次序无关，则有

$$\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = u^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

将上式代入(6-68)中，于是截断误差主部

$$\frac{\Delta t}{2}\cdot\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = \frac{u^2\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

结果也要造成数值弥散系数 $D_n=\frac{u^2\Delta t}{2}$的数值弥散。在这种情况下，总的数值弥散是两者之和

$$D_n = \frac{u\Delta x}{2} + \frac{u^2\Delta t}{2}$$ **

上面以有限差分为例说明了过量与数值弥散。实际上有限单元法中也存在类似的过量与数值弥散现象，只不过不如有限差分法严重罢了。

由上述分析可知，当对流-弥散方程中的对流项占主导地位时，常用的有限差分法及有限

---

* 对流项取 Taylar 级数展开的近似式为

$$\frac{\partial C}{\partial t}\approx D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u\frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x} - \frac{u\Delta x}{2}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \left(D_L - \frac{u\Delta x}{2}\right)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u\frac{C_i - C_{i-1}}{\Delta x}.$$

** 取浓度的 Taylor 展开近似式

$$C_{i,n-1}\approx C_{i,n} - \Delta t\frac{\partial C_{i,n}}{\partial t} + \frac{(\Delta t)^2}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial t^2}$$

整理后并考虑到 $\frac{\partial^2 C}{\partial t^2} = u^2\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ 有

$$\frac{\partial C_{i,n}}{\partial t}\approx\frac{C_{i,n} - C_{i,n-1}}{\Delta t} + \frac{\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial t^2} = \frac{C_{i,n} - C_{i,n-1}}{\Delta t} + \frac{u^2\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial x^2}\approx -u\frac{\partial C_{i,n}}{\partial x}$$

则

$$\frac{C_{i,n} - C_{i,n-1}}{\Delta t}\approx -\left(\frac{u^2\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial x^2} + u\frac{\partial C_{i,n}}{\partial x}\right)\approx -\left(\frac{u^2\Delta t}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial x^2} + u\frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta x} + \frac{u\Delta x}{2}\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial x^2}\right)$$

$$\approx -\left(\frac{u\Delta x}{2} + \frac{u^2\Delta t}{2}\right)\frac{\partial^2 C_{i,n}}{\partial x^2} - u\frac{C_{i,n} - C_{i-1,n}}{\Delta x}$$

故有 $D_n\approx\frac{u\Delta x}{2} + \frac{u^2\Delta t}{2}$.

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

单元法都会遇到困难，求解弥散方程时会产生过量及数值弥散。为了提高数值解法的精确性和稳定性，下面简要介绍几种减小过量和数值弥散的方法。

§6-4 对流项占主导地位时的几种数值方法

下面简单介绍为克服对流项占主导地位时所引起过量与数值弥散的几种数值方法。

§6-4-1 上游加权法

仍以一维稳定流动一维水动力弥散为例。对流-弥散方程为

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}$$

对上式中对流项取中心差分的隐式差分格式[(6-13)式]，即

$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}+\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i-1,n+1}+\left(1+\frac{2D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\right)C_{i,n+1}$$
$$-\left(\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}-\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\right)C_{i+1,n+1}=C_{i,n}$$

我们注意到：左端第一项括号内系数 G_{i-1} 总是负值，第二项系数 G_i 总是正值，而第三项系数则可能是正也可能是负。

从物理概念上分析，一般而言，若相邻格点 $i-1$ 或(和)$i+1$ 的浓度越大，则格点 i 的浓度也越大。这个含义反映到差分方程上，系数 G_{i+1} 和 G_{i-1} 不得与 G_i 同号，对于方程(6-13)式而言，即要求

$$\frac{D_L\Delta t}{(\Delta x)^2}\geqslant\frac{u\Delta t}{2\Delta x}\qquad \text{即 } P_e=\frac{u\Delta x}{D_L}\leqslant 2 \tag{6-69}$$

因此，当条件(6-69)式不能满足时，即对流占优势时($P_e>2$)，在浓度锋面附近计算的 C-x 曲线将会出现明显的波动与过量。

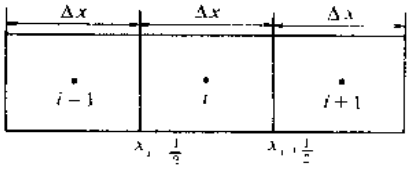


图 6-17 等距差分网格

如果在对流-弥散方程中对流项的有限差分化过程中乘上一个适当的权因子，则波动和过量可以得到改善或消除。

为简单起见，假定 D_L 和 u 为常数，并取等格距差分网格(图 6-17)。一维对流-弥散方程在$(x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}})$区间上积分(或直接写溶质的质量守恒方程)，有

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_m(x_{i+\frac{1}{2}}-x_{i-\frac{1}{2}})$$
$$=D_L\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x_{i+\frac{1}{2}}}-D_L\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x_{i-\frac{1}{2}}}-uC|_{x_{i+\frac{1}{2}}}+uC|_{x_{i-\frac{1}{2}}} \tag{6-70}$$

式中：$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_m$ 表示 $\frac{\partial C}{\partial t}$ 在区间$(x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}})$上的平均值；$D_L\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x_{i+\frac{1}{2}}}$ 表示在 $x_{i+\frac{1}{2}}$ 处的弥散通量。

弥散通量、对流通量可用如下有限差分近似表示

$$D_L\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x_{i+\frac{1}{2}}}=D_L\frac{C_{i+1}-C_i}{\Delta x}\qquad \text{(中心差分)}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$D_L\frac{\partial C}{\partial x}\bigg|_{x_i,\frac{1}{2}}=D_L\frac{C_i-C_{i-1}}{\Delta x}\qquad\text{(中心差分)}$$

$$uC\big|_{x_{i+\frac{1}{2}}}=u[\omega C_i+(1-\omega)C_{i+1}]\tag{6-71}$$

$$uC\big|_{x_i-\frac{1}{2}}=u[\omega C_{i-1}+(1-\omega)C_i]$$

其中，ω 为权因子；当 $\omega=\frac{1}{2}$ 时，对流项相当于取中心差分；当 $\omega=1$ 时，对流项相当于取向后差分；当 $\omega=0$ 时，对流项相当子取向前差分。对于不同的速度，对 ω 取不同的值：

$u>0$ 时，取 $\frac{1}{2}<\omega\leqslant 1$

$u\leqslant 0$ 时，取 $0\leqslant\omega\leqslant\frac{1}{2}$

即上游浓度的权因子大于 $\frac{1}{2}$。其物理意义是：加强上游格点浓度值在对流项中的作用。我们还可以通过浓度的线性(或二次)插值具体确定在 Δt 期间 C 在格边上随时间的变化，从而确定出 ω 值。

$\frac{\partial C}{\partial t}$ 在区间 $(x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}})$ 上的平均值近似在格点 i 处取值 $\frac{\partial C}{\partial t}\Big|_i$，即

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_m=\frac{\partial C}{\partial t}\bigg|_i=\frac{C_{i,n+1}-C_{i,n}}{\Delta t}\tag{6-72}$$

将(6-71)、(6-72)式代入(6-70)式中，并取隐格式，整理后得

$$-\left(\frac{D_L}{\Delta x}+u\omega\right)C_{i-1,n+1}+\left(\frac{2D_L}{\Delta x}+u(\omega-1)+\frac{\Delta x}{\Delta t}\right)C_{i,n+1}$$
$$-\left(\frac{D_L}{\Delta x}-u(1-\omega)\right)C_{i+1,n+1}$$
$$=\frac{\Delta x}{\Delta t}C_{i,n}\tag{6-73}$$

若仍用 G_{i-1}、G_i 和 G_{i+1} 分别表示上式左端第一、二、三项括号内系数。则不难看出：

(1)当 $u>0$ 时，$G_{i-1}<0$，$G_i>0$，而 G_{i+1} 可通过选择适当的 ω 值使其不大于零，令

$$\frac{D_L}{\Delta x}\geqslant u(1-\omega)\qquad\text{即}\quad\omega\geqslant 1-\frac{D_L}{u\Delta x}$$

(2)当 $u<0$ 时，$G_{i-1}<0$，同理可选择适当的 ω 使 G_{i-1} 不大于零，令

$$\frac{D_L}{\Delta x}\geqslant -u\omega\qquad\text{即}\ \omega\leqslant-\frac{D_L}{u\Delta x}$$

计算表明，采取上游加权的有限差分格式，可以消除过量和波动，但其数值弥散反而增大了。这是由子截断误差增大所引起。在§6-1节中我们提到过，取中心差分格式时，截断误差是二阶的，即 $o(\Delta x)^2$。而在上游加权有限差分中[式(6-71)]对 $\frac{\partial C}{\partial x}$ 不用中心差分近似，而是采用上游有限差分与中心差分的加权平均近似地代替它的一阶导数项，这时的截断误差是一阶的，即 $o(\Delta x)$。

有限单元法也可以采用类似的上游权因子的形式。

上游加权法是从差分方程各系数之间的关系引出的，它具有一定的物理意义：对流项浓度 C 在某断而，例如 $x_{i-\frac{1}{2}}$ 断面的中心差分意味着对流项的浓度在 Δt 时段内均以 i 与 $i-1$ 两格点的平均浓度，即 $\frac{C_i+C_{i-1}}{2}$ 通过 $x_{i-\frac{1}{2}}$ 断面；而实际情况是，该 Δt 时间段的初始时刻是该平均浓度

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

值，随后在对流的作用下，该断面的浓度显然会向上游格点的浓度 C_{i-1}（$\vec{u}>0$ 时）变化，这就是上游加权的物理实质，由此原理出发，可以导出权因子 ω 的确切取值。

§6-4-2 特征值方法

当对流-弥散方程中的对流项占主要地位时，数值弥散的影响变得十分显著。此时对流-弥散方程的性质很象忽略了弥散项（二阶导数项）的纯对流方程，即接近于一个一阶双曲型方程。这启发我们用解双曲型方程的特征值方法求解对流-弥散方程。特征值方法概念简单，也能处理各种复杂条件，因面在水质模拟的早期应用较多。

将对流-弥散方程(2-32)式展开（令源汇项为零）

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \mathrm{div}(\tilde{D}\cdot \mathrm{grad}C) - \mathrm{div}(C\vec{u})$$

$$= \mathrm{div}(\tilde{D}\cdot \mathrm{grad}C) - C\cdot \mathrm{div}\,\vec{u} - \vec{u}\cdot \mathrm{grad}\,C \qquad (6\text{-}74)$$

已知 $C=C(x,y,z,t)$，有

$$\frac{dC}{dt} = \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial C}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial C}{\partial z}\frac{dz}{dt}$$

$$= \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial x}u_x + \frac{\partial C}{\partial y}u_y + \frac{\partial C}{\partial z}u_z$$

$$= \frac{\partial C}{\partial t} + \vec{u}\cdot \mathrm{grad}C$$

将(6-74)式代入上式，有

$$\frac{dC}{dt} = \mathrm{div}(\tilde{D}\cdot \mathrm{grad}\,C) - C\cdot \mathrm{div}\,\vec{u} \qquad (6\text{-}75)$$

该式为对流-弥散方程的拉格朗日形式。其中$\frac{dC}{dt}$在数学上称为全导数；在流体力学中称物质导数或随体导数。其物理意义是：运动着的流体质点的浓度随时间的变化率。而$\frac{\partial C}{\partial t}$在数学上称偏导数，其物理意义是固定空间坐标点处的浓度随时间的变化率。

若假定流体的密度值 ρ 不变（即流体不可压缩），含水层也不可压缩（即要求 $\mu_s=0$ 或$\frac{\partial H}{\partial t}=0$），则有

$$\mathrm{div}\,\vec{u} = 0$$

这时(6-75)式简化为

$$\frac{dC}{dt} = \mathrm{div}\,(\tilde{D}\cdot \mathrm{grad}\,C) \qquad (6\text{-}76)$$

上式与(6-74)式相比，没有对流项。

特征值方法的基本思路是：物质导数[(6-75)式或(6-76)式]表示一个沿轨迹（特征曲线）$[x(t),y(t)]$运动的研究对象中的浓度变化率。这种变化率是由弥散作用引起。若存在着源汇项，则还将受到沿轨迹的源与汇、化学与生物化学反应、吸附与解析等的影响。对流项则是用沿特征线的示踪质点的运动来描述。赋予每个特征点一个初始浓度，为了有效地描述整个模拟区内的示踪质点浓度分布，特征点必须均匀分布在整个研究区内。含水层中未受污染部分特征点的初始浓度为零，特征点浓度沿轨迹的瞬时浓度变化，可以借助于矩形网格的差分格式来计算。首先将研究区剖分成一系列的矩形网格，第 j 行第 i 列的网格记为 $R_{i,j}$，其中心点——格点为 (i,j)；再根据初始水头分布和相应的边界条件，用任何一种有限差分方法确定每个格点处

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

的水头 H，于是可确定各格点的流速分量 u_x 和 u_y，还可以进一步利用插值方法确定已知时间水平 n 任一点 $(x_{p,n}, y_{p,n})$ 的流速分量 $u_x(x_{p,n}, y_{p,n})$ 和 $u_y(x_{p,n}, y_{p,n})$；然后还需要在特征点浓度与格点浓度之间进行转换。假定既知道 t 时刻每一特征点的初始浓度，又知道 t 时刻每个格点的初始浓度，那么可据如下 3 个步骤计算出 $t+\Delta t$ 时刻的特征点浓度和格点浓度（图 6-18）。

第一步：确定纯对流引起的格点暂时浓度。

假定在 Δt 时间内 u_x、u_y 不变，则

$$\left.\begin{aligned} x_{p,n+1} &= x_{p,n} + \Delta t_n u_x(x_{p,n}, y_{p,n}) \\ y_{p,n+1} &= y_{p,n} + \Delta t_n u_y(x_{p,n}, y_{p,n}) \end{aligned}\right\} \quad (6\text{-}77)$$

若在 Δt 时间内 u_x、u_y 有明显的变化，可将 Δt 分 n 步计算，分别取用不同位置的 u_x、u_y，以获得较精确的新位置 $(x_{p,n+1}, y_{p,n-1})$。但此法需要花费较多的机时。

上述两种情况下需对所有特征点都做一次。

格点 (i,j) 的暂时浓度 $C_{i,j,n}$ 可近似地取对流后落在此网格 R_{ij} 内所有特征点的浓度的平均值，即

$$C_{i,j,n} = \frac{\sum_{p=1}^{N} C_{p,n}}{N} \quad (6\text{-}78)$$

式中：$C_{p,n}$ 为 n 时间水平特征点 p 的浓度；N 为落在网格 R_{ij} 内的特征点数；$C_{i,j,n}$ 为对流后弥散前（n 时间水平上）格点 (i,j) 的暂时浓度。

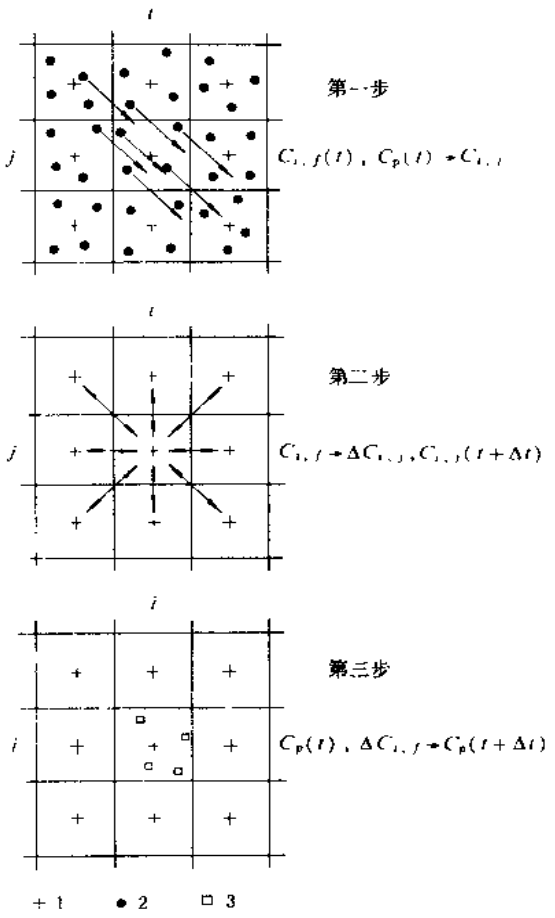


图 6-18 特征值法的计算步骤

1—结点；2—在时间 t 时的示踪粒子；3—在时间 $t+\Delta t$ 时的示踪粒子

第二步：确定纯弥散引起的格点浓度。

这一步骤中可以采用显式方法。

假定弥散系数是均一的，(6-74)式可写成二维的形式，即

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx}\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{xy}\frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yx}\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{yy}\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (6\text{-}79)$$

差分化（$\frac{\partial C}{\partial t}$ 取显格式，其他取中心差分）

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_{i,j,n+1} - C_{i,j,n}}{\Delta t} \triangleq \frac{\Delta C_{i,j,n}}{\Delta t}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{i+1,j,n} - 2C_{i,j,n} + C_{i-1,j,n}}{(\Delta x)^2}$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = \frac{C_{i,j-1,n} - 2C_{i,j,n} + C_{i,j-1,n}}{(\Delta y)^2}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial y}\right)=\frac{\partial}{\partial x}\left\{\frac{C_{x,j+1,n}-C_{x,j-1,n}}{2\Delta y}\right\}$$

$$=\frac{\left\{\frac{C_{x,j-1,n}-C_{x,j-1,n}}{2\Delta y}\right\}_{i-1}-\left\{\frac{C_{x,j+1,n}-C_{x,j-1,n}}{2\Delta y}\right\}_{i-1}}{2\Delta x}$$

$$=\frac{(C_{i-1,j-1,n}-C_{i+1,j-1,n})-(C_{i-1,j-1,n}-C_{i-1,j-1,n})}{4\Delta x\Delta y}$$

将上述差分近似式代入(6-79)式，可直接求得 $\Delta C_{i,j,n}$。当存在着源汇项时，还应考虑由于源汇、化学或生物化学作用、吸附与解析等对浓度的影响。

第三步：确定 t_{n-1} 时刻各特征点浓度 $C_{p,n-1}$。

有两种方法：

一种方法近似地认为，在同一网格 $R_{i,j}$ 上所有特征点的 $\Delta C_{p,n}$ 都相同，并且等于 $\Delta C_{i,j,n}$，即

$$C_{p,n+1}=C_{p,n}+\Delta C_{i,j,n} \tag{6-80}$$

另一种方法是通过某些插值方式获得 $\Delta C_{p,n}$，即

$$C_{p,n+1}=C_{p,n}+\Delta C_{p,n} \tag{6-81}$$

在这一步中，修正特征点浓度。这点可以给一个网格中的所有特征点分配一个新的结点浓度来达到。但是这一过程相当于取网格的平均值，因而使过量现象消失，这意味着将产生数值弥散。因此，特征点仅仅传递与其最接近的格点的浓度的变化。

这一过程保持了浓度的前锋。如果 $\Delta C_{i,j,n}$ 是负的，就必须留心，特征点浓度不应变成为负值。因此，在 $\Delta C_{i,j,n}$ 是负的情况下，$C_{p,n}$ 应以与 $\Delta C_{i,j,n}$ 相同的比例缩小，以得到 $C_{p,n-1}$。上述过程在时间上是显式的。正如在显式差分模型中一样，必须满足一些稳定性准则。第一条是克朗准则，它保证在一个时间步长内，示踪粒子的迁移距离不可能超过一个网格距。当然，弥散步长也可用隐式方法计算。

显然，模型的精确度取决于网格距的大小。可以在同一网格上计算速度场。如果采用较小的网格距，可以改善流场的描述。示踪粒子的局部速度，可以用双线性内插法。矩形网格还具有这样一个大的优点，即坐标为 $x_p(t)$、$y_p(t)$ 的特征点所在的单元，很容易用下标 i、j 来确定：

$$i=\mathrm{INT}[(x_p(t)-x_0)/x+1.]$$

$$j=\mathrm{INT}[(y_p(t)-y_0)/y+1.]$$

式中：x_0，y_0 为格点(1,1)的坐标。

要想结合有限元水流模型使用特征值法，需要作出更大的努力，除非网格是规则的。

模型的精确度还受到每一网格内所选择的最初的特征点数目的影响。Redell 和 Sunada (1970)提出的模型在每个单元内最初放置一个特征点。Konikow 和 Bredehoeft(1978)提出的模型允许 4～9 个特征点。

尽管此方法的原理简单，但实际程序却很冗长。它需要记录特征点的踪迹。到达抽水点或到达一个出流边界的特征点都必须消除，相应地在入渗边界上，或入渗井处则必须有特征点生成。不透水边界上，特征点必须反射回来，留在含水层内(图 6-19)。通过对相应的单元和单元内的特征点给定浓度，来处理给定浓度的边界。还必须通过消去特征点来避免滞流点附近的特征点堆积，以保持在所限定的模型范围内一定的特征点数目。为了能够进行有意义的浓度计算，在特征点耗尽的单元，必须产生新的特征点。注意，在特征值法中，特征点并不表示一个确定不变的污染物质的数量，它们仅代表示踪点。全部质量平衡必须根据格点上的浓度来计算。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

§6-4-3 动坐标系方法与网格变形方法

上述的特征值有限差分方法是在固定坐标网上求解，其格点(i,j)的浓度取值，或者用落在R_{ij}上的n个特征点的浓度取算术平均或者通过插值而获得，都带来一定的误差。为了提高计算精度，人们又提出了用运动的坐标系方法及网格变形方法，这些方法对于以对流为主的问题特别有效。它们不仅消除了过量现象，还保持了较陡的浓度锋面。

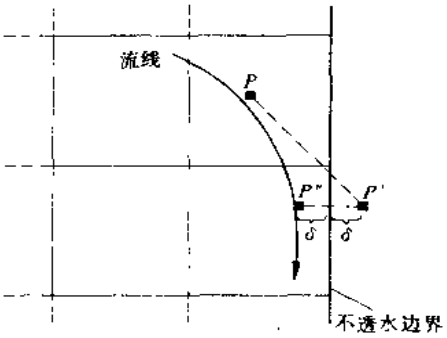


图 6-19 不透水边界上特征点的反射
P为t时刻特征点位置；P'为$t+\Delta t$时刻计算所得特征点位置；P''为$t+\Delta t$时刻修正后特征点位置

1. 动坐标系方法

考虑一维稳定流动一维水动力弥散方程

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-u\frac{\partial C}{\partial x}$$

若在以流速u运动的坐标系中观察对流-弥散现象，观察者将看不到对流作用而只看到弥散作用。设坐标变换

$$X=x-ut$$

代入一维对流-弥散方程，整理后得到

$$\frac{\partial C'}{\partial t}=D_L\frac{\partial^2 C'}{\partial X^2} \tag{6-82}$$

式中：$C'(X,t)$表示在动坐标系中观察到的浓度。在新坐标系下，由于没有对流项，因此用任何方法求解(6-82)式方程均不会引起数值弥散。若对$\frac{\partial C'}{\partial t}$取向前差分，$\frac{\partial^2 C'}{\partial X^2}$取中心差分，则有

$$\frac{C'_{i,n+1}-C'_{i,n}}{\Delta t}=D_L\frac{C'_{i+1,n}-2C'_{i,n}+C'_{i-1,n}}{(\Delta X)^2} \tag{6-83}$$

若在动坐标系中取空间步长$\Delta X=u\Delta t$，则上式改写成

$$C'_{i,n+1}=C'_{i,n}+D_L\frac{C'_{i+1,n}-2C'_{i,n}+C'_{i-1,n}}{u^2\Delta t} \tag{6-84}$$

上式即为动坐标系下格点浓度的表达式。通过简单的变换，即可将动坐标系下的浓度转化成原来的固定坐标系中。

在固定坐标系中取格距为$\Delta x=u\Delta t$，这时有

$$\frac{u\Delta t}{\Delta x}=1$$

于是动坐标系中的格点在运动过程中总是和固定坐标系中的格点相重合。设固定坐标系中的格点x_j在t_{n+1}时刻与动坐标系中格点X_i相重合，则有对应关系

t_{n+1}时刻，$x_j\longleftrightarrow X_i, C_{j,n+1}\longleftrightarrow C'_{i,n-1}$

t_n 时刻，$x_{j-2}\longleftrightarrow X_{i-1}, C_{j-2,n}\longleftrightarrow C'_{i-1,n}$

$x_{j-1}\longleftrightarrow X_i, C_{j-1,n}\longleftrightarrow C'_{i,n}$

$x_j\longleftrightarrow X_{i+1}, C_{j,n}\longleftrightarrow C'_{i+1,n}$

见图 6-20。于是在固定坐标系中(6-84)式变成

$$C_{j,n+1}=C_{j-1,n}+D_L\frac{C_{j,n}-2C_{j-1,n}+C_{j-2,n}}{u^2\Delta t} \tag{6-85}$$

对于半无限长砂柱中的一维对流-弥散问题，当$D_L=0$的极端条件下上式化成

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

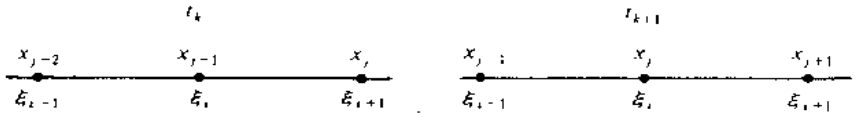


图 6-20　动坐标和固定坐标系格点间的对应关系

$$C_{j,n+1} = C_{j-1,n} \tag{6-86}$$

即浓度锋面“活塞式”推进，由此式可得到与解析解相同的直立锋面（图 6-21）。

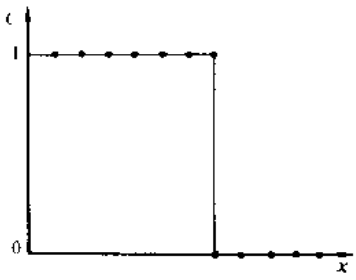


图 6-21　$D=0$ 时动坐标系数值解与解析解比较

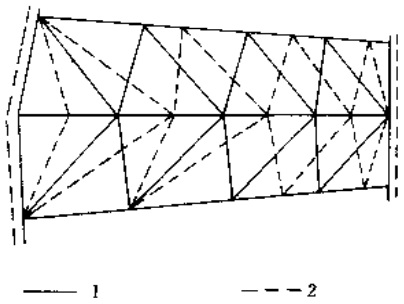


图 6-22　变形网格示意图

1—原坐标；2—变形坐标

上述的动坐标系方法在处理对流为主的一维水动力弥散很有效，但将这种方法推广到多维条件下非常困难。

2. 网格变形方法

网格变形方法是将坐标系固定，让有限单元结点可在空间移动，并使它们的移动自动地跟着锋面的移动而密集在锋面附近（图 6-22），这样可以降低局部（锋面附近）的 Peclet 数，从而降低过量和数值弥散。

设 t_n 时刻有限元结点在空间中的分布是$\{X_n\}$，在这些结点上已知的浓度分布是 $C^n(X_n)$。求出 t_{n+1}时刻适当的结点分布$\{X_{n+1}\}$及相应的浓度分布 $C^{n+1}(X_{n-1})$。求解的主要步骤是：

(1)用迦辽金有限单元法预测锋面在 t_{n-1}时刻的位置；

(2)重新布置结点，使它们在锋面附近有较大的密度，从而得出$\{X_{n-1}\}$；

(3)采用恰当的插值方法，从已知的 $C^n(X_n)$得出$C^n(X_{n-1})$，并以此作为下一步求解的初值；

(4)根据新的结点位置$\{X_{n-1}\}$及给定的边界条件重新形成有限元方程组的系数；

(5)通过求解方程组得出 $C^{n-1}(X_{n-1})$。

从上述步骤看出，结点的位置随着时间而变化，而基函数及有限元方程组的系数都依赖于时间，每推进一个 Δt 都需要重新计算。对于二维问题，每个 Δt 还得判断单元是否出现畸形。因此大大地增加了计算工作量。

为了提高计算精度，O'neill(1981)提出了在运动的变形坐标上求解一维对流-弥散方程，即结合动坐标研究了网格变形方法。

考虑一维对流-弥散问题，某个动点在 t 时刻的位置 x 可写成

$$x = x(x_0,t) \tag{6-87}$$

其中，x_0 是动点的初始位置。则有

$$C(x,t) = C[x(x_0,t),t]$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

取时间的一阶偏导数

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{x_0}=\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_x+\frac{\partial C}{\partial x}\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_{x_0} \tag{6-88}$$

其中，$\left(\frac{\partial x}{\partial t}\right)_{x_0}=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$表示动点 x 的移动速度，$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_x$表示动点浓度随时间的变化。这时一维对流-弥散方程可写成

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_{x_0}=D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}-\left(u-\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}\right)\frac{\partial C}{\partial x} \tag{6-89}$$

从上式看出，若控制动点的速度$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$并让它接近于流速 u，这样就可将以对流为主的对流-弥散方程化成以弥散为主的方程(6-89)式。

若用迦辽金有限单元方法求解方程(6-89)式，还应考虑到基函数因依赖于结点位置而成为时间的函数。图 6-23 显示一维线性基函数随结点位置的变化情况。若用$\{N_i(x,t)\}$表示随时间变化的基函数，则浓度 $C(x,t)$的近似表达式可写成

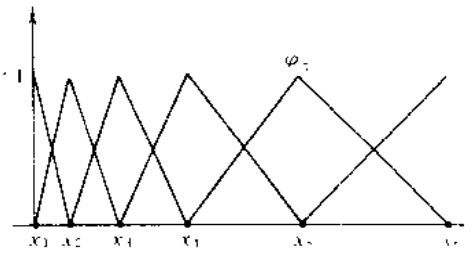


图 6-23　一维线性基函数随结点位置而变化

$$\tilde{C}(x,t)=\sum_{i=1}^{N}C_i(t)N_i(x,t) \tag{6-90}$$

从图 6-23 不难看出，无论 x 是否为结点，在任意时刻 t 都有 $N_i(x,t)=N_i(x_0)$，故上式可改写成

$$\tilde{C}(x,t)=\sum_{i=1}^{N}C_i(t)N_i(x_0)=\tilde{C}(x_0,t) \tag{6-91}$$

将(6-91)式代入方程(6-89)式中，就可以用通常的迦辽金有限单元过程求解，就像结点不动一样，从而使计算过程大大简化。但注意速度项依赖于$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}$，它随时间发生变化。

§6-4-4　随机步行法

如同特征值法一样，随机步行法也用示踪粒子来描述污染物的运移过程。但是模拟弥散的方法却完全不同。特征值法是利用在流场内各处已被污染或未被污染的特征点，每个特征点都给定一个浓度，在一个网格计算的中间步骤里，把已被污染的特征点的浓度分散到未被污染的或被轻度污染的特征点来模拟弥散作用。在随机步行法中，只有被污染的特征点在流场中运动。每个特征点都给定一个不变的污染物质量，此质量的和等于排进含水层的总污染物质量。弥散是通过叠加的对流运动和一个与弥散过程的性质相当的、具有统计特性的随机运动来模拟。取许多单个特征点轨迹(随机步行)的平均值，就可以得到一个有弥散的特征点分布。它同时代表一个污染物质量分布。要得到一个浓度分布，就要先叠加一个网格并算每个网格单元所含有的特征点数。和特征值法一样，必须通过加入和去除特征点来模拟源和汇。边界条件的并入也是类似的。给定浓度边界是经过加入或去除特征点，以便使浓度达到给定数值而模拟的。

通过考察最简单的一维运移问题，就很容易说明本方法的基本概念。在位置 $x=0$ 处，一个瞬时注入的、质量为 ΔM 的理想示踪剂，在时间 t 的浓度分布是

$$C(x,t)=\frac{C_0}{\sqrt{4\pi D_L t}}\exp\left[-\frac{(x-ut)^2}{4D_L t}\right] \tag{6-92}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

式中：$\bar{C}_0=M/(n_e mw)$，n_e 表示有效孔隙率，m 表示注入厚度，w 表示注入面积，流速方向与 x 轴的正方向一致。

对于一个固定的时间 t 来说，这个分布可以看作一个围绕 x 的平均值 $\mu=ut$、标准差为 $\sigma=\sqrt{2D_L t}$ 的正态分布（图 6-24）。可以随机地产生同样的分布。在时间 $t=0$ 和位置 $x=0$ 处，放置具有污染物质量为 $\Delta M/N$ 的 N 个特征点，每一个特征点移动距离 x，而在时刻 t 到达它们各自的位置，即

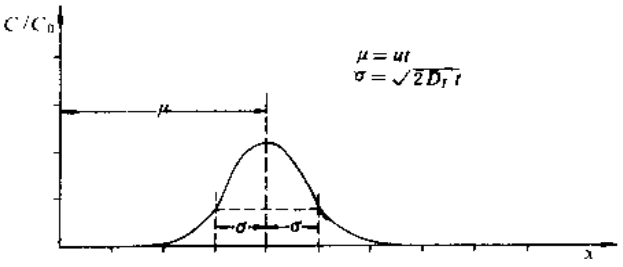


图 6-24　一维（稳定流中瞬时源）运移方程的基本解，可看作路径长度的正态分布

$$x = ut + Z\sqrt{2D_L t} \tag{6-93}$$

式中：Z 是一个平均值为零、标准差为 1 的正态分布的随机变量。因此，所得到的所有轨迹长度是平均值为 ut、标准差为 $\sqrt{2D_L t}$ 的正态分布。在 $N\to\infty$ 时所得到的频率分布，通过一个标准化因子，很容易与浓度分布(6-32)式等同起来

$$C(x,t) = \frac{\Delta M}{mwn_e} f(x,t) \tag{6-94}$$

对于有限数量的颗粒，可以近似地确定 $C(x,t)$，将空间变量划分为长度的 Δx 的若干个区间，因面，落在区间$[x,x+\Delta x]$中的颗粒数目 $n[x,x+\Delta x,t]$是确定的。该区间的中点的浓度近似为

$$C(x+0.5\Delta x,t) = \frac{\Delta M}{Nmwn_e\Delta x} n(x,x+\Delta x,t) \tag{6-95}$$

如果孔隙平均流速是时间和位置的函数，那么从时间为零开始的颗粒 P 在时间间隔 Δt 内的随机轨迹 $x_p(t)$ 为

$$x_p(0) = 0 \tag{6-96}$$

$$x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + u[x_p(t),t]\Delta t + Z\sqrt{2a_L|u(x_p(t),t)|\Delta t}$$

这种随机过程需要一个能产生平均值为 0、标准差为 1 的正态分布数 Z 的方法。简单方法是采用一个在大多数计算机上都可以用的均匀分布的随机变量 RN，这种分布可在$[0,1]$区间上产生平均值为 0.5、标准差为 $1/\sqrt{12}$ 的随机数。从 RN 分布中依次取出 12 个值，然后将它们加上 -6，就得到所需要的变量 Z，即

$$Z = -6 + \sum_{i=1}^{12} RN_i \tag{6-97}$$

用此方法得到的随机变量平均值为 0，标准差为 1。

$$Z = -6 + 12\times 0.5 = 0 \tag{6-98}$$

$$\sigma_z^2 = \sum_{i=1}^{12}\sigma_{RN}^2 = \sum_{i=1}^{12}(1/\sqrt{12})^2 = 1 \tag{6-99}$$

在一个二维流场中，颗粒的随机步行可类似于一维的情况来构造。首先假定流动方向平行于 x 轴，那么就得到

$$x_p(0) = x_0, y_p(0) = y_0 \tag{6-100}$$

$$x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + u_x(x_p(t),y_p(t),t)\Delta t + Z\sqrt{2a_L|u_x(x_p(t),y_p(t),t)|\Delta t}$$

$$y_p(t+\Delta t) = y_p(t) + Z'\sqrt{2a_T|u_x(x_p(t),y_p(t),t)|\Delta t}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

Z 和 Z' 是正态分布的随机变量的两个值。对于任意方向的流动，必须考虑弥散的张量特性。在这种情况下，随机轨迹的方程如下

$$\begin{aligned} &x_p(0) = x_0, y_p(0) = y_0 \\ &x_p(t+\Delta t) = x_p(t) + u_x\Delta t + P_x \\ &y_p(t+\Delta t) = y_p(t) + u_y\Delta t + P_y \end{aligned} \tag{6-101}$$

式中：$P_x = (u_x/u)P_L + (u_y/u)P_T$；$P_y = (u_y/u)P_L - (u_x/u)P_T$；$P_L = Z\sqrt{2\alpha_L u\Delta t}$，$P_T = Z'\sqrt{2\alpha_T u\Delta t}$；$u_x = u_x(x_p(t), y_p(t), t)$；$u_y = u_y(x_p(t), y_p(t), t)$；$u = \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$

这意味着，由对流运动可以确定在水流流动方向上和正交于水流流动方向上的随机弥散运动（P_L 和 P_T）。将 P_L 和 P_T 投影于坐标轴并与相应的分量相加即可得到 P_x、P_y（图 6-25）。图 6-26 给出了平行于水流流动方向的随机轨迹的例子。

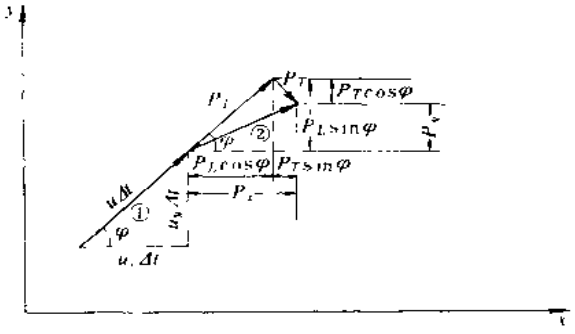


图 6-25　弥散步长由自然坐标系统（纵向和横向依局部流向而定）到笛卡尔坐标系统的转换
①特征点在时间 Δt 内的对流步长；
②特征点在时间 Δt 内的离散步长

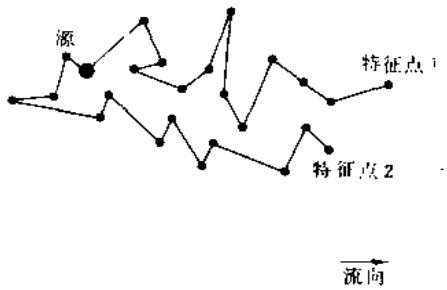


图 6-26　从一个特征点源出发的两个独立的随机路径（12m）

上述 Prick 等人的经验性随机步行方程在速度梯度较大的区域会发生问题。

例如在滞流点非物理性的特征点积累会出现。以 Fokker-Plancke 理论为基础的随机步行法会解决此问题，只要把对流性步骤中速度（u_x，u_y）用速度（u'_x，u'_y）代替，即

$$\begin{aligned} u_x \to u'_x &= u_x + \frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{xy}}{\partial y} \\ u_y \to u'_y &= u_y + \frac{\partial D_{yx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} \end{aligned}$$

将特征点位置转换成浓度，需要把空间坐标离散化，例如离散成为矩形网格。每个单元（i、j）的浓度是

$$C_{ij}(t) = \frac{\Delta M n_{ij}(t)}{N n_e m_{ij}\Delta x\Delta y} \tag{6-102}$$

式中：ΔM 是总污染物排放量，它分布在 N 个特征点上；n_{ij} 是包含在单元（i、j）内的特征点数；m_{ij} 为单元的厚度。

图 6-27 给出了污染物瞬时注入情况下的解析解和随机步行法的数值结果之间的比较。数值结果的质量主要取决于特征点数目 N，同时也必须仔细考虑网格的选择。很大的网格距会产生极为平均的结果，而很小的网格距则会产生十分粗糙的分布。折衷的办法是在两者之间选择一个格距尺寸，并采用某些平滑技术。在模拟示踪剂连续的注入时，在每个时间间隔 Δt 后，

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

在源的位置上置放新的特征点。这就有可能导致很大的特征点数目。在稳定流动和一个源或数个源都有固定强度的情况下，可以节省很多特征点。那时可以假定，在时间 t_1 时投入的 N 个特征点，将沿着不同的时间 t_2 投入的 N 个特征点的同样轨迹运动。于是，只需这样来移动在时间 $t=0$ 时投入的 N 个特征点；即把它们原来的位置看作以后时刻投入的特征点的新的位置。把这 N 个特征点加到原来的浓度分布上，就得到每一个时间间隔内新的浓度分布。

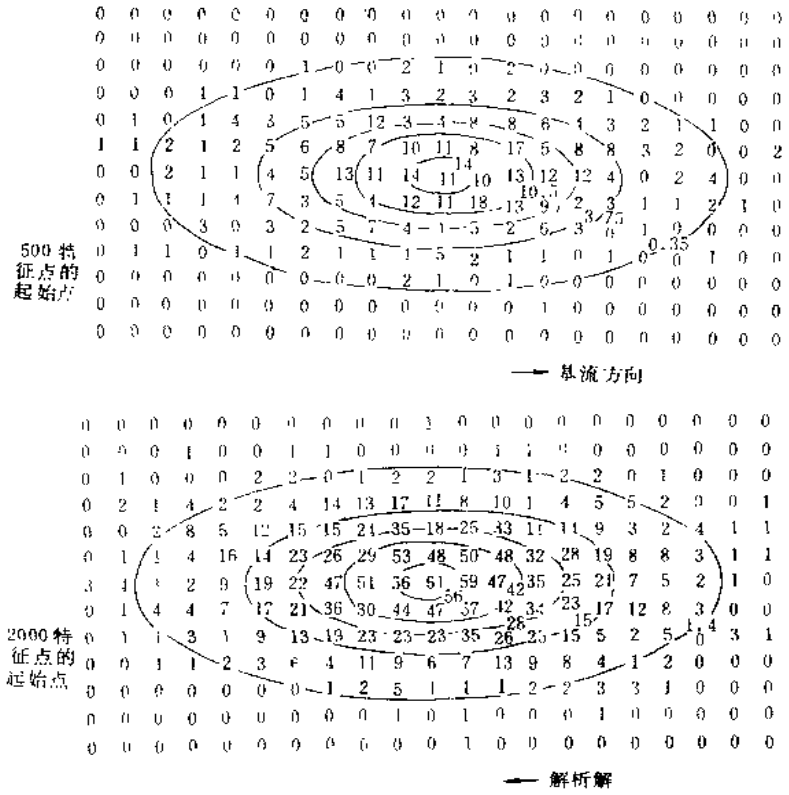


图 6-27　示踪剂瞬时注入时随机步行模拟和解析解的比较

实际孔隙平均流速 1m/d，纵向弥散度 4.5m，横向弥散度 1.125m，时间 120d，矩形单元边长 10m，含水层厚 10m，有效孔隙率 0.1，粒子质量 100g

$$C_{ij}(t)=\int_0^t n_{ij}^{\delta}(\tau)\,\frac{M(t-\tau)}{Nn_e m_{ij}\Delta x\Delta y}\mathrm{d}\tau \tag{6-103}$$

式中：n^{δ} 是在时间 τ 时，由在时间 $t=0$ 时瞬时注入所产生的分布。根据相应源的强度，把所得到的特征点分布加权叠加到最终的特征点分布上。

用迟滞流速 u/R 代替平均孔隙流速 u，并用迟滞系数去除全部的注入质量，就可以引进线性吸附作用。一级化学反应可以用两种方法引入。一种方法是分配给每一个特征点一个按下式随时间变化的污染物质量 $M_p(t)$

$$M_p(t)=M_p(0)\exp(-\lambda t) \tag{6-104}$$

另一种可选择的作法是，可以用定常的概率来除去特征点，就像一个具有定常概率的衰减一级反应一样。对于充分小的 Δt，衰减概率 ρ 和反应常数可以通过等比关系建立如下关系，即

$$\rho=\lambda\Delta t \tag{6-105}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第一种方法是值得推荐的，因为它可防止导致不重要的统计结果的特征点的消耗。

在传统的意义上，随机步行法不会出现数值弥散，但在污染带边缘上的计算结果可能是无意义的。要得到满意的结果，可能需要大量的特征点。用于浓度计算的时间步长和网格尺寸应该这样来调整，即要满足克朗准则，以避免特征点密度的振荡。Prickett 等推荐：在一个对流步长中，一个特征点的行走不应超过网格尺寸的 1/5。如果在模拟域内，存在着诸如抽水井等导致特征点损失的条件时，需要有一个准则来确定特征点在什么时候被抽走。用一个以井为中心的限制半径 r_G 就可以很方便地做到这一点。只要一个特征点离井的距离小于 r_G，该特征点就不可逆地消失于井中。时间步长的选择必须使对流步长保持小于 r_G；否则，特征点就有可能跳越过一口井。上述方法的一个缺点是出现在流速梯度较大的区域中。在滞留水区特征点会积累，因它们会跳入此区中而不容易离开，基本原因是特征点的弥散性行动不十分与水流耦合。此现象可以用 Uffink 推荐的方法来修改。总之，随机步行法是一个完整的、易于编程、并能用于每一个水流模型的方法。这种方法推广到三维模型是很容易的。即使用二维流场，也可以模拟某些三维的迁移问题，例如在垂直方向均匀的含水层中，污染物在地下水表面上的输入。Uffink(1983)给出了可以考虑层状结构的含水层的准三维模型。

随机步行法不方便之处出现在灵敏度分析。灵敏度较小的参数的变化引起的浓度分布变化会被随机性浓度的变化所覆盖。

§6.4.5 引入人工扩散量方法

将对流-弥散方程式简写成如下形式

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u_i\frac{\partial C}{\partial x_i}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_i}\right)=0 \tag{6-106}$$

为了表达上简单明了，上式可进一步简写成脚标注释的形式

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ij}=0 \tag{6-107}$$

式中：u_i 为 u_x、u_y、u_z；x_i、x_j 为 x、y、z；D_{ij} 为 D_{xx}、D_{yy}、D_{zz}、D_{xy}、D_{xz}、D_{yx}、D_{yz}、D_{zx}、D_{zy}；$C_{,i}=\dfrac{\partial C}{\partial x_i}$；$C_{,ij}=\dfrac{\partial^2 C}{\partial x_j\partial x_i}$。

为了写法上方便，上式中 D_{ij} 写在了 $C_{,ij}$ 之前。

在时间步长上对(6-107)式引入人工扩散系数，并对各项赋权，则有

$$\begin{aligned}&\frac{C^{n+1}}{\Delta t}+\theta_a u_i C^{n+1}_{,i}-\theta_d D_{ij}C^{n+1}_{,ij}-\theta_d D^*_{ij}C^{n+1}_{,ij}\\&-\frac{C^n}{\Delta t}+(1-\theta_a)u_iC^n_{,i}-(1-\theta_d)D_{ij}C^n_{,ij}-(1-\theta_d)D^*_{ij}C^n_{,ij}=0\end{aligned} \tag{6-108}$$

这里：

n、$n+1$ 分别表示老时间水平与新时间水平；Δt 为时间步长；D^*_{ij} 为人工扩散张量；θ_a、θ_d 分别表示与对流项、弥散项、人工扩散项对应的时间权系数。

当 $\theta_a=0$ 时，式(6-108)将导出对称的正定矩阵，若不进行校正，该格式是不稳定的(Leismann，1989)。为了进行有效的校正，将(6-108)式在时间步长中点展开成泰勒展开式，即

$$\begin{aligned}&\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ij}-D^*_{ij}C_{,ij}\\&+(\theta_a-\frac{1}{2})\Delta t u_i\frac{\partial C_{,i}}{\partial t}-(\theta_d-\frac{1}{2})\Delta t D_{ij}\frac{\partial C_{,ij}}{\partial t}\end{aligned}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$-(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t D_{ij}^{*}\frac{\partial C_{,ji}}{\partial t}+o(\Delta t^2)=0 \tag{6-109}$$

上式中包含了3项与时间 Δt 有关的误差项，加上人工扩散项与引入人工扩散项之前的各项。为了将时间偏导数转换成空间偏导数，利用(6-107)式并对时间求偏导数

$$\frac{\partial C}{\partial t}=-u_iC_{,i}+D_{ij}C_{,ji} \tag{6-110}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 C}{\partial t^2}&=\frac{\partial}{\partial t}(-u_iC_{,i}+D_{ij}C_{,ji})\\&=u_iu_jC_{,ji}-2u_kD_{ij}C_{,jik}+D_{kl}D_{ij}C_{,jilk}\end{aligned} \tag{6-111}$$

将偏导数代入(6-109)式得到

$$\begin{aligned}&\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ji}-D_{ij}^{*}C_{,ji}\\&-(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t u_iu_jC_{,ji}+(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t D_{jk}u_iC_{,ik}\\&+(\theta_d-\frac{1}{2})\Delta t u_kD_{ij}C_{,jik}-(\theta_d-\frac{1}{2})\Delta t D_{ik}D_{ij}C_{,jikl}\\&-(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t D_{ij}^{*}\frac{\partial C_{,ji}}{\partial t}+o(\Delta t^2)=0\end{aligned} \tag{6-112}$$

在 $\theta_u=\frac{1}{2}$，$\theta_d=\frac{1}{2}$，$D_{ij}^{*}=0$ 时，上式是具有二阶截断误差的 Crank-Nicolson 格式，一般能导出稳定的解。对中心加权格式的任何偏离将会降低求解的精度，其中对流项最敏感。当 $\theta_u>\frac{1}{2}$ 时数值弥散将加强，而 $\theta_u<\frac{1}{2}$ 时若不进行校正则解会变得不稳定。当偏离 Crank-Nicolson 加权格式时，弥散项的作用变得很微弱和不敏感。

为了获取对称的矩阵，须将对流项置于老的时间水平($\theta_u=0$)上，这样破坏了 Crank-Nicolson 格式的二阶截断误差精度。但是可以通过适当地选择 D_{ij}^{*} 与 θ_d，可以消除上述引入的误差，重新获得至少是对流项具有二阶精度。

为了评价对流项所引起的误差，将(6-112)式中各项归并后得到

$$\begin{aligned}&\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ji}\\&-[D_{ij}^{*}+(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t u_iu_j]C_{,ji}\\&+[(\theta_u+\theta_d-1)\Delta t u_kD_{ij}]C_{,jik}\\&-(\theta_d-\frac{1}{2})\Delta t D_{ik}D_{ij}C_{,jikl}\\&-(\theta_u-\frac{1}{2})\Delta t D_{ij}^{*}\frac{\partial C_{,ji}}{\partial t}\\&+o(\Delta t^2)=0\end{aligned} \tag{6-113}$$

当人工扩散项 D_{ij}^{*} 与弥散项权重 θ_d 采取如下形式时，因对流项取非中心权而引起的误差可消除：

$$D_{ij}^{*}=(\frac{1}{2}-\theta_u)\Delta t u_iu_j \tag{6-114}$$

$$\theta_d=1-\theta_u \tag{6-115}$$

当人工扩散项 D_{ij}^{*} 按式(6-114)计算时，(6-113)式第5行包含 D_{ij}^{*} 的误差是二阶的(因为包含 (Δt^2) 项)，可以忽略。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

对(6-113)式而言，只有当 $\theta_e=0$ 时，方可导出对称正定的系数矩阵，由此(6-114)、(6-115)可改写成

$$D_{ij}^{*}=\frac{\Delta t}{2}u_iu_j \tag{6-116}$$

$$\theta_d=1 \tag{6-117}$$

代入式(6-113)中得到

$$\begin{aligned}&\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ji}\\&\quad-\frac{1}{2}\Delta tD_{ik}D_{ij}C_{,jki}\\&\quad+o(\Delta t^2)=0\end{aligned} \tag{6-118}$$

上式第2行是弥散项采取非中心加权所引起的误差，它的存在使上式只具有一阶精度。但是，上式却获得了对数值弥散非常敏感的对流项的二阶精度。与标准的 Crank-Nicolson 格式的数值计算相比说明，一阶弥散误差没有对计算结果引起明显影响，因此这种格式具有近似的二阶精度。

式(6-116)所定义的人工扩散项是一种有效的校正。没有这种校正，在对流项占主导地位时会引起数值弥散与过量。据式(6-117)弥散项取隐式对数值弥散没有明显影响，却显著地提高了求解的精度。

取老时间水平对流项($\theta_e=0$，显式)，新时间水平上的弥散项($\theta_d=1$，隐式)，新老时间水平中间的人工扩散项($\theta_e=\frac{1}{2}$)，式(6-108)写成

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u_iC_{,i}-D_{ij}C_{,ji}-D_{ij}^{*}C_{,ji}=0 \tag{6-119}$$

上式即为 Leismann 和 Frind(1989)提出的引入人工扩散量和加权的对流-弥散方程。

§6-4-6 小结

有限单元法和有限差分法是求解溶质运移问题的主要数值方法，对于以弥散为主或对流不占优势情况下的对流-弥散方程而言，它们的解的精度是足够的。在对流-弥散方程中的对流项占主导地位时，有限单元法与有限差分法都会遇到困难，求解方程时会产生过量及数值弥散。如果不能够有效地克服这些数值困难，必然大大地影响求解的有效性和精确性。为了从根本上解决过量与数值弥散，许多研究者通过理论分析或计算实践，寻求特殊的处理方法。以上介绍了几种常用的方法，现做一简要回顾。

上游加权法。如果在对流项的数值化过程中乘上一个适当的权因子，数值弥散或过量可以得到改善或消除。上游加权法是从方程各系数之间的关系引出的，它具有一定的物理意义。例如一维差分问题，对流项浓度 C 在某断面，例如 $x_{i-\frac{1}{2}}$ 断面的中心差分意味着对流项的浓度在 Δt 时段内均以 i 与 $i-1$ 两格点的平均浓度，即 $\frac{1}{2}(C_i+C_{i-1})$ 通过 $x_{i-\frac{1}{2}}$ 断面，该断面的浓度显然会向上游格点的浓度 C_{i-1}($u>0$ 时)变化，这就是上游加权法的实质，由此原理出发，可导出权因子的确切取值。上游加权有限差分法可以避免过量，但解的精度却降低了，增大了数值弥散。上游加权法无力同时解决降低过量与减小数值弥散这两个问题，只好在两者之间取折衷。上游加权有限元法将权加在结点的连线上，而这些连线不一定是流动方向，却使数值弥散增大，有人称之为“侧风现象”。为了消除“侧风现象”，一些作者提出了改进。孙纳正等(1989)提出了一

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

种基于多单元均衡的上游加权方法。

特征值方法。当对流-弥散方程中的对流项占主导地位时，方程的性质很像忽略了弥散项（二阶导数项）的纯对流方程，即接近于一个一阶双曲线方程。这启发人们利用解双曲线的特征值方法求解对流-弥散方程。特征值方法概念简单，也能处理各种复杂条件，因此在水质模拟的早期为许多研究者所使用（孙纳正，1989）。美国地质调查局（USGS）将 Konikow 与 Bredehoeft 发展的二维溶质运移特征值有限元方法（MOC）列为推广项目。Zheng（1991）在他设计的三维有限差溶质运移（MT3D）软件说明书中，详细地论述了一般特征值方法（MOC）、修正特征值方法（MMOC）及混合特征值方法（HMOC）。黄康乐（1987）提出了特征值方法与交替方向解法相结合，研究了饱和—非饱和土壤中水盐的运动。将特征值方法进行推广还是有一定的困难，这是因为特征值方法存在着许多必须特殊处理的情况，因而计算程序冗长，非常费机时。

动坐标系方法与网格变形方法。上述的上游加权法与特征值方法是在固定的坐标网格上求解，其格点或结点的浓度取值，或者用落在网格或单元上的若干个特征点的浓度计算或者经过插值而获得，都带来了一定的误差。为了提高计算精度，一些作者提出了用运动的坐标系方法及网格变形方法（Thomson，1984；杨金忠，1985），这些方法解对流项占主要地位的对流-弥散方程比较有效，不仅消除了过量现象，还保持了较高的精度。由于需将在动坐标系中算得的结果转换到或“投影”到固定的坐标系中，以及变形网格中由于结点位置随时间的变化，因而基函数以及方程组的系数都需依赖于时间，每一个时间步长都需重新计算，所以明显地增大了计算工程量。

随机步行法。其基本思想是将溶质运移视为大量示踪剂特征点运动的平均结果。每个特征点做两种运动：一种是对流，即特征点按平均流速运动；一种是弥散，即特征点围绕着平均运动的起伏，具有随机性。当模型中考虑的特征点足够多时，能够大体上刻画出溶质运移过程。该方法的优点是特征点在研究域中连续运动，计算浓度值时，可在感兴趣的部分上进行统计特征点的数量，没必要在每一时间步长内计算所有区域上的浓度。Kinzelbach（1992）将随机步行方法与有限差分法、有限单元法及特征值法进行了详细的比较研究，最近他们将这种方法与美国地质调查局所推广的三维有限差水流程序 MODFLOW 结合在一起，开发出 MODWALK 软件。随机步行法的缺点是需要非常宏大的示踪剂质点数目，若数目不够多，统计出的浓度解会出现粗糙、跳动等。

引入人工扩散量方法。众所周知，因对流项的处理不当常导出非对称正定的系数矩阵，给求解方程组带来困难。若将对流项以老时间水平上的值，由此而产生的误差通过引入人工扩散系数变量并根据控制方程的泰勒展开式在时间步长内优化赋权，可获得对称矩阵，并可使用一般的对称矩阵方程求算方法。定义并引入人工扩散项是一种有效的校正，若没有这种校正，在对流项占主导地位时会引起数值弥散与过量。通过适当地选取人工扩散项 D_L^* 与弥散项的权系数 θ_t，从而获得了对数值弥散非常敏感的对流项的二阶精度，但是导出了只有一阶截断误差的弥散项。因此该方法比较适合空间剖分单元较大、时间步长也较长的大尺度水质模型。

综上所述，每一种方法都有各自的特点，因此在求解一个具体的对流-弥散问题时，究竟采取哪种方法，要分析具体的情况而确定。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

第七章　地下水水质模型及其应用

前六章系统地介绍了水动力弥散的概念、有关参数、解析解与求参以及各种数值解法。我们知道，水量模型已经被广泛地用于求解各类有关的水文地质问题，并取得了成功。随着地下水水质问题的日趋严重，自 70 年代末以来，人们开始将水质模型应用于解决与水动力弥散有关的水文地质问题。尽管由于野外含水层的非均质、人为影响以及水动力弥散理论的不完善，使水质模型的应用受到了限制，但越来越多的人正在探索将水质模型用于解决地下水污染的模拟与预测、滨海含水层中的海水入侵、核废物的处置等水文地质问题，大多数都取得了成功。

本章先介绍水动力弥散型水质模型（即对流-弥散型水质模型）、纯对流型水质模型。鉴于集中参数模型已失去实际的物理意义，这里不再介绍。然后介绍地下水水质模型应用的一般过程，并结合两个代表性的实例进行论述。最后对水质模型应用的有关问题进行讨论。

§7-1　对流-弥散型水质模型

对流-弥散方程中包含着水动力弥散系数 D、孔隙平均流速 u，水密度 ρ 及源汇项等参数。若能确定出这些参数，则可以根据定解条件求得溶质的浓度分布。但是各参数之间相互依赖，因此仅利用单个水动力弥散方程还不能解决水质问题。

对流-弥散型水质模型应由下列方程组构成：

(1)对流-弥散方程(水动力弥散方程)

$$\frac{\partial C}{\partial t}=\operatorname{div}\left\{\tilde{D}\cdot\rho\cdot\operatorname{grad}\left(\frac{C}{\rho}\right)\right\}-\operatorname{div}(C\vec{u})+I \tag{7-1}$$

(2)连续性方程(质量守恒方程)

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\operatorname{div}(\rho\vec{u}) \tag{7-2}$$

(3)运动方程(Darcy 定律)

$$\vec{u}=-\frac{\tilde{k}}{n\mu}(\operatorname{grad}p+\rho g\cdot\operatorname{grad}z) \tag{7-3}$$

或写成分量形式

$$u_i=-\frac{k_{ij}}{n\mu}\left(\frac{\partial p}{\partial x_j}+\rho g\frac{\partial z}{\partial x_j}\right)\qquad(i,j=1,2,3) \tag{7-3}'$$

(4)状态方程

$$\rho=\rho(C,p) \tag{7-4}$$

$$\mu=\mu(C,p) \tag{7-5}$$

(5)相应的初始条件和边界条件

其中，C 表示溶质浓度；p 表示流体压力；ρ 和 μ 分别表示水的密度和粘度；$\tilde{D}$ 是水动力弥

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

散系数；k 是渗透率；n 表示有效孔隙率；$\vec{u}$ 是平均孔隙流速；I 是源汇项。在式(7-3)′中采用了爱因斯坦求和约定。

说明：

(1)上述方程组中 $\tilde{D}$、I、$\tilde{k}$(或 k_{ij})、n、状态方程、初始条件和边界条件是已知的或给定的，是输入的参数或关系。在 5 个方程所构成的方程组中，C、ρ、$\vec{u}$、μ 和 p 5 个未知量是待求的。若(7-3)式改用(7-3)′式，则方程个数有 7 个，未知数也相应有 7 个，原来的 $\vec{u}$ 变为 u_x、u_y 和 u_z。

(2)由状态方程看出，自变量中无温度 T，实际上温度 T 对于 ρ、μ 与 D_d 都是有明显影响的，特别是 μ 和 D_d。温度 T 对 ρ、μ 和 D_d 的影响较 C、p 更大。但是若将温度引入，问题会变得十分复杂。例如，多孔介质中热量迁移问题的温度变化是研究的主要对象，因此该问题要比水动力弥散问题的研究更为复杂。故我们在这里作了“等温条件”的假设。对于低浓度的不可压缩流体，式(7-4)和(7-5)可近似地写成下列线性关系

$$\rho = \rho_0 + \alpha(C - C_0)$$

$$\mu = \mu_0 + \beta(C - C_0)$$

其中，ρ_0 与 μ_0 表示 $C=C_0$ 时刻的 ρ 与 μ。

(3)关于运动方程(7-3)式，这里写的是 Darcy 定律，即该模型假定渗流满足 Darcy 定律。但这里的 Darcy 定律不写成

$$\vec{u} = -\frac{\tilde{k}}{n} \cdot \mathrm{grad}H$$

的形式，这是因为考虑了 μ、ρ 的变化，则上式可写为

$$\vec{u} = -\frac{1}{n} \cdot \tilde{k} \cdot \frac{\gamma}{\mu} \cdot \mathrm{grad}\left(\frac{p}{\gamma} + z\right)$$

$$= -\tilde{k}\frac{\gamma}{n\mu} \cdot \left(\frac{\gamma \cdot \mathrm{grad}p - p\mathrm{grad}\gamma}{\gamma^2} + \mathrm{grad}z\right)$$

考虑到 $\mathrm{grad}\gamma \ll \mathrm{grad}p$，则上式简写为

$$\vec{u} \doteq -\tilde{k} \cdot \frac{1}{n\mu}(\mathrm{grad}p + \rho g \cdot \mathrm{grad}z)$$

上式即为(7-3)式。其中 γ 表示容重。

(4)连续性方程(质量守恒方程)(7-2)式中，$\rho\vec{u}$ 是质量速度(质量比流量)，$\mathrm{div}(\rho\vec{u})$ 是单位体积流出的质量流量。因为无源汇，所以它等于密度 ρ 随时间的变化率。“－”号表示两者的变化方向相反。这里实际上假定多孔介质不变形，即有效孔隙率 n 为定值。若考虑 n 的变化，则是

$$\frac{\partial(n\rho)}{\partial t} = -\mathrm{div}(\rho\vec{u}n)$$

(5)Fried(1975)称方程组(7-1)至(7-5)为对流-弥散系统，再加上有关的初始条件和边界，就构成了地下水水质的对流-弥散的数学模型。

该模型除了受等温条件和渗流服从 Darcy 定律两条件的限制之外，其他都是任意的。即：①多孔介质可以是非均质的或各向异性的；②流体可以是非均质的，ρ、μ 可以随溶质浓度 C 和压力 p 而变化；③当然，区域的几何形状、初始条件和边界条件是任意的。

求解上述水动力弥散问题是十分复杂的。这是因为：(7-1)式中，$\tilde{D}$ 依赖于 $\vec{u}$；(7-3)式中，$\vec{u}$ 依赖于 μ、ρ；(7-4)与(7-5)式中，μ、ρ 依赖于 C、p；(7-1)中 C 又取决于 $\tilde{D}$、ρ、$\vec{u}$。这些因素互相依赖，哪个变量也不能首先独立给出，因此造成求解的困难。

由于(7-1)式中的弥散系数 $\tilde{D}$ 依赖于溶质浓度 C 和粘滞系数 μ，所以它是一个非线性偏微

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

分方程系统。

上述的各变量之间互相依赖关系主要是 μ、ρ 取决于 C、p，因此可将该问题分为两类：一是一般情况，μ、ρ 是 C 的函数，例如滨海含水层中的海水入侵问题；二是示踪剂情况，μ、ρ 是常数且与 C、p 无关，当溶质浓度很低时，大多数情况满足此假定，例如地下水污染物的迁移问题。

§7-1-1 一般情况

由于弥散系数 $\tilde{D}$ 依赖于 $\vec{u}$，$\vec{u}$ 与 ρ、μ 有关，而 ρ、μ 又取决于 C，即 $\tilde{D}$、$\vec{u}$ 与 C 相关，使得水动力弥散方程是复杂的非线性方程，例如海水入侵问题。这种问题的求解要复杂的多，通常需要采用迭代法求解。具体求解步骤（见图 7-1）如下：

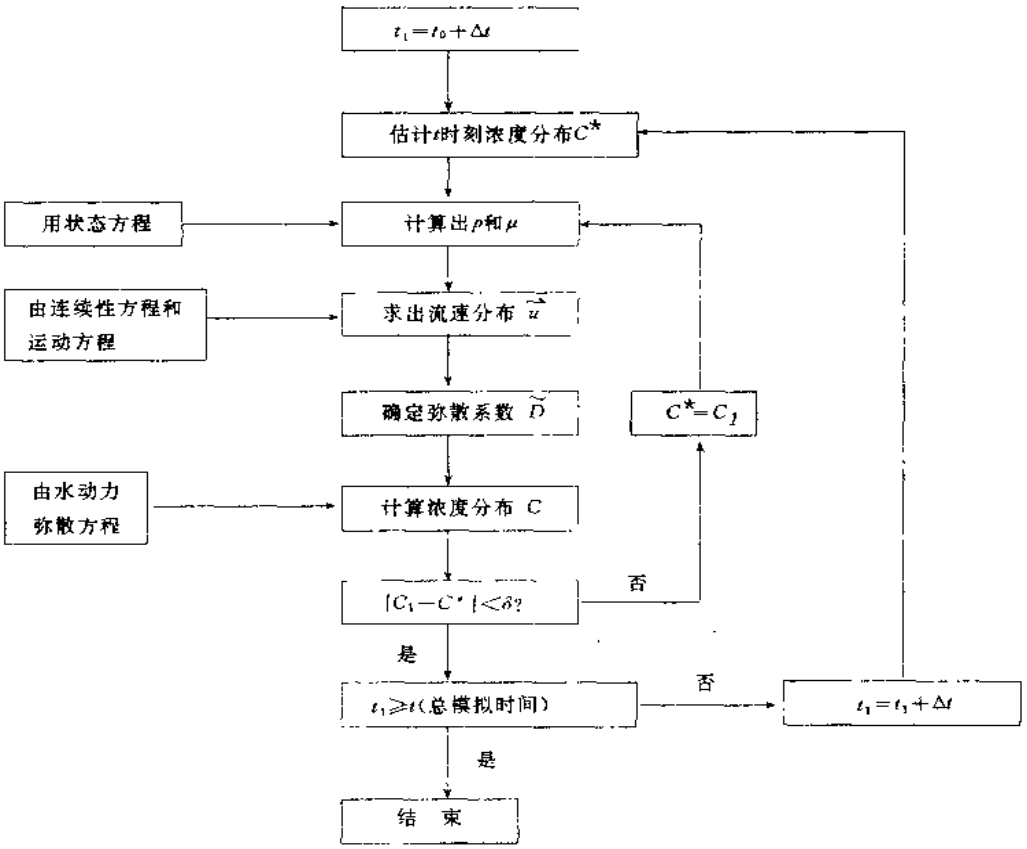


图 7-1 一般情况下水质模型计算框图

(1)首先估计出 $t+\Delta t$ 时刻浓度 C 的分布（称首次猜测值，记为 C^*）。通常采用两种办法：①根据前面几个时阶求得的浓度 C 分布外推而得；②直接取用 t 时刻的浓度 C 分布。

(2)已知浓度 C 分布，依状态方程(7-4)与(7-5)式计算出 μ 和 ρ。

(3)已知 μ、ρ，将其代入运动方程(7-3)式中，与连续性方程(7-2)式一起，加上相应的边界条件和 t_1 时刻的水头 H（或 p）分布（相当于初始条件），求出流速 $\vec{u}$ 的分布。如同求解一般的渗流问题。

(4)根据流速 $\vec{u}$ 计算水动力弥散系数 $\tilde{D}$。先计算出 Peclet 数 $P_e(\frac{u_d}{D_d})$，依 $\frac{D_L}{D_d}$-P_e（或 $\frac{D_T}{u_d}$-P_e）确

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

定所在的 P_e 数区号，再以不同关系确定 $\bar{D}$。

(5)根据浓度 C 的边界条件和 t_1 时刻的浓度 C 分布(相当于初始条件)，求解对流-弥散方程(7-1)式，从而解出 C 的分布。

(6)将求得的浓度 C 与步骤(1)中估计的 C^* 作比较，若所有结点都满足

$$|C - C^*| < \delta$$

或

$$\frac{|C - C^*|}{C} < \varepsilon$$

其中，δ 是规定的一个足够小的数值，它反映了解的精度。这时 C 值就作为 $t_1+\Delta t$ 时刻的解。否则，C 被认为是第一次迭代的结果，是第一次改进的猜测值。再从此出发，重复步骤(1)至(6)，直到所有结点的迭代浓度满足要求为止。这时它就是 $t+\Delta t$ 时刻的解。

为了对一般情况下地下水水质模型的求解过程有个系统的认识，下面以考虑密度变化的海水入侵过渡带模型为例，阐明如何建立水流与水质的数值模型及其耦合。

对于海水入侵模型，海水的氯离子浓度相对淡水而言非常大，海水与淡水的密度也存在着明显的差异，当含水层厚度较大时，海水在密度驱动下的流动作用更加明显，因此只有同时考虑过渡带的存在及流体浓度变化对流体速度的影响，建立非均匀流体的对流-弥散模型才能正确地反映海水入侵的过程。

非均匀流体的水流方程中体现了浓度变化对密度分布的影响，而密度变化又引起水头的变化。在非线性的溶质运移问题中常把连续性方程用压力的形式表示，因此密度是浓度和压力的函数。由于海水与淡水相比，密度(1.025g/cm^3)与浓度(约 16g/L)变化不太大，仍可近似地将其视为稀释溶液，可忽略动力粘滞系数的变化。为了简化计算，便于得出压力的表达式，通常采取密度仅是浓度线性函数的假设。我们可写出如下关系式

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_s - \rho_0} = \frac{C - C_0}{C_s - C_0} \tag{7-6}$$

式中：ρ 为溶液密度；ρ_s 为与最大海水浓度 C_s 所对应的密度；ρ_0 为参考密度(淡水密度)；C 为溶液浓度；C_s 为海水最大浓度；C_0 为淡水浓度。

由于淡水浓度(如氯离子浓度)相对于海水浓度很小(淡水一般为 50mg/L 左右，海水高达 16 000mg/L 左右)，(7-6)式可近似地写成

$$\frac{\rho - \rho_0}{\rho_s - \rho_0} = \frac{C}{C_s} \tag{7-7}$$

整理后得

$$\rho = \rho_0\left(1 + \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0} \cdot \frac{C}{C_s}\right) \tag{7-8}$$

设

$$\varepsilon = \frac{\rho_s - \rho_0}{\rho_0} \tag{7-9}$$

式中：ε 表示密度差率。(7-8)式写成

$$\rho = \rho_0\left(1 + \varepsilon \cdot \frac{C}{C_s}\right) \tag{7-10}$$

(7-10)式是在许多文献中所见到的形式，据此可写出考虑密度变化影响的水流方程的较简捷形式。

考虑水头、密度与浓度三者相互影响的可溶混咸淡水中溶质运移问题，需要由两个偏微分

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

方程描述，一是考虑密度随浓度不断变化的液体的流动，二是溶质（一般用氯离子）的运移。

考虑密度不断改变的水流方程在剖分层面较平缓时可表达如下（Huyakorn 等，1987）

$$\frac{\partial}{\partial x}(K_{xx}\frac{\partial H}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(K_{yy}\frac{\partial H}{\partial y})+\frac{\partial}{\partial z}\left[K_{zz}(\frac{\partial H}{\partial z}+\Psi C)\right]=\mu_s\frac{\partial H}{\partial t}+\varphi\cdot\Psi\frac{\partial C}{\partial t}-\frac{\rho}{\rho_0}\cdot q\qquad(x,y,z)\in D\qquad(7\text{-}11)$$

边界条件

$$H(x,y,z,t)\Big|_{\Gamma_1}=\overline{H}(x,y,z,t)\qquad(7\text{-}12)$$

$$H(x,y,z,t)\Big|_{\Gamma_{2,1}}=z\qquad(7\text{-}13)$$

$$K_{zz}\frac{\partial H}{\partial z}\Big|_{\Gamma_{2,1}}=\varepsilon'-\mu_d\frac{\partial H}{\partial t}\Big|_{\Gamma_{2,1}}\qquad(7\text{-}14)$$

$$K_{zz}\frac{\partial H}{\partial z}\Big|_{\Gamma_{2,2}}=0\qquad(7\text{-}15)$$

式中：x,y,z 为笛卡尔坐标轴；t 为时间；H 为参考水头（即折算为淡水的水头）；K_{xx},K_{yy},K_{zz} 为坐标轴方向的主渗透系数；μ_s 为单水贮水系数；μ_d 为重力给水度；φ 为孔隙率；Ψ 为密度耦合系数，$\Psi=\frac{\varepsilon}{C_s}$；$q$ 为单位体积井流量，抽水时取正号；Γ_1 为第一类边界，渗流区与海水垂向接触界面；$\Gamma_{2,1}$ 为潜水面边界；$\Gamma_{2,2}$ 为零流量边界；ε' 为降雨入渗补给量或蒸发量。

可用一般的描述溶质运移的对流-弥散方程描述海水入侵模型中盐分的运移，即

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zx}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\&+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yz}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\&-U_x\frac{\partial C}{\partial x}-U_y\frac{\partial C}{\partial y}-U_z\frac{\partial C}{\partial z}=\frac{\partial C}{\partial t}\end{aligned}\qquad(7\text{-}17)$$

式中：$D_{xx},D_{yy},D_{zz},D_{xy},D_{yx},D_{xz},D_{zx},D_{yz},D_{zy}$ 为弥散系数张量分量，$D_{xy}=D_{yx}$，$D_{xz}=D_{zx}$，$D_{yz}=D_{zy}$；U_x,U_y,U_z 为溶质孔隙平均流速

$$u_x=-\frac{K'_{xx}}{\varphi}\cdot\frac{\partial H}{\partial x}\qquad(7\text{-}18)$$

$$u_y=-\frac{K'_{yy}}{\varphi}\cdot\frac{\partial H}{\partial y}\qquad(7\text{-}19)$$

$$u_z=-\frac{K'_{zz}}{\varphi}\left(\frac{\partial H}{\partial z}-\Psi C\right)\qquad(7\text{-}20)$$

上式中：K'_{xx},K'_{yy},K'_{zz} 为参考渗透系数，它们与实际渗透系数 K_{xx},K_{yy},K_{zz} 有如下转换关系

$$K'_{xx}=\frac{\rho_0}{\rho}\cdot K_{xx}\qquad(7\text{-}21)$$

$$K'_{yy}=\frac{\rho_0}{\rho}\cdot K_{yy}\qquad(7\text{-}22)$$

$$K'_{zz}=\frac{\rho_0}{\rho}\cdot K_{zz}\qquad(7\text{-}23)$$

上述给出了密度与浓度的关系式（7-10）、考虑密度影响的水流方程（7-11）及描述盐分运移的对流-弥散方程（7-17）。通过联立求解这 3 条方程式，将密度、水头与浓度分布有机地耦合在一起，得出过渡带的分布范围及水头与浓度值。

1. 水流数值模型

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

选用任意六面体结点水头的近似函数

$$h(x,y,z,t)=\sum_{j=1}^{N}H_j(t)\cdot N_j(x,y,z) \tag{7-24}$$

式中：N 为研究区域剖分的结点总数；$H_j(t)$为结点 j 在 t 时间水平上的水头；$N_j(x,y,z)$为基函数。

水流问题在渗流域 D 上的迦辽金有限元方程为

$$\iiint_D\left\{\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial H}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial H}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial H}{\partial z}+\Psi C\right)-\mu_s\frac{\partial H}{\partial t}-\varphi\Psi\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\rho}{\rho_0}q\right\}\cdot N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z=0 \qquad (L=1,2,\cdots,N) \tag{7-25}$$

式中：N_L 表示结点 L 处的基函数。

根据格林公式变换，(7-25)式可写成

$$\begin{aligned}&\iiint_D\left[K_{xx}\frac{\partial H}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+K_{yy}\frac{\partial H}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}+K_{zz}\left(\frac{\partial H}{\partial z}+\Psi C\right)\frac{\partial N_L}{\partial z}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\iiint_D\mu_s\cdot\frac{\partial H}{\partial t}\cdot N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&=-\iiint_D\varphi\Psi\frac{\partial C}{\partial t}N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z+\iiint_D\frac{\rho}{\rho_0}\cdot qN_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\iint_\Gamma\left[K_{xx}\frac{\partial H}{\partial x}\cdot S_x+K_{yy}\frac{\partial H}{\partial y}\cdot S_y+K_{zz}\left(\frac{\partial H}{\partial z}+\Psi C\right)S_z\right]N_L\mathrm{d}s\\&=-\iiint_D\varphi\Psi\frac{\partial C}{\partial t}N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z+\iiint_D\frac{\rho}{\rho_0}\cdot qN_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\iint_{\Gamma_{2-1}}(\varepsilon'-\mu_d\cdot\frac{\partial H}{\partial t})N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y \qquad (L=1,2,\cdots,N)\end{aligned} \tag{7-26}$$

设 D_L 为结点 L 的子域，其上包括有共 m 个单元，根据基函数的性质有，并考虑到 $\rho=\rho_0(1+\Psi C)$〔将(7-16)式代入(7-10)式〕则有

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{m_L}\iiint_e\left[K_{xx}\frac{\partial H^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+K_{yy}\frac{\partial H^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+K_{zz}\frac{\partial H^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\sum_{e=1}^{m_L}\iiint_e\mu_s\frac{\partial H^e}{\partial t}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&=-\sum_{e=1}^{m_L}\iiint_e K_{zz}\Psi C^e\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad-\sum_{e=1}^{m_L}\iiint_e\varphi\Psi\frac{\partial C^e}{\partial t}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\sum_{e=1}^{m_L}\iiint_e(1+\Psi C^e)q^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\\&\quad+\sum_{e=1}^{m_L}\iint_{\Gamma_{2-1}}(\varepsilon'^e-\mu_d\frac{\partial H^e}{\partial t})N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y \qquad (L=1,2,\cdots,N)\end{aligned} \tag{7-27}$$

式中：H^e、C^e、ρ^e 分别表示单元 e 上的水头、浓度与密度；N_L^e 表示单元 e 上 L 结点的基函数；q^e 表示单元 e 上的开采强度；ε'^e表示 Γ_{2-1}边界与单元 e 的公共面上的单位面积降水入渗量。

单元 e 上的水头可用相应结点上的水头表示

$$H^e(x,y,z,t)\approx\sum_{l=1}^{8}H_l^e(t)N_l^e(x,y,z) \tag{7-28}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

将上式代入(7-27)中并合并整理得

$$\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iiint_{e}\left(K_{xx}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+K_{yy}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+K_{zz}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z H_I^e(t)\right]\right\}$$

$$+\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\left(\iiint_{e}\mu_s N_I^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z+\iint_{\Gamma_{2-1}}\mu_d N_I^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right)\cdot\frac{\mathrm{d}H_I^e(t)}{\mathrm{d}t}\right]\right\}$$

$$=-\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\iiint_{e}K_{zz}\Psi C^e\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z-\iiint_{e}\varphi\Psi\frac{\partial C^e}{\partial t}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right.$$

$$\left.+\iiint_{e}(1+\Psi C^e)q^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\right\}$$

$$+\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\iint_{\Gamma_{2-1}}\varepsilon^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}\qquad(L=1,2,\cdots,N)\tag{7-29}$$

上式可简写成

$$\sum_{e=1}^{m_L}\left[P_{L_1}^e H_1^e+P_{L_2}^e H_2^e+P_{L_3}^e H_3^e+P_{L_4}^e H_4^e+P_{L_5}^e H_5^e+P_{L_6}^e H_6^e+P_{L_7}^e H_7^e+P_{L_8}^e H_8^e\right]$$

$$+\sum_{e=1}^{m_L}\left[S_{L_1}^e\frac{\mathrm{d}H_1^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_2}^e\frac{\mathrm{d}H_2^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_3}^e\frac{\mathrm{d}H_3^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_4}^e\frac{\mathrm{d}H_4^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_5}^e\frac{\mathrm{d}H_5^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_6}^e\frac{\mathrm{d}H_6^e}{\mathrm{d}t}\right.$$

$$\left.+S_{L_7}^e\frac{\mathrm{d}H_7^e}{\mathrm{d}t}+S_{L_8}^e\frac{\mathrm{d}H_8^e}{\mathrm{d}t}\right]=\sum_{e=1}^{m_L}F_L^e\qquad(L=1,2,\cdots,N)\tag{7-30}$$

其中，

$$P_{LI}^e=\iiint_{e}\left[K_{xx}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+K_{yy}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+K_{zz}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right]\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\tag{7-31}$$

$$S_{LI}^e=\iiint_{e}\mu_s N_I^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z+\iint_{\Gamma_{2-1}}\mu_d N_I^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\tag{7-32}$$

$$F_L^e=-\iiint_{e}K_{zz}\Psi C^e\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

$$-\iiint_{e}\varphi\Psi\frac{\partial C^e}{\partial t}N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

$$+\iiint_{e}(1+\Psi C^e)q^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$

$$+\iint_{\Gamma_{2-1}}\varepsilon^e N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\qquad(I=1,8;\quad L=1,2,\cdots,N)\tag{7-33}$$

记第 L 条方程中 H_{MP} 的系数为 P_{LMP}，$\frac{\mathrm{d}H_{MP}}{\mathrm{d}t}$ 的系数为 S_{LMP}($MP=1,2,\cdots,N$)，则式(7-30)改写成

$$P_{L_1}H_1+P_{L_2}H_2+\cdots+P_{L_N}H_N+S_{L_1}\frac{\mathrm{d}H_1}{\mathrm{d}t}+S_{L_2}\frac{\mathrm{d}H_2}{\mathrm{d}t}+\cdots+S_{L_N}\frac{\mathrm{d}H_N}{\mathrm{d}t}=F_L\tag{7-34}$$

将与已知一类边界结点有关的已知项移到方程的右端并入 F_L 中则有

$$P_{L_1}H_1+P_{L_2}H_2+\cdots+P_{L_n}H_n+S_{L_1}\frac{\mathrm{d}H_1}{\mathrm{d}t}+S_{L_2}\frac{\mathrm{d}H_2}{\mathrm{d}t}+\cdots+S_{L_n}\frac{\mathrm{d}H_n}{\mathrm{d}t}=F_L\tag{7-35}$$

这里 n 为待求结点数，写成矩阵形式有

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$[P]\{H\}+[S]\left\{\frac{dH}{dt}\right\}=\{F\} \tag{7-36}$$

式中：$[P]$为n阶系数方阵，由(7-31)式来确定其矩阵的元素，称之为导水矩阵；$[S]$为n阶系数方阵，由(7-32)式确定其矩阵的元素，称之为储水矩阵；$\{H\}$为未知结点水头的列矩阵；$\left\{\frac{dH}{dt}\right\}$为未知结点水头关于时间一阶导数的列矩阵；$\{F\}$为由(7-33)式确定其矩阵的元素，包含了密度项、边界项、源汇项及已知一类边结点上水头的列矩阵。

对(7-36)式中的一阶导数用差商代替

$$\left\{\frac{dH}{dt}\right\}\approx\frac{1}{\Delta t}(\{H^{t+\Delta t}\}-\{H^t\}) \tag{7-37}$$

将(7-37)代入(7-36)中，并取隐式差分得到以H为未知量的方程组

$$\left([P]+\left[\frac{S}{\Delta t}\right]\right)\{H^{t+\Delta t}\}=\left[\frac{S}{\Delta t}\right]\{H^t\}+\{F\} \tag{7-38}$$

求解矩阵所表示的代数方程组(7-38)即可由t时刻水头求出下一时刻$t+\Delta t$时的水头。

2. 盐分运移数值模型

选用上章介绍过的引入人工弥散量方法建立盐分运移的数值模型。为了清楚起见，将(2-32)式写成

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D^*_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D^*_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D^*_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial z}\left(D^*_{zx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D^*_{yz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D^*_{zy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\
&-u_x\frac{\partial C}{\partial x}-u_y\frac{\partial C}{\partial y}-u_z\frac{\partial C}{\partial z}\\
&=\frac{\partial C}{\partial t}
\end{aligned} \tag{7-38}$$

选用浓度的近似表达式

$$C(x,y,z,t)=\sum_{j=1}^{N}C_j(t)N_j(x,y,z) \tag{7-39}$$

式中：$C_j(t)$表示结点j在t时间水平上的浓度；其他符号意义同前。

盐分运移问题在渗流域D上的迦辽金有限元方程为

$$\begin{aligned}
\iiint\Bigg[&\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D^*_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D^*_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)\\
&+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D^*_{yx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial x}\left(D^*_{xz}\frac{\partial C}{\partial z}\right)
\end{aligned}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz}^{*}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(D_{yz}^{*}\frac{\partial C}{\partial z}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zy}^{*}\frac{\partial C}{\partial y}\right)$$
$$-u_x\frac{\partial C}{\partial x}-u_y\frac{\partial C}{\partial y}-u_z\frac{\partial C}{\partial z}-\frac{\partial C}{\partial t}\Big)N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$=0 \qquad (L=1,2,\cdots,N) \tag{7-40}$$

式中：N_L 表示结点 L 处的基函数；$D_{xy}=D_{yx}$，$D_{xz}=D_{zx}$，$D_{yz}=D_{zy}$，$D_{xy}^{*}=D_{yx}^{*}$，$D_{xz}^{*}=D_{zx}^{*}$，$D_{yz}^{*}=D_{zy}^{*}$。

根据格林公式，上式可写成

$$\iiint_D\Big(D_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}+D_{zz}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}$$
$$+D_{xy}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}+D_{yx}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{xz}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}$$
$$+D_{zx}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{yz}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}+D_{zy}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$+\iiint_D\Big(D_{xx}^{*}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{yy}^{*}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}+D_{zz}^{*}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}$$
$$+D_{xy}^{*}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}+D_{yx}^{*}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{xz}^{*}\frac{\partial C}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}$$
$$+D_{zx}^{*}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial x}+D_{yz}^{*}\frac{\partial C}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial z}+D_{zy}^{*}\frac{\partial C}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$+\iiint_D\Big(u_x\frac{\partial C}{\partial x}+u_y\frac{\partial C}{\partial y}+u_z\frac{\partial C}{\partial z}+\frac{\partial C}{\partial t}\Big)N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$$
$$+\iint_{B_{2-1}}\varepsilon'(C-C')N_L\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$
$$=0 \qquad (L=1,2,\cdots,N) \tag{7-41}$$

根据基函数的性质则有

$$\sum_{e=1}^{m_L}\Big\{\iiint_e\Big(D_{xx}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{xy}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{yx}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{xz}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{zx}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{N_L^e}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\Big\}$$
$$+\sum_{e=1}^{m_L}\Big\{\iiint_e\Big(D_{xx}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{xy}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{yx}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{xz}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{zx}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}^{*}\frac{\partial C^e}{\partial z}\cdot\frac{N_L^e}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\Big\}$$
$$+\sum_{e=1}^{m_L}\Big\{\iiint_e\Big(u_x\frac{\partial C^e}{\partial x}+u_y\frac{\partial C^e}{\partial y}+u_z\frac{\partial C^e}{\partial z}+\frac{\partial C^e}{\partial t}\Big)N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\Big\}$$
$$=-\sum_{e=1}^{m_L}\Big\{\iint_{B_{2-1}}\varepsilon'(C^e-C^{e'})N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\Big\} \qquad (L=1,2,\cdots,N) \tag{7-42}$$

式中：C^e、N_L^e 分别表示结点 L 的子域单元 e 上的盐分浓度及权函数。

单元 e 上的浓度可用相应结点上的浓度表示

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$C^e(x,y,z,t) \approx \sum_{I=1}^{8} C_I^e(t) N_I^e(x,y,z) \tag{7-43}$$

将(7-43)式代入(7-42)中，整理得

$$\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iiint_e\left(D_{xx}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right.\right.\right.\\
&\quad+D_{xy}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{yx}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{xz}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\\
&\quad\left.\left.\left.+D_{zx}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}zC_I^e\right]\right\}\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iiint_e\left(D_{xx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right.\right.\right.\\
&\quad+D_{xy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{yx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}-D_{xz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\\
&\quad\left.\left.\left.+D_{zx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}zC_I^e\right]\right\}\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iiint_e\left(u_x\frac{\partial N_I^e}{\partial x}+u_y\frac{\partial N_I^e}{\partial y}+u_z\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\right)N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}zC_I^e\right]\right\}\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iiint_e N_I^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\frac{\partial C_I^e}{\partial t}\right]\right\}\\
&=\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\iint_{B_{2-1}}\varepsilon''C^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right\}-\sum_{e=1}^{m_L}\left\{\sum_{I=1}^{8}\left[\iint_{B_{2-1}}\varepsilon'C^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]\right\}
\end{aligned}$$

$$(L=1,2,\cdots,N) \tag{7-44}$$

上式可写成如下简略式

$$\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{m_L}\left[D_{L_1}^eC_1^e+D_{L_2}^eC_2^e+D_{L_3}^eC_3^e+D_{L_4}^eC_4^e+D_{L_5}^eC_5^e+D_{L_6}^eC_6^e+D_{L_7}^eC_7^e+D_{L_8}^eC_8^e\right]\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left[D_{L_1}^{*e}C_1^e+D_{L_2}^{*e}C_2^e+D_{L_3}^{*e}C_3^e+D_{L_4}^{*e}C_4^e+D_{L_5}^{*e}C_5^e+D_{L_6}^{*e}C_6^e+D_{L_7}^{*e}C_7^e+D_{L_8}^{*e}C_8^e\right]\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left[U_{L_1}^eC_1^e+U_{L_2}^eC_2^e+U_{L_3}^eC_3^e+U_{L_4}^eC_4^e+U_{L_5}^eC_5^e+U_{L_6}^eC_6^e\right.\\
&\quad\left.+U_{L_7}^eC_7^e+U_{L_8}^eC_8^e\right]\\
&+\sum_{e=1}^{m_L}\left[R_{L_1}^e\frac{\partial C_1^e}{\partial t}+R_{L_2}^e\frac{\partial C_2^e}{\partial t}+R_{L_3}^e\frac{\partial C_3^e}{\partial t}+R_{L_4}^e\frac{\partial C_4^e}{\partial t}+R_{L_5}^e\frac{\partial C_5^e}{\partial t}\right.\\
&\quad\left.+R_{L_6}^e\frac{\partial C_6^e}{\partial t}+R_{L_7}^e\frac{\partial C_7^e}{\partial t}+R_{L_8}^e\frac{\partial C_8^e}{\partial t}\right]\\
&=\sum_{e=1}^{m_L}F_L^e-\sum_{e=1}^{m_L}\left[E_{L_1}^eC_1^e+E_{L_2}^eC_2^e+E_{L_3}^eC_3^e+E_{L_4}^eC_4^e+E_{L_5}^eC_5^e\right.\\
&\quad\left.+E_{L_6}^eC_6^e+E_{L_7}^eC_7^e+E_{L_8}^eC_8^e\right]
\end{aligned}$$

$$(L=1,2,\cdots,N) \tag{7-15}$$

其中，

$$\begin{aligned}
D_{LI}^e=\iiint_e&\left(D_{xx}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}\right.\\
&\left.+D_{xy}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}-D_{yx}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{xz}\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\right.
\end{aligned}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$+D_{zz}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{7-46}$$

$$D_{LI}^{e*}=\iiint_e\Big(D_{xx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{zz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{xy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}+D_{yx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{xz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial x}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}$$
$$+D_{zx}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial x}+D_{yz}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial y}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial z}+D_{zy}^*\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\cdot\frac{\partial N_L^e}{\partial y}\Big)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{7-47}$$

$$U_{LI}^e=\iiint_e\Big(u_x\frac{\partial N_I^e}{\partial x}+u_y\frac{\partial N_I^e}{\partial y}+u_z\frac{\partial N_I^e}{\partial z}\Big)N_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{7-48}$$

$$R_{LI}^e=\iiint_e N_I^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z \tag{7-49}$$

$$F_L^e=\iint_{B_{2-1}}\varepsilon^eC^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{7-50}$$

$$E_{LI}^e=\iiint_{(B_{2-1})^e}\varepsilon^eN_I^eN_L^e\mathrm{d}x\mathrm{d}y \tag{7-51}$$

若记第 L 条方程中 C_P 的系数为 D_{LP}、D_{LP}^*、U_{LP} 及 E_{LP}，$\frac{\partial C}{\partial t}$ 的系数为 $R_{LP}(L=1,2,\cdots,N)$，则

$$D_{L_1}C_1+D_{L_2}C_2+\cdots+D_{L_N}C_N+D_{L_1}^*C_1+D_{L_2}^*C_2+\cdots+D_{L_N}^*C_N$$
$$+U_{L_1}C_1+U_{L_2}C_2+\cdots+U_{L_N}C_N+R_{L_1}\frac{\partial C_1}{\partial t}+R_{L_2}\frac{\partial C_2}{\partial t}+\cdots+R_{L_N}\frac{\partial C_N}{\partial t}$$
$$=F_L+E_{L_1}C_1+E_{L_2}C_2+\cdots+E_{L_N}C_N\qquad(L=1,2,\cdots,N) \tag{7-52}$$

将与已知浓度结点有关的已知项移到方程的右端并入 F_L 中，则有

$$D_{L_1}C_1+D_{L_2}C_2+\cdots+D_{L_n}C_n+D_{L_1}^*C_1+D_{L_2}^*C_2+\cdots+D_{L_n}^*C_n$$
$$+U_{L_1}C_1+U_{L_2}C_2+\cdots+U_{L_n}C_n+R_{L_1}\frac{\partial C_1}{\partial t}+R_{L_2}\frac{\partial C_2}{\partial t}+\cdots+R_{L_n}\frac{\partial C_n}{\partial t}$$
$$=F_L'+E_{L_1}C_1+E_{L_2}C_2+\cdots+E_{L_n}C_n \tag{7-53}$$

式中：n 为待求浓度结点的总数。上式可写成矩阵形式

$$[R]\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}+[U]\{C\}+[D]\{C\}+[D^*]\{C\}=\{F'\}+[E]\{C\} \tag{7-54}$$

式中：$[D]$是 n 阶弥散系数矩阵，各元素由式(7-46)确定；$[D^*]$是 n 阶人工扩散矩阵，由式(7-47)确定各元素；$[U]$是 n 阶流速矩阵，各元素由(7-48)确定；$[R]$是 n 阶系数方阵，各元素由式(7-49)确定；$\{C\}$是未知浓度的列矩阵；$\left\{\frac{\partial C}{\partial t}\right\}$是未知浓度结点对时间的一阶偏导数的列矩阵；$\{F'\}$为列矩阵，其元素由式(7-50)及已知浓度结点的相关元素确定；$[E]$是 n 阶矩阵，其中仅与潜水面上结点及其相邻结点有关的元素为非零。

对一阶偏导数差分化，按照上章中介绍的引入人工扩散量方法，采用加权显隐式格式，并取上式右端第二项为显式且与右端第一项归并成$\{FC\}$，则有

$$\left[\frac{R}{\Delta t}\right]\{C\}^{t-\Delta t}+\theta_u[U]\{C\}^{t-\Delta t}-\theta_d[D]\{C\}^{t-\Delta t}-\theta_a[D^*]\{C\}^{t-\Delta t}$$
$$-\left[\frac{R}{\Delta t}\right]\{C\}^t+(1-\theta_u)[U]\{C\}^t-(1-\theta_d)[D]\{C\}^t$$
$$-(1-\theta_a)[D^*]\{C\}^t$$
$$=\{FC\} \tag{7-55}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

按照上章讨论，对流项取显式 $\theta_a=0$，弥散项取隐式 $\theta_d=1$，人工弥散项新老时间水平中间 $\theta_a=\frac{1}{2}$，则上式写成以结点浓度 C 为未知量的代数方程组

$$\left\{-[D]-\left[\frac{D^*}{2}\right]+\left[\frac{R}{\Delta t}\right]\right\}\{C\}^{t+\Delta t}=\left\{-[U]-\left[\frac{D^*}{2}\right]+\left[\frac{R}{\Delta t}\right]\right\}\{C\}^t+\{FC\} \tag{7-56}$$

这里 D_{ij}^* 的优化取值是

$$D_{ij}^*=\Delta t\cdot U_i\cdot U_j \qquad (i=x,y,z;\quad j=x,y,z) \tag{7-57}$$

其形式看上去像物理弥散项。

式(7-56)即为用引入人工扩散量方法所建立起来的盐分运移数值模型。

有了如上导出的水流问题与盐分运移问题的数值解，根据一般情况的求解步骤(1)至(6)，便可计算出各时段海水入侵过渡带的分布及变化规律。

在一些文献或教科书中看到海水人侵突变界面模型。但需要指出的是，此类问题在建立数学模型时使用了下列假定：

(1)在淡水与海水之间存在一个突变界面，水动力弥散的作用忽略不计；

(2)裘布依假定成立，即不论在海水带还是淡水带，水头随深度的变化忽略不计，海水与淡水基本上是水平流动；

(3)含水层的水头传导系数和比弹性给水度不随深度变化；

(4)含水层底板不透水。

本书不再予以论述。

§7-1-2 示踪剂情况

由于 ρ 和 μ 是常量且与 C、p 无关，因此 Darcy 定律(7-3)式中溶液的孔隙平均流速 $\bar{u}$ 与 C 无关。这时对流-弥散方程(7-1)式是线性偏微分方程，于是求解步骤比较简单(图7-2)：

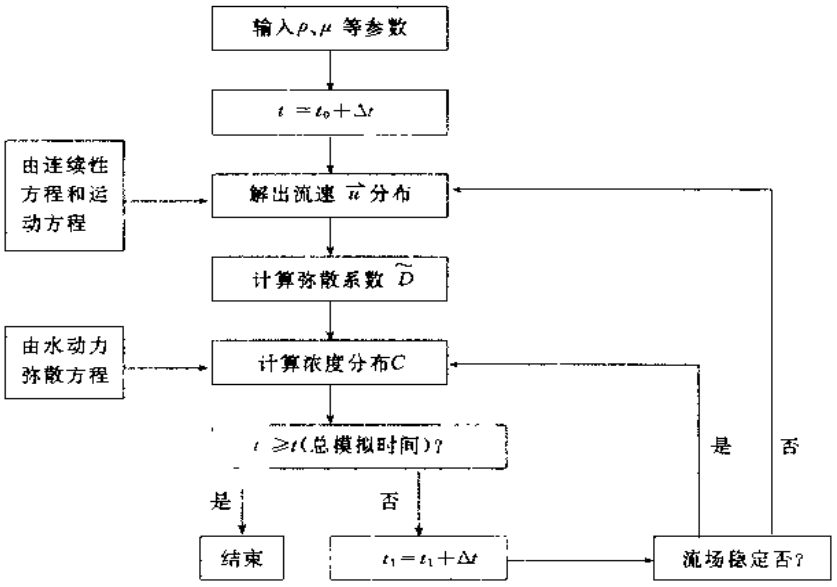


图7-2 示踪剂情况下水质模型计算步骤

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(1)连续性方程(7-2)式和运动方程(7-3)式可以抛开水动力弥散方程(7-1)式，加上适当的关于水头 H 的初始条件和边界条件独立求解，就像通常求解纯对流问题一样，这样可以解得所有 Δt 关于 $\vec{u}$ 在空间上的分布规律；

(2)根据已经求出的速度分布 $\vec{u}$，计算出各 Δt 空间上 $\vec{D}$ 的分布规律；

(3)依水动力弥散方程(7-1)和有关 C 的初始条件及边界条件，再求解出条 Δt 末时刻浓度 C 的分布规律。

无论是一般情况还是示踪剂情况，其中都包含着由连续性方程和运动方程对水流方程和对流-弥散方程的耦合。从图7-1和图7-2所示的计算框图也看出，水质模型的求解都是由两部分组成，即分别求解或迭代求解水流方程与水动力弥散方程的定解问题。将上述对流-弥散方程的数值解与水流问题的数值解中密度 ρ 赋值1，即可求解示踪剂情况下各种定解条件下的对流-弥散型水质模型。限于篇幅，不再赘述。

§7-2 纯对流型水质模型

水动力弥散的作用表现在示踪剂与未污染水之间存在着过渡带。假若过渡带的宽度与所研究的污染范围相比较窄时，就可以忽略弥散作用，采用纯对流型水质模型，从而避免了确定弥散系数的困难。例如滨海含水层中的海水入侵问题中，可将咸淡水之间由弥散作用形成的过渡带视为突变界面，使计算工作大大简化。

纯对流模型可分为两种：一种是只用水流方程；另一种是耦合水流方程与水质方程，但在水质方程中不考虑弥散作用。

§7 2-1 用水流方程预测溶质运移

当两种可混溶液体之间的过渡带宽度可忽略时，我们可以假定该两种液体之间存在着一个突变的锋面，它将随着污染的发展而不断移动。问题是如何确定这一运动锋面的位置。当解析法不能确定锋面的形状时，常用数值法。

数值法确定锋面位置的基础，是每一瞬时位于推进锋面上的全部质点在该时刻的速度值。如果能够确定锋面上足够数量流体质点的速度，那么锋面上下一时刻的新位置，即可通过研究这些质点在时间步长 Δt 上的位移而求得。

在稳定流动和不稳定流动条件下，可采用不同的方法来确定流速分布。在稳定流条件下，尽管锋面不断运动，而水流仍处于稳定流动状态，首先要确定流网的模式，当流网中流线确定之后，就可以通过锋面上的流体质点沿流线方向上的位移面求出锋面的位置。在不稳定条件下，可以先计算出每一时刻锋面上各点的速度(大小和方向)，然后来计算 Δt 时间后的锋面位置。以此类推，可利用 Δt 时间步长末新的水头分布确定下一时段的速度。但由于在 Δt 内流速的变化(大小和方向)，将产生累计误差，所以通过减小时间步长 Δt，可以提高锋面位置的准确度。

现在介绍一种在概念上非常简单的数值方法。假设 t 时刻的锋面为已知，在该锋面上取若干点，且这些点足够多，能很好地刻画出锋面的位置和形状。然后我们根据水流方程的解和达西定律计算出这些在该时刻的流速。设第 i 个点在 t 时刻的已知位置是 (x_i, y_i, z_i)，速度分量是 u_{x_i}、u_{y_i}和 u_{z_i}，则该点在 $t-\Delta t$ 时刻的位置可用下列式子近似表示，即

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$\begin{cases} x_i^{t+\Delta t} \cong x_i^t + u_{i,x}^t \cdot \Delta t \\ y_i^{t+\Delta t} \cong y_i^t + u_{i,y}^t \cdot \Delta t \\ z_i^{t+\Delta t} \cong z_i^t + u_{i,z}^t \cdot \Delta t \end{cases} \quad (i = 1, \cdots, N) \tag{7-58}$$

对所有的点(N 个)都这样做,从而求出它们在 $t+\Delta t$ 时刻的位置,于是 $t+\Delta t$ 时刻的锋面也就被近似地确定出来了。这也是"特征值法"的一种应用(见上章),该计算过程很容易在计算机上实现。

图7-3表示在一口井中连续地注入定流量的含示踪剂的水,而在另一口井中相同强度定流量地抽水的双井系统中,用上述方法所求得的示踪剂的锋面随时间的变化。这里假定流场是稳定的,锋面是直立的。

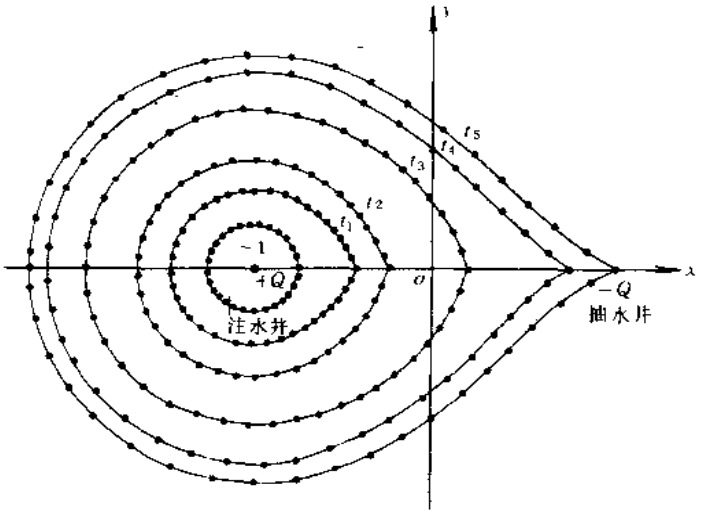


图7-3 双井系统中锋面随时间的变化

但是我们应该注意,用上述方法得到的锋面位置只是实际锋面的平均位置,而不是示踪剂的实际散布范围,实际散布范围要比锋面圈定的范围更大一些。所以计算出的示踪剂从源到某一给定位置所需的穿行时间也只代表平均穿行时间。

§7-2-2 水流方程与水质方程的耦合方法

以潜水含水层平面二维污染问题为例来说明该方法。

首先将计算区域剖分成若干单元,如三角形单元、矩形单元或多边形单元。计算中常采用矩形单元剖分(图7-4),用 i 表示所研究的单元,j 表示与其相邻的任何一个单位。水流方程与水质方程相耦合的方法基础仍然

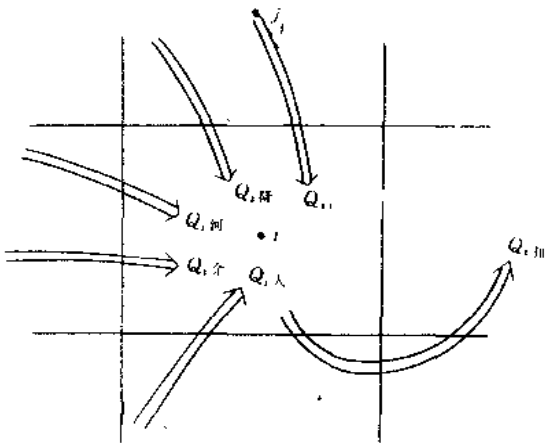


图7-4 单元 i 的水量与质量均衡示意图

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

是对每个单元建立水量与质量均衡。对于单元 i，常用下列均衡要素：

(1)和相邻任意单元 j 交换的流量 Q_{ij}，所含的示踪剂浓度为 C_{ij}；

(2)降雨入渗补给的流量 $Q_{i降}$、所含的示踪剂浓度为 $C_{i降}$；

(3)河流补给含水层或含水层补给河流的流量 $Q_{i河}$(流出为负，流进为正)，设所含的示踪剂浓度为 $C_{i河}$；

(4)其他地表水体(如池塘、水库等)或灌溉回归水所补给的水量，统记为 $Q_{i余}$，设其所含示踪剂的浓度为 $C_{i余}$；

(5)人工回灌的流量 $Q_{i人}$，其所含示踪剂的浓度为 $C_{i人}$；

(6)由该单元中井或泉排出的流量 $Q_{i排}$，假定排出水所含的示踪剂浓度就是该单元的平均浓度 C_i。

根据上述的均衡要素，可写出单元 i 的水量均衡方程为

$$V_i^{t+\Delta t} - V_i^t = \left\{ \sum_{(j)} Q_{ij} + Q_{i降} + Q_{i河} + Q_{i余} + Q_{i人} - Q_{i排} \right\} \Delta t \tag{7-59}$$

式中：(j)表示与单元 i 相邻的所有单元；V_i 表示单元 i 所含的水量；左端项表示在 Δt 时间内第 i 单元中的水量变化，当该单元的某条边属于整个区域的进水或排水边界时，应再在上式方程右端项中加上或减去通过这段边界的水量。

实际上，根据结点的坐标很容易求出单元 i 的面积 S_i。再根据孔隙率 n_i，含水层底板标高 b_i 以及单元 i 与相邻单元 j 之间的渗透系数 K_{ij}、含水层厚度 M_{ij}、过水断面宽度 l_{ij}和两个单元中心之间的距离 r_{ij}等，可将方程(7-59)中的水量项用地下水水位来替换。

设单元 i 与相邻单元 j 的水头分别为 h_i 和 h_j，则有(据 Darcy 定律)

$$Q_{ij} = \frac{K_{ij} m_{ij} l_{ij}}{r_{ij}} (h_j - h_i) \tag{7-60}$$

$$V_i = n_i S_i (h_i - b_i) \tag{7-61}$$

将上两式代入(7-59)中，得到

$$n_i S_i \frac{h_i^{t+\Delta t} - h_i^t}{\Delta t} = \sum_{(j)} \frac{K_{ij} m_{ij} l_{ij}}{r_{ij}} (h_j - h_i) + Q_{i降} + Q_{i河} + Q_{i余} + Q_{i人} - Q_{i排} \tag{7-62}$$

式(7-62)实际上是单元 i 水流方程的有限差分方程，通过联立求解各个单元的有限差分表达式，即可得到各单元(或结点)的水位分布，再根据(7-60)与(7-61)式分别可求出 Q_{ij}与 V_i。

同样可写出单元 i 的示踪剂质量均衡方程

$$\begin{aligned} &V_i^{t+\Delta t} \cdot C_i^{t+\Delta t} - V_i^t \cdot C_i^t \\ &= \left\{ \sum_{(j)} Q_{ij} C_{ij} + Q_{i降} C_{i降} + Q_{i河} C_{i河} + Q_{i余} C_{i余} + Q_{i人} C_{i人} - Q_{i排} C_{i排} \right\} \Delta t \end{aligned} \tag{7-63}$$

不难看出，实际上在这里还隐含进入单元 i 中的各种水瞬时混合均匀的假定，否则上式左端项无法成立。式中 C_{ij}可以这样来确定：当水由单元 j 流向单元 i 时($Q_{ij}>0$)，取 $C_{ij}=C_j$；反过来，当水由单元 i 流向单元 j 时($Q_{ij}<0$)，取 $C_{ij}=C_i$。还可以把 C_{ij}取为 C_i 和 C_j 的加权平均值

$$C_{ij} = (1 - \lambda) C_i + \lambda C_j \tag{7-64}$$

将上式代入(7-63)中，就可以得到关于示踪剂浓度的有限差分方程。若单元 i 为边界单元时，在建立单元 i 的均衡方程时，还应考虑到相应的边界条件。当(7-63)式的右端的有关浓度取 t 时刻的值时，就是显式有限差，这时左端的 $t+\Delta t$ 时刻浓度 $C_i^{t+\Delta t}$ 就可用这个方程式直接求出。当(7-63)式右端的浓度取 $t+\Delta t$ 时刻的值时，系隐式有限差，此时求解包括所有单元在内的方程组以得到 $t+\Delta t$ 时刻的浓度分布。上一章我们曾讨论过，无论是显式还是隐式，都将出现数值弥散。如果采用形如(7-64)式的"上游加权法"可望减小数值弥散。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

该纯对流型的水质模型也应区分为示踪剂情况与一般情况。对于示踪剂情况，每一时间步长 Δt 都应由(7-60)、(7-61)、(7-62)求出 $Q_{i,}$ 和 $V_{i,}$，然后代入方程(7-63)中即可求得示踪剂的浓度分布，这里水流方程与水质方程的求解是分开进行的。而对于一般情况，还需状态方程(7-5)式，按上节的迭代过程求解，只不过是略去了弥散部分。

海水入侵的突变界面模型是介于一般情况和示踪剂情况之间的过渡类，它是属于考虑了密度作用的纯对流模型。

§7-3 水质模型应用的一般过程

1. 确定目标和任务

应根据所考虑的实际水文地质问题来确定所研究的目标和任务。我们最常遇到如下的地下水水质问题：

(1)地下水污染趋势分析与对策；

(2)海岛及滨海含水层中的海水入侵；

(3)垃圾堆放或废水排放对地下水的污染；

(4)核废物处置的安全评价与分析；

(5)农药、化肥以及污水灌溉对地下水所造成的污染；

(6)人工回灌对地下水水质的影响；

(7)尾矿库(坝)渗漏对地下水质的影响；

(8)地表水污染对地下水水质的影响等。

根据所研究问题的不同提出相应的任务。这些任务包括：

(1)确定污染区的范围，预防地下水的进一步污染；

(2)根据水质分布及发展趋势，指导新井的布置；

(3)确定滨海含水层中的开采强度与分布以避免海水入侵的进一步扩展；

(4)预计已污染含水层天然净化所需要时间；

(5)估计污水排放、生活垃圾、工矿业废弃物以及核废物处置的合理位置；

(6)为管理和决策部门提供污染治理与防制的定量信息等。

确定了研究的目的与任务之后，应对预计的研究成果精度提出恰当的要求。

2. 资料收集与野外调查

首先要勾画出水质模型的范围，摸清范围内的基本水文地质条件。为此，要收集研究范围内的地质、水文地质、水文及环境监测等方面的资料，包括含水层的分布、结构和边界条件、钻孔资料、长期观测资料（水量、水位与水质），地下水的补给与开采情况，地表水与地下水的联系，污染源的位置、大小和强度等。根据所收集的现有资料，对模型所含的参数和定解条件进行初步的分析，明确还需为获取必要信息所进行的调查研究工作。在此基础上，制定和设计出为获得这些参数和条件所必须进行的勘探和试验。其中包括需要增加的钻探工作量、抽水试验或野外弥散试验的布置，室内水质分析等。

3. 选择模型

模型使用的目的是选择模型时首先考虑的问题。对流-弥散模型考虑了水动力弥散的作用，能够比较精确地刻画过渡带的浓度分布，比纯对流模型更加符合实际。问题的精度要求主要取决于研究区域的尺寸或规模，即过渡带的宽度和整个区域大小的比。对于大范围的水质问题，或对研究区的精度要求不太高时，污染水与未污染水之间的弥散过渡带的宽度相比之下

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

可以忽略不计。这时可选用较简单的纯对流水质模型，以避免因确定水动力弥散系数而带来的困难。对于局部的水质问题或者精度要求较高的水质问题，必须用对流-弥散模型。这一模型能够反映污染物质在含水层中的时空分布规律。

资料收集与野外调查的结果是选择模型的依据。根据资料状况，要仔细分析计算范围内的水文地质条件，要确定计算区的范围、含水层的结构及地下水流动方程的类型。例如，含水层系统是单层的还是多层的；含水层是承压的、无压的，还是承压-无压的；多层结构的层间水力联系是面状越流、“岩性天窗”勾通，还是两者兼有；另外，上部含水层是均质结构、二元结构，还是多层非均质结构；等等。对于潜水层的多层垂向非均质结构，采用三维或准三维模型而不是二维模型，则能更好地反映水文地质条件。

计算工作量也是选择模型时须考虑的因素。不过，在计算机硬件迅猛发展的今天，计算工作量的考虑逐渐变为次要的地位。从总体趋势来看，对流-弥散模型将会得到更充分的发展，日臻完善。

4. 现场试验

当初步确定了地下水水质模型的基本类型后，经常碰到的问题是缺乏某些资料，如长期的地下水位观测资料，水质的统测资料以及所必须的某些水文地质参数。对于前两者，可以补充观测网点，增加观测时段；而后者常需要按初步模型的要求，进行抽水试验和示踪剂注入的弥散试验。根据现有的调查资料，对野外试验的方法、规模、观测井网的布置、试验时段等做合理的设计。在试验期间，要对各观测网点进行统测，一方面观测井水位的变化，另一方面要取水样进行分析，测出各水样中相关的示踪剂浓度。通过不同网点的水位与水质变化来确定试验范围内的地下水流动方向、水动力弥散发展，并通过不同地段的实测资料，结合长期观测资料，进而可确定研究区的流动状态与弥散发展，为下一步的水质模型建立提供可靠资料。如果采用多层含水层的准三维模型或三维模型，还需在不同层位或不同深度下测水位（头）及采水样，以确保得到浓度随深度变化的资料。最终是将由野外试验所形成的水位（头）分布、示踪剂浓度分布和流速变化，并整理成表格形式或形成计算机中的数据库。

由于野外含水层的非均质等特点，以及水动力弥散的尺度效应，在设计野外弥散试验时一定要慎重考虑。

5. 编制程序与整理数据

实际的水质问题很难满足各种解析解的假设条件，因此往往求助于数值法求解，所以必须设计相应的计算机程序。不同的水质模型以及不同的计算方法需要不同的计算机程序。一般讲，可以根据具体的水质模型选择适用的计算程序。但水文地质条件的复杂性很难用一个通用的程序来解决。我们要根据实地的水文地质条件，提出能符合实际的仿真模型，结合已有的水质模型程序或软件，经过适当的修改、补充，甚至重新设计程序。然后按照程序或软件的要求准备各项数据。这些数据一般包括含水层的结构、水量与水质等有关数据。例如，二维流动二维对流-弥散模型需要输入如下主要数据：

（1）含水层的几何参数，包括边界形状、顶底板高度；

（2）各剖分结点的初始水头与初始浓度，未知结点的值可通过相邻结点上有关值插值获得；

（3）源汇项：抽水井（或注水井）的位置和强度，河流、地表水体的位置及补给量，灌溉回归水的分布与强度，各污染源的位置以及各源汇项的水质等；

（4）水流方程的边界条件（如一类边界、二类边界或流量边界分布）与水质方程的边界

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

条件（如等浓度边界）；

（5）各种有关水文地质参数的估计值，包括给水度、弹性给水度、渗透系数、降雨入渗系数、灌溉回归入渗系数、纵向弥散度、横向弥散度、分子扩散系数等；

（6）水位（头）动态的长观资料与水质的长观资料，或野外试验期间水位（头）与水质动态的观测资料，这些资料用于校正模型。

6. 模型校正及运转

将各种水文地质参数的估计值与边界条件、初始条件等各种有关数据代入水质模型中。将这些初值代入到水质模型程序中，模拟已有的污染过程（长观动态或试验过程），将各观测孔计算水位（头）值或示踪剂浓度值与实测的水位（头）值或示踪剂浓度值之差的平方求和作为目标函数（可分为水量目标函数与水质目标函数），当目标函数极小时就称模拟结果较优。要达到模拟较优，需要对参数进行反复修正，但必须以符合水文地质的约束为条件。于是最终得到一个能够代表该区域实际情况的水质模型。为了提高模型的仿真性与可靠性，若有条件可用其他时段的观测资料对已模拟的参数和边界条件进行检验。

水质模拟的经验表明：

（1）调参过程需要反复、交叉地进行。一般地，应先调水量有关的参数，当水位（头）的计测差基本满足精度要求时，再调水质参数。若示踪剂浓度的计测差满足不了精度要求时，再返回来调整水量参数，如此反复进行，直到满足精度（水量与水质）要求。

（2）示踪剂浓度受有效孔隙度的影响较大，受纵向或横向弥散度的影响却较小。

（3）当地下水流速较大时，流速分量 u_x、u_y 的变化将导致结点浓度的显著变化；而弥散度的变化对结点浓度的变化影响较小；当流速较小时，弥散度的变化对结点浓度的影响却较大。

经过反复校正或检验后可获得一个仿真的水质模型。结合所研究问题的具体任务与目标，可操作水质模型使其运转。根据不同的条件预测水质的发展趋势，提供各种趋势的效果，管理部门或决策者可通过对比各种方案的相应效果，提出相应的决策，从而达到地下水管理与规划的目的，同时有效地控制地下水污染过程。

§7-4 广西北海市涠洲岛海水入侵模拟*

目前，绝大多数海水入侵研究是在发生严重海水入侵危害地区开展的。在我国，随着沿海地区经济的高速发展，目前除在部分滨海城市和地区遭受到较严重的海水入侵危害外，绝大多数滨海地区和海岛都存在着海水入侵的势头，或者已经遭受到轻度的海水入侵危害。鉴于海水入侵一旦发生即将造成难以治理的环境危害，进行超前的以防止海水入侵为主要目的的预报模型研究，分析在不同的自然和人为活动条件下，咸淡水过渡带的变化与运动规律，以达到防止和减轻海水入侵危害的目的就显得特别重要。在这种条件下开展海水入侵研究具有两个明显特征：专门勘探工作量不足与海水入侵范围有限。前者限制了对含水层空间分布及边界条件的认识；后者对选用咸水中的天然示踪剂（例如氯离子）进行模拟求参（弥散度）带来了困难。若设计专门的弥散试验又遇到经费问题和弥散度尺度效应的困扰。

涠洲岛是广西第一大岛，面积24.7km^2，位于北海市正南方的北部湾海面上，距北海市67km，具有开发远景的旅游意义及军事意义。为了解决岛上军民用水问题，在岛上打了多眼开

---

* 李国敏，1994，海岛海水入侵动态三维有限元模型研究及应用，博士学位论文，中国地质大学（武汉）。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

采井。由于开采井布置不合理，过于集中及开采量增大，引起了局部明显的海水入侵。如904孔成井时氯离子含量仅49.6mg/L，长期开采后浓度高达548.7mg/L而报废。又如911孔在1970年国防施工中因连续大流量抽水招致海水入侵而报废。目前使用的某供水井，在连续抽水2h之后，氯离子浓度由124mg/L上升至388mg/L（1992年6月19日取样全分析）。本研究从整个地下水流动系统出发，通过对岸边水头动态研究求得含水层水力参数，通过分析水动力弥散尺度效应的分形特征初估弥散度参数；利用地质统计方法插值处理数值模型中结点标高与初始水头分布；设计开发出一套考虑密度、水头与浓度相互影响的三维有限元地下水溶质运移模拟、校正与分析的软件。在此基础上选择局部地段开展海水入侵的模拟，对初步估计的参数进一步校正，然后将所校正参数拓广并用于建立全岛的海水入侵模型，模拟了咸淡水过渡带在降雨及开采条件下的运动规律，为涠洲岛发展过程中对地下淡水透镜体的合理开发与海水入侵防治提供了科学依据。该研究为其他资料缺乏的海岛或海岸地区海水入侵防治提供了值得借鉴的方法。

涠洲岛海水入侵的数学模型采用考虑密度变化的过渡带模型，求解对流-弥散方程采用引入人工扩散量方法。

1. 水文地质条件概况

根据地质条件与地层组合，可分为火山岩含水层与砂砾孔隙含水层。自上向下简述如下：

火山碎屑孔隙含水层。为沉凝灰岩、凝灰岩、玄武质角砾岩。多孔状，孔隙大，分布较均匀，质地较松散。

玄武岩孔洞-裂隙含水层。顶部为气孔状构造的灰黑色橄榄玄武岩、玄武岩，下部为灰绿到深灰色橄榄玄武岩为主，孔状玄武岩、玄武岩次之。在多次火山喷发旋回及冷凝收缩作用下，使玄武岩的原生孔洞、裂隙与风化层共同赋存地下水。

砂砾碎屑岩组含水层。由第四系下更新统湛江组与第三系上新统雷琼组组成。数米厚的粘土将湛江组含水层与玄武岩孔洞-裂隙含水层隔开。湛江组与雷琼组之间也普遍存在一层粘土。湛江组主要由含砾粗砂及粘土质细砂、粉砂夹层组成。雷琼组上部由一套灰至灰绿色的浅海-深海相粉细砂、中细砂，局部为中粗砂夹亚粘土及少量薄层状粘土组成，下部主要由薄层状粘土互层，局部夹粗细砂层组成。

上述火山岩含水层与碎屑岩含水层在垂向上的叠置以及它们之间普遍存在的透过粘土的越流作用，使它们构成统一的含水系统。如位于中部的BD1孔，潜水位标高11.20m，下伏砂砾碎屑岩孔隙含水层中的地下水头仅3.40m，相差7.8m；而近海岸的901和906孔，上下层水头差减小并发生逆转。这反映出在岛中部潜水透过粘土层补给下伏承压水，而近岸处承压水则补给潜水。在岛边缘地带，已有多个钻孔在不同深度揭露到咸水，勾画出地下水系统为一“漂浮”于海水之上的淡水透镜体。

降水是本区地下水的主要来源。地下水呈辐射状潜流入海（局部形成下降泉）与人工开采是地下水的主要排泄方式。降水是影响海岛中部地下水动态的主要因素，近海地带地下水受潮汐效应影响也作相应的波动。

2. 含水层参数的初步界定

（1）据岸边地下水头动态计算玄武岩含水层的导水系数。涠洲岛中部曾进行过玄武岩含水层的抽水试验。配合抽水试验，于1989年12月17日至21日连续对观测孔水位及海水位进行了每隔半小时的统测。其中BD7与BD8两孔离抽水井较远，却接近海岸线。从观测资料发现，几乎很难测出抽水引起两观测孔中地下水位下降，而得到的是受海潮影响的地下水位潮汐动态。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

应用潮汐方法可求出玄武岩含水层的水力传导系数或导水系数，作为海水入侵数值模型中的参数初值。此外，广西北海地质勘察院据抽水试验及广西水文地质队据降雨后水位动态分别计算出的火山岩含水层的渗透系数及降雨入渗系数，可供数值模型反求参数及模拟时参考。

(2) 砂砾碎屑孔隙含水层的水流参数。涠洲岛存在的湛江组孔隙含水层，在附近内陆地区广泛分布，其岩性与北海半岛一致，由上部粘土层与下部的中粗砂含水层构成。我们曾对北海市地下水进行了准三维流数值模拟与校正*，所求参数可作为涠洲岛相应含水层的初始参数。湛江组下部的雷琼组仅被几个钻孔揭露，进行的水文地质工作较少。由于其岩性较上部湛江组为细并多夹粘土层的特点，可参考湛江组参数大小取值。

(3) 据水动力弥散尺度效应的分形特征初估弥散度。在涠洲岛海水入侵仅发生在局部范围，为何还要进行海水入侵模型研究?没有进行弥散试验，如何确定弥散度参数?这是基于如下考虑：一是做弥散试验缺少经费且难于保证达到设定目标；二是若示踪剂选择不当还会对海岛有限的地下淡水资源造成污染；三是由于含水层结构的非均匀性，使弥散试验所求出的弥散度值具有尺度效应；四是海水入侵研究超前性的重要性。我们不能坐等海水入侵造成严重危害时再着手调查、研究，而应该在海水入侵的初期甚至尚未发生海水入侵时就着手设计、模拟与论证，为滨海及海岛有限的、宝贵的地下水合理开发及防治海水入侵做好理论上研究及预见性分析，供决策部门参考。根据水动力弥散尺度效应的分形特征，将世界范围内所收集到的百余个纵向弥散度数据按不同介质特征（孔隙与非孔隙）、不同种类模型（解析与数值）及模型维数（一维、二维或三维）分别求出相应的分维数，从中选取本研究中所涉及到的弥散度的取值范围，作为数值模型中的初值。

3. 局部模型校正与分析

为了检验和校正初步界定的含水层有关参数，我们设计了局部模型（图7-5）。局部模型岛上面积约1km²，区内有一口供水井，岛上东西边界为自然边界，南北为沿流线切割的人为边界。

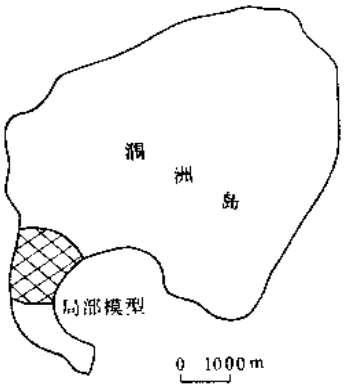


图7-5 局部模型位置

我们曾于1992年6月在现场用电导率仪并结合化学滴定分析在供水井抽水过程中测试井水的氯离子浓度变化。抽水井流量约75m³/h，平均每天供水2h左右。现场测试结果表明，随着抽水的进行，氯离子浓度呈升高趋势。室内全分析结果表明1992年6月19日的抽水过程中氯离子浓度由124.55mg/L升至388.15mg/L。

研究区有4眼（包括供水井）钻孔，基本上能控制火山岩含水层与湛江组砂质孔隙含水层及其上下部粘土层的厚度变化。

(1) 边界条件与初始条件处理。将岛上研究区的东西边界延伸到海底。这是基于如下事实：一是滨海含水层在海岸线处并未被垂直切割，面是向海底延伸；二是边界处水头与浓度条件的处理。模拟试验表明在模型中将临海边界延伸到海底一段距离，并处理成定水头、定浓度边界与未知水头、浓度边界，比将临海边界直接处理在海岸线上具有更好效果。含水层底部边界处理成零通量（水量与质量）边界，这是考虑到碎屑砂质孔隙含水层底部为基岩，以及下部碎屑砂质孔隙介质多是由导水性极差的薄层状粘土组成。岛上边界处理成降雨补给边界

* 李国敏，1988，广西北海市地下水准三维流数值模拟与岸边水头动态研究，硕士学位论文，中国地质大学（武汉）。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

及定浓度边界。将降雨量处理成全年平均值（1.372m/a），降水取定浓度约50mg/L（氯离子）。由于观测孔比较少，无法给出初始浓度及水头分布。采用一般的稳定流动方程加上密度变化的影响计算水头与浓度分布（实际上并非稳定，因为水流方程中考虑到了密度变化，密度随浓度变化，浓度随时间变化。水头分布与贮水系数，即比弹性给水度有关，浓度分布与孔隙率有关。因此水头分布与浓度分布一般不能同时达到稳定状态，前者很快会达到稳定，后者则需要较长的时间）。将求出的值作为模拟研究时段的初始值。

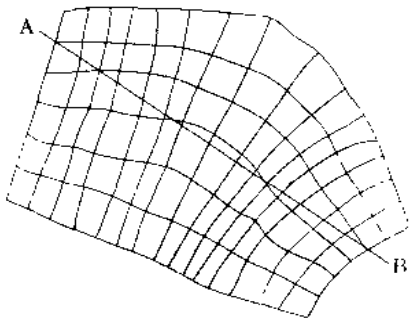


图7-6　局部模型剖分平面图

（2）剖分与插值。研究区采用任意六面体（垂向上为4根相平行的四棱柱）剖分。上下剖分8个单元层，9个结点；平面上98个单元，120个结点；共计单元784个，结点1080个（图7-6）。根据岩性不同，上下共划分了8个参数分区，向上向下分别代表：火山碎屑孔屑孔隙含水层，玄武岩孔洞-裂隙含水层、粘土层、湛江组砂质孔隙含水层、湛江组与雷琼组之间的粘土层、雷琼组上部的碎屑孔隙含水层及中、下部薄层粘土夹砂的低渗透区。区内的4个钻孔，最深仅揭露到湛江组下部的粘土层，为了保证松散含水层的完整性，参考全岛范围内的钻孔资料，将其延伸到雷琼组的底界。考虑到4个钻孔相对较集中，在西北部参考局部模型之外的若干钻孔构造出一个结点处的垂向层位标高，以供 Kriging 方法插值使用。

（3）模型校正与求参。为了能够根据局部研究区内有限的资料获取比较精确的有关参数，分两步对模型校正，并反求出含水层的参数。首先是对观测孔中的水头进行校正。在地下水头拟合较好的前提下，进行地下水中氯离子浓度动态的拟合。抽水井流量分配在同一垂向上的4个结点上（滤管下在整个火山岩中）。抽水井中浓度处理为抽水井流量结点浓度的加权平均（以流量为权重）。井中氯离子浓度虽然每天有较大的波动，但在每天抽水之前都可以降至150mg/L 左右。加上抽水井周围没有足够的勘探工作量，给模拟2d 之内井水中氯离子浓度的变化造成困难。因此从现有资料出发，取全年平均降雨量，井水中氯离子浓度取每天的平均值（相对于海水浓度的0.01）。当井水中氯离子浓度在模型中的计算值达到实测的平均值并趋于稳定时，所求出的有关参数即为能够反映局部模型所研究的含水层特征。校正后所求出的参数是：纵向弥散度1.9905—346.7m，横向弥散度0.2108—16.789m，比弹性给水度0.0003—0.0089，有效孔隙率0.0235—0.2518，渗透系数0.1019—22.33m/d。

图7-7至7-9给出了局部模型的模拟结果。

4. 全岛模型模拟与预测

全岛区内有钻孔、井多眼，能够控制湛江组及上覆地层的厚度分布。平面上计算范围延伸到海底一定范围，下边界取至雷琼组的底板。

（1）边界条件与初始条件处理。涠洲岛外观上像一个巨大的“螺”。在模型边界处理上将岛周围的陆上边界延伸到海底一定范围。同局部模型一样将其处理为定水头、定浓度边界与未知水头、未知浓度边界。含水层底部处理为零通量边界（水量与质量）。由于全岛模型边界处理以自然边界为基础，可用于预测和分析未来人为活动对海水入侵或咸淡水过渡带位置的影响。沿时间方向在不同时间步长内分别使用稳定流动模型先计算出地下水头分布，进而获取流速分布并代入对流-弥散方程，得到新的浓度分布，计算出相应的密度分布，再将密度分布代入考

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

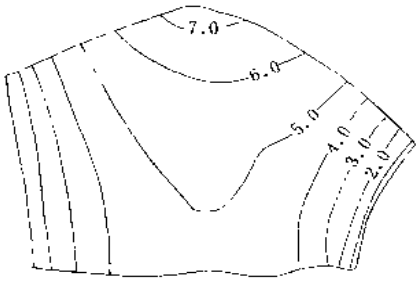


图7-7　局部模型第三层结点等水头线图（m）

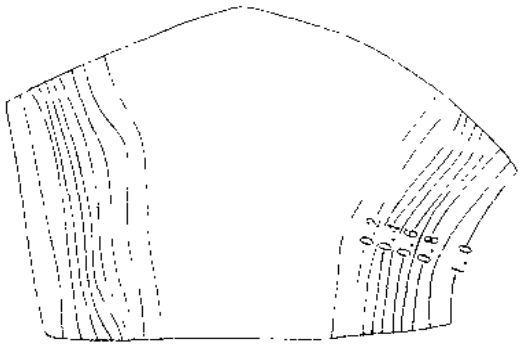


图7-8　局部模型第三层结点等浓度线图（相对浓度，海水为1）

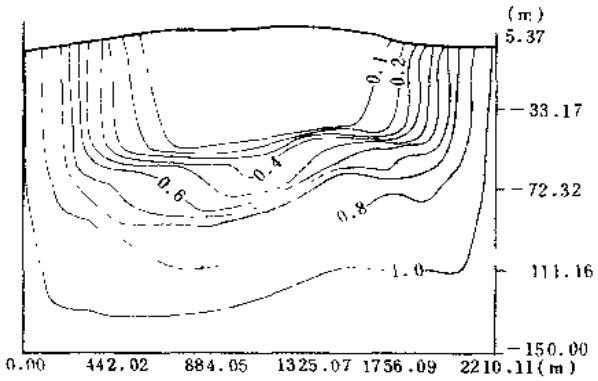


图7-9　AB剖面浅部浓度等值线图（相对浓度，海水为1）

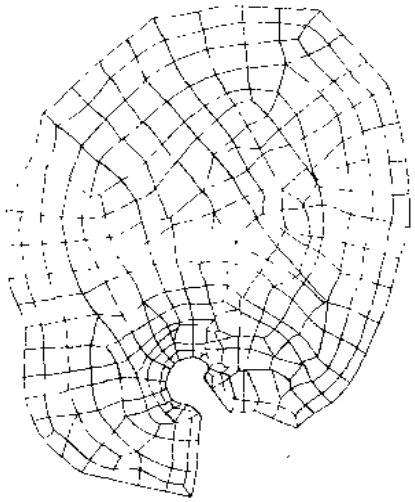


图7-10　全岛模型剖分平面图

虑密度的稳定流动方程。重复以上过程直至相邻两次时间步长所计算的水头与浓度分布差别不大，作为初始水头与浓度分布。

(2) 剖分与插值。研究区同样采取任意六面体剖分。上下剖分8个单元，9个结点；平面上320个单元，352个结点（图7-10）；共计2560个单元，3168个结点。与局部模型一样，垂向上将参数分为8个大区。在第一层又进行了渗透系数的平面分区。根据已知钻孔所揭露地层的标高，逐层使用 Kriging 方法进行插值计算。第一层在陆地上结点标高取与潜水位标高一致，而海底部分的结点标高不参与插值计算。

(3) 参数检验与模型运行。将局部模型求出的水流参数代入全岛模型，将弥散度数据按水动力弥散尺度效应的分维数拓广到全岛模型，模拟了全岛1990年2月至1991年6月的水头分布及浓度分布，对局部模型所求参数进行了进一步的检验与修正，结果表明局部模型所求参数基本合理。模拟结果显示，在现有开采条件下，除了近岸局部范围内因布井不当及开采强度与频率偏大而引起海水入侵外，在整体上咸淡水过渡带基本上保持稳定状态。图7-11与图7 12分别表示第三层结点的水头与氯离子浓度等值线图（相对浓度，海水为1）。

(4) 初步预测模拟分析。由于地下水动力系统的不同，滨海与海岛地区地下水资源评价与内陆有很大差别。在滨海或海岛含水层中，接收大气降水的地下淡水资源，必须保证相当一部分地下淡水在一定水力梯度作用下排泄入海。因此常年可利用的地下水资源量小于含水层

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn



图7-11　全岛模型第三层结点水头等值线（m）



图7-12　全岛模型第三层结点氯离子浓度等值线

的年平均降水补给量。根据涠洲岛面积、降雨入渗系数及多年平均降雨量，岛上地下水资源多年平均补给量约25000m³/d。在现有开采井分布条件下增加开采量，当开采量增加到7500m³/d时（目前开采量约2000m³/d），模拟了地下水头分布与咸淡水过渡带的运动。据50%海水浓度所表达的淡水透镜体的形状与规模，在近岸地带海水入侵有所加强，在岛中部开采井的下部咸淡水过渡带有明显的升高。潜水位高的部位，淡水透镜体的厚度也大。取年平均降雨量，经过10年预测模拟，50%海水浓度界面趋于新的稳定。

§7-5　瑞士 Grimsel 核废物处置试验场弥散试验模拟分析*

核电站运行产生的大量垃圾——一系列高、中、低放射性废物，与医疗、科研、国防等事业的核废物，一起成为越来越重要的环境问题。许多国家日益重视开展核废物处置的地质研究，纷纷规划与建立核废物处置试验场。在预选处置场正式运行之前，必须经过安全与可靠性的详尽论证与各种试验，通常在初步选定的处置场或为实验目的而专门设置的类似岩层中进行现场试验研究。

高放射性核废物（HLW）在1000年内其放射性水平可降至初期值的1%，必须保证其在很长时间内完全与生物圈隔离，宜置放于地下深部且封闭稳定的岩层中。由于花岗岩具有很低的渗透性及容易施工等特点，许多国家在其中规划未来的高放射性核废物处置场。在花岗岩中建立的处置试验场最多，开展的研究项目也最多。

在花岗岩中的地下核废物处置试验场进行现场试验的目的包括：获取确定有关水力参数与数据的技术与方法；获取测试溶质运移参数的技术与模型；获取测试与热扩散问题有关参数的技术；高温下岩石力学性质的变化规律；洞室附近岩石应力变化与变形；获取封闭地下水流动通道的技术与方法。前三项研究最重要，需要进行多次现场试验来反复测试与验证。在

---

* 李国敏，Kinzelbach，W.，Thorschall，P.，1995，瑞士 Grimsel 核废物处置试验场弥散试验的数值模拟研究，地质科学与人类生存、环境与自然灾害学术讨论会，河北正定（已收入30届国际地质大会B专辑出版物）。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

花岗岩中，断层带、断裂与裂隙是影响岩体渗透性的主要因素，因而水文地质研究的焦点是断裂带或裂隙网络中的地下水水力试验、示踪剂弥散试验与热扩散试验等。

示踪剂弥散试验的目的是通过试验获取有关断层或裂隙的水质参数及化学作用参数，解释试验成果并用于预测放射性物质的运移规律等。本例对瑞士 Grimsel 核废物处置试验场1993年3—4月进行的双井弥散试验的资料用二维有限元法进行了数值模拟。

1. Grimsel 试验场的水文地质背景与试验

瑞士于1983年在北部的 Grimsel 湖附近中央水电站的主隧道旁，用全断面隧洞掘进机开挖了通往地下试验场的隧道与平巷。上部的花岗岩厚度约400—500m。

Grimsel 试验场位于瑞士北部阿尔卑斯山脉最大的结晶岩体——阿尔地块内。该区的主要岩石是两种密切相关的浅色花岗岩和深色的花岗闪长岩。阿尔卑斯山区的地质建造分属于几个构造活动期，在这些活动期中它们被抬升，因而露出了花岗岩。但在瑞士中部，花岗岩体的连续性大都未被扰动并被厚层沉积物覆盖。在 Grimsel 试验场，有几个地点煌斑岩脉侵入了花岗岩。这些侵入体不含石英，是岩石中的软弱带。

1993年3—4月的弥散试验是在裂隙系统水流试验（BK）现场开展的（图7-13）。从 BK 平

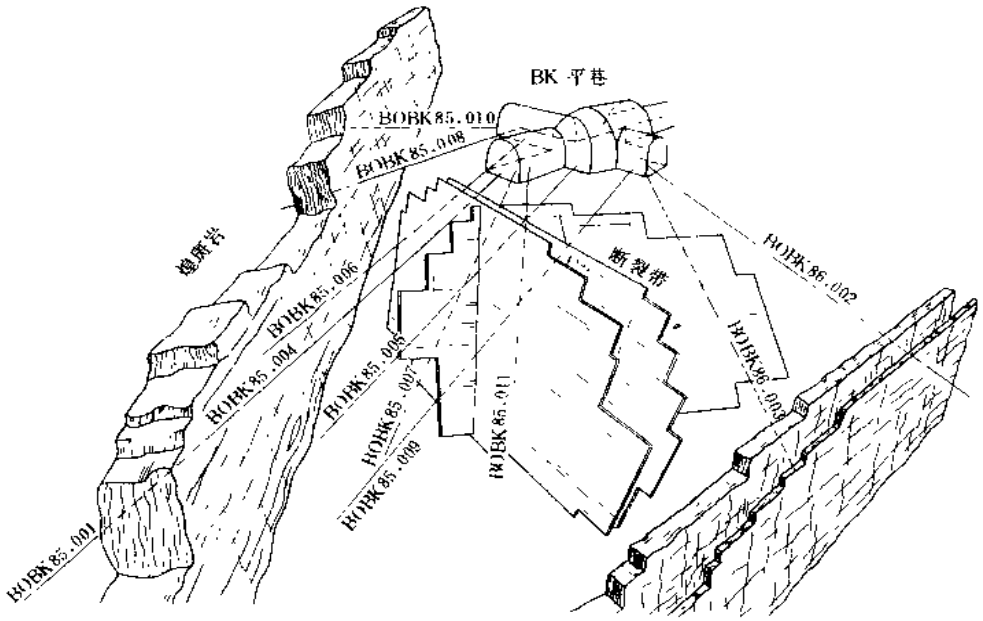


图7-13 BK 试验现场与钻孔示意图

巷可以打一系列钻孔。在钻孔揭露的所研究的断裂带或裂隙面前后，安置两个充气的封隔器。在间隔约1m 的封隔器之间放置一个探头。该探头包括压力传感器、温度传感器和电导率传感器。数据传输电缆通过一根防水的不锈钢管连接探头与计算机。通过两个钻孔可以分别放置注水导管与抽水导管，并通过精密的泵从一个钻孔中注入盐水，从另一个钻孔中以近两倍于注水孔流量进行抽水，以保证被污染的地下水被抽出。图7-14表示双井弥散试验所形成流场与隧道排水所形成流场叠加的情况。由于隧道长期的抽水作用，在周围岩块中的断裂带或裂隙面中形成了较大范围内的拟稳定流场。双井弥散试验的规模与隧道排水规模相比较小（井距仅10m）。因此可将该问题概化为拟稳定流动条件下的双井弥散试验。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

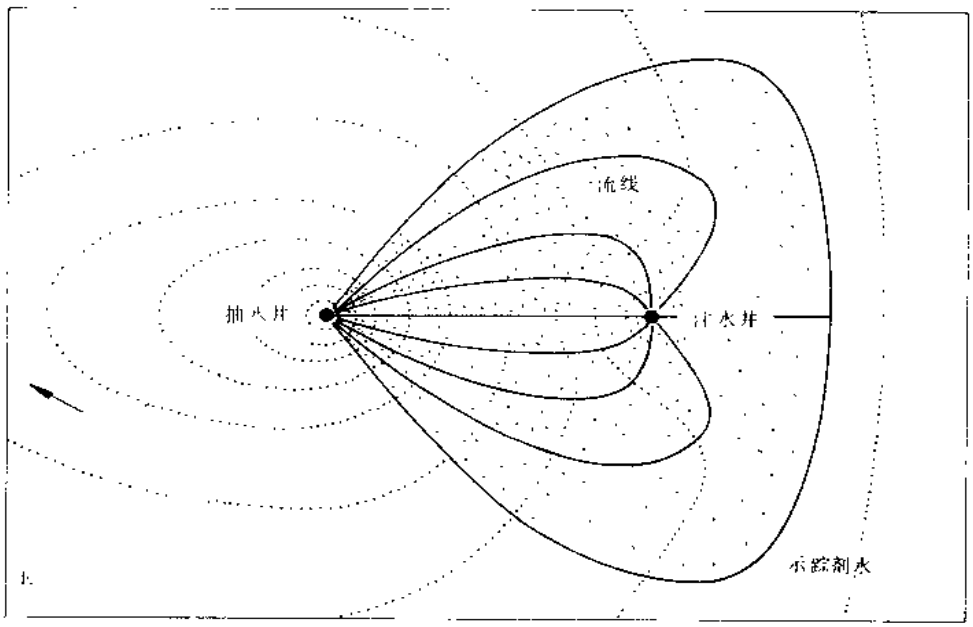


图7-14　双井弥散试验示意图

2. 数学模型与数值方法

一维（拟）稳定天然流场中的双井弥散试验，通常选择井的布置沿天然流线，并且注水井位于上游，以保证注入的示踪剂基本上被抽水井所接收。一般由注水井注入小流量的水，从抽水井中抽出大流量的水。当进行较长时间的抽注水之后，这时地下水流动基本上达到拟稳定状态，再注入示踪剂，将一维天然流场中的双井弥散试验概括为（拟）稳定流动条件下的溶质运移问题。

(1) 地下水流动模型：

地下水流场中某点处的孔隙平均流速 $\vec{u}$ 是天然孔隙平均流速 $\vec{u}_0$ 和抽水井引起的孔隙平均流速 $\vec{u}_{w1}$ 及注水井引起的孔隙平均流速 $\vec{u}_{w2}$ 的矢量和，即

$$\vec{u} = \vec{u}_0 + \vec{u}_{w1} + \vec{u}_{w2} \tag{7-65}$$

据达西定律可写出 $\vec{u}_0$ 的表达式

$$\vec{u}_0 = \vec{u}_0(\cos\alpha, \sin\alpha) = -\frac{K_f}{n_f} \cdot \frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}n} \tag{7-66}$$

式中：u_0 为天然孔隙平均流速矢量的模；α 为天然流向与 x 轴方向（自注水井至抽水井方向）的夹角；K_f 为渗透系数；n_f 为有效孔隙率；$\mathrm{d}h/\mathrm{d}n$ 为水力梯度。

对于均质、等厚、各向同性承压含水层，据 Dupuit-Thiem 方程可写出抽、注水井所引起的孔隙平均流速分量（Strack，1989）

$$u_{wx1} = -\frac{Q_1}{2\pi M n_f} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2} \tag{7-67}$$

$$u_{wy1} = -\frac{Q_1}{2\pi M n_f} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} \tag{7-68}$$

$$u_{wx2} = \frac{Q_2}{2\pi M n_f} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2} \tag{7-69}$$

$$u_{wy2} = \frac{Q_2}{2\pi M n_f} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2} \tag{7-70}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

式中：M 为含水层厚度；u_{w1}、u_{w2}为抽、注水井在 x 方向上产生的孔隙平均流速分量；u_{w1}、u_{w2}为抽、注水井在 y 方向上产生的孔隙平均流速分量。

可写出天然流场与双井作用叠加的流速公式

$$u_x = u_{0}\cos\alpha - \frac{1}{2\pi M n_f}\left[\frac{Q_1(x-x_1)}{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2} - \frac{Q_2(x-x_2)}{(x-x_2)^2+(y-y_2)^2}\right] \tag{7-71}$$

$$u_y = u_{0}\sin\alpha - \frac{1}{2\pi M n_f}\left[\frac{Q_1(y-y_1)}{(x-x_1)^2+(y-y_1)^2} - \frac{Q_2(y-y_2)}{(x-x_2)^2+(y-y_2)^2}\right] \tag{7-72}$$

式中：u_x、u_y 为孔隙平均流速 u 在 x、y 方向上分量；(x_1, y_1)、(x_2, y_2) 为抽、注水井坐标。

(2) 双重介质中溶质运移方程

双井弥散试验一般是在单个含水层中进行，如承压含水层。当承压含水层是宏观上均匀的裂隙介质时，比如花岗岩中形成的均厚断裂带，其顶板或底板一般是含水量较高的微裂隙或次生孔隙，其中的水流动很慢或根本不运动，这对断裂带中地下水流动影响不大，而对其中的溶质运移的影响不可忽视。这是因为溶质运移仅一部分是靠地下水运动携带，而另一部分却是在浓度梯度驱动下的弥散，尤其当地下水流动较慢时后一部分作用更明显。在示踪剂注入期间，含水层中流动着的水中的示踪剂浓度高于顶、底板微裂隙和孔隙中几乎不流动水中的示踪剂浓度，在浓度差的驱动下一部分示踪剂由含水层进入顶、底板微裂隙和孔隙中；当停止注入示踪剂之后，若含水层流动着的水中示踪剂浓度低于顶、底板介质中的示踪剂浓度时，则一部分示踪剂由顶、底板介质中补充到含水层中。这种作用的结果，一是降低了观测孔或抽水井中浓度穿透曲线的幅度，二是拉长了观测孔或抽水井中接收到的示踪剂浓度峰值出现时间，三是加强了浓度穿透曲线的“拖尾”现象，其总效果是加大了弥散强度，即等效于含水层的弥散度增大。

裂隙带介质中的地下水溶质运移可用双重介质中的对流-弥散方程来描述。根据含水层中裂隙介质和其顶、底板岩块介质特点及作用，分别在裂隙域中和岩块域中建立数学模型，通过内部边界条件（即顶、底板面）的耦合，可以较客观地反映裂隙介质中溶质运移过程。

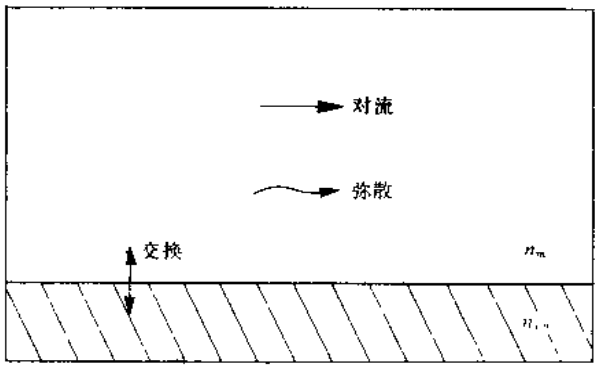


图7-15　双重介质浓度交换模型

①浓度交换模型。据上述分析，视双重介质中地下水流动与否而将介质分成流动相介质与非流动相介质。流动相介质中溶质运移可用对流-弥散方程描述，非流动相中的浓度变化是两相间浓度差的函数。图7-15说明了流动相介质与非流动相介质间浓度交换的概念模型。下式给出了双重介质的对流-弥散方程组，两个方程式之间通过浓度交换系数及流动相与非流动相中的浓度差来耦合。

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_{xx}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + 2D_{xy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x\partial y} + D_{yy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial x}(u_x C_m) - \frac{\partial}{\partial y}(u_y C_m) - \frac{n_{im}}{n_m}\cdot\frac{\partial C_{im}}{\partial t} \tag{7-73}$$

$$\frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\beta}{n_{im}}(C_m - C_{im}) \tag{7-74}$$

式中：C_m、C_{im}为流动相与非流动相中地下水的示踪剂浓度；n_m、n_{im}为流动相与非流动相中的

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

孔隙率；D_{xx}、D_{xy}、D_{yy}为弥散系数张量的分量。

②扩散模型。仍将双重介质分为流动相介质与非流动相介质。流动相介质中溶质运移仍可用对流-弥散方程描述，而非流动相中溶质也发生动态的扩散（图7-16）。该问题可用如下数学模型描述

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_{xx}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + 2D_{xy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x \partial y} + D_{yy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial x}(u_x C_m) - \frac{\partial}{\partial y}(u_y C_m) - \frac{n_{im}}{n_m}\cdot\frac{\partial C_{im}}{\partial t} \tag{7-75}$$

$$\frac{\partial C_{im}}{\partial t} = D''\frac{\partial^2 C_{im}}{\partial z^2} \tag{7-76}$$

式中：D''表示地质介质中的分子扩散系数。

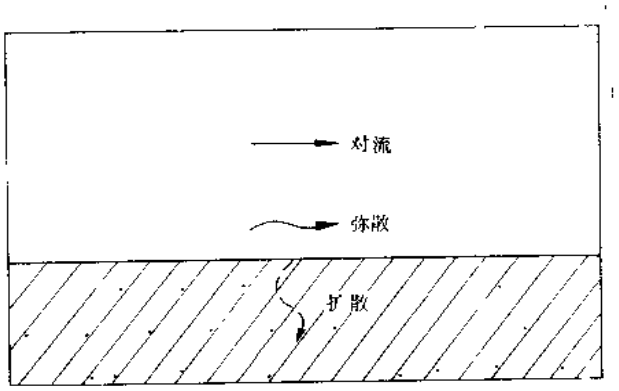


图7-16 双重介质对流-弥散-扩散模型

双井弥散试验的数学模型很难求出解析解，需借助于数值方法求解。（7-75）与（7-76）式构成的数学模型是三维问题。为了简化计算，本例提出了解析解与数值解相结合的方法求解（7-75）与（7-76）方程。

求解方程（7-76）。由于在z方向（垂直于含水层）上的扩散范围有限，可视为在$z\to\infty$处$C_{im}=C_0$（初始浓度）。若在$z\to 0$处具有定浓度C_1，则浓度分布为（王秉忱等，1985）

$$C_{im}(z,t) = C_0 + (C_1 - C_0)\mathrm{erfc}\left(\frac{x}{\sqrt{4D''t}}\right) \tag{7-77}$$

式中：erfc是余补误差函数（$\mathrm{erfc}(R) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_R^{\infty} e^{-u^2}\mathrm{d}u$）。

可据（7-77）式写出含水层顶面或底面处的浓度梯度

$$\begin{aligned}\mathrm{grad}C_{im}\Big|_{z=0} &= \frac{\partial C_{im}}{\partial z}\Big|_{z=0} \\ &= \left\{(C_1 - C_0)\frac{2}{\sqrt{\pi}}\cdot\frac{1}{\sqrt{4D''t}}e^{-u^2}\Big|_{\frac{z}{\sqrt{4D''t}}}^{\infty}\right\}_{z=0} \\ &= -\frac{C_1 - C_0}{\sqrt{\pi D''t}}\cdot e^{-\frac{z^2}{4D''t}}\Big|_{z=0} \\ &= -\frac{C_1 - C_0}{\sqrt{\pi D''t}}\end{aligned} \tag{7-78}$$

据Fick定律可写出进入非流动相介质中的扩散通量$\vec{J}_{im}\big|_{z=0}$

$$\vec{J}_{im}\Big|_{z=0} = -D''\mathrm{grad}C_{im}\Big|_{z=0} = \frac{\sqrt{D''}}{\sqrt{\pi t}}(C_1 - C_0) \tag{7-79}$$

双井弥散试验过程中，含水层中示踪剂经过区域中任一点处的浓度变化，均是先上升后下降。结合数值模型中的时间步长，将浓度过程曲线画成折线（图7-17），这对于非流动相介质中溶质扩散〔（7-76）式〕的内边界而言，在一个时间步长内为定浓度边界，在整个过程中是阶梯状的定浓度内边界。相应的溶质通量可采用叠加公式（为叙述方便起见，以下采用等时间步长），即

$t=2$（Δt）时

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

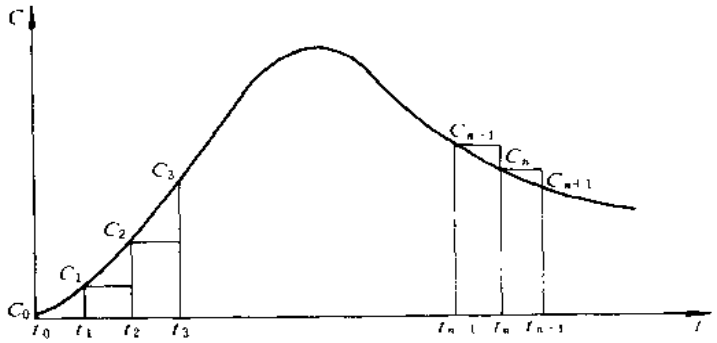


图7-17　浓度历时曲线示意图

$$\vec{J}_{im} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \sqrt{\frac{D''}{t-\Delta t}}(C_1 - C_0) \tag{7-80}$$

$t=3$（Δt）时

$$\vec{J}_{im} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{D''}{t-\Delta t}}(C_1 - C_0) + \frac{1}{\sqrt{\pi}}\sqrt{\frac{D''}{t-2\Delta t}}(C_2 - C_1) \tag{7-81}$$

……

$t=n$（Δt）时

$$\vec{J}_{im} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{D''}}{\sqrt{t-(i-1)\Delta t}}(C_{i-1} - C_{i-2}) \tag{7-82}$$

上式表示在 $z=0$ 一侧界面上扩散通量。对于 $z=0$ 和 $z=M$ 上下两侧界面上流动相与非流动相的扩散通量之和为

$$\vec{J}_{im} = \sum_{i=1}^{n} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\sqrt{D''}}{\sqrt{t-(i-1)\Delta t}}(C_{i-1} - C_{i-2}) \tag{7-83}$$

结合数值模型的每个步长，可以用解析公式计算出发生在双重介质界面间的扩散通量 $\vec{J}_{im}$，作为流动相介质中对流-弥散方程的源汇项，利用数值方法求解二维问题，求出的浓度分布再代入（7-83）式得出新的扩散通量，从而实现解析模型与数值模型的耦合。

（3）数值方法

采用 Leismann 和 Frind（1989）提出的引入人工弥散量和空间加权方法求解对流-弥散方程。众所周知，因对流项的处理不当常导出非对称正定的系数矩阵，给方程组的求解带来很大的运算量。若将对流项取老时间水平上的值，由此而产生的误差通过引入人工弥散量系数张量，并根据控制方程的泰勒展开式在时间步长内优化赋权，可获得对称矩阵，并可使用一般的对称矩阵求解方法。

引入人工弥散系数张量后得出如下对流-弥散方程（为书写方便，将弥散系数放在原方程右端各项之前，原方程（7-73）或（7-75）式右端第六项暂不写）

$$D_{xx}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + 2D_{xy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x \partial y} + D_{yy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial y^2} + D'_{xx}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} + 2D'_{xy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial x \partial y}$$
$$+ D'_{yy}\frac{\partial^2 C_m}{\partial y^2} - \frac{\partial}{\partial x}(u_x C_m) - \frac{\partial}{\partial y}(u_z C_m)$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= \frac{\partial C_m}{\partial t} \tag{7-84}$$

式中：D_{xx}^*、D_{xy}^*、D_{yy}^*是人工弥散系数张量分量。采用如下的浓度近似函数代入上式，经过格林变换可写出矩阵表示的迦辽金方程

$$C_m(x,y,t) = \sum_{j=1}^{N} C_j(t)\bar{N}_j(x,y)$$

$$[D]\{C_m\} + [D^*]\{C_m\} + [V]\{C_m\} + [R]\left\{\frac{dC_m}{dt}\right\} = \{FC\}$$

式中：$C_j(t)$ 表示结点 j 在 t 时间水平上的浓度值；$\bar{N}_j$ 表示基函数；$[D]$ 与 $[D^*]$ 分别表示弥散项矩阵与人工弥散项矩阵；$[V]$ 表示对流项矩阵；$[R]$ 表示溶液质量矩阵；$[FC]$ 表示边界上溶液质量矩阵。

对上式进行加权并整理得

$$\left[\frac{R}{\Delta t}\right]\{C_m\}^{t-\Delta t} + \theta_u[V]\{C_m\}^{t+\Delta t} - \theta_d[D]\{C_m\}^{t+\Delta t} - \theta_d[D^*]\{C_m\}^{t-\Delta t}$$

$$- \left[\frac{R}{\Delta t}\right]\{C_m\}^t + (1-\theta_u)[V]\{C_m\}^t$$

$$- (1-\theta_d)[D]\{C_m\}^t - (1-\theta_d)[D^*]\{C_m\}^t$$

$$= \{FC\} \tag{7-85}$$

取老时间水平对流项（$\theta_u=0$），新时间水平上的弥散项（$\theta_d=1$），新老时间水平中间的人工弥散项（$\theta_e=\frac{1}{2}$），上式写成

$$\left(-[D] - \left[\frac{D^*}{2}\right] + \left[\frac{R}{\Delta t}\right]\right)\{C_m\}^{t-\Delta t} = \left(-[V] + \left[\frac{D^*}{2}\right] + \left[\frac{R}{\Delta t}\right]\right)\{C_m\}^t + \{FC\} \tag{7-86}$$

其中 D_{ij}^* 的优化取值为

$$D_{ij}^* = u_i \cdot u_j \cdot \Delta t \qquad (i = x,y \qquad j = x,y) \tag{7-87}$$

其形式像物理弥散项。

上述加权格式对敏感的对流项具有二阶截断误差。对弥散项而言只有一阶截断误差，但是由于上式优化赋权使一阶截断误差最小，由此而产生的误差可忽略。

结合方程（7-73）或（7-75）容易写出双重介质中溶质运移的数值模型。

3. BK 平巷1993年3月双井弥散试验数值模拟

瑞士 Grimsel 核废物处置试验场位于地下花岗岩中，其中的断层、裂隙带是影响核废物扩散的主要通道。为查明其中核废物运移扩散规律，1993年3月1日至24日在 BK 平巷对某一断裂带进行了双井弥散试验。从 BO5孔中连续3d 注入电导率为1800μs/cm 的盐水，从 BO15孔中抽水24d。两孔之间距离10m。据现场的地质资料分析及地下水流试验成果，由于隧道长期排水，可将该问题概化为拟稳定流动条件下的双井弥散试验。

断裂带周围的花岗岩导水性很差，发育着一系列微裂隙，中部发育着导水性较好的裂隙网络（图7-18），可将其概化成二维承压含水层。应用地下水示踪试验模拟软件 GTTS 对试验成果进行模拟与分析。

（1）流网型 有限元网格剖分：

地下水流动对弥散试验中的示踪剂运移起到了主要作用。尤其是在井附近地下水流速较大，其作用更明显。在愈靠近井周围剖分的有限元网格愈小，对井附近流速的刻画愈细，计算出的含水层水质参数精度愈高。可以写出（拟）稳定流场中 m 根流线与 n 根等势线的非线性方

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

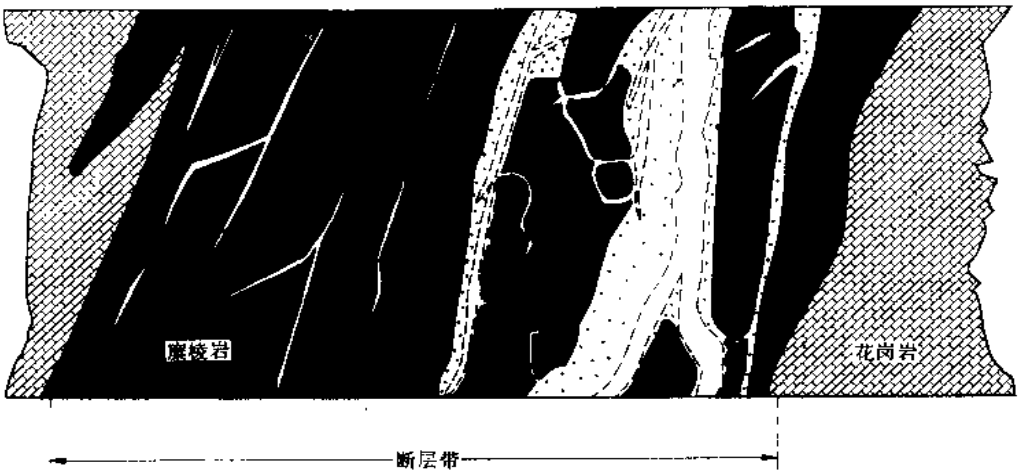


图7-18　断裂带结构示意图

程组。通过计算机程序联立求解非线性方程组，求出流线与势线所构成流网的交点。由于抽水井流量大于注水井流量，抽水井除吸收注水井流量外，还将吸收一部分区域流场中的流量，由此据流函数与势函数分析，在流场中判断划出一定范围作为数值模拟区。在抽水井上游出现不动点，其周围的流网比较稀疏，若需要则可移动计算机屏幕上光标补充一些点。将上述流网交点及补充点的坐标与编号记录下来作为数值模型中的结点，有限元网格（四边形与三角形）的剖分编号可由计算程序自动完成。图7-19是计算区域的流网型剖分网格，图7-20是放大的抽水井附近流网型网格。流网型网格比一般网格具有很多优点。

上述网格剖分是以流函数和势函数决定的。抽、注水井流量、断裂带导水系数、区域流场水力梯度等是影响流函数与势函数的参数。抽、注水井流量可以测出，其他参数已由多次的水

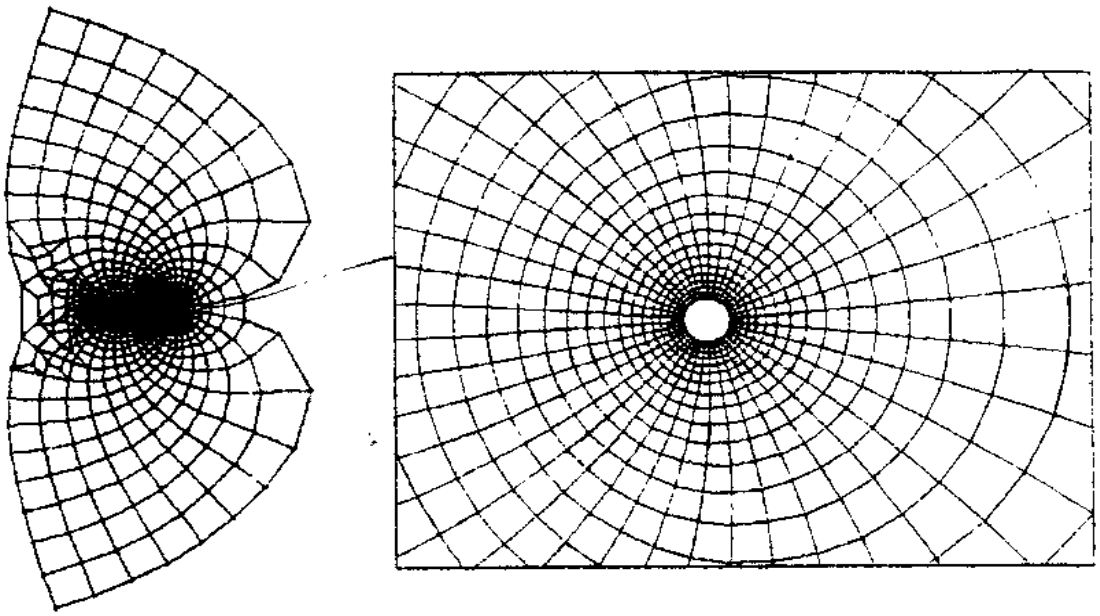


图7-19　流网型网格

图7-20　抽水井附近流网型网格

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

力试验所确定。

(2) 数值模拟结果与讨论：

将抽、注水井流量及其他参数代入(7-71)式与(7-72)式计算出每个结点上的流速分布，从而进一步计算示踪剂的分布与运移。

利用地下水示踪试验模拟软件GTTS，通过数值模型拟合抽水井中的计算浓度穿透曲线与实测曲线，求出纵向弥散度、横向弥散度、有效孔隙率（分两相介质）、浓度交换系数或扩散系数等。图7-21、图7-22与图7-23分别是单含水层介质模型、双重介质浓度交换模型与双重介质扩散模型对抽水井中浓度穿透曲线的拟合结果。表7-1是3种模型所反求出的参数结果。

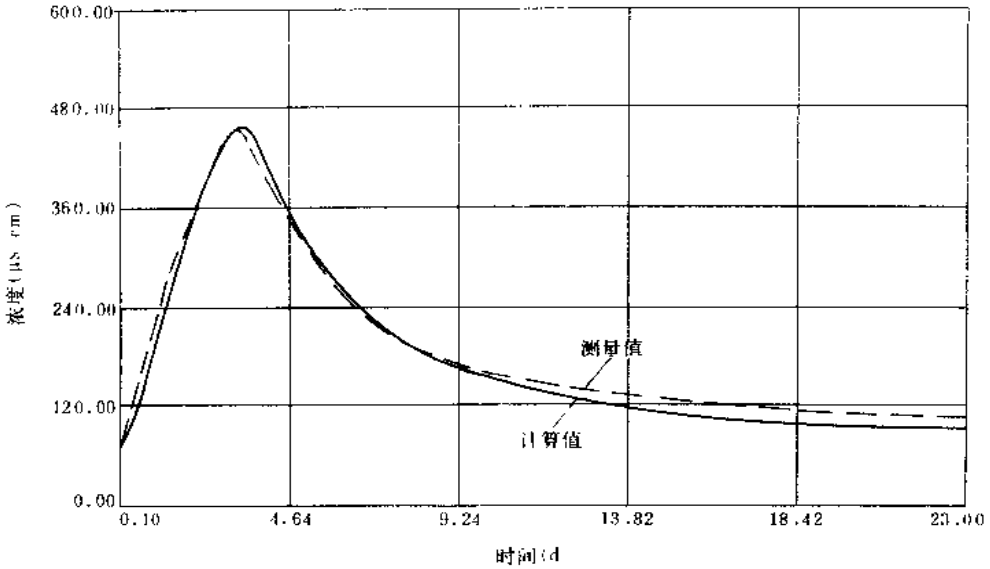


图7-21 单含水层介质浓度拟合结果

表7-1 3种模型求出的参数

参数 \ 模型	单相介质模型	双重介质浓度交换模型	双重介质扩散模型
纵向弥散度 α_L (m)	4.86	2.23	2.46
横向弥散度 α_T (m)	29.23	0.70	0.87
浓度交换系数 β	/	0.0029	/
扩散系数 D^* (m/d)	/	/	0.00085
断裂带有效孔隙率 n_{em}	0.0333	0.0323	0.0341
顶、底花岗岩体孔隙率 n_{em}	/	0.0473	/

从图7-21及表7-1看出，在抽水井中浓度的计算值与观测值拟合较好的条件下，所求出的纵向弥散度为4.86m，横向弥散度却高达29.23m，远远大于两井之间的距离（10m），也远离开在世界范围内收集到的弥散试验的统计分布规律。由于断裂带顶、底岩块中微裂隙的存在，其中的地下水流动缓慢，对水流试验影响可忽略，而对示踪剂运移却具有明显作用，一是降

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

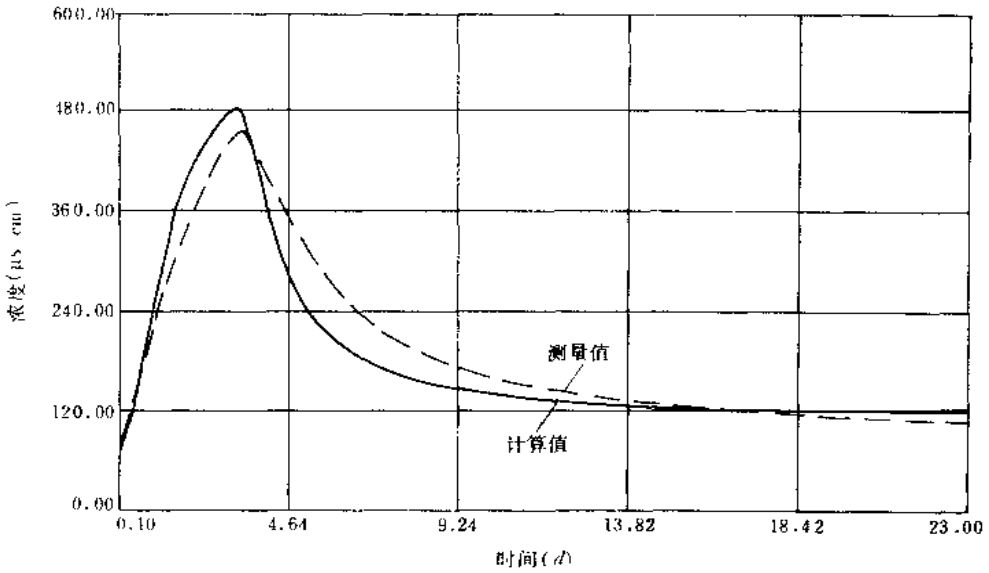


图7-22　双重介质浓度交换模型浓度拟合结果

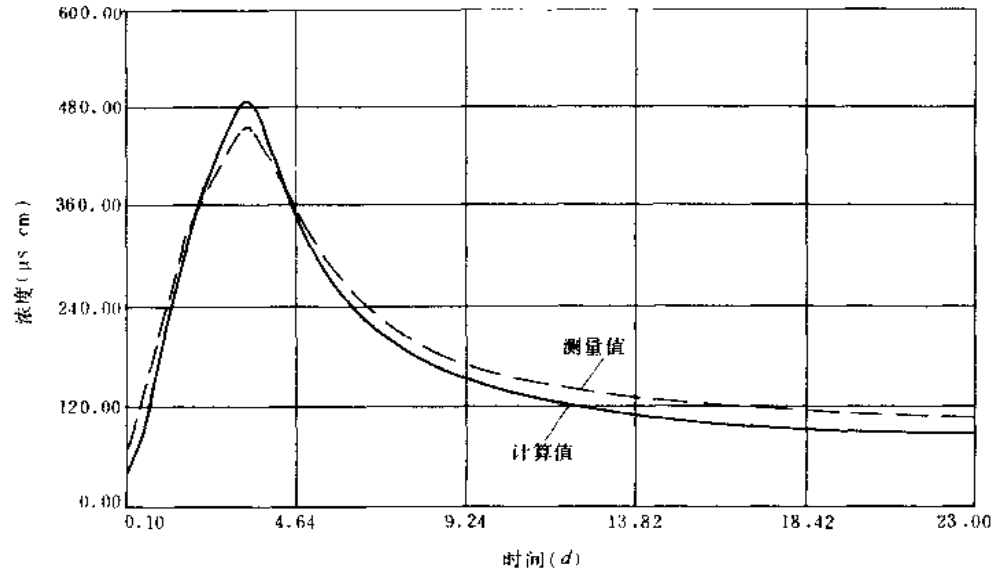


图7-23　双重介质扩散模型浓度拟合结果

低了抽水井中接收到的示踪剂峰值，二是拉长了抽水井中接收到的示踪剂峰与尾的长度，其等效于增强了弥散的强度。因此用单相介质模型模拟，所求出的弥散度偏大，尤其是横向弥散度。可见弥散试验中断裂带顶、底部岩块中近乎不流动地下水对溶质运移的作用不可忽视。

图7-22表明，利用浓度交换的双重介质模型进行模拟的结果，大大地降低了单相介质模型所求出的横向弥散度．在浓度峰值附近计算井中浓度与测量值相差较大，这可能是由于交换过程中只考虑到浓度差的作用，没考虑时间因素所致。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

由于双重介质扩散模型中除了考虑浓度差之外，还考虑到了浓度扩散时间的变化，模拟结果也显示了计算井中浓度与测量值在整体上拟合较好（图7-23）。该模型能够较合理地模拟和解释断裂带中所进行的双井弥散试验成果。

§7-6 水质模型应用的有关问题讨论

§7-6-1 水质模型与水量模型对比

这里的水质模型与水量模型均指数值模型。水量模型应用自60年代初开始至今已有30年历史。而水质模型自70年代初才开始研究，70年代末才开始用于解决实际问题，至今才10年多时间，而且现有的大多水质模型仍限于理论研究水平。

水量模型多是以渗透流速的 Darcy 定律为基础。渗透流速是一个在多孔介质的骨架和空隙上平均化了的假想流速，它未考虑多孔介质骨架结构、通道形状等复杂的微观情况，只是在实用上达到流量等效。而水质模型却不然，不同孔隙内流速不同，同一孔隙内横断面上各质点流速不同，骨架的阻挡使水流质点垂直于平均流向波状起伏，这3种作用都对纵向弥散有贡献，而横向弥散主要取决于第三项的波动情况。因此，解释水动力弥散机理需从微观角度来考虑。对于流量上等效的两种介质，可能会得到相似的渗流效应，但弥散效应有可能相差很大。对于水量问题，介质中质点（群）的流速差越大，则介质的渗透性能越好；而对于水质问题，应该强调质点（群）的流速差越大，介质弥散性能越好。因此，水量问题中，一般渗透流速即可满足需要，而水质问题则要求用孔隙平均流速来讨论问题。

在水流问题中，有压力传导系数 $a_h=\frac{k}{\mu_s}$，它反映含水层中某点水头变化引起附近水头变化的速率大小。通常 μ_s 较小，故 a_h 较大，常达10^5数量级。对于浓度问题，按照同样的理解，类似地有 $a_c=\frac{D}{1}=D$，a_c 也可相应地理解为某点浓度变化引起附近浓度变化的速率大小。从数量上讲，一般 D 要比 a_h 小得多，因此某点浓度的改变，其影响范围是很小的。对很多水位（头）问题看来是很有限的边界，对浓度问题而言完全有可能被看作是无限的。或者说，在同样的边界条件下，水头问题对其反应要比浓度问题灵敏得多。

§7-6-2 野外非均匀介质对水质模型的影响

野外含水层实际上都是非均质各向异性的。由前面讨论可知，以往的水量模型是基于渗透流速来研究水头作用下水量的传递关系。有时，地层中虽有少量透镜体，但一般还能构成具有统一水力联系的含水层。相对而言，局部透镜体对水头分布不致于产生明显的影响。因此一般将野外地层视作“均质”，用抽水试验求参往往还能得到较满意的结果。但水质模型主要研究在孔隙流速作用下示踪剂质点的运移状况，与水量传递相比，水质点的传递是非常缓慢的；同时，即使是均质的地层中，浓度分布都可能呈现各向异性的特点。当存在非均质时，水质点总是绕开透水性差的地带选择性地沿着透水性好的通道前进。因此，即使微小的非均质都有可能对水质的运移和分布有着明显的控制作用。与水量模型相比，水质模型对介质的非均质性的反应要敏感得多。

同时也表明，为解决水量问题而求取的地层参数用于水质模型可能是不够的。因为有的地层在肉眼看来是“均质”的，但由于微层理和微裂隙的存在，可以使一小段岩心的渗透系数

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

发生很大的变化（图7-24）。一般通过观测孔中混合水位进行抽水试验求取的参数显然不能反映这种变化。因此，就水质模型而言，在更细致的程度上了解地层的非均质是必要的。

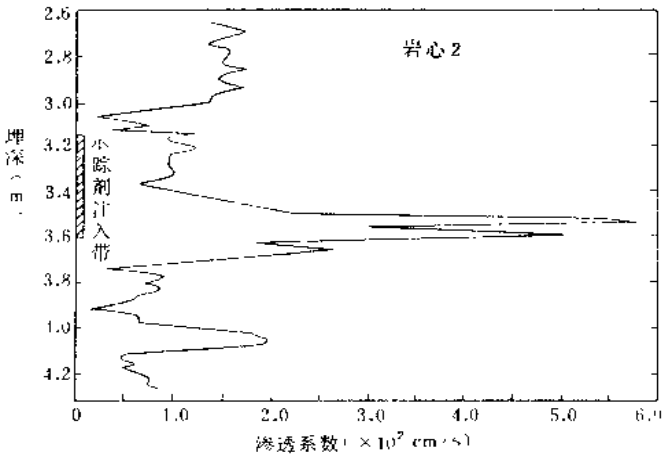


图7-24　Borden 地区某钻孔中一段岩心渗透系数随深度变化

1. 局部透镜体对水质模型的影响

一般而言，即使与室内同样粒径的孔隙介质，由于野外地层的压密、胶结，孔隙小而连通性差，造成质点流速波动大，因而弥散系数总是要比室内的大。但实际上野外弥散系数偏大的主要原因是由于将非均质地层对流迁移量视为均质地层中弥散迁移量造成的。

（1）将含局部透镜体的介质视为均质对弥散系数的影响。若在平面上有弱透水的透镜体，则水流通过时，分开绕道而行（图7-25a），如果把速度的横向分量造成的物质迁移归结为横向弥散量，则显然会加大或加强横向弥散，因为它的存在虽然减慢了物质迁移速度，但溶质一旦迁移到弱透镜体中，再慢慢地流出，从而拉大了弥散晕的前锋与尾的距离，扩大了弥散晕的范围，从而会使弥散有所加强。强透水带可以使得纵向弥散系数加大。图7-26c 为渗透系数 K_2 的地层中夹有一层渗透系数 K_1 的介质，$K_1>K_2$，K_1 介质的孔隙平均流速为 u_1，整个介质的平均孔隙流速为 u_2。如果将整个介质视为均质，且按传统的弥散理论，把按 u_2 前进的溶质运移称为对流造成的溶质迁移，而把超前或滞后于 u_2 的迁移量称为弥散迁移，这实际上就把本来是由对流造成的部分迁移量（以 u_1 前进的量）归结为弥散迁移量，从而使纵向弥散系数偏大。强透镜体可能导致横向弥散的减弱。如图7-26b 所示，流线被强透水的透镜体“吸引”，且透

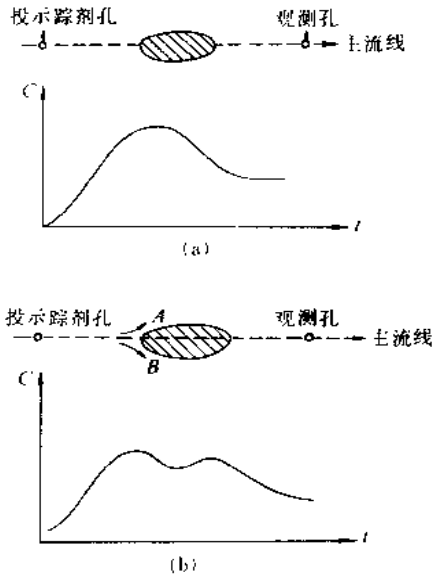


图7-25　地层局部非均质对物质迁移的影响

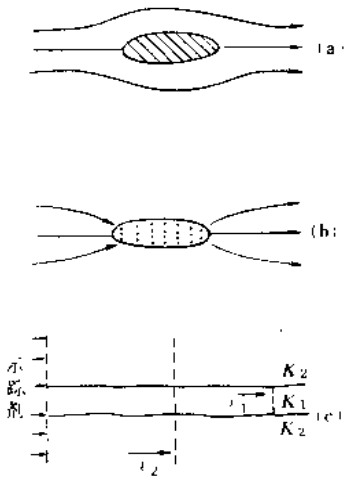


图7-26　透镜体对浓度曲线的影响

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

镜体内流速加大，溶质在迁移相同距离内，溶质分子横向扩散的范围相对减少，从而横向弥散减弱。

(2)局部透镜体对弥散试验浓度曲线的影响。野外弥散试验的浓度曲线常出现各种异常曲线情况，这显然与介质的非均质有关。如图7-26a所示，含水层中有一弱透镜体，设有示踪剂投放孔、观测孔，示踪剂流经透镜体时，以分子扩散和较小的流速进入弱透镜体，当大部分示踪剂到达观测孔使浓度曲线上升后，透镜体中的示踪剂再慢慢地“释放”出来，使曲线缓慢地下降。这种情况下，透镜体暂时贮存示踪剂的作用，从而使C-t曲线明显地不对称。如果出现关于主流线极不对称的弱透镜体，如图7-25b所示，则可能使观测曲线出现两个峰值。因为不规则的透镜体可以使瞬时投放的示踪剂分为A、B两部分，而先后到达观测孔，如果两者到达的时间相差较大，则观测孔中C-t曲线可能会出现两个峰值。如果到达的时间相差不大，则会拉长峰值出现的时间，同时降低了峰值的最大值。

野外地层中总是由多个透镜体的复杂组合，强透镜体使峰值提前到达观测孔；弱透镜体使峰值减小，使曲线下降慢或使示踪剂分期分批到达。因此，野外试验的曲线一般都是锯齿状的不对称曲线。

2. 非均质地层对不同弥散试验结果的影响

在非均质地层中，不同试验方式结果可能是不一样的，因为示踪剂总是以较快的速度在透水性好的地带迁移，同时，以较慢的速度向透镜体中扩散。因此，流速较大时，弱透镜体主要通过影响流场中流速分布从而影响到示踪剂的分布；当流速较小时，弱透镜体除了干扰流场之外，本身还通过贮存部分示踪剂而干扰浓度分布。

目前采用的弥散试验主要有两种：一是在天然水头梯度下进行；二是在抽水条件下进行。前者一般流速较小，有利于弱透镜体中分子扩散的充分进行；但后者流速大，试验时间短，不利于分子扩散。因此，两种试验方法所得出的浓度分布及求出的参数是会有区别的。如果要预测的是天然条件下污染物长期的迁移情况，也许前者试验方法求取的弥散系数更可靠。

同在天然条件下，若投放示踪剂的方式不同，结果也可能有差别。若瞬时投放，示踪剂相对较少，与弱透镜体接触的时间较短，无明显的分子扩散，因此弥散晕的分布范围内，浓度随透水性的强弱而明显变化；但连续投放示踪剂时，示踪剂与弱透镜体的接触时间较长，分子扩散较充分，弥散晕的分布范围内，浓度分布较均匀。因此，两种投放方式所求得的参数可能会有不同。

§7-6-3 人为因素对弥散系数的影响

1. 模型选择或流速不清对参数的影响

由于天然或人为因素，野外弥散试验一般是三维或二维的。如果将原来系高维弥散造成的浓度分布，结果套用较简单的模型，将之“压缩”为二维或一维等低维问题，这显然会造成弥散系数偏大，有人研究表明，这种误差完全有可能造成弥散系数10^5的偏离。若将高维流场造成的弥散采用低维的模型求解，则误差更大。

有时，虽然查清是一维流场，但因流向不准，或钻孔位置不准而将偏离主流线上的浓度误作主流线上的浓度，其误差也将是很大的。

2. 取样孔中垂向混合使浓度减小对弥散系数的影响

理论模型都是要求示踪剂只在含水层中迁移。如图7-27所示，应该只有BC段中有示踪剂，但目前有些取样法常使之垂向搅动，结果AB段也有示踪剂，BC段浓度则因此而稀释。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

曾在河北束鹿进行的一次弥散试验即属于这种情况。用的是“提桶式”取样法，一段时间后，在一观测孔中每隔一定深度取样，数据见表7-2。含水层以上浓度的升高显然是含水层内浓度稀释的结果。

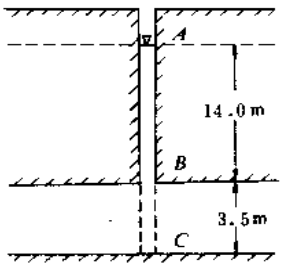


图7-27　束鹿等地含水层剖面示意图

表7-2　不同埋深示踪剂浓度

埋深（m）	浓度（荧光计读数）
6	45.5
8	41.0
10	42.0
12	45.0
14	78.0
15	88.0

可以简单地估算一下因稀释而造成的偏差。设一维流动一维水动力弥散，瞬时投放示踪剂质量为 M，则主流线上最大浓度为

$$C_m = \frac{M}{2}\sqrt{D_x \pi t}$$

上式说明，弥散系数 D_x 与浓度平方成反比，若浓度稀释$\frac{1}{10}$，则 D_x 增加100倍。由此可见，浓度稀释有可能使弥散发生数量级的增大。

3. 观测孔附近渗透性能的改变

各种钻井方法都会在一定程度上挤压地层或使井孔附近地层中充填泥浆，从而使渗透性减弱——相当于一个弱透镜体。我们曾经讨论过，天然透镜体对弥散试验有影响，那么人为造成的这种透镜体则影响更大，这是因为我们获取浓度信息的观测孔即位于其中。就水位问题而言，若抽水强度不太大，还不致于形成明显的三维流，含水层与钻孔虽只局部相通，那么在水头差作用下，钻孔中的水位与外侧含水层的水位相差也许不会太大；而对于水质问题，若只有局部相通，那么钻孔中的示踪剂浓度可能会只为钻孔外含水层浓度的几分之一或几十分之一。如果把这种由于泥浆充填使钻孔中浓度减少归结于弥散作用的话，那么将极大地夸大弥散作用。

总之，影响弥散系数的因素还有很多，这些因素大多使弥散系数偏大。

§7-6-4　水动力弥散理论的不足

野外弥散系数的偏大与实际地层的非均质性及人为因素有关外，还可能与水动力弥散理论本身的不完善有关。

(1)从水动力弥散的原理上讲，分子扩散在溶质迁移过程中起着重要作用。前面曾经讲过，如果不存在分子扩散，使示踪剂质点从一根毛管跳跃到另一根毛管上，则很难形成明显的横向弥散。但我们在一般的水动力弥散过程中，往往忽略分子扩散系数但仍然求得了与实际弥散晕较符合的结果。这显然不合适。如果这样，我们所采用的形式上的“机械弥散系数”实质上包含了分子扩散作用。这说明分子扩散作用并没有真正地弄清楚。进一步讨论分子扩散的意义可以通过将分子扩散作用忽略并且具有高分散性的示踪剂（如粘土胶体溶液，$Al(OH)_3$ 胶体等）与具有显著分子扩散作用的示踪剂来进行对比研究。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(2) 当流速改变但只要达到稳定，机械弥散产生的“基本范围”并不会改变。同时，也没有理由认为分子扩散会随着流速加快而加强。但一般实验却表明横向弥散随着流速加大而加大，显然这在理论上讲不通。这也从侧面反映出，还存在影响弥散的未知因素。

(3) 将弥散理论应用到地质介质中会出现很大偏差。即使在室内，理论模型与实验数据也并非完全吻合，这种误差具有一定的系统性。有人认为这种系统误差是因为实验中某种未被扩散方程的积分包括在内的效应所引起的。虽然这种未知效应在室内介质中未造成很大的偏差，但对于野外的地质介质，这种效应可能会得到“放大”而造成很大的偏差。因此加强室内弥散试验研究是必要的。

(4) 在讨论机械弥散时，也采用了与分子扩散相类似的 Fick 定律形式。分子扩散通量取决于单个分子运动速度与平均分子运动速度偏离程度；相似地，机械弥散通量取决于单个水质点与平均水质点运动速度的偏离程度。仔细分析不难发现，这两种偏离在程度上很大，这是因为：单个分子运动全然是杂乱无章的，而受流场总体流向及骨架的控制，单个水质点偏离程度却是有限的，因此，两种情况采用相同的形式来表示通量值得怀疑。虽然也有理论和实验证明 Fick 模型的正确性，但实验证明是将资料与 Fick 模型进行拟合，这种证明只是间接的，理论证明也是因为有了 Fick 模型后经过数学推导使其结果向 Fick 模型靠拢，这也不能算是一种严格的证明。因此，不少人认为 Fick 模型是一个经验公式或工作假定，而这种假定对实际多孔介质来说，误差有多大，尚无人做过讨论。

(5) 对于室内弥散实验，一般认为有近似式 $D=\alpha \cdot u$。但没人研究过野外条件下这种关系是否成立。本来应该有 $D=\alpha \cdot u^m$。人们只关心室内与野外弥散试验的弥散度 α 值相差很大，但实际上 m 也可能变化。若将 m 的变化归结于 α 的变化，也许是造成室内与野外弥散试验所求弥散度 α 值偏差很大的原因之一。而且，就室内实验速度分布与野外试验中速度分布的复杂程度相比，对野外弥散试验也采用 $D=\alpha \cdot u$ 是缺乏说服力的。

总之，水质模型的出现，使水质研究仅仅是简单的水质分析发展到定量的数值模拟，有助于有效地解决地下水污染等越来越严重的环境问题。因此，加强水动力弥散理论与水质模型的研究具有深远的意义。为了使水质模型更能进一步解决实际问题，今后应加强以下课题的研究：

(1) 进一步深入研究水动力弥散的机理，寻求弥散系数的物理解释，确切定义弥散系数，并充分认识水质模型的特点；

(2) 完善和改进野外水文地质勘探的手段和方法，包括查清非均质体的分布，确定渗透系数 K、给水度在空间上的变化，提高成井工艺，改进三维空间上收集水样，测定地下水的实际流速与流向等；

(3) 研究各种物理、化学、生物作用对水质迁移的影响，尤其是研究吸附、离子交换与化学反应对水质迁移的影响，尽可能对目前的水质模型做些定量的修正；

(4) 探索和发展更有效的数值方法，尤其是更符合实际的三维数值模型，同时要研究有效地克服数值弥散的方法。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

附录一　水动力弥散室内实验

A. 一维水动力弥散实验

一、实验目的

加深对弥散现象的理解；熟悉室内一维水动力弥散试验的一般步骤；掌握一维条件下纵向弥散系数的求解方法。

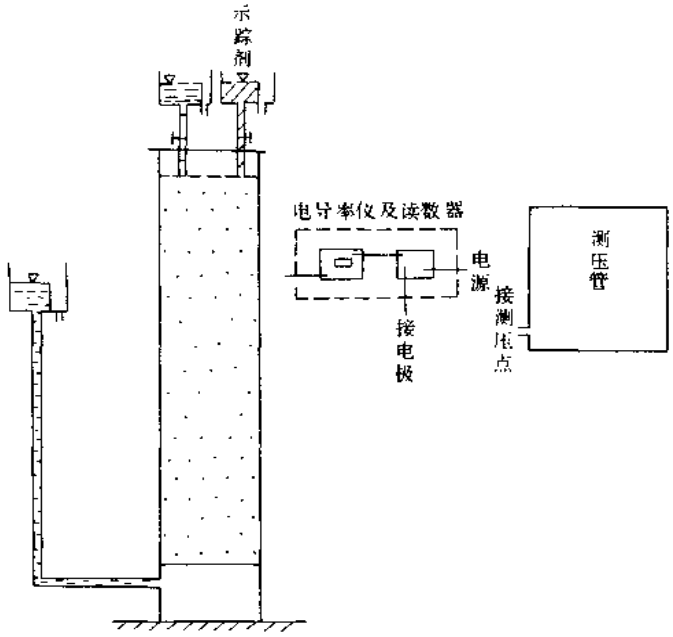
二、实验内容

熟悉实验装置；绘制 C-t 曲线；测定弥散系数。

三、实验装置与用品

1. 实验装置的主要组成部分及功能

主体装置见图附 1，该装置主要组成部分及功能如下：



图附 1　实验装置的主要组成部分示意图

(1) 砂柱体　长 200cm，内径 15cm，内盛白色均质石英砂，模拟含水层。

(2) 上下游定水头装置　用于控制砂柱内渗透流速。

(3) 测压点与测压管读数板　砂柱上每隔一定距离设有测压点，它与测压管读数板相接，可以直接读出测压点的水头。

(4) 电极点　每隔 10cm 有一电极，与电导率仪相通，用于测量电极点处浓度。

(5) 示踪剂注入箱　为一马氏瓶。

2. 浓度检测装置

由 DDS-11A 型电导率仪和读数器两部分组成。电导率仪和电极相通，再通过显示器读出

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

测点的浓度。

3. 示踪剂溶液

本实验采用 NaCl 溶液，其浓度可取 0.01N 左右。浓度大小以与自来水没有明显密度差为宜；

4. 量筒、秒表、温度计、坐标纸等

5. 实验报告记录表

见附表 1。

附表 1　一维水动力弥散试验记录表

电 极 号_____初始浓度_____电极常数_____室内气温_____水　温_____

开始时间_____结束时间_____实验日期_____年_____月_____日

时间（min）	累计时间（min）	电导率	修正电导率	浓　度	相对浓度	备　注

报告者_____记录者_____观测者_____班　级_____组　号_____

四、实验步骤

该实验步骤如下：

(1)先配制 NaCl 示踪剂，测出示踪剂浓度与电导率关系曲线；

(2)熟悉一维水动力弥散实验装置及功能，量取有关几何数据；

(3)由下向上逐渐饱和砂柱，并形成一维稳定流动；

(4)读取测压管读数、流量等，求出渗透系数与实际流速；

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(5)接通电源，并校正仪器；

(6)测定各电极初始电导率及示踪剂、自来水的电导率，记下电极常数；

(7)迅速切断自来水，并供给示踪剂，并记录初始时间，然后由上至下逐个电极进行观测并记录，直到最后一个电极浓度达到稳定为止；

(8)试验过程中，多次测流量、测压水头及温度。

五、实验资料整理

整理实验数据，继续完成记录表。作出各电极 C-t 曲线，抽象出装置所模拟的定解问题，选择适当的方法计算弥散系数。最后提交实验报告。

B. 二维水动力弥散实验

一、实验目的

增强对二维水动力弥散的感性认识；熟悉室内二维水动力弥散试验的基本过程；基本上掌握该条件下的求解弥散系数的主要方法。

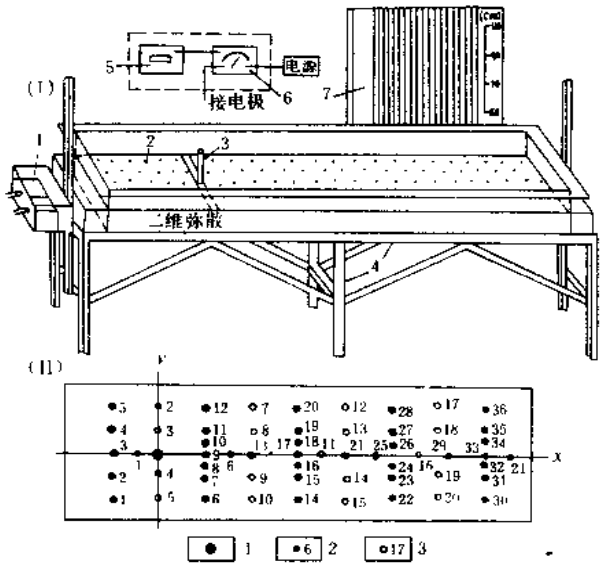
二、实验内容

熟悉实验装置及用品；掌握实验的基本原理；绘制 C-t 曲线图；计算纵向弥散系数和横向弥散系数。

三、实验装置及用品

1. 实验装置的主要组成部分及功能

主体装置见图附 2，该装置主要组成部分及功能如下：



图附 2　实验装置及电极分布示意

(Ⅰ)实验装置图：1—上游水箱；2—渗流槽；3—注水井；4—渗流槽底座及支架；5—数字显示器；6—DDS-11A 电导率仪；7—测压管。(Ⅱ)电极及测压管分布平面图：1—注水井、2—电极位置及编号，3—测压管及编号

(1)渗流槽　厚 10cm，长 200cm，宽 60cm 的有机玻璃砂槽，模拟层状含水层；

(2)定水头装置　砂槽与上、下游水箱之间设有起缓冲作用的水箱及消能装置，以保证流场稳定；

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

(3) 测压点与测压管读数板　砂槽中按一定间隔布置测压点，与测压管读数板相接，可以直接读出测压点处的水头；

(4) 电极点　各电极都插入砂层中间位置 5cm 处，以保证水流能畅通流过；除主流线上每隔 20cm 安装一电极外，其余是每隔 40cm 安装一个；与电导率仪相通，用于测量电极点处浓度；

(5) 示踪剂注入设备　连续投放时，将示踪剂装入马氏瓶；瞬时投放时，将示踪剂装入一注射器；由于要求投放井为“完整井”，故在 10cm 砂层厚度内，设有一束出口不同高度的针头，以保证示踪剂能较均匀地分布到整个砂层的厚度上去。

2. 浓度检测装置

包括转换装置、DDS-11A 电导率仪和直流电压数字显示器三个部分。

3. 示踪剂浓度

采用 NaCl 溶液，一般以 0.01N 左右为易。

4. 量筒、秒表、温度计、坐标纸、注射器等

5. 实验报告记录表

见附表 2。

附表 2　二维水动力弥散试验记录表

电 极 号_____初始浓度_____电极常数_____室内气温_____水　温_____

开始时间_____结束时间_____实验日期_____年_____月_____日

示踪剂浓度_____投放方式_____投 放 量_____

时间 (min)	累计时间 (min)	电导率	修正电导率	浓　度	相对浓度	备　注

报告者_____记录者_____观测者_____班　级_____组　号_____

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

四、实验步骤

该实验步骤如下：

(1)先配制 NaCl 示踪剂，再测出示踪剂浓度与电导率之间的关系曲线；

(2)熟悉二维水动力弥散的实验装置及功能；

(3)调整上、下游水箱水位，形成一维稳定流场；

(4)读取测压管读数、流量等，求出渗透系数与实际流速；

(5)接通电源，并校正仪器；

(6)测定各电极初始电导率及示踪剂、自来水的电导率，并记下电极常数；

(7)投放示踪剂。连续投放时，可将示踪剂装入马氏瓶，以保持均匀流量投放；瞬时投放时，可用有效体积为 50mL 的注射器将示踪剂瞬时挤出；记下投放的初始时间，然后由上至下逐个电极进行观测并记录，直到最后一个电极浓度达到稳定为止；

(8)试验过程中要多次测量流量、测压水头、温度等。

五、实验资料整理

整理实验数据，继续完成记录表，作出各电极的 C t 曲线。抽象出装置所模拟的水动力弥散定解问题，选用前面所介绍的标准曲线法、直线图解法或直接利用原始数据求参法来计算纵向弥散系数或横向弥散系数，最后提交实验报告。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

附录二　张量的基本概念及渗透系数张量

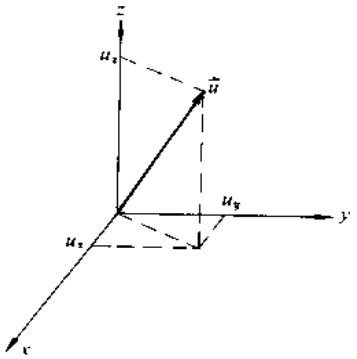
A. 张量的基本概念

物理量有不同类型。在地下水动力学的教材中，我们已经有了两种物理量的概念，一种是标量，一种是矢量。

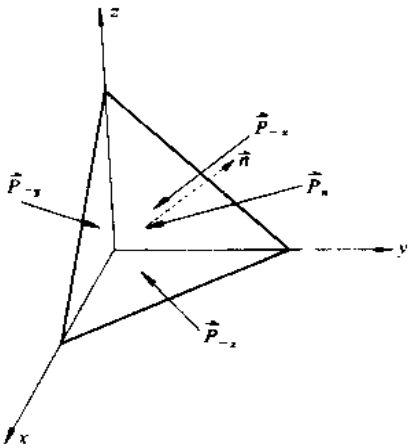
标量是指在空间上没有方向的物理量。其基本特征是只需要一个数来表示。例如质量、密度和粘滞系数等均属于标量。

矢量是空间上有一定方向的物理量。其基本特征是在三维空间上需要 3 个数（分量）来表示（图附 3），在二维空间上需要两个数（分量）来表示。而且，当坐标轴转动时，这些分量按一定规律变换。例如地下水的流速。

多孔介质的渗透率 K 是什么类型的物理量呢？矢量还是标量？密度场是标量场 $\rho(x, y, z)$，速度场是矢量场 $\vec{v}(x, y, z)$，渗透率场是什么场？我们知道，各向同性多孔介质的渗透率是标量，而各向异性呢？显然，对于各向异性介质，我们既不能用一个数来描写给定点处的渗透率 K，也不能用矢量来描写它。我们说，在均质多孔介质中的某点并给定流向，则该流向上的 K 值是一个数，但这与矢量却是两个概念。将其与渗透速度 $\vec{u}$ 相比便知，渗透率 K 并非矢量。一般地说，渗透率 K 既不是标量，又不是矢量，而是另一种物理量——张量。



图附 3



图附 4

在引入张量的概念之前，我们先考虑一下粘性流体流场中某点的受力状况。

设想有一个通过液体内部一点 N 且与 y 方向垂直的平面，并以 $\vec{y}$ 方向为该平面上一个包含 N 点的小面元上的应力可分解为沿坐标轴方向上的 3 个分量。通过垂直于另两个坐标轴 (x, z) 方向的平面可以定义其余的应力分量。也就是说，应力场中 N 点的受力状况可由与 3 个坐标平面相平行的面元上的 3 个应力矢量 $(\vec{p}_x, \vec{p}_y, \vec{p}_z)$ 共计 9 个分量来表示（图附 4）。采用双下标格式表示 N 点的应力分布。双下标中的第一个下标表示与应力分量所作用的平面相

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

垂直的轴向（即该平面的外法线方向），第二个下标表示应力分量的作用方向（即应力所投影的方向）。

N 点处应力 p 可用 9 个分量线性地表示出来。这 9 个元素所组成的二阶矩阵定义了一个张量，即应力张量。我们知道：描述一个点的密度只需一个量 ρ；描述一个点的速度 v 需要 3 个量 v_x、v_y 和 v_z。但从上述讨论中看出，描述一个点的应力 p 需要 9 个量，即 p_{xx}，p_{xy}，p_{xz}，p_{yx}，p_{yy}，p_{yz}，p_{zx}，p_{zy}和 p_{zz}。相应地，人们称密度是个标量，速度是个矢量，应力是个张量。

应力张量可记为

$$\tilde{p}=\begin{bmatrix} p_{xx} & p_{xy} & p_{xz} \\ p_{yx} & p_{yy} & p_{yz} \\ p_{zx} & p_{zy} & p_{zz} \end{bmatrix} \tag{1}$$

设 p_{nx}，p_{ny}，p_{nz}是应力矢量 $\vec{p}_n$ 的 3 个分量；n_x，n_y，n_z 是法向单位矢量 $\vec{n}$的 3 个分量，即

$$n_x=\cos(\vec{n},x)\qquad n_y=\cos(\vec{n},y)\qquad n_z=\cos(\vec{n},z)$$

可以证明

$$\left.\begin{aligned} p_{nx}&=n_x p_{xx}+n_y p_{yx}+n_z p_{zx}\\ p_{ny}&=n_x p_{xy}+n_y p_{yy}+n_z p_{zy}\\ p_{nz}&=n_x p_{xz}+n_y p_{yz}+n_z p_{zz} \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

或写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} p_{nx} & p_{ny} & p_{nz} \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} n_x & n_y & n_z \end{bmatrix}\begin{bmatrix} p_{xx} & p_{xy} & p_{xz} \\ p_{yx} & p_{yy} & p_{yz} \\ p_{zx} & p_{zy} & p_{zz} \end{bmatrix} \tag{3}$$

归纳为

$$p_{ni}=\sum_{j=1}^{3} n_j \cdot p_{ji}\qquad (i,j=1,2,3) \tag{4}$$

利用爱因斯坦求和约定*，可将上式简写成

$$p_{ni}=n_j \cdot p_{ji}\qquad (i,j=1,2,3) \tag{5}$$

对于(1)式可简化成张量的形式

$$\vec{p}_n=\vec{n}\cdot\tilde{p} \tag{6}$$

再来看速度的表达式

$$v_n=\vec{n}\cdot\vec{v} \tag{7}$$

比较(6)与(7)式不难看出：

(1) 矢量与矢量的点积是标量，而矢量与张量的点积是矢量；

(2) 流速 $\vec{v}$矢量场描述空间上速度分布状态，每点有 3 个分量 (v_x, v_y, v_z)，而应力 $\tilde{p}$ 张量场描述空间上应力分布状态，每点要 9 个分量才唯一地确定。

应力分布之所以要用 9 个数（分量）来表示，是由于当我们考察通过流体内任一面元的应力时，既要考虑这个面元的方向，又要考虑通过该面元的应力的方向，这种两次定向的性质，使得这类物理量在三维空间上成为要由 9 个数（分量）描述二阶张量。

一般说来，组成张量 $\tilde{p}$ 的各分量随坐标轴的选取面变。但是，如同矢量一样，整个张量

---

* 爱因斯坦求和约定是在与张量有关的表达式中常用的一种缩写方法。该约定规定：当等式右端的下标在等式左端不出现时，即表示对该下标求和。例如，写 $b_i=a_{ij}$，表示 $b_i=\sum_j a_{ij}$；写 $b=a_{ii}$时，则表示 $b=\sum_i\sum_j a_{ij}$。

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

本身是个物理量，它表示了流体的应力状态，但它并不依赖于坐标的选择，只是各分量的数值随坐标轴的变换而改变。

前面用矩阵表示二阶张量（实际上矩阵并非二阶张量的唯一表达式，例如还可用三个矢量表示），这样有一个好处，可将有关矩阵的一些性质用于张量分析：

(1) 若张量的非对角线元素（分量）对称于对角线（即 $p_{ij}=p_{ji}$），则称为对称张量；

(2) 当坐标轴转动时，矩阵的对角线元素之和不变，所以，张量对角线 3 个分量之和 $p_{11}+p_{22}+p_{33}$也是常量，这点具有物理意义，p_{xx}，p_{yy}与 p_{zz}是法应力（分量），p_{xy}、p_{xz}、p_{yx}、p_{yz}、p_{zx}、p_{zy}是切应力（分量），这意味着，在坐标变换中，3 个法应力之和不变，在静止液体的特殊情况下，切应力等于零，3 个法应力相等；

(3) 矩阵可以对角线化，所以，任何一个张量都可以找到一组坐标轴，使张量只有对角线张量，称之为对角线张量：

$$\tilde{K}=\begin{bmatrix} K_{11} & 0 & 0 \\ 0 & K_{22} & 0 \\ 0 & 0 & K_{33} \end{bmatrix}$$

这时的坐标轴，称为二阶对称张量的主轴，K_{11}、K_{22}与 K_{33}称为 $\tilde{K}$ 的主值；

(4) 设原来坐标系为 $ox_1x_2x_3$，其中某张量分量为 K_{ij}；转动后的坐标系变为 $ox_1'x_2'x_3'$，其同一张量的分量为 K_{ij}'，可以证明，两者之间具有如下变换关系

$$K_{ij}'=\sum_{m=1}^{3}\sum_{n=1}^{3}\beta_{im}\beta_{jn}K_{mn} \qquad (i,j,m,n=1,2,3) \tag{8}$$

或用爱因斯坦求和约定简写成

$$K_{ij}'=\beta_{im}\beta_{jn}K_{mn} \qquad (i,j,m,n=1,2,3) \tag{9}$$

其中，β_{ij}表示 x_i' 轴相对于 x_j 轴的方向余弦，即

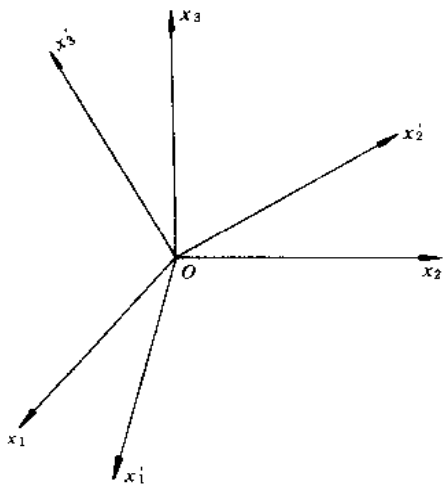
$$\beta_{ij}=\cos(\vec{x}_i',\vec{x}_j)$$

对比后不难得出矢量 $\vec{v}$与 $\vec{v}'$的变换关系

$$v_i'=\beta_{ij}v_j$$

实际上，要证明某些物理量是张量，必须证明其分量的变换服从于式 (9)。

从以上分析看出，张量比起矢量来是较抽象的一种数学结构。和矢量一样，张量的性质与描述它的坐标系无关。张量在给定的坐标系下，是由一组函数作为它的分量而被定义的一种量。这也正如一个矢量在一坐标系中是由其分量来确定的那样，当坐标系从一个变换到另一个时，作为张量分量的一组函数将按一定的运算法则变换着。因此张量也可看作是矢量的一种推广。



图附 5

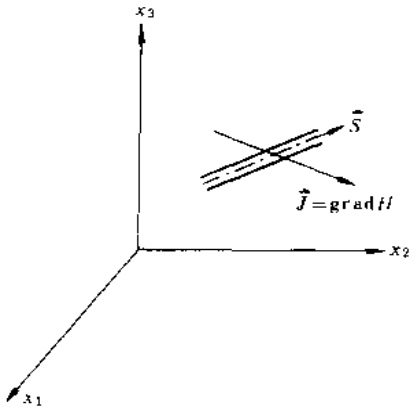
张量要比矢量高一级。标量可以称为“零阶”矢量。矢量可以称为一阶张量。二阶张量可用 3 个矢量来表示。

B. 多孔介质的曲折率张量和渗透系数张量

我们将多孔介质视为由许多毛管网络所组成。现在来考虑直角坐标系 (x_1、x_2、x_3) 中的

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

一根毛管(图附 6)，其轴线方向的单位矢量为 $\vec{S}$。渗流场平均水力梯度矢量 $\vec{J}=-\mathrm{grad}H$。矢量 $\vec{J}$ 在 3 个坐标轴上的分量为 J_i $(i=1,\ 2,\ 3)$。



图附 6

由于流动只能沿着毛管运行，因此水力梯度的 3 个分量 J_i $(i=1,\ 2,\ 3)$，只是它们在 $\vec{S}$ 方向上的投影 J_{si} $(i=1,\ 2,\ 3)$ 起着（单位）驱动力的作用。这时，沿毛管方向水流的驱动力是 3 个分量 J_i $(i=1,\ 2,\ 3)$ 的投影 J_{si} $(i=1,\ 2,\ 3)$ 之和。即

$$J_s = J_i\cos(\vec{S},\vec{x}_i) \qquad (i=1,2,3) \tag{10}$$

或

$$J_s = J_1\cos(\vec{S},\vec{x}_1) + J_2\cos(\vec{S},\vec{x}_2) + J_3\cos(\vec{S},\vec{x}_3)$$

水力学教材中曾提到，圆管中过水断面的平均流速为

$$u = \frac{d^2}{32}\cdot\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_s \tag{11}$$

两平行板间液体流动时其平均流速

$$u = \frac{1}{12}\cdot b^2\cdot\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_s \tag{12}$$

式中：d 为圆管的直径；b 为两平行板间的宽度；μ 为动力粘滞系数；υ 为液体的容重。

上两式(11)与(12)可归纳成

$$u_s = B\cdot\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_s \tag{13}$$

其中，B 称为毛管的传导率，即

$$B=\begin{cases}\dfrac{d^2}{32} & \text{圆管}\\[2ex] \dfrac{b^2}{12} & \text{两平行板}\end{cases} \tag{14}$$

于是，速度 u_s 在坐标轴 x_j 方向上的分量为

$$u_j = u_s\cos(\vec{S},\vec{x}_j) \tag{15}$$

将(10)、(13)式代入上式，得

$$\begin{aligned} u_j &= B\cdot\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_s\cdot\cos(\vec{S},\vec{x}_j)\\ &= B\cdot\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_i\cos(\vec{S},\vec{x}_i)\cos(\vec{S},\vec{x}_j) \qquad (i,j=1,2,3) \end{aligned} \tag{16}$$

我们知道，水力梯度矢量 $\vec{J}$ 沿 3 个坐标轴方向上有 3 个分量 J_i $(i=1,\ 2,\ 3)$。因为水流仅限制在毛管中，因此其每个分量对毛管中流动的贡献都体现在其沿毛管轴向上的投影。(16)式只是一根毛管的情况。在典型单元体上有许多方向不同、大小不等的毛管，我们可以在典型单元体上求 $\vec{u}$ 的平均值 $\bar{\vec{u}}$。另外，将渗透流速（达西流速）$\vec{v}$ 转化成平均的实际流速（平均孔隙流速）$\bar{\vec{u}}$。

$$\vec{v} = n\,\bar{\vec{u}}$$

而 $\vec{v}$ 具有 3 个分量 v_1、v_2 与 v_3，则

$$v_j = n\bar{u}_j = n\cdot\overline{B\,\frac{\upsilon}{\mu}\cdot J_i\cos(\vec{S},\vec{x}_i)\cos(\vec{S},\vec{x}_j)}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn

$$= n \cdot \frac{\upsilon}{\mu} \cdot J_i \cdot \overline{B \cdot \cos(\vec{S},\vec{x}_i)\cos(\vec{S},\vec{x}_j)} \qquad (i,j=1,2,3)$$

记
$$T_{ij}^{*} = \cos(\vec{S},\vec{x}_i)\cos(\vec{S},\vec{x}_j) \tag{17}$$

则
$$v_j = n \cdot BT_{ij}^{*} \cdot \frac{\upsilon}{\mu} \cdot J_i$$

$$= k_{ij} \cdot \frac{\upsilon}{\mu} \cdot J_i \qquad (i,j=1,2,3) \tag{18}$$

式中：
$$k_{ij} = n \cdot BT_{ij}^{*} \tag{19}$$

这里得出一个很重要的关系：

(1) (17) 式 $T_{ij}^{*}(i,j=1,2,3)$ 共有 9 个分量，它们构成了一个二阶张量

$$\tilde{T}^{*} = [T_{ij}^{*}] = \begin{bmatrix} T_{11}^{*} & T_{12}^{*} & T_{13}^{*} \\ T_{21}^{*} & T_{22}^{*} & T_{23}^{*} \\ T_{31}^{*} & T_{32}^{*} & T_{33}^{*} \end{bmatrix} \tag{20}$$

根据它的性质，称为多孔介质的曲折率（张量）。由 (17) 式不难看出，其中 $T_{12}^{*}=T_{21}^{*}$，$T_{13}^{*}=T_{31}^{*}$，$T_{23}^{*}=T_{32}^{*}$，故曲折率是二阶对称张量。

(2) 达西定律是由实验求得的。实际上，它也可以从理论上导出。(18) 式就是达西定律的理论形式

$$v_j = k_{ij} \cdot \frac{\upsilon}{\mu} \cdot J_i = K_{ij} \cdot J_i \qquad (i,j=1,2,3) \tag{21}$$

式中：$K_{ij} = n \cdot \overline{BT_{ij}^{*}}$，表示渗透率(张量)；$K_{ij} = k_{ij} \cdot \frac{\upsilon}{\mu} = n \cdot \overline{BT_{ij}^{*}} \cdot \frac{\upsilon}{\mu}$，表示渗透系数（张量）。

据此可写出达西定律的张量形式

$$\vec{v} = \tilde{K} \cdot \vec{J} \tag{22}$$

(21) 与(22) 是达西定律的一般形式，可用于各向异性介质

$$\begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{bmatrix} \tag{23}$$

为了对达西定律一般形式有个清晰的理解，将 (21) 式展开。并将下标写成 x、y、z 的形式，即

$$\left.\begin{aligned} v_x &= K_{xx}J_x + K_{xy}J_y + K_{xz}J_z \\ v_y &= K_{yx}J_x + K_{yy}J_y + K_{yz}J_z \\ v_z &= K_{zx}J_x + K_{zy}J_y + K_{zz}J_z \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

不难看出，在三维渗流场中，9 个分量确定了渗透系数张量，其矩阵形式为

$$\tilde{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \tag{25}$$

若在二维空间，只有与 x、y 方向有关的分量，即

$$\tilde{K} = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{yx} & K_{yy} \end{bmatrix} \tag{26}$$

由于多孔介质的曲折率 $\tilde{T}$ 是对称张量，因此渗透系数 $\tilde{K}$ 也是对称张量。因而

$$K_{xy} = K_{yx} \quad K_{xz} = K_{zx} \quad K_{yz} = K_{zy}$$

PDF 文件使用 "pdfFactory Pro" 试用版本创建 www.fineprint.cn