

文章编号:1672-6197(2005)03-0001-04

地下水及其污染研究的反问题方法

李功胜, 秦惠增, 张 瑞, 范小平, 刘进庆

(山东理工大学 数学与信息科学学院, 山东 淄博 255049)

摘 要: 介绍了基于数理方程(输运方程)模型的地下水问题研究概况及进展趋势, 分析了涉及地下水污染的几个关键数学问题. 指出主要是鉴于地下水的埋藏特点及其数据的不可直接测量性, 使得所谓反问题的数学方法成为地下水研究的一种主要途径.

关键词: 地下水; 污染; 数学模型; 反问题

中图分类号: O175.29; X523; P641

文献标识码: A

Inverse problem method in the research of groundwater system and its pollution

LI Gong-sheng, QIN Hui-zeng, ZHANG Rui, FAN Xiao-ping, LIU Jing-qing

(School of Mathematics and Information Science, Shandong University of Technology, Zibo 255049, China)

Abstract: This paper gives an introduction to the research of groundwater problems on the basis of model in partial differential equations (transport equations). Especially, several key mathematical problems arising in groundwater pollution are discussed. The analysis shows that inverse problem method has become an important direction in the research of groundwater due to its embedding characteristics and indirectly measured data.

Key words: groundwater; pollution; mathematical model; inverse problem

随着社会经济的发展, 水的供需矛盾日渐突出. 我国是一个水资源并不丰富的国家, 人均水资源占有量只占世界平均数的 1/4 左右. 地下水作为水资源的重要组成部分, 是举足轻重的供水水源和生态系统的重要支撑, 对于我国国民经济和社会发展、安全供水保障具有十分重要的作用. 由于地下水具有的埋藏性和系统的复杂性, 其污染问题不如大气和地表水污染等表现直观与突出, 不易受到关注, 因而长期受到忽视, 使得污染问题更加突出. 已有调查结果显示, 我国 90% 城市地下水不同程度遭受氮、有机烃和微量有毒有害元素污染. 地下水环境污染已呈现由点向面、由城市向农村扩展的趋势, 水环境恶化和水质污染迅速发展, 已到了极为严重的程度. 这使得对污染控制与修复的理论、方法及技术创新的研究变得极为迫切.

收稿日期: 2005-01-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10471080), 山东省自然科学基金资助项目(Y2001E03)

作者简介: 李功胜(1966-), 男, 博士, 教授.

从基础理论研究的角度来看,基于地下水系统的结构复杂性、构成要素的多样性以及污染控制与修复涉及的多学科性等特点,急需对多尺度复合污染体系物质循环过程学、污染控制与修复方法学、污染地下水系统复合界面传质与物质输运动力学、地下水水质演化的内在机理等领域开展研究与创新,为我国地下水污染的控制与修复提供理论与技术支持.这里涉及的关键基础问题是污染模型的科学表述,尤其是能否构建相应的数学模型对问题的全面解决往往起着重要的作用.

1 地下水研究与反问题

地下水运移是一种长时间、大范围的非线性行为.对于地下水问题的研究涉及到水文地质、地球物理与化学以及生物工程等多学科的方方面面. J. Bear 在 60 年代末 70 年代初关于多孔介质渗流理论的研究是地下水动力学的经典著作^[1],对于地下水模型、地下水系统管理的研究, R. Willis 等人在 80 年代中的工作^[2]具有代表性.对于地下水相关反问题(水文地质逆问题)的研究,从应用数学的角度,中国学者山东大学数学学院的 Sun Ne-zheng 先生从 20 世纪 80 年代始就进行了较为系统的研究.^[3-6]但总体来看,对地下水模拟及模型参数识别问题研究较多,针对地下水污染问题的研究相对较少.进入 20 世纪 90 年代,随着观测技术的提高、计算方法的进步与长期地下水运移资料的积累,特别是由于计算机技术的迅猛发展,地下水相关问题的反问题理论与数值计算方法研究受到数学界与工程界人士的广泛关注^[6-9].虽然这其中以水文地质学者与水利工作者的研究最多,但是数理方程的数值解法、最优化方法以及遗传算法等方法却是推动地下水相关领域研究进展的主要方法.

另一方面,20 世纪 70 年代初,随着 CT 技术的出现,国际上对反问题的研究迅速发展起来.反问题是从各个领域、各个学科的实际需求中提出的,它是一门交叉性学科.反问题研究在近 20 年来已经成为国内外数学、力学、地球物理学、水文地质与环境科学、生物学、医学与工程等领域的一个重要的、非常活跃的研究方向,展示了反问题研究的重大理论意义和广阔的应用前景.

反问题的研究起源于数学物理方程.反问题大都是非线性的.主要表现在未知函数与已知数据的关系都蕴涵在微分方程式中.反演算法中包含了微分方程数值解法、最优化方法、积分方程方法以及参数估计等新型算法的许多思想和技巧.研究反问题必须进行跨学科、多领域的携手合作.可以说,反问题的出现,为传统数理方程的研究开辟了新的领域,反问题研究已成为关联科学创新、并具有重大现实意义的学科方向.^[10-13]

地下水赋存于岩(土)层间隙之中,其运移具有对流、机械弥散、分子扩散等特征;一般满足的是抛物型(对流弥散)偏微分方程组.鉴于含水层的水文地质参数大都不能直接测量得到,因而需要通过间接的数学方法,主要是所谓反问题的方法加以辨识和确定.这就导致模型参数识别的反问题.其次,对于地下水污染问题,有关地下水污染源(汇)的主要信息(位置、强度及持续时间等)往往是不知道的.实际中常常通过现场勘测,利用试错法等工程技术方法进行处理,相对来说工作量大、经验性强且缺少统一的标准.这也需要尝试运用数学方法及手段,进行数值模拟进而加以确定和识别.这就是所谓污染源反演问题.

可以看出,地下水流动及其溶质运移过程中提出了大量的反问题.对于这类问题的研究,只要建立的模型符合实际,数值算法正确,则一定程度上完全可以用数学方法与数值模拟来代替代价较高的实际勘测工程和烦琐的数据整理工作,从而也带来一定的社会效益、经济效益和环境效益.

2 地下水模型与数理方程反问题

数理方程反问题与数理方程正问题(定解问题)是相对应的.一般说,正问题描述的是时空域中顺时间的物理变化过程,往往是按照某种物理规律(物理模型),由过去、现在来预测未来;而反问题则逆其道而行之,它描述的是时空域中逆时间的物理变化过程,往往由因果关系来识别物理模型中的参数,由外

及里,由现在重现过去.譬如,考察下面的数学模型:

$$\begin{cases} Lu = f, & \Omega \times (0, T) \\ Bu = g, & \partial\Omega \\ u = u_0, & t = 0 \end{cases} \quad (1)$$

其中, L 为模型算子(微分算子); B 为边界算子; $u = u(x, t)$ 为状态变量; f 为源(汇)项; g 为边界函数; u_0 不初值函数; Ω 为研究区域; $\partial\Omega$ 为 Ω 的边界.

由式(1)求解 $u = u(x, t)$, $(x, t) \in \Omega$, 这是数理方程正问题. 另一方面, 若式(1)中除了状态量未知以外, 还有未知的函数(系数)、或有关区域的几何特征等, 此时就导致了所谓数理方程的反问题.

实际问题往往本质上属于反问题. 特别对于赋存于地下介质中的地下水问题, 在数学意义上可归于数理方程的反问题. 一般地下水问题考虑的是二维系统模型. 在适当的坐标系下, 对应于式(1), 有下面的水流方程和溶质输运方程(见文献[3, 4]等).

水流方程

$$\mu \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} (T_x \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (T_y \frac{\partial h}{\partial y}) - \sum Q_i \delta(x - x_i, y - y_i) + \epsilon \quad (2)$$

式中, $h = h(x, y, t)$ 为水头(水压)函数; μ 为给水度(弹性释水系数); T_x 为沿 X 轴的导水系数; T_y 为沿 Y 轴的导水系数; Q_i 为单位时间内第 i 口井的抽水量; (x_i, y_i) 为第 i 口井点坐标; ϵ 为垂向入渗(降水)补给强度.

溶质输运方程:

设 M 为含水层厚度(常数), 二维输运模型为

$$R \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (vc) - \nabla \cdot (D \nabla c) = \frac{\epsilon c_s}{n_e M} - \sum \frac{Q_i c}{n_e M} \delta(x - x_i, y - y_i) \quad (3)$$

这里, R 为阻滞因子; n_e 为有效孔隙度; $c = c(x, y, t)$ 为溶质浓度; $v = (v_x, v_y) = -\frac{K}{n_e} \nabla h$ 为地下水实际流速; K 为渗透系数张量; D 为弥散系数张量; c_s 为入渗水的浓度.

若有效选取坐标系, 渗透系数张量 K 与弥散系数张量 D 分别具有如下简约形式

$$K = \begin{bmatrix} K_x & 0 \\ 0 & K_y \end{bmatrix}, \text{ 其中 } K_x \text{ 及 } K_y \text{ 分别为沿 } X \text{ 轴、} Y \text{ 轴的渗透系数;} \\ D = \begin{bmatrix} D_L & 0 \\ 0 & D_T \end{bmatrix}, \text{ 其中 } D_L, D_T \text{ 分别称为纵向与横向弥散系数.}$$

地下水问题通常要联立求解水流方程(2)与溶质输运方程(3). 一般求解过程为 1) 求水流方程, 算得水头分布; 2) 由水头梯度求地下水流速; 3) 由输运方程求出溶质依时间、空间的浓度分布.

当然, 这里一个关键的问题是模型中参数的确定. 弥散系数 D 一般可通过实验近似求得, 但是渗透系数与有效孔隙率往往难以直接确定. 这即是模型参数识别反问题. 另一方面, 在实际问题中, 输运方程中的右端项, 即所谓的源(汇)项及其属性往往也是未知的. 此时导致的是识别与确定地下水污染源的反问题.

无论是水力参数的确定, 还是源汇项的识别, 我们都需要知道关于解的部分(先验)信息. 直观地说, 就是需要另外的条件(越少越好), 称为附加数据(信息), 进行联合求解.

关于附加数据的提法一般是给出边界处, 或部分边界点处的测量信息. 有以下 3 种提法:

1) Dirichlet 数据 $u(x, t)|_{\Gamma_1} = h_1(x, t)$.

2) Neumann 数据 $\frac{\partial u}{\partial n}|_{\Gamma_2} = -h_2(x, t)$.

3) 终值数据 $u(x, T) = \theta(x)$, $x \in \Omega$.

上述提法与一般数理方程反问题的提法是一致的(见文献[13]等). 当给定了某种附加信息以后, 连同模型(2)与(3)就构成了一个完整的地下水反问题. 接下来, 同于一般数理方程反问题的研究, 主要讨

论已给数据的相容性,反问题解的存在惟一性,以及反演算法的条件稳定性等.除了这些理论上的探讨之外,还需要进行数值求解方法的研究.地下水反问题的求解也同于一般反问题的解法.其基本思路就是在某种误差意义下寻求最优解,也即应用最优化方法求解极小问题.

需要注意的是,鉴于地下水相关数据获取的困难及其复杂性,求解误差往往较大,因而要开展地下水相关问题的研究,需要与实际部门的工程师们进行协作.

3 地下水研究展望

对于地下水问题,长期以来人们关心的大都是流量、水位变化与溶质迁移行为的数值模拟与模型的数据拟合.实际上问题的关键在于数学意义上的模型参数确定与源(汇)项的识别,特别是当水力参数也未知的情况下,对于潜在污染源的同时识别问题.而且,大量的数值模拟结果还有待于理论证明,已有研究也大都缺少较为严格的数学分析和推导.比如,地下水模型参数识别的惟一性及其尺度效应是水文地质工作者面临的一个主要难题^[8,14],而关于反演计算的稳定性分析更是为人们所忽视.

另一方面,有关区域地下水研究还有许多问题没有解决,特别是对于裂隙岩溶地下水,由于地质构造的复杂性,目前国内外的通常做法是用试凑法求解或用等价的孔隙介质模型进行计算,而针对裂隙水运移模型及算法应用的研究并不多见.为此,关于裂隙介质中的水流与溶质运移的数学模型还有待于进一步的讨论,主要是渗透系数,有效空隙度与弥散度等模型参数的识别与确定问题^[14-16].对于区域地下水污染问题,当上述主要水力参数也未知时(现实情况往往如此),对于污染源与模型参数的联合反演问题更具有相当的难度.一大批数学工作者介入这一领域是地下水相关问题研究步入精细化和数字化的一个主要推动力.

对于地下水相关问题,尽管现有文献中关于适定性理论分析的很少,应用数学方法研究也有相当大的困难,如模型的过于复杂性与随机性,现有方法对计算机性能和相应正问题解的依赖性,数据的勘测误差以及数值求解时的不稳定性等等.但是国内外数学界、工程界对这一类问题的研究方兴未艾,这是一个极具发展空间的研究课题.

参考文献:

- [1] Bear J. Dynamics of Fluid in Porous Media[M]. New York:Elsevier, 1972.
- [2] Willis R, Yeh W W-G. Groundwater Systems Planning and Management[M]. Englewood Cliffs:Prentice-Hall, 1987.
- [3] 孙诤正. 地下水流的数学模型和数值方法[M]. 北京:地质出版社, 1981.
- [4] 孙诤正. 地下水污染-数学模型与数值模拟[M]. 北京:中国建筑工业出版社, 1989.
- [5] Sun N Z. Inverse Problem in Groundwater Modeling[M]. Dordrecht:Kluwer, 1994.
- [6] Sun N Z. Mathematical Model of Groundwater Pollution[M]. New York:Springer, 1996.
- [7] Bruckner G, Handrock-Meyer S, Langmach H. An inverse problem from 2D ground-water modeling[J]. 1998,14:835-851.
- [8] Mahar P S, Datta B. Optimal identification of ground-water pollution sources and parameter estimation[J]. J Water Res Plan Manag, 2001, 127(1): 20-29.
- [9] Constables D, Kacur J, Van Keer R. Parameter identification by a single injection-extraction well[J]. Inverse Problems, 2002,18:1 605-1 620.
- [10] Groetsch C W. Inverse Problems in the Mathematical Sciences[M]. Braunschweig:Vieweg, 1993.
- [11] Engl H W, Hanke M, Neubauer A. Regularization of Inverse Problems[M]. Dordrecht:Kluwer, 1996.
- [12] Kirsch A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems[M]. New York:Springer, 1996.
- [13] Isakov V. Inverse Problems for Partial Differential Equations[M]. New York:Springer, 1998.
- [14] 薛禹群,吴吉春. 面临 21 世纪的中国地下水模拟问题[J]. 水文地质工程地质, 1999,26(5): 1-3.
- [15] 朱学愚,刘建立,朱俊杰,等. 山东淄博裂隙岩溶水中石油污染物分布和迁移特征[J]. 中国科学(D), 2000,30(5): 479-485.
- [16] 钱家忠,吴剑锋,朱学愚,等. 地下水资源评价与管理数学模型的研究进展[J]. 科学通报, 2001,46(2): 99-104.