

文章编号: 1001-1986(2005)05-0033-04

地下水流线的数值算法研究

胡立堂¹, 陈崇希², 王忠静¹, 王旭升³

(1. 清华大学水利水电工程系, 北京 100084; 2. 中国地质大学环境地质研究所, 湖北 武汉 430074; 3. 中国地质大学水资源与环境工程学院, 北京 100083)

摘要:地下水流线的生成是数值模拟结果显示中的一个重点。根据地下水流线可方便分析地下水的运动态, 而常见的工具不能满足要求。论文探讨并提出了流线的“质点追踪”生成算法, 这为流线数据可视化显示及其地下水年龄计算提供了一定的依据。最后, 进行了实例研究, 结果显示了设计算法的正确性。

关键词:地下水流线; 数值算法; 地下水年龄

中图分类号: P641.2 **文献标识码:** A

Researches on numerical algorithm of groundwater flowline

HU Li-tang¹, CHEN Chong-xi², WANG Zhong-jing¹, WANG Xu-sheng³

(1. Department of Hydraulic and Hydropower Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China; 2. Institute of Environmental Geology, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China; 3. Institute of water resources and environment engineering, China University of Geosciences, Beijing 100083, China)

Abstract: Groundwater flowline generation is one difficulty in results visualization of groundwater simulation, by which we could analyze groundwater movement easily. However, common tools don't satisfy the need. This article discussed and designed the particle-tracing numerical algorithm of groundwater flowline, which would supply argument for visualization of flowline data and groundwater age calculation, and finally made a case study. The results showed the accuracy of algorithm.

Key words: groundwater flowline; numerical algorithm; groundwater age

1 引言^[1]

地下水流线反映了地下水流场在空间范围内的

变化, 因而成为数值模拟后处理中的一个重点研究内容。目前, 国际上通用的软件(如 Visual ModFlow, Processing ModFlow, FeFlow 等)显示的流线是众多离

收稿日期: 2005-01-07

基金项目: 中国地质调查局地质调查项目(批准号: 200320150002)资助

作者简介: 胡立堂(1976—), 男, 湖北潜江人, 清华大学博士后, 主要研究方向为地下水资源评价、地下水数值模拟及地下水软件开发。

[7] Ungerer P, Pelet R. Extrapolation of the kinetics of oil and gas formation from laboratory experiments to sedimentary basins[J]. Nature, 1987, 327: 52—54.

[8] Ungerer P. State of the art of research in kinetics modeling of oil formation and expulsion[J]. Org. Geochem., 1990, 16(1—3): 1—25.

[9] Behar F, Kressmann S, Vandenbroucke M, et al. Experimental simulation in a confined systems and kinetic modeling of kerogen and oil cracking[J]. Org. Geochem., 1991, 19: 173—189.

[10] Tang Y, Jenden P D, Nigrini A, and Teeman S C. Modeling early methane generation in coal[J]. Energy and Fuels, 1996, 10: 659—671.

[11] Behar F, Vandenbroucke M, Tang Y, et al. Thermal cracking of kerogen in open and closed systems: determination of kinetic parameters and stoichiometric coefficients for oil and gas generation[J]. Organic Geochemistry, 1997, 26(5—6): 321—339.

[12] Boreham C J, Horsfield B and Schenk H J. Predicting the quantities of oil and gas generated from Australian Permian coals, Bowen basin using pyrolytic methods[J]. Marine and Petroleum Geology, 1999, 16: 165—188.

[13] 刘金钟, 唐永春. 用干酪根生烃动力学方法预测甲烷生成量[J]. 科学通报, 1998, 43(11): 1187—1191.

[14] 付少英, 彭平安, 张文正等. 鄂尔多斯盆地上古生界煤的生烃动力学研究[J]. 中国科学(D 辑), 2002, 32(10): 812—818.

[15] 李贤庆, 肖贤明, 米敬奎等. 塔里木盆地库车坳陷中生界烃源岩生烃动力学参数研究[J]. 煤田地质与勘探, 2005, 33(4): 35—39.

[16] 卢双舫. 有机质成烃动力学及其应用[M]. 北京: 石油工业出版社, 1996: 1—56.

[17] 高喜龙, 肖贤明, 刘中云等. 用开放体系的热解方法对烃源岩生烃动力学的研究: 以东营凹陷某生油岩为例[J]. 地球化学, 2003, 32(5): 486—490.

[18] 李贤庆, 肖贤明, Tang Y 等. 库车坳陷煤成甲烷碳同位素动力学研究[J]. 石油与天然气地质, 2004, 25(1): 21—25.

[19] 梁狄刚, 张水昌, 金之钧等. 塔里木盆地油气源及成藏研究[A]. “九五”国家重点科技攻关项目(99—111—01—03)成果报告[R]. 北京: 中国石油勘探开发研究院, 2000: 132—166.

散的矢量,不是一条从源至汇的连续线,同时常用的绘图软件(如 Surfer 等)和算法^[1]也不能实现连续流线的绘制。而地下水连续流线算法的研究将提高数值模拟后处理的工作效率,同时对地下水数值模拟可视化软件的形成有着积极的辅助作用。本文针对地下水流数值模拟计算的某一时刻结果,基于有限元数值计算的理论(对有限差分网络和格点水头的数据,可通过一定的方法将其转化为有限元的三角网络及相应数据),通过“质点追踪”方法,即任意给定一个点,根据点所在单元的流线方向确定离散单元体的出点,再以该点为始点,依次求出流线上的各个点,从而实现空间任意给定一个点的流线数据的生成。本算法既可同地下水数值计算结合,也可成为独立模块,可用来研究感兴趣区域地下水流场的变化。

2 算法设计

地下水流线的算法设计如图 1 所示,下面以地下水流有限元理论对其加以说明。模拟区域在平面上被离散为三角网络,垂向上为多层结构模型。开始,由用户在空间上任意给定一个点坐标及计算流线方向(顺时针或逆时针方向),先由程序判断该点是否在模型网络中,如点不在模型网络内,则直接结束程序;再判断该点是否在包气带(即非饱和带)中,如点在包气带内,因地下水模拟的是潜水面至模型底边界的范围,因此也结束流线的求取;最后,再判断结点所处的单元及模拟层位。然后,在一个单元及模拟层位中根据介质信息及计算的水头数据确定结点的渗透流速,再根据已知起点及渗透流速方向确定该点在五面体中的出点,接着以出点为起点循环进行计算。当找不到侧边单元或起始点为源汇点、计算层位小于 1 或大于总模拟层数时,流线计算结束。

设给定 $P_0(x_0, y_0, z_0)$, 总层数为 N_{layer} , 由计算得知点 P_0 在单元 e 内, 单元 e 对应的结点分别为 i, j, k , 结点 i, j, k 水头值分别为 h_i, h_j, h_k 。如图 2 所示, 记点 P_0 的上格点层面单元对应结点分别为 i', j', k' , 下格点层面单元结点分别为 i'', j'', k'' , 当前格点层与上下格点层面的中截面分别为面 i_u, i_d , 如果 P_0 点的出点为 P_1 点, P_1 点出了当前的五面体(由 i_u, j_u, k_u, i_d, j_d 和 k_d 6 个结点构成), 则进入另外一个五面体, 再循环进行计算。因此首要的问题是如何计算 P_0 点的渗透流速及在五面体中的出点 P_1 , 下面分别进行讨论。设 P_0 点所处的模拟层位为 $Curlayer$ (在 $[1, N_{layer}]$ 范围内), 根据伽辽金有

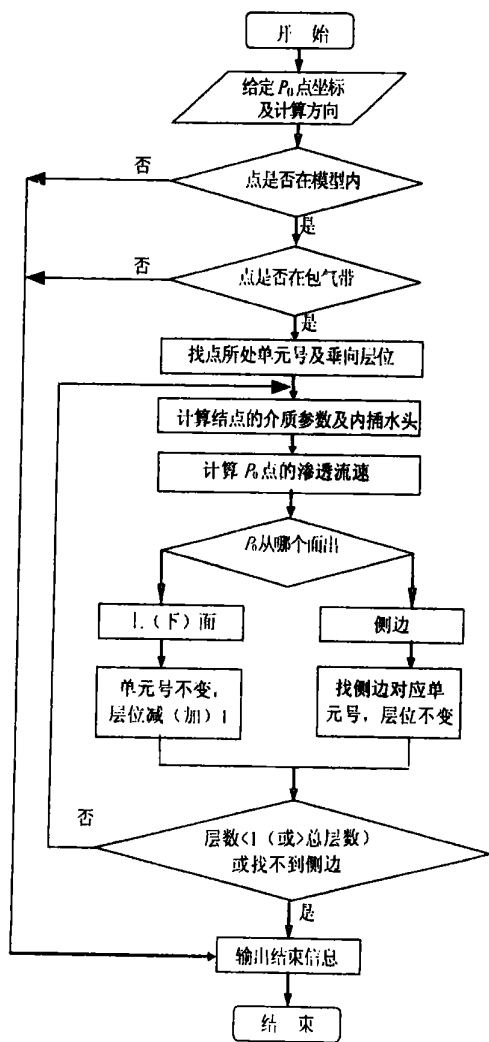


图 1 基于三角网络的地下水流线算法设计框图
Fig. 1 Algorithm design of groundwater flowline for triangle net

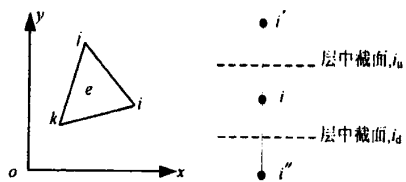


图 2 三角单元结构示意图(平面和剖面)
Fig. 2 Schematic figure of triangle net structure (in plane and section plane)

限元算法理论^[2], 记 i, j, k 3 点的基函数分别为 N_i, N_j, N_k (基函数可根据单元几何性质得出), 则单元内任意一点 (x, y) 处水头为:

$$h(x, y) = h_i N_i(x, y) + h_j N_j(x, y) + h_k N_k(x, y). \quad (1)$$

2.1 P_0 点渗透流速的计算

根据达西定律, 可得平面上渗透流速 v_x 和 v_y 分别为:

$$\begin{cases} v_x = -k_x \frac{\partial h}{\partial x} = -k_x \left(h_i \times \frac{\partial N_i}{\partial x} + h_j \times \frac{\partial N_j}{\partial x} + h_k \times \frac{\partial N_k}{\partial x} \right) \\ v_y = -k_y \frac{\partial h}{\partial y} = -k_y \left(h_i \times \frac{\partial N_i}{\partial y} + h_j \times \frac{\partial N_j}{\partial y} + h_k \times \frac{\partial N_k}{\partial y} \right) \end{cases} \quad (2)$$

在垂向上,渗透流速由当前层与上下两层的渗透流速进行矢量叠加得到:

$$v_z = \begin{cases} -k_{ii}'' \frac{h_i'' - h_i}{z_i'' - z_i} & (CurLayer=1) \\ -k_{ii}'' \frac{h_i'' - h_i}{z_i'' - z_i} - k_{ii}' \frac{h_i' - h_i}{z_i' - z_i} & (1 < CurLayer < Nlayer) \\ -k_{ii}' \frac{h_i' - h_i}{z_i' - z_i} & (CurLayer=Nlayer) \end{cases} \quad (3)$$

如果给定的 P_0 点追踪方向为逆流线方向,则 $v_x = -v_x, v_y = -v_y, v_z = -v_z$ 。

2.2 单元内 P_0 出点的计算

在一个单元 e 内,已知点 P_0 的 $x、y、z$ 方向的渗透流速,欲求 P_0 从单元内的出点 $P_1(x_1, y_1, z_1)$ 。在数值模型的一模拟时段内,假定水流是稳定的,这时迹线与流线重合,因此可通过水流在介质中的运动时间来确定 P_1 的位置,在求出时间 t 后,可通过下式计算 P_1 的位置:

$$\begin{cases} x_1 = x_0 + v_x \times t \\ y_1 = y_0 + v_y \times t \\ z_1 = z_0 + v_z \times t \end{cases} \quad (4)$$

关键的问题是时间 t 的求取,分两种情况讨论:

a. 当 $\sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ 不为 0 时,先假设平面上 P_0 点按平面渗透流速方向与当前三角单元的交点为 $P_1(x_1, y_1, z_1)$,设 P_0 点对应的上下格点层面的标高分别为 $z_{0u}、z_{0d}$,设在 P_0 点利用平面上渗透流速计算的运动时间为 t_1 ,利用垂向上渗透流速计算的运动时间为 t_2 ,而由 P_0 至出点 P_1 的运动时间为 t ,则 $t = \min(t_1, t_2)$,其中,

$$t_1 = \sqrt{(x_1 - x_0)^2 + (y_1 - y_0)^2} / \sqrt{v_x^2 + v_y^2}, \quad (5)$$

$$t_2 = \begin{cases} \frac{z_{0u} - z_0}{v_z} & (v_z > 0) \\ \frac{z_0 - z_{0d}}{v_z} & (v_z < 0) \end{cases} \quad (6)$$

当 $t_1 > t_2$,则点 P_0 从上下格点层面出;当 $t_1 < t_2$ 或 v_z 为零时,则点 P_0 从侧面单元流出。

b. 当 $\sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ 为 0 时, $v_x = v_y = 0$,则结点从上或下格点层面出, t 可按(6)式求取。

由情况 a 和情况 b 可求出时间 t ,再利用(4)式求出点 P_1 的位置。

3 数值流线算法中歧义性的讨论与算法修正

前面提出的算法虽然简单、切实可行,但该算法

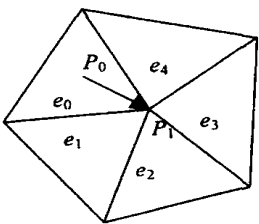
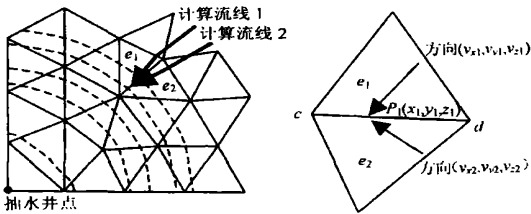


图 3 出点为单元角点的判断

Fig.3 Judgment when point is located at the vertex of element



(1)计算中的异常终止情况示意图 (2)算法修正示意图

(1)计算中的异常终止情况示意图 (2)算法修正示意图

图 4 流线计算中异常终止情况和修正示意图

Fig.4 Schematic figure of abnormal abort in groundwater flowline calculation and algorithm modification

存在如下歧义性,必须对其修正。

3.1 出点位于三角单元顶点的计算

如图 3 示,当出点 P_1 位于三角单元顶点时, P_0 点流出的三角单元可能为 $e_1、e_2、e_3、e_4$ 。当 P_1 不为源汇点时,可依次假定点 P_1 从可能的三角单元流出,如果在相应的单元能找到出点,则 P_1 从该三角单元流出;当 P_1 为源汇点时,则 P_1 为终止点。另外, P_1 的出点可能为三角单元的相交边,在计算中须引起注意。

3.2 异常终止点的出现与修正

理论上,若给定一点,无论是追踪顺流线方向,还是逆流线方向,点最终的终止点位于分水岭、源汇点或模型的边界处,否则属异常终止。图 4(1)所示为按前述设计的算法产生的异常终止情况。图中仅显示了部分三角网络,虚线表示地下水等水头线,箭头线表示数值计算中异常终止的两条流线。从图中可知,流线 1 计算中,追踪点出单元 e_1 后,进入 e_2 单元,而按照 e_2 单元的流速方向找不到出点,流线计算终止,产生这种问题的原因与数值模拟计算中单元的疏密和离源汇点的远近有很大关系,单元剖分越密,图 4(1)的情况出现的机率越小。然而,实际数值模拟计算中,由于模拟区域过大,剖分不可能过细,因此,必须对当前的算法进行修正。

有一种较简便的方法 即在计算出点时 再加一个判断和修正,当异常终止时,找两相邻单元公共边的顶点(如图 4(2)中的 c 或 d 点)作为该单元的最

终出点。如图 4(2)所示,设单元 e_1 和 e_2 相邻边为 cd ,其对应的直线方程为 $ax + by + c = 0$,对单元 e_1 中的出点 $P_1(x_1, y_1, z_1)$,按原流线方向 (v_{x1}, v_{y1}, v_{z1}) ,给一微小时间 t_a ,运动至 $P_2(x_2, y_2, z_2)$,记 $F_1(x, y) = ax_2 + by_2 + c$;同样,对 e_2 中的 $P_1(x_1, y_1, z_1)$ 按原流线方向 (v_{x2}, v_{y2}, v_{z2}) 给一微小时间 t_b ,运动至 $P_3(x_3, y_3, z_3)$,记 $F_2(x, y) = ax_3 + by_3 + c$ 。如果 F_1 与 F_2 同号时,则 P_2 正常进入 e_2 单元,不会产生歧义,否则,为避免数值算法中的流线异常终止,必须对其进行修正,按流线方向取 c 或 d 结点作为出点,可由下式判断:

$$G(x_1, x_2) = (x_2 - x_1) \times (x_c - x_1) \quad (7)$$

若 $G(x_1, x_2)$ 为正,则取 c 为出点,否则取 d 为出点。

4 算例分析

限于三维地下水流的解析模型难以求取,现取二维模型来对算法进行分析。设有一均质、各向同性且等厚的承压含水层(东西南北边界尽可能取大),其中有一对称分布的开采井稳定地抽水^[3],离散的三角网络单元如图 5 所示(其中两个点密集处为抽水井点)。根据所设计的算法,在歧义修正前,图中流线不连续(见图 6),而在充分考虑歧义因素后计算的流线图(图 7)中,流线与等值线正交,符合解析解求出的流线情况。(图 6、7 中,虚线表示等水头线。)

5 结语

在假定地下水流为稳定流的情况下,流线与迹线重合,而当我们得知介质的有效孔隙度 n_e 和渗透流速 v 时,可根据(8)式求出点的实际流速,从而得出质点在含水层中的运移时间,如果在地下水数值模型中以同位素测龄资料作为拟合目标,增加介质有效孔隙度的率定工作,该方法可预测未来情况下质点的运动位置及运移时间,这对污染物的运移分析提供了一种技术方法。设 v 为介质渗透流速, u 为介质实际流速, $l_{p_0 p_1}$ 为 P_0 和 P_1 点距离, t 为介质在 P_0 和 P_1 间运移时间,则 t 可由如下式子求取:

$$\begin{cases} v = n_e \cdot u \\ t = l_{p_0 p_1} / u \end{cases} \quad (8)$$

本文提出的方法是依据地下水的有限元理论来计算质点的运动时间,因而可计算任意一个源或汇在某个方向的流线及其中两点的运移时间,相比同

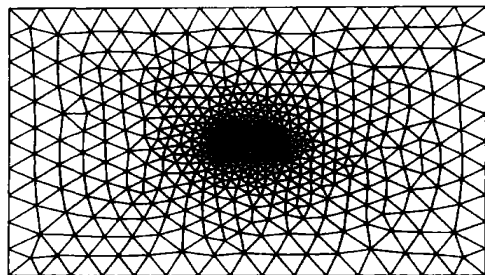


图 5 模拟区域离散化网络

Fig. 5 Plan view of sample model discretization

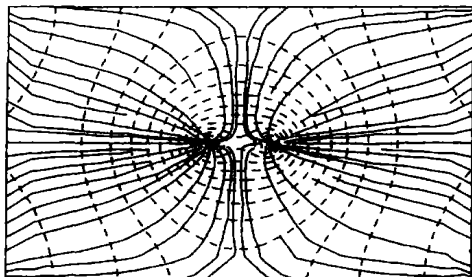


图 6 地下水流线的计算结果(歧义修正前)

Fig. 6 Results of groundwater flowline calculation (not checking the different meanings)

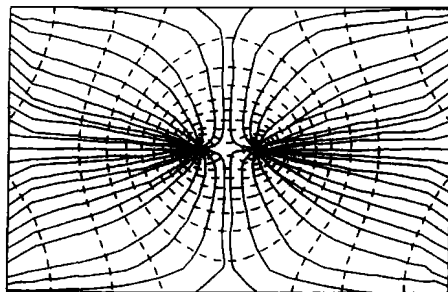


图 7 地下水流线的计算结果(歧义修正后)

Fig. 7 Results of groundwater flowline calculation (checking the different meanings)

位素求取地下水年龄方法来说,该方法具有更高的适应性和拓广性。然而本文只是在理论情况下讨论了该法的应用,而对于实际情况,由于受水文地质参数的复杂性和某些未知干扰因素等影响,该法的应用仍待更进一步研究。

参考文献

- [1] 刘瑜, 张永波. 基于数值格网数据生成流场图的算法研究[J]. 地理学与国土研究, 2002, 18(2): 44—50.
- [2] 陈崇希, 唐仲华. 地下水流动问题数值方法[M]. 武汉: 中国地质大学出版社, 1990, 87—93.
- [3] 陈崇希, 林敏. 地下水水动力学[M]. 武汉: 中国地质大学出版社, 1996, 87—90.