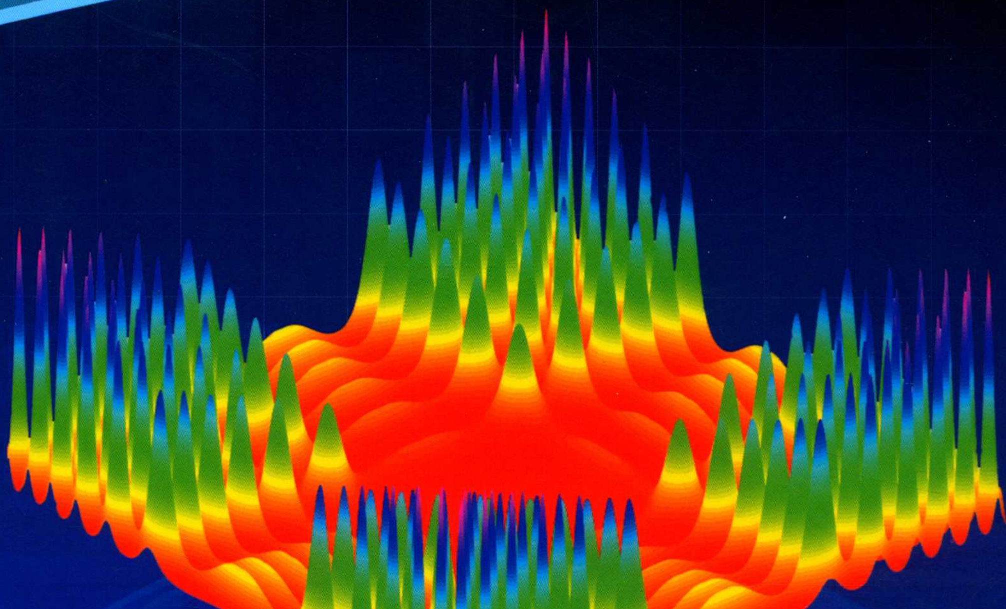
地学数值模拟与数学优化

◎ 李大伟　杨新社　米石云　编著



石油工業出版社

地学数值模拟与数学优化

李大伟　杨新社　米石云　编著

石 油 工 业 出 版 社

内 容 提 要

本书从数值模拟和数学优化在地学中的应用出发，介绍了实用、成熟的相关算法，研究了基本数学方法、数值积分、有限差分法和有限体积法以及有限元方法等在地球科学方面的应用，并介绍了最新的数学优化算法。

本书可供从事地学模拟和优化的研究人员及相关院校师生参考阅读。

图书在版编目（CIP）数据

地学数值模拟与数学优化 / 李大伟等编著. —北京：石油工业出版社，2018.1

ISBN 978-7-5183-2178-0

Ⅰ. ①地… Ⅱ. ①李… Ⅲ. ①地球科学-数值模拟-最优化算法 Ⅳ. ①P

中国版本图书馆 CIP 数据核字（2017）第 247247 号

出版发行：石油工业出版社
（北京安定门外安华里 2 区 1 号 100011）
网　址：www. petropub. com
编辑部：（010）64523544
图书营销中心：（010）64523633
经　　销：全国新华书店
印　　刷：保定彩虹印刷有限公司

2018 年 1 月第 1 版　2018 年 1 月第 1 次印刷
787×1092 毫米　开本：1/16　印张：16.25
字数：390 千字

定价：80.00 元
（如发现印装质量问题，我社图书营销中心负责调换）

作者简介

李大伟：男，1996年在中国地质大学（北京）能源系获得工学博士学位，主要研究方向为油气运移模拟。1996—2001年在原石油物探局研究院北京地球软件公司工作，从事地震地质综合研究和软件设计开发工作，2001—2003年在中国石油勘探开发研究院从事博士后研究工作，主要从事新构造运动以及中国石油第三次油气资源评价研究。2004—2011年主要从事中国石油勘探与生产技术数据管理系统（A1）的试点、推广和应用。2011年至今，在中国石油勘探开发研究院从事海外勘探开发信息化建设与应用工作，近年来主要从事油气行业数据挖掘研究和应用。共发表论文约50篇，出版专著3部。

杨新社：男，1998年在英国牛津大学获得应用数学专业博士学位，现任英国密德萨斯大学教授，剑桥大学兼职导师及冰岛雷克雅未克大学客座教授。长期从事应用数学、数学建模、计算数学、工程优化以及科学、数值计算方法等领域的科学研究。现为国际科学和工业优化及数学建模协会主席、《数学建模和数值优化》国际期刊的主编，及IEEE计算与商业智能委员会的主席，是基本科学指标（ESI）全球排名前1%的高引论文作者。发表论文300多篇，出版著作20余部。

米石云：男，1992年毕业于中国石油勘探开发研究院，获石油地质与勘探专业硕士学位；2009年获中国石油勘探开发研究院矿产普查与勘探博士学位。长期从事油气地质定量化模拟研究、油气资源评价及应用软件研制、油气资源信息系统研制与建设等跨学科研究工作。先后获得省部级科技奖励7次，合作出版盆地模拟、勘探目标评价方面专著4部，发表论文40余篇。

前　　言

利用计算机进行数值模拟是现代地学家应具备的一种非常重要的分析技能。随着数学、计算机技术的不断发展，地学各个领域的研究人员从客观和技术上具备了使用数学和计算机作为工具进行地学半定量和定量研究的条件，从而大大促进了地学的发展。如今，基于各种数学模型的计算机模拟已经用于研究各种地质过程（如油气运移、盆地模拟、油藏描述、石油工程等）。此外，在地学研究中，又存在各种最优化问题（例如油气勘探开发过程和成本的最优化），我们都希望以最小的成本获取最大的收益，特别是在当前低油价作为全球石油市场新常态的形势下，如何利用已经掌握的各类海量地学数据资源，深入分析、模拟、挖掘其中蕴藏的各种有价值的信息和知识，并优化地学研究和日常工作，是我们应当重点关注的数学、计算机和地学综合研究领域。为此我们编著了本书，以期为从事地学模拟和优化的研究人员提供一本比较系统介绍数值模拟和数学优化常用算法的专业书。

但是，由于地球科学的研究主题非常广泛，而且其本身也是在不断发展的。而数值模拟和数学优化方面的成熟算法也非常多，因此如何从数值模拟和数学优化在地学应用中的角度，选择那些实用、成熟的相关算法，使本书既简明，又能比较全面地涵盖那些重要而且有趣的主题以及流行的算法，是编写本书时比较头痛的问题。

为此，笔者不得不优选主题和算法，精简章节，力图在简明扼要的同时避免遗漏重要内容和常用的相关算法；在每种算法中，基本都列举了我们研究过的例子，用循序渐进的方式来描述各种算法及其应用，帮助读者理解基本原理，把握数学模拟的基本技巧。因此本书的风格比较适合非数学专业的读者。

本书没有详细的定理证明，从严格的数学分析角度来看其实并不太正规。这样做的原因有二：首先，可以流畅地展示结果，避免行文被定理证明打断；其次，可以更加侧重培养读者的分析技巧，有益于构建数学模型以及求解数学方程的数值算法。

本书可分为四大部分，分别介绍数学方法、数值算法、实际应用和数学优化。

第一部分是对基本数学方法的介绍，包括数学模拟概述（第一章）、微积分与复变量（第二章）、向量与矩阵（第三章）、常微分方程与积分变换（第四章）、偏微分方程和求解方法（第五章）、概率（第六章）和地质统计（第七章）方面的内容。

第二部分首先介绍了数值积分（第八章）、有限差分法（第九章）和有限体积法（第十章）的研究，最后探讨了有限元法（第十一章）。

第三部分主要是上述主题在地球科学方面的几个应用。首先详细探讨了弹性和多孔介质弹性力学方面的内容（第十二章），然后探讨了多孔介质中的流动，包括地下水流动和污染物运移（第十三章）。通过这几个实例，试图启发读者如何将各种数学方法应用于自己的研究工作中。

第四部分包括第十四章至第十七章，主要介绍了几个最新的数学优化算法。将这部分内容放到最后，并不是说明这部分内容不重要，反而是我们重点向读者推荐的内容，其中包含了一些最新的数学优化方面的算法，例如非线性规划、模拟退火、遗传算法、差分进化算

法、蚂蚁和蜜蜂算法、粒子群优化算法、加速粒子群优化算法、二进制粒子群优化算法、萤火虫算法、布谷鸟搜索算法、蝙蝠算法、花授粉算法等。

在本书的后面还有一个附录，提供了一些相关的程序（Matlab 和 Octave），便于读者进行数值模拟研究。

值此书得以正式出版之际，感谢国家油气重大科技专项“全球剩余油气资源研究及油气资产快速评价技术”提供出版经费，同时感谢石油工业出版社编辑的辛勤工作。

虽然我们试图努力保证本书中的每一个公式、每一个算法、每一个数字等都是正确的，也经过了多轮的审校，但在编写过程中难免会有一些错误。非常欢迎读者提出反馈和建议。

目　　录

第一章　数学模拟概述

第一节　引　　言

一、数学模拟

利用数学语言构建抽象模型，对某一真实系统的复杂行为进行描述，这一过程称为数学模拟。数学模型属于定量模型，通常以常微分方程及偏微分方程表示。数学模型也可以是统计模型、模糊逻辑模型、经验关系。实际上，凡是利用数学语言进行描述的模型都可以称为数学模型。数学模拟已经广泛应用于自然科学、计算、工程、气象等多个领域，当然也包括地球科学。例如，理论物理学实质上就是利用若干基本定律（如能量守恒定律、动量守恒定律等）以及十几种重要方程（如波动方程、薛定谔方程、爱因斯坦方程等）对现实过程进行模拟。这些方程几乎全部为偏微分方程。

数学模拟和数值算法与地球科学相关的一个重要特征就是跨学科性，需要应用数学、计算机科学、地球科学以及其他学科的相互交叉。数学模拟与科学计算相结合是一种新兴的跨学科技术。很多国际公司应用这种技术来模拟物理过程，设计新产品和解决难题，从而提升其国际竞争力。

数学模拟的基本步骤如图 1-1 所示。模拟的第一步通常是对现实问题的分析，通过理想化和各种假设条件提取基本物理过程。一旦建立起了理想的物理模型，利用偏微分方程(PDE)、积分方程以及统计模型就可以将其转化为对应的数学模型。然后凭借数学分析(如果可能的话)、数值模拟以及其他工具对该模型进行深入研究，并在适当条件下进行预测。最后，利用已有的模型、已建立好的基准以及实验数据去验证模拟和预测结果。如果验证结果满意（一般情况下，第一次验证时是难以实现的），就认为该数学模型是可以接受的。否则就需要根据反馈情况对物理模型及数学模型进行修正，然后重新验证模拟及预测结

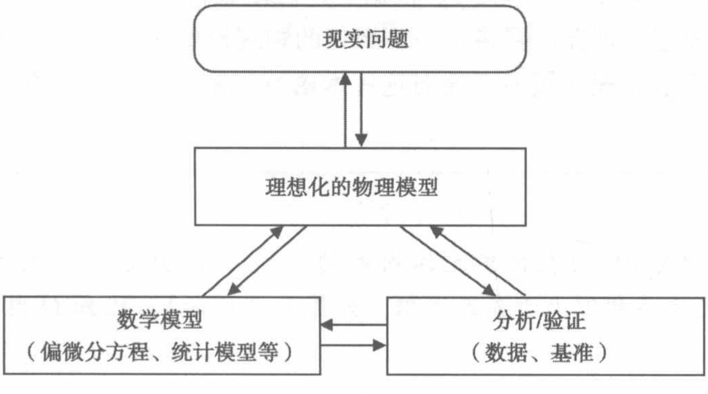


图 1-1　数学模拟

果。只有反复执行这一过程（通常要重复多次），才能确保最终构建的数学模型较为准确，能够深入洞察现实问题并对所要研究的过程进行预测。

以地球科学为例，任何一类物理问题在传统意义上都有两种处理方法：理论法、野外观测与实验法。基于数学模拟的理论法是对实际问题的理想化和简化，理论模型通常只提取问题的基本特征或主要特征。即便是这种已经过度简化的系统，所得出的数学方程往往仍然难以用于数学分析。另一方面，对于野外观测及实验法，即使可行，也可能会过于昂贵。除了经济性和实用性方面的制约，这种方法还受其他多种因素的限制，例如地区的可进入性、物理参数的范围以及开展不同实验所耗费的时间等。随着计算机运算速度与性能在过去几十年间的大幅提升，第三种切实可行的方法也应运而生：基于数学模型的计算机模拟和数值实验法。众所周知，计算机建模与模拟法凭借合理的性价比，对传统的理论法和实验法形成了有益补充和完善。

数学模拟实际上是以抽象的形式构建现实问题的数学模型。这一过程对于研究人员的实践和经验要求都很高。数值模拟的风格很大程度上依赖于个人的理解、抽象概念、问题的类型以及处理类似问题的经验，因此难度较大。即使是面对同一个物理过程，由于个人对过程的局部侧重点不同，所产生的模型也可能有较大差异。例如，处理某一特别问题时我们可能会对某一特定量格外关注，但处理其他过程或问题时却不再对其关注。

二、模型构建

数学模拟的第一步通常是对物理过程进行分析，并通过理想化和近似法建立抽象物理模型，利用各种基本定律（例如质量守恒、动量守恒、能量守恒以及牛顿定律）将该理想化的物理模型转化为数学方程。以糖在一杯水中的扩散过程为例，我们知道糖在浓度存在空间差异的情况下才会发生扩散，这个物理过程比较复杂。糖在水中的浓度分布受很多因素影响，包括温度、搅拌、糖的质量、糖的类型、加糖的方式，甚至容器的形状等。为了理想化这一过程，假定温度恒定（从而可以忽略热传递的影响），无搅拌（因为搅拌会影响有效扩散系数，并产生层流甚至紊流）。然后选择表征单元体（REV），确保单元体与水杯相比体积非常小，这样就可以用一个单一的浓度值代表单元体内部的糖含量（如果该单元体体积过大，就会造成内部糖分浓度存在较大差异）。此外，还假定糖与水不发生化学反应（否则就要处理一些其他问题）。如果从一个很高的位置将糖块放入杯中，杯中的水会溅起，造成液体体积的变化，引发流体动力学问题。因此只关注将糖加入水后的过程，而不关注水中初始杂质的问题（或者只限于一定程度）。根据上述假定条件，将整个过程理想化为糖在恒温静水中扩散的物理模型。现在需要将这一理想化的物理模型转化为数学模型，在本例中为抛物型偏微分方程或扩散方程（读者可能对这些术语感到陌生，后文会有详细介绍）。下面我们来看一个实例。

例 1–1

假设水杯中体积为 dV 的表征单元体内部的平均浓度为 c，Ω 为任意虚构的封闭体积（远远大于表征单元体体积但小于容器体积，如图 1–2 所示）。已知 Ω 内每单位时间糖分质量变化率为

$$\delta_1 = \frac{\partial}{\partial t}\iiint_{\Omega} c\,dV$$

其中，t 代表时间。由于质量是守恒的，Ω 中糖含量的变化只能通过封闭截面 $\Gamma=\partial\Omega$ 补充或流出。设 J 为截面通量，则通过截面 Γ 的总物质通量为

$$\delta_2 = \iint_\Gamma J \cdot \mathrm{d}S$$

Ω 中总质量守恒：

$$\delta_1 + \delta_2 = 0$$

或

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_\Omega c\mathrm{d}V + \iint_\Gamma J \cdot \mathrm{d}S = 0$$

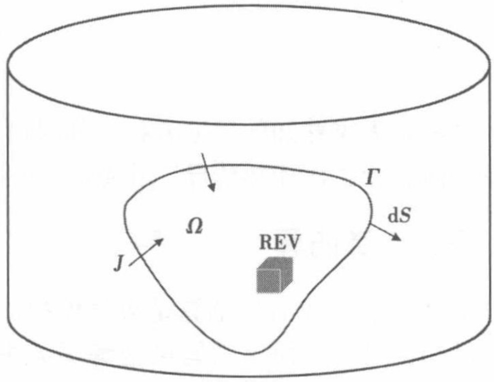


图 1-2　表征单元体（REV）

这就是该数学模型的积分式。根据高斯定理（详见后文）：

$$\iint_\Gamma J \cdot \mathrm{d}S = \iiint_\Omega \nabla \cdot J\mathrm{d}V$$

可以将曲面积分转化为体积积分。因此有

$$\frac{\partial}{\partial t}\iiint_\Omega c\mathrm{d}V + \iiint_\Omega \nabla \cdot J\mathrm{d}V = 0$$

由于区域 Ω 固定不变（不受 t 支配），允许第一项中微分与积分交换，得到

$$\iiint_\Omega \frac{\partial c}{\partial t}\mathrm{d}V + \iiint_\Omega \nabla \cdot J\mathrm{d}V = \iiint_\Omega \left(\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot J\right)\mathrm{d}V = 0$$

由于封闭区域 Ω 具有任意性，上述公式对于任何形态或大小的 Ω 均成立，因此，被积函数必须为零。最终得到

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0$$

这就是质量守恒的微分式，为偏微分方程。已知扩散是从高浓度向低浓度发生的，扩散率与浓度梯度 ∇c 成正比。菲克定律给出了通过单元截面积的通量 J 为

$$J = -D\nabla c$$

其中，D 称为扩散系数，与温度及物质类型有关。负号说明扩散方向与梯度相反。代入质量守恒方程，得到

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \nabla \cdot (D\nabla c) = 0$$

或

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \nabla \cdot (D\nabla c)$$

在简化情况下，D 视为常数，则

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\,\nabla^2 c \tag{1-1}$$

这就是大家熟知的扩散方程。如果用相关物理参数替换 D，可以将扩散方程应用于多种现象的研究中，例如热传导、孔隙压力消散、地下径流以及固结现象等。

三、参数估算

量级（非精确值）估算是数学模拟的另一项重要内容。如果某个物理量的量级和变化范围已知，可以选择正确的尺度编写无量纲数学模型，从而利用正确的数学模型来解决问题。此外，还可以在正确的尺度下选择更为适用的数值模型求解。通过估值能够加深对物理过程的理解，有助于构建更加合理的数学模型。例如，研究板块构造时应如何准确设定物理尺度（地幔的受力和厚度）？在动力一定的情况下（来自热对流或俯冲带拉张力），是否可以对板块漂移速度的量级进行估算？当然，实际过程肯定非常复杂，相关领域的研究仍在进行中。但这并不妨碍我们作一些简单（但并不是太朴素）的估算。

例 1–2

板块漂移速度估算：板块漂移与热对流有关，黏滞蠕变引发变形作用。应变率 $\dot{e}$ 与应力 σ 的关系为

$$\dot{e} = \frac{\sigma}{\eta}$$

其中，η 代表地幔黏度，这里取一个固定的值 $\eta = 2\times10^{21}\,\mathrm{Pa\cdot s}$（取决于温度）。

设 L 为地幔的典型厚度，v 为平均漂移速度。应变率表示为

$$\dot{e} = \frac{v}{L}$$

将该方程与前文的蠕变关系相结合，可得

$$v = \frac{L\sigma}{\eta}$$

取 L 的典型值约为 $3\times10^6\mathrm{m}$，σ 的典型值约为 $10^6\mathrm{Pa}$，有

$$v = \frac{L\sigma}{\eta} \approx \frac{3\times10^6\times10^6}{2\times10^{21}} \approx 1.5\times10^{-9}\mathrm{m/s} \approx 4.7\mathrm{cm/年}$$

鉴于大多数板块漂移速度为每年 1~10cm，因此计算结果基本合理。另一个有趣的现象是，只要 L 值与 σ 值的乘积满足 $L\sigma\approx3\times10^{12}$，即使两者不够精确，估算得到的 v 值也不会出现较大偏差。

若 $L\approx1000\mathrm{km}\approx10^6\mathrm{m}$，为保证板块漂移速度值不变，要求 $\sigma=3\times10^6\mathrm{Pa}\approx30\mathrm{atm}$。由此可见，如此大规模运动所需要的驱动力居然不大，俯冲带内俯冲板块提供的拉力（来自于密度差）就足以满足要求。

下面的实例介绍如何估算地球表面热损失率以及地壳、大气中的温度梯度（图 1-3）。此外，还证明了阳光对于大气热能平衡的重要性。

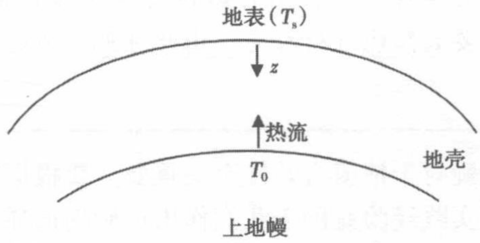


图 1-3　地球表面热损失率估值

例 1-3

已知地表平均温度 T_s 约为 300K，陆壳厚度 d 为 35~70km。粗略估算，岩石圈上部温度 T_0 为 900~1400K。地温梯度约为

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}=\frac{T_0-T_s}{d}\approx 9\sim 31\mathrm{K/km}$$

全球地温梯度观测值范围为 10~30K/km。岩石热导率 k 为 1.5~4.5W/(m·K)（忽略与温度的关系），这里选取 $k=3\mathrm{W/(m\cdot K)}$ 作为地壳热导率的估算值。热损失率服从傅里叶热传导定律：

$$q=-k\,\nabla T=-k\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}\approx 0.027\sim 0.093\mathrm{W/m^2}$$

该值接近平均实测值 0.07W/m²。对于 6~7km 厚的洋壳，温度梯度（以及热损失率）可能要高出海底 5 倍之多，损失的热量成为防止海洋冰冻的主要能量。

若损失的热量穿过大气，根据能量守恒定律，有

$$k\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}\bigg|_{\mathrm{crust}}+k_a\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}h}\bigg|_{\mathrm{air}}=0$$

其中，h 为地表高度，空气热导率 $k_a=0.020\sim 0.025\mathrm{W/(m\cdot K)}$（同样排除温差变化影响）。空气中的温度梯度可表示为

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}h}=-\frac{k}{k_a}\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}z}\approx -3.6\sim -4.5\mathrm{K/km}$$

设 $\mathrm{d}T/\mathrm{d}z=30\mathrm{W/km}$。上式中负号说明温度与高度成反比。干燥空气的真实温度梯度约为 10K/km，湿润空气则为 6~7K/km。由于热导率随湿度的增大而增大，因此温度梯度随湿度增大而减小。

或者，已知大气层有效厚度约为 50km（即占 99.9%空气质量的气层厚度）。当然我们知道大气层与外太空不存在明确的边界，而且大气层可延伸数百千米。此外，假设宇宙真空中温度约为 4K，地表温度为 300K，空气中的温度梯度为