

21世纪高等学校研究生教材



北京市高等教育精品教材立项项目

环境科学与工程系列教材

环境模拟数值方法

HUANJING MONI SHUZHIFANGFA

■ 陈家军 王 烜 / 编 著



北京师范大学出版集团

BEIJING NORMAL UNIVERSITY PUBLISHING GROUP

北京师范大学出版社

21世纪高等学校研究生教材



北京市高等教育精品教材立项项目

环境科学与工程系列教材

环境模拟数值方法

HUANJING MONI SHUZHIFANGFA

陈家军 王 烜 / 编 著



北京师范大学出版集团

BEIJING NORMAL UNIVERSITY PUBLISHING GROUP

北京师范大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

环境模拟数值方法/陈家军,王烜编著. —北京:北京师范大学出版社,2010.2

ISBN 978-7-303-10519-9

I. ①环… II. ①陈… III. ①环境系统-数值模拟-研究 IV. ①X21

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2009) 第 180718 号

营销中心电话 010-58802181 58808006
北师大出版社高等教育分社网 <http://gaojiao.bnup.com.cn>
电子信箱 beishida168@126.com

出版发行: 北京师范大学出版社 www.bnup.com.cn
北京新街口外大街 19 号
邮政编码: 100875

印 刷: 唐山市润丰印务有限公司
经 销: 全国新华书店
开 本: 170 mm × 230 mm
印 张: 21.5
字 数: 350 千字
版 次: 2010 年 2 月第 1 版
印 次: 2010 年 2 月第 1 次印刷
定 价: 33.00 元

策划编辑: 胡廷兰 责任编辑: 胡廷兰
美术编辑: 高 霞 装帧设计: 高 霞
责任校对: 李 菡 责任印制: 李 丽

版权所有 侵权必究

反盗版、侵权举报电话: 010-58800697

北京读者服务部电话: 010-58808104

外埠邮购电话: 010-58808083

本书如有印装质量问题, 请与印制管理部联系调换。

印制管理部电话: 010-58800825

前言

随着工业化社会的飞速发展，环境问题已成为全社会共同关注的焦点。长期以来，环境科学和工程工作者为了有效地控制环境污染，一直在试图阐明污染物在环境中的存在特征和变化趋势，包括污染物的产生、运移和归宿，以实现对环境影响的准确预测、评估，对环境污染的控制和修复。

环境模拟是环境(系统)过程的再现，环境系统的广泛性和复杂性决定了环境模拟的广泛性和复杂性。本书所关注的则是环境介质中污染物质的产生、运移、转化的模拟。环境介质和其中的污染物质都始终处于不断的运动变化过程中，环境介质是污染物质的载体，明确环境介质运动变化情况是环境模拟的基础。

环境模拟可以通过不同方法来实现，主要有物理方法、化学方法、生物方法和数学方法。明确环境过程的物理、化学及生物机制是应用数学方法的前提。数值方法由于其适用条件广泛，已成为主要的数学模拟方法，本书采用的数值方法主要是针对环境介质中污染物质输移边值问题的偏微分方程数值方法，它是数值分析方法的组成部分。因此本书的核心是如何运用数值方法模拟环境介质中污染物质的迁移转化。

本书所讨论的数值方法，从数学理论上讲是应用数学中偏微分方程数值方法，包括有限差分、有限元、边

界元等方法。由于这类方法的实用性,自其问世以来在科学与工程各个领域都有着广泛的应用,且在应用实践中得到了飞速的发展。环境科学与工程是一个交叉性的综合学科,就环境模拟而言,其涵盖面广,如按环境介质来分就有水环境模拟、大气环境模拟、土壤环境模拟等,不同介质中污染质输移的数值模拟方法有一定的差别,考虑到环境科学与工程专业学生知识的综合性,作者在课程的教学和本书的编写过程中试图从不同环境介质中污染质输移数值模拟的共性出发,介绍污染质输移数值模拟的原理和方法,力图使学生获得环境模拟的基本理论和基本知识,深入理解环境介质中污染质输移的主要机制、污染质输移基本模型,掌握污染质输移有限差分、有限元法的基本原理和数值求解方法,理解环境数值模拟中的前沿方法,能有效地利用和改进现有的或发展新的数值方法和计算程序,为进行环境工程分析、环境评价、环境规划管理等环境保护工作提供科学手段和依据。

本书以北京师范大学环境学院开设的“环境模拟数值方法”课程为基础,结合了作者近年来在相关领域的研究成果,经十多年(1996~2008年)教学实践不断修订而成。参加本书编写工作的有陈家军、王烜、尚光旭、解建波、李合莲,张俊丽、王浩、杨建、王育礼、谭雅懿。分工如下:第1章,陈家军、王烜、杨建;第2章,陈家军、尚光旭;第3章,陈家军、王烜、王育礼、谭雅懿;第4章,陈家军、尚光旭;第5章,陈家军、解建波;第6章,陈家军、尚光旭、王浩;第7章,陈家军、王烜、李合莲、张俊丽、王育礼、谭雅懿。最后由陈家军、王烜统稿而成。参加本书审稿工作的有北京师范大学的王红旗教授、王金生教授、彭胜副教授,清华大学的戴松涛副教授,在此,作者对他们提出的宝贵意见表示衷心的感谢。

在多年的教学过程中,许多老师和同学也提出了不少建设性意见,对本书的编写给予了极大的支持,在此,作者表示衷心的感谢。受作者水平所限,书中肯定存在一些不足或错误之处,敬请读者给予指正。

陈家军

2009年12月

内容简介

数值模拟方法是现代科学和工程中进行定量分析和实际问题所广为使用的有效数学方法，对于进行环境影响分析、指导环境工程设计也同样有着重要的作用。环境模拟数值方法课程的教学目的是使环境科学、环境工程专业的研究生获得环境模拟数值求解方法的基本理论和基本知识，深入理解环境介质中污染质输移的主要机制和基本模型，掌握污染质输移有限差分、有限元法的基本原理和数值求解方法，理解环境数值模拟中的前沿方法，能有效地利用和改进现有的数值方法和计算程序，并在此基础上有所发展，为进行环境工程分析、环境评价、环境规划管理等环境保护工作提供科学手段和依据。

作为环境模拟数值方法课程的教材，本书包括 7 章内容。第 1 章简要介绍环境模拟及其数值方法、环境模拟的主要对象，污染物在环境介质中的迁移与转化特征。第 2 章介绍污染质输移的载体——地表水和地下水流动数学模型，概述污染质输移一维及多维数学模型的推导、初始条件和边界条件的给定、模型的求解方法和典型污染质输移问题的解析解。第 3 章阐述有限差分法的基本思想、不同差分格式的误差表示、误差阶数和一维、二维扩散模型和对流—扩散型污染质输移问题差分方程的

构造及三维对流—扩散型污染质输移问题差分方程的构造。第4章论述一维有限元单元形状函数的构造、稳定和非稳定输移问题有限元方程组的建立，二维污染质输移问题的三角形元和四边形等参元基函数及权函数的选取和有限元方程组的推导，以及三维污染质输移问题的单元基函数的选取和有限元方程组的推导。第5章推导稳定和非稳定污染质输移问题边界积分方程，建立线性元及常数元边界元方程组。第6章介绍离散方程组的特点、系数矩阵的存储方法，讲述离散方程组的解法，包括追赶法和标准带宽消元解法的直接解法，以及超松弛和强隐式迭代解法。第7章作为应用专题，阐述环境数值模拟的问题和若干应用实例，分别介绍了环境初始场的模拟方法、一维河流水量水质差分数值模型的应用、考虑悬移质吸附与沉降作用的海湾 ^{137}Cs 迁移模拟、地下水和土壤包气带污染质输移的有限元模拟、填埋场释放气体运移数值模型及应用。

本书的重点是污染质输移的有限差分、有限元的基本原理和方法，特别强调方法所涵盖的污染质输移转化机制及数学表述。

考虑到数值模拟方法应用的广泛性，本书也可供其他专业研究生及有关科技人员参考。

目 录

第 1 章 绪 论 /1

- 1.1 环境模拟及其数值方法概述 /3
 - 1.1.1 环境模拟的概念及意义 /3
 - 1.1.2 环境模拟的对象 /4
 - 1.1.3 主要环境模拟数值方法及应用现状 /5
 - 1.1.4 环境数学模型的分类 /9
- 1.2 污染物在环境介质中的运动与转化特征 /11
 - 1.2.1 对流迁移作用 /11
 - 1.2.2 扩散作用 /11
 - 1.2.3 污染物的衰减和转化 /16
- 练习题 /17

第 2 章 污染质输移数学模型 /19

- 2.1 流动数学模型 /21
 - 2.1.1 地表水流动数学模型 /21
 - 2.1.2 地下水流动数学模型 /23
- 2.2 污染质输移数学模型 /28
 - 2.2.1 基本模型的推导 /28
 - 2.2.2 初始条件和边界条件 /33

2.2.3 污染质输移数学模型常用解析解 /35

练习题 /53

第3章 污染质输移有限差分法 /55

3.1 有限差分法概述 /57

3.1.1 有限差分法的基本思想 /57

3.1.2 差分格式 /62

3.1.3 差分格式的相容性、收敛性和稳定性 /67

3.2 一维污染质输移差分方程 /75

3.2.1 对流弥散问题差分方程的建立 /75

3.2.2 数值弥散和过量 /81

3.3 二维污染质输移差分方程 /84

3.3.1 矩形网格的差分格式 /84

3.3.2 三角形网格的差分格式 /90

3.4 三维污染质输移差分方程 /100

3.4.1 立方体网格的差分格式 /100

3.4.2 四阶全隐紧致差分格式 /103

练习题 /110

第4章 污染质输移有限元法 /115

4.1 有限元理论基础 /117

4.1.1 变分原理 /117

4.1.2 加权剩余法 /122

4.1.3 有限元方法求解步骤 /125

4.2 一维污染质输移模型有限元方程 /126

4.2.1 稳定扩散型输移问题的线性元 /126

4.2.2 非稳定对流扩散型输移问题的线性元 /132

4.3 二维污染质输移模型的有限元方程 /139

4.3.1	污染质输移的三角形元 / 139
4.3.2	污染质输移的四边形等参元 / 159
4.4	三维污染质输移的有限元方程 / 167
4.4.1	污染质输移的四面体元 / 167
4.4.2	污染质输移的六面体元 / 172
4.4.3	污染质输移的三棱柱元 / 175
	练习题 / 176

第 5 章 污染质输移边界元法 / 185

5.1	边界元法基础 / 187
5.1.1	第二格林公式 / 187
5.1.2	边界积分方程 / 188
5.2	二维污染质输移问题边界元方程 / 189
5.2.1	污染质输移边界积分方程 / 189
5.2.2	污染质输移边界元数值计算 / 196
5.3	三维污染质输移问题边界元方程 / 204
5.3.1	污染质输移边界积分方程 / 204
5.3.2	污染质输移边界元数值计算 / 205
5.4	计算实例：边界元法在填埋场气体运移数值模型中的应用 / 213
5.4.1	基本方程的推导 / 213
5.4.2	边界积分方程及初始条件和边界条件 / 215
5.4.3	实例分析 / 215
	练习题 / 222

第 6 章 污染质输移离散化方程的解法 / 227

6.1	离散方程的基本特征及系数矩阵的存储 / 229
6.1.1	离散方程的基本特征 / 229

- 6.1.2 系数矩阵在计算机中的存储方法 /230
- 6.2 直接解法 /232
 - 6.2.1 追赶法 /232
 - 6.2.2 高斯消去法 /234
 - 6.2.3 三角分解法 /235
 - 6.2.4 分块解法 /237
- 6.3 迭代解法 /241
 - 6.3.1 超松弛迭代解法 /241
 - 6.3.2 强隐式法(SIP法) /243
- 练习题 /251

第7章 环境模拟数值方法应用专题 /253

- 7.1 初始场模拟(估值) /255
 - 7.1.1 初始场模拟的趋势面加残差法 /255
 - 7.1.2 初始场估值的泛克立格法 /257
 - 7.1.3 实例分析 /260
- 7.2 黄河下游水流水质的有限差分模拟 /265
 - 7.2.1 研究区概况 /265
 - 7.2.2 黄河下游水流的数值模拟 /266
 - 7.2.3 黄河下游水质的数值模拟 /271
 - 7.2.4 结果分析 /276
- 7.3 海湾放射性污染物迁移数值模拟与预测 /277
 - 7.3.1 概述 /277
 - 7.3.2 大鹏澳内¹³⁷Cs迁移的对流—扩散模型 /278
 - 7.3.3 有限元数值模型 /282
 - 7.3.4 模型计算程序 /287
 - 7.3.5 模型检验 /288
 - 7.3.6 大鹏澳¹³⁷Cs水质预测 /293

7.3.7 结论 /294

7.4 铀尾矿库区地下水污染物迁移有限元模拟预测 /294

7.4.1 概述 /294

7.4.2 数学模型 /296

7.4.3 有限元求解 /296

7.4.4 源项 /298

7.4.5 模拟结果 /299

7.4.6 结果分析 /305

7.5 黄土包气带放射性核素迁移的有限元模拟 /305

7.5.1 非平衡吸附核素迁移数学模型 /305

7.5.2 非平衡吸附核素迁移有限元模型 /307

7.5.3 现场核素迁移数值模拟分析 /309

7.5.4 结论 /312

7.6 填埋场释放气体运移数值模型及应用 /312

7.6.1 填埋场释放气体运移数值模型 /313

7.6.2 数值模型的应用 /316

7.6.3 结论 /319

练习题 /319

参考文献 /321

附录 常用数学知识 /326

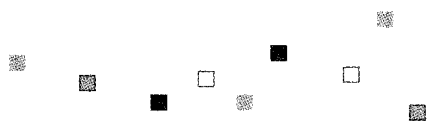
附录 A 矢量(或向量)代数 /326

附录 B 多元函数微分 /328

附录 C 多元函数积分 /330

第 1 章

绪 论



随着社会经济和人类生产活动的飞速发展,环境问题已成为国际社会共同关注的焦点。长期以来,环境科学和工程工作者为了有效地控制环境污染,一直在试图阐明污染物在环境中的存在特征和变化趋势,包括污染物的产生、运移和归宿,以实现对环境影响的准确预测、评估,对环境污染的控制和修复。本章简要介绍环境模拟的概念及意义、模拟对象、环境数学模型的分类、主要环境模拟数值方法及污染物在环境介质中的运动和转化规律。

1.1 环境模拟及其数值方法概述

1.1.1 环境模拟的概念及意义

环境一般是指围绕人们的空间及其中直接或间接影响人类生存和发展的各种因素的总体,是一个非常复杂的系统,由大气圈、水圈、土壤圈和生物圈等圈层组成。环境系统可以被看作由物质、能量和信息三部分组成,是一个开放的系统,在环境的各圈层之间时时刻刻都存在着物质、能量和信息的交换,其中的物质部分被称为环境介质,能量和信息部分被称为环境因素。环境介质是环境因素的载体,一般以气态、液态和固态存在,可以是大气、水体或土壤,也可以是岩石或包括人类在内的一切生物体。本书所考虑的环境介质主要指大气、水体(包括地表水和地下水)和土壤,污染物则是人们所关注的主要环境因素。

环境模拟是环境(系统)过程的重演,环境系统的广泛性和复杂性决定了环境模拟的广泛性和复杂性。环境模拟可以指环境系统自身变化的模拟,包括系统各组成部分变化的模拟,本书所关注的则是环境介质中污染物质的运移、转化的模拟。环境介质和其中的污染物质都始终处于不断的运动、变化过程中,环境介质是污染物质的载体,明确环境介质运动变化情况是环境模拟的基础。

对于环境系统而言,模拟占有很重要的地位。就某一个环境系统的污染控制和规划管理而言,为了研究污染物在该环境系统中的变化,一般不会采取向其倾倒大量污染物(特别是有毒、有害物质)的办法,而是采用模型模拟的方法获取相关参数,进而研究环境系统的变化规律。这种研究方法根据实际监测资料,通过逻辑推理、数理分析或实物模型试验揭示环境介质中污染物质迁移、转化的本质特征,建立起能代替真实系统的模型,然后用模型进行环境系统变化规律的研究,并预测污染物质在环境介质中的迁移、转化。

环境模拟可为环境介质中污染物迁移转化的理论研究、区域开发与行业发展的环境保护规划、建设项目环境影响评价及环境保护措施的制订提供科学依据,具有重要的理论意义和实际应用价值。

1.1.2 环境模拟的对象

环境污染问题中污染物种类繁多,各种污染物均可以是环境模拟的对象,且环境模型的模拟对象不仅可以是物质形式的污染物,也可以是其他形式的污染物,如能量形式的余热等。环境模型模拟的主要对象可以按污染物的载体——环境介质,同时结合污染物的特性加以分类。

(1) 大气环境模拟

大气污染物的种类很多,根据其存在的状态,可以概括为两大类:气态污染物和气溶胶状态污染物。气态污染物主要有五类:二氧化硫为主的含硫化合物;一氧化氮和二氧化氮为主的含氮化合物;碳的氧化物;碳氢化合物及卤素化合物。气溶胶状态污染物主要有:尘,指能悬浮于大气中的小固体粒子,其直径一般为 $1 \sim 200 \mu\text{m}$;液滴,指大气中悬浮的液体粒子,一般是由于水汽凝结及随后的碰撞增长而形成;有机盐和无机盐粒子等化学粒子,指在大气中由化学过程产生的固态或液态粒子。

(2) 水环境模拟

水环境中的污染物包括以下几类。

悬移质及无机盐:颗粒悬浮于水中随水流而搬运,其悬移物被称为悬移质。悬移质及无机盐是无毒物质,主要影响水的浑浊度和含盐量。

重金属物质:环境中重金属污染物质主要是指铅、铜、锌、镉、铬、汞等,水体中重金属主要以溶解态、悬浮态存在。

有机污染物:水体中有机污染物按降解性可分为可降解有机物、难降解有机物。可降解有机物主要是酚类,包括挥发性酚和不挥发性酚,以及溶解性和颗粒性碳水化合物、蛋白质、油脂、氨基酸、脂肪酸、酯类等有机物;难降解有机物主要是多环芳烃、滴滴涕(DDT)、氯代化合物等化学性质稳定和难被微生物降解的有机化合物。

富营养化物质:造成水体富营养化的因素很多,其中最主要的是氮和磷。水体中氮和磷主要来源于生活污水、工业废水、家畜排泄物和农业径流等。

浮游植物:浮游植物是指在水中浮游生活的微小植物,通常指浮游藻类,主要包括蓝藻、硅藻、甲藻等。

放射性物质：分低中水平放射性物质和高水平放射性物质。低中水平放射性物质，如核电站排放的放射性污染物，主要是氚(^3H)、锶-90(^{90}Sr)、铯-134(^{134}Cs)、铯-137(^{137}Cs)、银-110(^{110}Ag)等。

水温：水温作为模拟对象是考虑其是一种能量，可产生热污染。水温是影响水质过程的重要因素，过高的水温或过快的水温变化都会影响水生生物正常生长和水体的功能，形成热污染。

(3) 土壤环境模拟

土壤环境污染物的种类很多，有些与水环境中污染物是一致的，包括重金属物质、无机盐、有机污染物、放射性物质等类别。

1.1.3 主要环境模拟数值方法及应用现状

环境模拟可以通过不同方法来实现，主要有物理方法、化学方法、生物方法和数学方法。明确环境过程的物理、化学及生物机制是应用数学方法的前提。

环境系统模拟所形成的数学模型(控制方程)的微分和积分项中包括时间和空间变量(自变量)以及物理变量(因变量)，这些变量分别对应着时间和空间求解域和定义在求解域上流动问题的解。要把这些积分或者微分项用离散的代数形式代替，必须首先把求解域表示为离散形式。在不同的离散方法中，求解域或者被近似为一系列网格点的集合，或者被划分为一系列控制体或单元体，因变量定义在网格上或者控制体的中心、顶点或其他特征点上。在每一个网格点或者控制体上，流体运动方程中的积分项或者微分项被近似地表示为离散分布的因变量和自变量的代数函数，并由此得到作为微分或积分型控制方程近似的一组代数方程，这个过程被称为控制方程的离散化，其中所采用的离散化方法被称为数值方法或者数值格式。这组代数方程的解(即数值解)给出了离散点上流场的定量描述。

数值方法由于其适用条件广泛，已成为主要的数学模拟方法。本书采用的数值方法主要是针对环境介质中污染物质输移边值问题的偏微分方程数值方法，它是数值分析方法的主要组成部分。因此本书的核心是如何运用数值方法模拟环境介质中污染物质的迁移、转化过程。

环境模拟的数值方法从最初的有限差分法(Finite Difference Method, FDM)和有限元法(Finite Element Method, FEM)，发展到后来的边界元法(Boundary Element Method, BEM)和有限分析法(Finite Analysis Method, FAM)等多种方法并存，其中最常用的是有限差分法和有限元法，每一种数