

水 科 学 前 沿 丛 书

地下水与土壤水运动 数学模型和数值方法

杨金忠 朱 焱 查元源 蔡树英 著



科学出版社

水科学前沿丛书

地下水与土壤水运动数学模型 和数值方法

杨金忠 朱 焱 查元源 蔡树英 著

科学出版社

北京

内 容 简 介

本书详细论述地下水运动、土壤水运动和溶质运移的数值方法。首先简单介绍饱和-非饱和水分运动、土壤水分蒸发和地下水入渗、溶质运移问题的数学模型；其次，分别给出了一维、二维、三维和拟三维饱和-非饱和水流运动和溶质运移数值模型及相应的算例；同时，本书介绍地下水运动和溶质运移问题的不确定描述方法，详细论述了地下水和土壤水随机数值模型，重点介绍了蒙特卡罗方法、动量分析方法和随机配点法；最后介绍了数据同化在饱和-非饱和水分运动数值模拟中的应用，给出了利用集合卡尔曼滤波反求水文地质参数和实时预测的方法。

本书可供水文与水资源、农田水利、农业水土工程、水文地质、环境工程、土壤物理等专业的科研人员、工程技术人员和高等学校师生阅读和参考。

图书在版编目(CIP)数据

地下水与土壤水运动数学模型和数值方法/ 杨金忠等著. —北京: 科学出版社, 2016.6

(水科学前沿丛书)

ISBN 978-7-03-048291-4

I. ①地… II. ①杨… III. ①地下水-关系-土壤水-数学模型-数值方法
IV. ①P641.13 ②S152.7

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2016)第 103538 号

责任编辑: 杨帅英 张力群 / 责任校对: 张小霞 何艳萍
责任印制: 张 伟 / 封面设计: 陈 敬

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京教图印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2016 年 6 月第 一 版 开本: 787×1092 1/16

2016 年 6 月第一次印刷 印张: 30 1/4

字数: 692 000

定价: 149.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

《水科学前沿丛书》编委会

(按姓氏汉语拼音排序)

顾	问	曹文宣	陈志恺	程国栋	傅伯杰		
		韩其为	康绍忠	雷志栋	林学钰		
		刘鸿亮	卯智	孟伟	王超		
		王浩	王光谦	薛禹群	张建云		
		张勇传					
主	编	刘昌明					
		常务副主编	徐宗学				
		编	委	蔡崇法	常剑波	陈求稳	陈晓宏
				陈永灿	程春田	方红卫	胡春宏
				黄国和	黄介生	纪昌明	康跃虎
				雷廷武	李怀恩	李义天	林鹏
				刘宝元	梅亚东	倪晋仁	牛翠娟
				彭世彰	任立良	沈冰	王忠静
				吴吉春	吴建华	徐宗学	许唯临
				杨金忠	郑春苗	周建中	

《水科学前沿丛书》出版说明

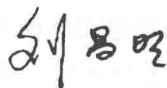
随着全球人口持续增加和自然环境不断恶化,实现人与自然和谐相处的压力与日俱增,水资源需求与供给之间的矛盾不断加剧。受气候变化和人类活动的双重影响,与水有关的突发性事件也日趋严重。这些问题的出现引起了国际社会对水科学研究的高度重视。

在我国,水科学研究一直是基础研究计划关注的重点。经过科学家们的不懈努力,我国在水科学研究方面取得了重大进展,并在国际上占据了相当地位。为展示相关研究成果、促进学科发展,迫切需要对过去几十年国内外水科学不同分支领域取得的研究成果进行系统性的梳理。有鉴于此,科学出版社与北京师范大学共同发起,联合国内重点高等院校与中国科学院知名中青年水科学专家组成学术团队,策划出版《水科学前沿丛书》。

丛书将紧扣水科学前沿问题,对相关研究成果加以凝练与集成,力求汇集相关领域最新的研究成果和发展动态。丛书拟包含基础理论方面的新观点、新学说,工程应用方面的新实践、新进展和研究技术方法的新突破等。丛书将涵盖水力学、水文学、水资源、泥沙科学、地下水、水环境、水生态、土壤侵蚀、农田水利及水力发电等多个学科领域的优秀国家级科研项目或国际合作重大项目的成果,对水科学研究的基础性、战略性和前瞻性等方面的问题皆有涉及。

为保证本丛书能够体现我国水科学研究水平,经得起同行和时间检验,组织了国内多位知名专家组成丛书编委会,他们皆为国内水科学相关领域研究的领军人物,对各自的分支学科当前的发展动态和未来的发展趋势有诸多独到见解和前瞻思考。

我们相信,通过丛书编委会、编著者和科学出版社的通力合作,会有大批代表当前我国水科学相关领域最优秀科学研究成果和工程管理水平的著作面世,为广大水科学研究者洞悉学科发展规律、了解前沿领域和重点方向发挥积极作用,为推动我国水科学研究和水管理做出应有的贡献。



2012年9月

前 言

本书是我们多年来在地下水-土壤水运动数值方法研究成果的总结,主要阐述了求解一维、二维、三维和拟三维饱和-非饱和水流运动、溶质运移和氮磷迁移转化的确定性与随机性数值方法和数值模型。

第1章绪论中回顾了团队多年来的研究进展,讨论了国内外在地下水数值分析的研究成果和动态;第2章介绍地下水运动的基本理论和控制方程;第3章介绍土壤水运动和土壤水热运移的数学模型;第4章论述土壤蒸发和地下水入渗,并详细介绍腾发量计算方法 and 地下水补给模型;第5章论述地下水和土壤水中溶质运移理论和模型;第6~10章给出地下水与土壤水分运动和溶质运移的数值模型,利用有限元、有限差和有限体积法建立了一维、二维、三维和拟三维地下水土壤水运动和溶质运移数值模型,并对各种模型都给出了详细算例,以便读者更好地理解数值方法和模型应用条件;第11章介绍地下水运动和溶质运移问题的不确定描述方法和求解不确定问题的随机数值方法,为后两章建立随机数值模型提供理论基础;第12章给出地下水和土壤水运动的随机数值模型的蒙特卡罗方法、动量分析方法和随机配点法,特别关注了土壤水分运动非线性数学模型的随机数值方法及其应用效果;第13章介绍数据同化方面所取得的研究成果,给出了利用集合卡尔曼滤波反求水文地质参数和实时预测问题的方法,应用非饱和土壤水分运动的试验数据介绍了方法的实际应用。

参加本书撰写的人员有:杨金忠(第1章、第5章、第6章、第11章、第12章、第13章),朱焱(第8章、第9章、第10章)、查元源(第4章、第7章)、蔡树英(第2章、第3章)。唐云卿、宋雪航和张玉雪参与了第12章和第13章部分内容的编写。杨金忠负责全书的统稿工作。在本研究团队中工作过的研究生陆垂裕、王丽影、林琳、李少龙、史良胜、周发超、孙怀卫、谭秀翠、廖卫红、刘昭、曾季才、毛威、赖斌、宋戈、郝培静、杨文元等参加了部分研究工作,承担了大量资料整理和编排工作;书中的部分内容是作者所在课题组多年来的研究成果,课题组的成员和研究生作出了大量贡献;研究课题曾得到国家自然科学基金委员会、国家高技术研究发展计划(“863”计划)、国家科技支撑计划的资助;本书的出版得到国家自然科学基金(41272270)和水资源与水电工程科学国家重点实验室(武汉大学)研究成果出版基金的资助,在此一并表示感谢!

限于作者水平,本书定有许多不完善和欠妥之处,敬请同行批评指正。

编 者

2015年3月

目 录

《水科学前沿丛书》出版说明

前言

第1章 绪论	1
第2章 地下水运动模型	5
2.1 多孔介质和含水层	5
2.1.1 多孔介质	5
2.1.2 含水层及其结构和划分	6
2.2 地下水运动的基本概念	7
2.2.1 渗流的基本概念	7
2.2.2 渗流运动要素	7
2.3 达西定律与连续性方程	9
2.3.1 水流连续性方程	9
2.3.2 动量方程和达西定律	10
2.3.3 渗透系数及其影响因素	11
2.4 含水层的储水特征	13
2.4.1 水和含水层的可压缩性	13
2.4.2 承压含水层的储水性	14
2.4.3 潜水含水层的储水性	15
2.5 地下水运动的偏微分方程和定解条件	17
2.5.1 承压水运动的基本方程	17
2.5.2 潜水运动的基本方程	20
2.5.3 定解条件和定解问题	22
第3章 非饱和土壤水运动模型	25
3.1 非饱和土壤水的基本性质	25
3.1.1 土壤含水率	25
3.1.2 土壤水势	26
3.1.3 土壤水分特征曲线	29
3.2 非饱和水分运动基本方程	31
3.2.1 非饱和土壤水的达西定律	31
3.2.2 非饱和土壤的水力传导度	31
3.2.3 非饱和带土壤水运动的基本方程	34

3.2.4	非饱和土壤中水、气、热耦合运移方程	38
3.3	非饱和土壤水分运动参数的求解	40
3.3.1	基本参数求解概述	40
3.3.2	土壤水分运动参数的室内外实验确定方法	41
3.3.3	土壤水分运动参数的野外确定方法	54
第4章	腾发量与地下水补给计算模型	59
4.1	土壤-作物-大气连续系统	59
4.1.1	能量平衡方程	59
4.1.2	净辐射	59
4.1.3	潜热通量	61
4.1.4	显热通量	61
4.1.5	土壤热通量	62
4.2	作物腾发量的计算方法	62
4.2.1	腾发量的概念及影响因素	63
4.2.2	腾发量模型及计算方法	64
4.3	作物根系吸水的计算方法	72
4.3.1	根系吸水影响因素	72
4.3.2	根系吸水模型及计算方法	73
4.4	作物冠层截留的计算方法	76
4.4.1	截留过程概念	76
4.4.2	截留模型及计算	76
4.5	地下水补给量的计算方法	78
4.5.1	INFIL3.0模型	79
4.5.2	INFIL3.0模型的适用性和改进	86
4.5.3	地下水补给模型应用示例	87
第5章	溶质运移模型	94
5.1	多孔介质中的水动力弥散	94
5.1.1	多孔介质中的水动力弥散现象	94
5.1.2	水动力弥散机理	95
5.1.3	水动力弥散系数(D)	98
5.2	溶质运移的对流-弥散方程	106
5.2.1	饱和水流运动问题的水动力弥散方程	106
5.2.2	运动坐标系中的水动力弥散方程	109
5.2.3	非饱和水流运动问题的水动力弥散方程	109
5.2.4	考虑不动水体作用时的水动力弥散方程	111

5.2.5 双重介质的水动力弥散方程	111
5.3 地下水和土壤中氮磷转化运移数学模型	112
5.3.1 氮磷素运移模型	112
5.3.2 氮素转化模型	113
5.3.3 磷素转化模型	117
5.3.4 温度模型	124
5.4 溶质运移的定解问题	124
5.4.1 起始条件	124
5.4.2 边界条件	124
5.4.3 定解问题	125
第6章 地下水流问题的数值方法	129
6.1 地下水数值方法概述	129
6.1.1 数值方法的基本概念	129
6.1.2 地下水数值方法的发展	130
6.1.3 数值方法在地下水及溶质运动问题中的应用	132
6.2 有限差分法	132
6.2.1 差分法的概念	132
6.2.2 主要差分格式	133
6.2.3 二维饱和-非饱和水流问题的差分格式	135
6.3 有限元法	139
6.3.1 基本原理	139
6.3.2 区域离散与基函数	140
6.3.3 二维饱和-非饱和水流问题的有限元法	145
6.4 有限体积法	148
6.4.1 基本原理	149
6.4.2 二维饱和-非饱和水流运动问题的有限体积法	151
6.4.3 非规则网格技术	152
第7章 一维水分和溶质运移数值模型	155
7.1 一维非饱和水流运动数值模型	155
7.1.1 以水头为主变量的 Richards 方程	155
7.1.2 迭代求解	159
7.1.3 含水量型 Richards 方程	161
7.1.4 Richards 方程非迭代算法	175
7.1.5 重力流方程	187
7.2 一维溶质运移数值模型	192

7.2.1	水动力弥散方程的差分法与数值困难	193
7.2.2	对时间导数采用高次近似的差分格式	194
7.2.3	带有上风因子的差分格式	195
7.2.4	有限元法	197
7.2.5	上风有限元法	198
7.2.6	在运动坐标系中求解对流-弥散方程	199
7.2.7	各种数值方法计算结果的比较	202
7.3	非饱和带水分均衡模型	208
7.3.1	水均衡模型的特征及定义	208
7.3.2	典型水均衡模型流程图	210
7.3.3	非饱和水分再分配模型	212
7.3.4	常用水均衡模型介绍	216
7.3.5	算例	223
第8章	二维渗流和溶质运移数值模型	231
8.1	二维平面饱和地下水运动数值模型	231
8.1.1	二维平面饱和水流运动控制方程	231
8.1.2	二维平面饱和水流问题的单元均衡计算	231
8.2	二维剖面饱和-非饱和水流运动数值模型	234
8.2.1	二维剖面饱和-非饱和水分运动控制方程	234
8.2.2	根系吸水项	234
8.2.3	非饱和土壤水力参数	236
8.2.4	定解条件	237
8.2.5	水流方程的求解	238
8.3	饱和水流运动问题的溶质运移	245
8.3.1	对流-弥散方程的伽辽金有限元模型	245
8.3.2	特征方法与有限元结合	247
8.4	特征方法二维溶质运移问题数值方法	248
8.4.1	计算纯对流引起的暂时浓度	250
8.4.2	纯弥散部分的节点浓度及 t^{k+1} 时刻节点总浓度计算	251
8.5	饱和-非饱和剖面二维溶质运移数值模型	254
8.5.1	饱和-非饱和剖面二维溶质运移控制方程	254
8.5.2	二维溶质运移方程空间离散	256
8.5.3	二维溶质运移方程时间离散	258
8.5.4	二维溶质运移方程求解策略	259
8.6	剖面二维饱和-非饱和氮素运移转化数值模型	262

8.6.1 氮磷迁移转化数值模型	262
8.6.2 模型检验	262
第9章 三维渗流和溶质运移数值模型	274
9.1 三维饱和地下水运动数值模型	274
9.1.1 三维饱和地下水水流模型建立思路	274
9.1.2 水头梯度平均面	275
9.1.3 三维饱和水流运动简化数值模型	276
9.1.4 含水层层间水流通量和水量均衡分析	278
9.1.5 边界及源汇项处理	279
9.2 三维饱和-非饱和水流运动数值模型	280
9.2.1 基于VHS的三维饱和-非饱和水流运动数值模型	280
9.2.2 基于主变量转化的三维饱和-非饱和水流运动数值模型	282
9.2.3 三维饱和-非饱和水流运动数值计算流程	284
9.2.4 模型检验及应用	285
9.3 三维饱和溶质运移数值模型	294
9.3.1 三维饱和溶质运移模型基本思路	294
9.3.2 基本假设	295
9.3.3 溶质均衡项分析	295
9.3.4 迎风加权格式	299
9.3.5 三维饱和溶质运移数值模型流程	300
9.3.6 模型验证及应用	301
第10章 拟三维渗流和溶质运移数值模型	306
10.1 区域饱和-非饱和拟三维水流运动数值模型	307
10.1.1 一维-三维区域尺度模型耦合方式	307
10.1.2 变网格拟三维饱和-非饱和水流运动数值模型	308
10.1.3 不变网格拟三维饱和-非饱和水流运动数值模型	317
10.1.4 拟三维饱和-非饱和水流运动模型验证	320
10.2 区域饱和-非饱和拟三维溶质运移数值模型	333
10.2.1 拟三维饱和-非饱和溶质运移方程	333
10.2.2 饱和-非饱和溶质运移完全耦合方法	334
10.2.3 拟三维饱和-非饱和溶质运移模型流程	337
10.2.4 模型验证与分析	338
第11章 渗流的不确定性数值模拟方法	343
11.1 影响渗流不确定性的主要因素	343
11.1.1 介质参数的空间变异性	343

11.1.2	饱和含水层中渗透系数的空间变异性	343
11.1.3	非饱和含水层中水力参数的空间变异性	345
11.1.4	宏观弥散参数	347
11.1.5	水分运动定解条件的不确定性	348
11.2	描述土壤变异性的方法	348
11.2.1	随机变量	348
11.2.2	随机过程和随机场	351
11.3	土壤变异性随机模拟方法	353
11.3.1	随机变量的模拟方法	353
11.3.2	空间随机场的模拟方法	358
11.4	地下水运动随机模拟方法简介	365
11.4.1	谱分析方法	365
11.4.2	矩方程方法	366
11.4.3	蒙特卡罗模拟	367
11.4.4	基于 Karhunen-Loève 展开的随机分析方法	368
11.4.5	随机配点方法	368
第 12 章	地下水和土壤水运动的随机数值模型	370
12.1	地下水运动随机问题的蒙特卡罗方法	370
12.1.1	地下水运动问题的模拟步骤和随机函数的统计矩	370
12.1.2	吸附性溶质在非饱和土壤中运移的蒙特卡罗模拟	371
12.2	地下水运动随机问题的 Karhunen-Loève 展开模型	377
12.2.1	Karhunen-Loève 展开(KL 展开)	377
12.2.2	随机场的多项式混沌展开	379
12.2.3	饱和水流运动的随机数值模型	380
12.2.4	非饱和水流运动的随机数值模型	391
12.3	随机配点法	404
12.3.1	输入参数的随机表达	404
12.3.2	随机配点技术	405
12.3.3	随机配点法基本概念	408
12.3.4	张量积配点法	409
12.3.5	稀疏网格配点法	410
12.3.6	非高斯分布的稀疏网格配点法	418
12.3.7	稀疏网格配点法算例	422
第 13 章	地下水及土壤水动态预测的数据同化方法	426
13.1	数据同化方法涉及的基本概念	427

13.1.1	正问题与反问题	427
13.1.2	状态变量与模型参数	428
13.1.3	观测值和预测值	428
13.1.4	贝叶斯理论	429
13.2	集合卡尔曼滤波	431
13.2.1	目标函数构建	431
13.2.2	目标函数求解及矩阵变换	432
13.2.3	基于样本统计的 EnKF 方法	433
13.2.4	EnKF 方法的实现过程	435
13.2.5	举例说明 EnKF 的计算过程	436
13.2.6	数据同化方法的步骤流程图	437
13.3	集合随机最大似然滤波	438
13.3.1	构造目标函数	438
13.3.2	高斯牛顿法求解目标函数	439
13.3.3	基于样本统计的 EnRML 方法	441
13.4	其他几种数据同化方法	444
13.4.1	Confirming EnKF 和 Restart EnKF	444
13.4.2	Modified Restart EnKF	445
13.4.3	不同方法的对比分析	446
13.5	数据同化方法的算例分析	447
13.5.1	试验方案	447
13.5.2	含水率实测数据分析	450
13.5.3	正演模拟	452
13.5.4	参数反演研究	453
13.5.5	含水率剖面估计	456
	参考文献	457

第1章 绪 论

在 20 世纪 50 年代以前,地下水运动问题求解技术主要以解析方法为主,它通过数学分析手段(包括变量代换、分离变量、保角变换、积分变换等)得到各种理想化条件下水流运动的解析解。解析解在理论上和形式上都很完美,通过对解析解的分析,可以从物理机制上深入理解地下水的运动规律与特征。特别重要的是,地下水运动的解析解为求取水文地质参数提供了简洁的工具。但是,由于数学工具的局限性,只有在水流运动比较简单的条件下才有可能得到解析解,条件稍一复杂,特别是对于非均质问题、非线性问题和区域边界较为复杂的问题,就很难得出解析解。对于某些条件稍微复杂的水流运动问题,即便是可以得到解析解,但由于解的形式太过繁杂而难以在实际工作中应用。正是解析方法的这一缺点限制了它的推广和应用。

20 世纪 50 年代至 70 年代初期,可求解复杂地下水运动规律的电模拟方法得到深入研究和广泛应用。这种方法根据地下水运动的达西定律与电流运动的欧姆定律的相似性以及地下水质量守恒方程的有限差分近似,可以利用介质的电阻和电容模拟含水层的导水性和储水性,通过测量电网络系统的电流和电压,得到相应地下水系统的渗透速率和水头分布,为非均质、各向异性、不规则的几何形状、多层结构含水层及复杂的人工干扰条件下地下水运动的模拟提供了有力的工具。用电阻网络模拟稳定流的模型在 40 年代末期就出现了,而模拟非稳定流的电阻-电容网络是 50 年代发展起来的,到 60 年代初期,它已成为求解大区域含水层中地下水问题的有力工具。南京水利科学研究所对电网络模型进行了详细的研究,武汉水利电力学院建立了电阻网络和电阻-电容网络,河北地质学院使用电阻-电容网络解决了天津宝坻一个化工厂供水和邯郸某矿区地下水疏干条件下的地下水系统的模拟。电模拟方法的主要缺点是网络固定,通用性较差,难以处理潜水问题,而且只能用于地下水流的模拟,不能用于水质和其他方面的模拟(孙讷正, 1981)。70 年代以后,由于计算机的快速发展,求解地下水运动问题的数值方法得到快速发展,不断提出各种求解方法,开发出大量通用软件。由于数值模拟方法的便利性和通用性,几乎可以替代电网络模型而成为解决地下水运移模拟的主要方法。20 世纪 80 年代后,电模拟模型的研究和发展受到很大的限制,已逐步退出历史舞台。

我国地下水数值模拟的研究始于 20 世纪 70 年代,特别是水文地质学家与数学家合作,从理论研究、数值方法、实际应用等不同层面开展不同类型的协作研究,经过几十年的不懈努力,数值模拟方法得到广泛的应用,已成为目前研究地下水运移问题的主要工具和手段。我国科学家在数值理论和数值方法方面的研究基本与国际前沿研究同步,利用有限差分法、有限元法、边界元法、有限解析法、有限体积法、特征线法等解决地下水渗流和溶质运移问题,各研究单位和高等学校编制了大量地下水数值计算的应用程序,撰写了多部专著和教材(薛禹群和谢春红, 1980; 孙讷正, 1981; 孙讷正, 1989; 陈崇希和唐仲华, 1990; 薛禹群和谢春红, 2007; 陈崇希等, 2011),对地下水模拟的

推广和应用起到重要作用。数值模拟方法也是解决实际工程问题的主要技术手段,在地下水资源评价、地下水污染、地面沉降、海水入侵、非饱和带水分和盐分的运移、地热分析和地下储能、渠道渗漏、地下水管理等方面得到广泛的应用。尽管我们在实际应用方面取得了显著的成果,但是我国的研究主要是以跟踪国际前沿研究为主,自主创新不足。在理论研究方面和商业软件开发方面与国外相比明显落后,特别是国际上广泛应用的地下水数值模拟程序和商业应用软件,很难看到有中国学者开发研制的产品。我国学者在地下水运动数值方法的研究和实际应用中,编制了大量的程序代码和应用软件,积累了丰富的经验。但这些代码和软件多是为了解决不同类型的实际问题而研发的,通用性稍差,代码开源不够,程序代码和数值方法的资料系统不完善,阻碍了代码和软件的广泛应用和进一步完善,在某种程度上限制了我国在地下水运动数值模拟技术领域的国际影响力。产生这种现象的原因和突破这种限制的途径值得我们深思。

数值模拟研究的最终目的是解决生产中所提出的实际问题,当研究区域地下水和土壤水运动时,特别是研究区域地下水中溶质运移时,由于介质分布的不确定性,观测结果具有巨大的随机性和空间变异性,而我们现有的地下水运动数学理论和数值方法不能对水流运动的不确定现象进行描述和分析预测。如何对地下水运动的随机特征和空间变异性进行定量分析,是多孔介质中水分运动和溶质运移研究领域所面临的挑战性课题。20世纪90年代,在张蔚榛院士的带领下,武汉水利电力大学水利系地下水科研组成立了地下水和土壤水不确定性方法研究队伍,在地下水运动的随机理论和随机数值方法方面开展了研究,并取得了一些研究成果。

多年来,我们课题组从地下水运动的解析方法、电网络模拟方法、数值分析方法、区域地下水模拟、土壤水分运动的机理、土壤水分运动参数的实验技术、地下水和溶质运移理论和数值分析、地下水和土壤水盐运动的随机理论、地下水运动的随机数值模拟方法等领域开展了持续的研究,一直在地下水土壤水运动理论和模拟技术的前沿研究领域开展工作,秉承理论与实际应用相结合,针对实际应用中提出科学问题开展基础研究。由于我们课题组的主要研究领域与农田水利密切相关,除地下水运动的分析研究外,我们更关注土壤水分运动、土壤水分的蒸腾耗散、土壤水分中的盐分和养分的运移。土壤水分和溶质的运移尺度与地下水运动和研究的尺度具有很大的差别,土壤水研究的尺度为米的量级,在土壤深度范围内土壤水分含量和溶质浓度急剧变化;受降水、蒸发、灌溉等水分频繁交替作用的影响,土壤水分时间变化剧烈,时间尺度远小于地下水。由于土壤水分运动的非线性,土壤分数值模拟的实际步长经常为秒的量级。土壤水是地下水的重要补给来源,也是浅层地下水的主要消耗途径。同时,土壤水分运动的包气带是地下水污染的主要源头和缓冲区。对于区域地下水资源和浅层地下水环境保护而言,土壤水分运动和溶质运移是关键的控制因素,需要将两者进行统一分析和模拟。因此,将地下水和土壤水作为一个统一的水分转化和溶质运移系统进行耦合研究的过程中,如何兼顾两者在空间尺度和时间尺度的差异而建立高效的分析方法是模拟分析的关键问题之一。在本书中,我们将地下水和土壤水进行了分别的论述,以便区分水分和溶质在两个系统中运移过程的差异,分别建立了求解地下水和土壤水分运动的数值方法,针对非饱和土壤水分运动的非线性问题,提出了不同条件下的高效数值模型。对于饱和

与非饱和水流系统的耦合问题, 建立考虑两系统水流时空尺度差异的有效数值方法。

书中主要采用了有限差分法、伽辽金有限元素法和有限体积法求解地下水与土壤水运动控制方程, 特别是对于三维的地下水和溶质运移问题, 考虑到含水层的成层特征, 在平面上分层应用有限体积法, 各层之间在垂向应用有限差分法, 这样在程序设计方面比较简单。有限体积法由于其方法简单、物理概念清晰、局部和总体质量守恒, 我们在一维的非饱和问题中主要应用该数字方法。在溶质运移问题的数值方法中, 对一维和二维问题, 我们应用了动坐标方法, 该方法对于降低数值弥散效果明显, 但是对三维饱和-非饱和问题, 动坐标的重构具有较大的挑战性, 程序设计及通用性困难, 因此在三维的溶质运移分析中, 我们还是应用了带有上风因子的数值方法, 尽管该方法对降低浓度锋面的数值跳动有效, 但对数值弥散效果不佳。

对于三维饱和-非饱和水分运动问题的数值方法, 如果将整个水流系统统一处理为三维问题, 数值方法本身难度较小, 主要的问题是, 应用三维的数值方法解决区域饱和-非饱和水流运动问题时, 饱和带和非饱和带的空间剖分以及相应的时间步长的设定将面临很大的挑战。非饱和水流运动问题要求空间剖分的尺度很小, 否则, 很难刻画非饱和水流运动特征。另外, 非饱和水分运动具有强烈的非线性, 剖分单元太大将使得问题难以收敛。非饱和带的空间剖分要求毫米级单元大小, 饱和带空间剖分常以米到公里级单元大小, 对于区域问题, 这种剖分的差异使得计算工作量和解法的收敛性遇到很大的困难。我们在几公里尺度大小的饱和-非饱和水流运动实际生产问题的数值模拟中, 应用现有的三维数值模型难以解决实际生产问题。为此, 根据饱和带和非饱和带水流运动的特征, 我们提出了拟三维的数值方法。可以想象, 对于区域饱和-非饱和水分运动而言, 由于非饱和带厚度与地下水含水层厚度和水平延伸相比, 非饱和带可视为很薄的一层上覆于饱和含水层, 非饱和带中水分的蒸发和入渗主要以垂向一维运动, 在宏观上, 非饱和带水分的侧向运动可以忽略不计。基于此, 在饱和-非饱和水分运动的拟三维数值模型中将非饱和带水分运动处理为分区控制的一维垂向运动, 地下水为三维运动, 将两种不同维数运动的问题进行耦合而得到拟三维数值模型。研究表明, 该方法的计算效率明显提高, 具有较好的实际应用价值。

运用随机模型模拟多孔介质中地下水流及污染物的运移方法在国外发展迅速 (Dagan, 1989; Gelhar, 1992; 杨金忠等, 2000; Zhang and Lu, 2002)。通过近 30 年的理论研究, 人们对宏观弥散的尺度效应问题、非饱和水流运动的空间变异性问题和宏观水力参数与微观尺度水力参数之间的关系有了比较深入和理解, 认识到控制大区域溶质运移不确定性的机理在于微观地下水流速的不均匀性, 而地下水流速的不均匀性主要起源于储水介质沉积特征和水力特征的空间变异性, 这些影响区域溶质运移的基本特征在室内实验中是反映不出来的。正如研究水动力弥散时分子扩散可以忽略一样, 小范围测得的弥散度对大区域溶质的分散过程可以忽略不计。因而, 微观的水动力弥散理论不能用于宏观的研究。另外, 边界条件、起始条件、溶质转化参数等都可能具有不确定性和随机性, 因此, 描述地下水和溶质运移的微分方程变为随机微分方程, 得到的定解问题变为随机定解问题。在了解介质特性的随机特征和空间变异特征后, 求解随机定解问题的困难之一是计算工作量很大, 发展新的数值方法和模型解决随机定解问题是目前

研究的重要内容。由于模型参数和定解条件的随机性和不确定性，地下水随机定解问题的输出也是不确定的，表征这种不确定性的关键指标是系统输出的各阶动量，常用的低阶动量是系统输出的均值和方差，用于表示系统输出的平均状态和偏离平均状态的状况，这些量为我们更合理地实施地下水资源管理提供更多的信息。近年来我们在多孔介质中水分和溶质运移问题的理论研究基础上，关注了随机数值方法的研究。主要针对饱和与非饱和水分运动问题，研究了蒙特卡罗随机数值模型、基于 KL 随机参数分解的动量分析方法、随机配点方法，这些方法的核心之一是降低随机数值模拟的计算工作量，使得随机数值方法可以在解决实际问题中得到应用。

由于地下水随机系统参数(如水力传导度、给水度等)和定解条件(如补给和边界条件等)的空间变异性，精确地获取这些参数需要昂贵的观测和试验费用，数据同化模型可根据动态的监测数据来反演这些参数，并弥补参数不确定给模拟结果带来的偏差；地下水运移模型本身也存在局限性或误差，可通过监测数据来约束输出变量；另外，数据同化模型能够实时地更新模型参数和系统状态，可以动态地获取地下水分布状况，为地下水的科学管理提供定量分析工具，减少预测的不确定性和模型误差的不利影响。集合卡尔曼滤波方法是目前应用较广的数据同化方法。集合卡尔曼滤波方法顺序同化数据，可以实时融合观测数据；采取样本统计的方法，降低了计算成本；算法易于同现有的数值模拟工具相结合，并有较好的并行计算的潜力。书中介绍了集合卡尔曼滤波在地下水随机系统求参和预测中的应用，特别对非饱和水流问题，给出了一种简单的适应于求解非线性水流方程和解决非一致性问题方法，并用该方法求解了非饱和水力参数反演问题。

值得说明的是，无论数值方法功能如何强大，也不过是解决地下水和土壤水运动物理问题的数值工具。目前有大量的通用开源代码(如 Modflow、Swap、SWAT、SWMS 等)和商业软件(如 Visual Modflow、FEFlow、GMS 等)可以下载或直接应用，这些代码具有标准化、规范化和通用性的特点。但我们千万不能有仅仅会利用几个代码或熟练掌握几个软件就能成功解决实际问题的思想。能够正确解决实际生产问题的关键是对地下水和土壤水运动物理过程的了解，首先是细致分析研究区域的水文地质条件、补给排泄条件、水分流动特征和规律，建立合理的水文地质模型和水流运动模型；然后在此基础上选用合理的数值模型，根据实际观测数据对模型进行识别，通过对观测数据和模拟结果差异的分析研究，实现对水文地质模型的再认识，循环往复，才有望得到正确合理的结果。实际生产问题是千差万别的，所谓“通用”代码和软件，也不可能解决实际遇到的所有问题，对于某些问题，我们需要在已有代码的基础上进行修改和补充，这就需要我们掌握一些基础代码和相应的数值方法，形成新的算法或软件，创新性地解决所遇到的问题。