

非饱和土中溶混污染物运移模型及特征线有限元法*

Miscible pollutant transport model for unsaturated soils and characteristic finite element method

李锡夔 武文华

(大连理工大学工业装备结构分析国家重点实验室, 大连, 116023)

文 摘 提出了一个非饱和土中溶混污染物输运过程的数值模拟框架。输运过程数学模型包含了包括物理和化学非平衡过程的如下控制现象: 对流, 机械逸散, 分子弥散, 平衡与非平衡吸附, 不流动水效应和蜕变。发展了基于特征线 Galerkin 离散化的有限元方法和相应的隐式算法以数值求解模型控制方程的边值初值问题。隐式算法基于算子分离过程及在 Lagrange 座标下精细积分过程与传统数值积分过程的结合。数值例题结果和稳定性分析验证了本文模型及其数值方法的有效性, 计算精度和稳定性。

关键词 污染物运移, 非饱和土, 平衡与非平衡过程, 特征线有限元法, 精细积分, 隐式算法

中图法分类号 TU 223.4

作者简介 李锡夔, 男, 1940 年生。获英国威尔士 Swansea 大学土木系博士学位。任大连理工大学工程力学系教授, 中国力学学会理事, 博士生导师。

Li Xikui Wu Wenhua

(National Laboratory for Structural Analysis of Industrial Equipment, Dalian University of Technology, Dalian, 116023, P. R. China)

Abstract A framework for numerical modelling of miscible pollutant transport in saturated-unsaturated soils is presented. The mathematical model of the transport process integrates the following governing phenomena: convection, molecular diffusion, mechanical dispersion, sorption, immobile water effect and degradation, including both physical and chemical nonequilibrium processes. A finite element method based on the characteristic Galerkin discretization is developed. A corresponding implicit algorithm is devised to numerically solve the initial and boundary value problem for the model governing equations. The implicit algorithm is based on the operator splitting procedure and formulated by means of a combination of both the precise and the traditional numerical integration procedures in the Lagrange coordinates. The numerical results and the stability analysis of the algorithm validate good performance of the present model and efficiency, accuracy and stability of the present numerical method.

Key words contaminant transport; unsaturated soil; equilibrium/nonequilibrium process; characteristic finite element method; precise integration; implicit algorithm

1 引 言 *

污染物在非饱和土中随地下水运移过程的数值模拟研究已引起人们的广泛注意^[1-7]。非饱和土域通常是污染物进入含水层之前首先要通过的区域, 植物和农作物也从中吸取水份, 营养和污染物质。同时, 非饱和土域也是当有污染物排泄时人们可首先采取措施限制或进而消除污染物迁移的区域。预测污染物在非饱和土中运移的数值模型对于深入理解污染物随地下水的输运现象是必需的, 它也为控制污染和水资源管理提供了有用的工具。模拟饱和-非饱和土壤中溶混污染物运移过程的数值模型包含两部分: 多孔介质中不溶混两相流的渗流-水动力学分析以确定孔隙水和气的速度场和饱和度分布^[8-12]; 多孔介质中的溶混污染物运移分析。本文重点研究第二部分。具体考虑的污染物是硝酸盐和重金属镉。

Bear 和 Verruijt^[1]描述了控制孔隙介质中溶混污染物运移的三个主要机制: 对流, 机械逸散和分子弥

散, 和另三个造成污染物暂时存储或释放等延迟效应的机制: 吸附, 蜕化和不流动水效应。Biver^[13], Radu 等^[14]和李锡夔等^[15-16]的模型已包含了这些控制现象。这些模型中假定吸附是平衡控制的, 他们已广为接受并被成功地用于许多实际问题。

非平衡过程对土壤中污染物输运的影响已逐渐引起人们更多的关注。上述模型^[13-16]中包含的不流动水效应作为输运相关非平衡(物理非平衡)过程计及了流动水和不流动水之间的污染物浓度交换。然而, 实验研究表明, 平衡吸附模型不能恰当地描述如重金属镉这样的溶质在土壤中输运的真实过程^[17]。在本文模型中将包含反映化学非平衡过程和由于溶质与固体介质中的吸附剂相互作用比率限制而引起的非平衡吸附机制。

* 国家自然科学基金项目, 及欧共体国际科学合作基金“非饱和区地下水中溶混污染物输运过程的模拟”项目(CII* CT94-0014)资助
到稿日期: 1998

多孔介质中包含延迟效应在内的溶质运移过程能由瞬态的对流-扩散-吸附方程描述。污染物在孔隙流动水中的浓度 c_m 被取作为方程的基本未知数, 而孔隙不流动水及固体颗粒中的浓度处理为单元积分点的状态变量。对流-扩散方程数值求解中的困难是众所周知的。特征线 Galerkin 方法的提出对于对流-扩散方程的有限元求解过程的发展给予了很大的推动。它的主要优点是仍可正确地利用 Galerkin 空间离散, 同时以理性形式引入作为‘上风项’的对稳定起平衡作用的扩散项, 因而不需利用带任意性且依赖于网格的上风项系数。方法的成功在于利用了一个基于合适的算子分离过程的分步方法^[20]。为考虑由于在模型中引入了引起延迟效应的吸附, 蜕变, 不动水效应等机制, 基于 Zienkiewicz 等的特征线 Galerkin 方法^[18~19], 李锡夔等发展了一个修正的特征线 Galerkin 方法^[15~16]。由于方程沿特征线成为自伴随的, 因而仍利用对自伴随方程在空间域离散最优的标准 Galerkin 方法离散方程, 并给出了瞬态对流-扩散方程数值求解的一个显式算法。算法的优点是计算上非常有效, 易于程序实现并给出精确的结果。但是, 显式算法的稳定性对时间步长, 或者说对问题的 Courant 数提出了限制。

鉴于显式算法条件稳定性这一内在缺点, 本文发展了一个对流-扩散方程的隐式特征线 Galerkin 方法。利用基于 2^N 算法^[21~22]的精细积分方法^[21], 在算子分离过程中确定对流函数的物质导数, 并基于此发展了一个时域中对于物质粒子(Lagrange 座标下)的隐式数值积分算法。分析了算法的稳定性。数值例题结果和稳定性分析验证了本文数值模型在模拟非饱和土中溶混污染物运移过程时的性能以及本文所发展的隐式特征线 Galerkin 方法的优良的无条件稳定性和精度。

2 非饱和土中溶混污染物运移模型的控制方程

包含运移和吸附相关非平衡过程的非饱和土中溶混污染物运移模型的控制方程, 即污染物在流动水, 不流动水和固体中的质量守恒方程可表示为^[16]

$$\frac{\partial(\theta_m c_m)}{\partial t} + \text{div}[\theta_m(c_m \mathbf{U}_w - \mathbf{D}_h \nabla c_m)] = \theta_m \rho_w \Gamma_m + f_m^m - f_m^s - g_m^s + Q^* c^* \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\theta_m c_{im})}{\partial t} = \theta_m \rho_w \Gamma_{im} - f_{im}^m - f_{im}^s - g_{im}^s \quad (2)$$

$$\frac{\partial(\theta_s \rho_s (F + F_n))}{\partial t} = \theta_s \rho_s \Gamma_s + f_m^s + f_{im}^s + g_m^s + g_{im}^s \quad (3)$$

式中 Q^* 是含污染物浓度为 c^* 的污水流量。流动水

的真实相速度为^[9]

$$\mathbf{U}_w = \mathbf{u} + \frac{\dot{\mathbf{w}}}{\theta_m} \approx \frac{\dot{\mathbf{w}}}{\theta_m} \quad (4)$$

以及流动水的相体积部分

$$\theta_m = n(S_w - S_{w0}) \quad (5)$$

式中 $\dot{\mathbf{w}}$ 是孔隙水的达西(平均)速度; $\mathbf{u}$ 是土壤固体骨架速度; n 是孔隙度; S_w 是孔隙水饱和度; S_{w0} 是 S_w 中的不动水部分; nS_{w0} 是不流动水的相体积部分并表示为

$$\theta_{im} = nS_{w0} \quad (6)$$

$\mathbf{D}_h$ 是水动力逸散张量, 并可表示为

$$\mathbf{D}_h = \mathbf{D}_m + \mathbf{D}_d \quad (7)$$

式中 $\mathbf{D}_m$ 和 $\mathbf{D}_d$ 分别是孔隙介质中的分子弥散张量和机械逸散张量。对各向同性孔隙介质^[1]

$$\mathbf{D}_d = a_T \|\mathbf{U}_w\| \mathbf{I} + (a_L - a_T) \frac{\mathbf{U}_w \mathbf{U}_w^T}{\|\mathbf{U}_w\|} \quad (8)$$

式中 $\mathbf{I}$ 是单位矩阵, a_L 和 a_T 是沿流线方向与垂直于流线方向上的逸散系数, 而

$$\mathbf{D}_m = D_m \mathbf{I} \quad (9)$$

D_m 是孔隙介质的分子弥散系数, 一般地与孔隙度和饱和度相关。

若考虑线性蜕化模型, 各相单位质量单位时间的污染物溶质蜕化可表示为^[14]

$$\Gamma_s = -k_s F = -k_s(F_m + F_{im}) \quad (10)$$

$$\Gamma_m = -k_m \frac{c_m}{\rho_w} \quad (11)$$

$$\Gamma_{im} = -k_{im} \frac{c_{im}}{\rho_w} \quad (12)$$

式中 k_s , k_m 和 k_{im} 分别是各相蜕化系数(s^{-1}); ρ_w 是水的体积密度。

f_x^y 是单位时间内一个单元体中污染物由 x 相迁移到 y 相的量。固相与流相间由平衡吸附和线性蜕化机制控制的污染物迁移量可表示为

$$f_m^s = \frac{\partial}{\partial t} [\theta_s \rho_s (1-p) K_d c_m] + k_s \theta_s \rho_s (1-p) K_d c_m \quad (13)$$

$$f_{im}^s = \frac{\partial}{\partial t} (\theta_s \rho_s p K_d c_{im}) + k_s \theta_s \rho_s p K_d c_{im} \quad (14)$$

式中 $\theta_s = 1 - n$ 是固相所占体积部份, ρ_s 是固相颗粒密度。

孔隙不流动水部份可能是死端孔隙中水或是由于局部区域中非常低的渗透性造成的, 因而通常对孔隙不流动水假定不存在污染物的水动力逸散和对流, 然而存在作为运移相关非平衡过程的在流动水域与不流动水之间污染物交换。以 c_{im} 表示不流动水中的污染

物浓度, 不流动水和流动水间污染物的交换率 f_{im}^m 常可表示为^[1]

$$f_{im}^m = \alpha_d^* (c_{im} - c_m) \quad (15)$$

式中 α_d^* 是从流动水到不流动水的污染物迁移系数, 它依赖于分子弥散系数和不流动水和流动水间接触面的几何^[3]。在计算中有时也可简化地假定 α_d^* 为一常数。

吸附现象由平衡与非平衡吸附两个过程模拟。作为平衡吸附过程, 吸附是瞬时可逆的。采用线性等温吸附法则并推广到流动水和不流动水两方面。单位固体质量以平衡吸附法则从流动水和不动水中吸附的污染物量 F_m 和 F_{im} 分别与流动水和不动水中污染物浓度成正比, 并能写成

$$F = F_m + F_{im} = (1-p)K_d c_m + pK_d c_{im} \quad (16)$$

式中 K_d 称为分配系数 (m^3/kg); p 是不流动水在总的流固接触面中所占的部份。

采用 Langmuir 吸附法则模拟非平衡吸附过程, 假定由它所控制的固体中污染物质量变化率由下式给出

$$\frac{\partial(\theta_s \rho_s F_n)}{\partial t} = \theta_s \rho_s [K_1 \delta(F_0 - F_n)((1-p)c_m + pc_{im}) - K_2 F_n] \quad (17)$$

式中 F_n 是固体单位质量中的非平衡吸附溶质; K_1 , K_2 是非平衡吸附模型参数(通常 $K_1 \gg K_2$), F_0 表示由溶质与固体介质中吸附剂相互作用比率限制所控制的非平衡吸附溶质的最大量的值, 而函数 $\delta(F_0 - F_n)$ 定义为

$$\delta(F_0 - F_n) = h(F_0 - F_n)(F_0 - F_n) \quad (18)$$

式中 $h(F_0 - F_n)$ 为 Heaviside 函数。由方程式(17)和(3)可得

$$g_s^m = \theta_s \rho_s (1-p) [K_1 \delta(F_0 - F_n) c_m - K_2 F_n] \quad (19)$$

$$g_{im}^s = \theta_s \rho_s p [K_s \delta(F_0 - F_n) c_{im} - K_2 F_n] \quad (20)$$

方程(3)中 $\rho_s F$ 和 $\rho_s F_n$ 分别是固体中由平衡与非平衡吸附过程所吸附的污染物浓度。方程(19)和(20)中关于参数 K_1 和 K_2 的项分别表示吸附和解吸附部分。与平衡吸附过程相比, 如考虑解吸附系数 K_2 很小而略去不计, 则非平衡吸附过程是不可逆的, 且污染物的吸附率随非平衡吸附污染物总量 F_n 的增加而降低。

将方程(13), (15)和(19)代入方程(1)得到

$$R_m \frac{\partial(\theta_m c_m)}{\partial t} + A_m(\theta_m c_m) + \mathbf{U}_w^T \nabla(\theta_m c_m) - \text{div}(\theta_m \mathbf{D}_h \nabla c_m) - \alpha_d^* c_{im} - Q^* c^* + g_{im2}^s = 0 \quad (21)$$

式中

$$A_m = \text{div} \mathbf{U}_w + k_m + \alpha_m + \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\theta_s}{\theta_m} \rho_s (1-p) K_d \right] + \frac{\theta_s}{\theta_m} \rho_s (1-p) [K_d k_s + K_1 \delta(F_0 - F_n)]$$

$$R_m = 1 + \frac{\theta_s}{\theta_m} \rho_s (1-p) K_d$$

$$g_{im2}^s = -\theta_s \rho_s (1-p) K_2 F_n; \quad \alpha_m = \alpha_d^* / \theta_m \quad (22)$$

考虑不流动水的控制方程(2)。把方程(14), (15)和(20)代入(2)可得到

$$R_{im} \frac{\partial c_{im}}{\partial t} + A_{im} c_{im} = \alpha_{im} c_m - g_{im2}^{s*} \quad (23)$$

式中

$$A_{im} = k_{im} + \alpha_{im} + \frac{1}{\theta_{im}} \frac{\partial \theta_{im}}{\partial t} + \frac{1}{\theta_{im}} \frac{\partial(\theta_s \rho_s p K_d)}{\partial t} + \frac{\theta_s}{\theta_{im}} \rho_s p [K_d k_s + K_1 \delta(F_n - F_0)]$$

$$R_{im} = 1 + \frac{\theta_s}{\theta_{im}} \rho_s p K_d; \quad g_{im2}^{s*} = -\theta_s \rho_s p K_2 F_n / \theta_{im}$$

$$\alpha_{im} = \alpha_d^* / \theta_{im} \quad (24)$$

注意到系数 A_{im} 依赖于非平衡吸附溶质 F_n 的值, 而 F_n 在时间增量 $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 中是变化的, 因而方程(23)不再是线性的。令

$$H_0 = (-A_{im}/R_{im})_n$$

$$H_1^t = (-A_{im}/R_{im})_t - (-A_{im}/R_{im})_n$$

$$H_1^{n+1} = (-A_{im}/R_{im})_{n+1} - (-A_{im}/R_{im})_n$$

$$f_t = [(\alpha_{im} c_m - g_{im2}^{s*})/R_{im}]_t$$

$$f_{n+1} = [(\alpha_{im} c_m - g_{im2}^{s*})/R_{im}]_{n+1}$$

$$f_n = [(\alpha_{im} c_m - g_{im2}^{s*})/R_{im}]_n \quad (25)$$

把由式(25)定义的符号代入到方程(23), 得到

$$\frac{\partial c_{im}}{\partial t} = (H_0 + H_1^t) c_{im} + f_t \quad (26)$$

考虑方程(26)系数 A_{im} , R_{im} 和右端项在时间步 $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 中的变化, 我们可近似地解析求解方程得到 c_{im} 的解如下

$$c_{im}^t = [\exp(H_0 \Delta t) c_{im}^n - H_0^{-1} f_n (1 - \exp(H_0 \Delta t)) - H_0^{-1} (f_t - f_n) (1 + H_0^{-1} \Delta t^{-1} (1 - \exp(H_0 \Delta t)))] / w \quad (27)$$

式中 $\Delta t = t - t_n$, $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 和

$$w = 1 + H_0^{-1} H_1^t [1 + H_0^{-1} \Delta t^{-1} (1 - \exp(H_0 \Delta t))] \quad (28)$$

把式(25)中符号代入式(27)得到

$$c_{im}(t) = [c_{im}^n \exp(H_0 \Delta t) - H_0^{-1} \left(\frac{\alpha_{im}}{R_{im}} \right)_n (c_m^{n+1} - c_m^n) + \left[\left(\frac{\alpha_{im}}{R_{im}} \right)_n c_m^n + H_0^{-1} \left(\frac{\alpha_{im}}{R_{im}} \right)_n \frac{c_m^{n+1} - c_m^n}{\Delta t} \right] (1 -$$

$$\begin{aligned} & \exp(H_0 \Delta t)) - H_0^{-1} [c_m^n \Delta(\frac{Q_{im}}{R_{im}}) - \Delta(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}}) + \\ & [- (\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})_n + H_0^{-1} \Delta t^{-1} [c_m^n \Delta(\frac{Q_{im}}{R_{im}}) + \\ & \Delta(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})]] (1 - \exp(H_0 \Delta t))] / w \end{aligned} \quad (29)$$

式中

$$\begin{aligned} \Delta(\frac{Q_{im}}{R_{im}}) &= (\frac{Q_{im}}{R_{im}})_t - (\frac{Q_{im}}{R_{im}})_n \\ \Delta(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}}) &= (\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})_t - (\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})_n \end{aligned} \quad (30)$$

最后, 把式(29)所表示的 c_{im} 的解代入方程(21), 得到溶混污染物输运过程的控制方程

$$\begin{aligned} & \frac{\partial(\theta_m c_m)}{\partial t} + \mathbf{U}_w^* \cdot \nabla(\theta_m c_m) + A \theta_m c_m - \\ & \frac{1}{R_m} \operatorname{div}(\theta_m \mathbf{D}_h \nabla c_m) + Q = 0 \end{aligned} \quad (31)$$

式中

$$\begin{aligned} A &= \frac{A_m^*}{R_m}; \quad \mathbf{U}_w^* = \frac{\mathbf{U}_w}{R_m} \\ Q &= (Q_{im}(t) - Q^* c^* + g_{m2}^*) / R_m \\ A_m^* &= A_m + \alpha_d^* H_0^{-1} \frac{Q_{im}}{R_{im} \theta_m} [1 + H_0^{-1} \Delta t^{-1} \cdot \\ & (1 - \exp(H_0 \Delta t))] / w \\ Q_{im}(t) &= -\alpha_d^* [c_{im}^n \exp(H_0 \Delta t) - H_0^{-1} (\frac{Q_{im}}{R_{im}})_n \cdot \\ & c_m^n [-1 + (1 - H_0^{-1} \Delta t^{-1}) (1 - \exp(H_0 \Delta t))] - \\ & H_0^{-1} [c_m^n \Delta(\frac{Q_{im}}{R_{im}}) + \Delta(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}}) + [(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})_n + \\ & H_0^{-1} \Delta t^{-1} [c_m^n \Delta(\frac{Q_{im}}{R_{im}}) + \Delta(\frac{g_{im2}^*}{R_{im}})]] (1 - \\ & \exp(H_0 \Delta t))] / w \end{aligned} \quad (32)$$

为计算非平衡吸附溶质的当前值, 需求解方程(17), 它可改写为

$$\frac{\partial S}{\partial t} = (B_0 + B_1^t) S + b_t \quad (33)$$

式中

$$\begin{aligned} S &= \theta_s \rho_s F_n \\ B_0 &= - (K_1 [(1-p) c_m + p c_{im}] h (F_0 - F_n) + K_2)_n \\ B_1^t &= - (K_1 [(1-p) c_m + p c_{im}] h (F_0 - F_n) + K_2)_t + \\ & (K_1 [(1-p) c_m + p c_{im}] h (F_0 - F_n) + K_2)_n \\ b_t &= (\theta_s \rho_s K_1 F_0 h (F_0 - F_n) [(1-p) c_m + p c_{im}])_t \end{aligned} \quad (34)$$

类似于求解方程(26)得式(27), 我们能近似地得到方程(33)在时间间隔 $t \in [t_n, t_{n+1}]$ 的解析解 F_n

$$\begin{aligned} (F_n)_t &= [\exp(B_0 \Delta t) S_n - B_0^{-1} b_n (1 - \exp(B_0 \Delta t)) - \\ & B_0^{-1} (b_t - b_n) (1 + B_0^{-1} \Delta t^{-1} (1 - \end{aligned}$$

$$\exp(B_0 \Delta t))] / [w_s \cdot (\theta_s \rho_s)_t^{-1}] \quad (35)$$

式中

$$w_s = 1 + B_0^{-1} B_1^t [1 + B_0^{-1} \Delta t^{-1} (1 - \exp(B_0 \Delta t))] \quad (36)$$

应当指出, 分别与物理和化学非平衡过程相关的不流动水中污染物浓度 c_{im} 和吸附于固体的污染物溶质 F_n 处理为有限元积分点处的状态变量。

3 非饱和土中溶混污染物运移模型控制方程的特征线 GALERKIN 离散

基于特征线 Galerkin 方法, 把 $\mathbf{U}_w$ 看作为方程(31)中的广义对流速度, 因而能把方程中广义对流算子与扩散-吸附算子相分离并写为

$$\begin{aligned} \frac{d(\theta_m c_m)}{dt} \Big|_{t=t_{ref}} &= \left[\frac{\partial(\theta_m c_m)}{\partial t} + \right. \\ & \left. \mathbf{U}_w^* \cdot \nabla(\theta_m c_m) \right] \Big|_{x=x - \mathbf{U}_w^* t, t=t_{ref}} \end{aligned} \quad (37)$$

为以离散形式计算时域 $[t_n, t_{n+1}]$ 中的物质导数 $\frac{d(\theta_m c_m)}{dt}$, 取 t_{n+1} 为参考时刻及考虑该时刻以 $\mathbf{x}_{n+1}$ 表示的一特定粒子为参考粒子, 我们可用 $(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1})$ 标志此粒子。同一粒子在时刻 t_n 占有位置 $\mathbf{x}(t_n)$ 并可标志为 $(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ 。需要说明的是 $(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_n)$ 并不表示参考粒子而是另一个在时刻 t_n 占有位置 $\mathbf{x}_{n+1}$ 的粒子。因此对于参考时刻下的参考粒子, 物理量 $\frac{d(\theta_m c_m)}{dt} \Big|_{t=t_{ref}}$ 的时域离散可表示为

$$\begin{aligned} \frac{d(\theta_m c_m)}{dt} \Big|_{t=t_{ref}} &= \frac{1}{\Delta t} [(\theta_m c_m)(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1}) - \\ & (\theta_m c_m)(\mathbf{x}(t_n), t_n)] \end{aligned} \quad (38)$$

式中 $(\theta_m c_m)(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1}), (\theta_m c_m)(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ 表示参考粒子在时刻 t_{n+1} 和 t_n 物理量 $\theta_m c_m$ 的值。对于任意物理量 φ , 我们表示同一参考粒子在时刻 t_{n+1} 和 t_n 的值 $\varphi^{+1} = \varphi(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1})$ 和 $\varphi_n = \varphi(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ 。注意到有限元计算通常不直接提供 φ_n 的值, 而仅提供 $\varphi = \varphi(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_n)$ 的值。Zienkiewicz 和 Codina^[19] 推导了一个计算 $\varphi(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ 的显式公式并构造了相应的对流-扩散方程的特征线 Galerkin 方法的显式算法。基于这一工作, 为模拟非饱和土中污染物输运问题, 李锡夔^[16] 等发展了求解对流-扩散-吸附方程的特征线 Galerkin 方法的一个修正显式算法。显式算法在时域内条件稳定, 时间步长 $\Delta t = t_{n+1} - t_n$, 因而, Courant 数 ($C_r = \|\mathbf{U}_w\| \Delta t / h$, h 是典型的有限元网格尺寸) 将被由算法稳定性条件确定的临界时间步长所

限制。

定义 $\varphi = \theta_m c_m$ 。在本文的工作中, 我们利用精细积分过程发展了一个确定 $\varphi(\mathbf{x}(t_n), t_n)$ 表示式的算法。算法可视为一个算子分离过程, 非自伴随的对流算子与扩散及吸附等其它自伴随算子相分离。在时刻 t_{n+1} 位于有限元网格节点 $\mathbf{x}_{n+1}$ 的物质粒子被定义为参考物质粒子。首先考虑纯对流方程由 t_n 至 t_{n+1} 的解 $\varphi^*(\mathbf{x}(t_{n+1}), t_{n+1})$

$$\frac{d\varphi^*}{dt} = \frac{\partial \varphi^*}{\partial t} + \mathbf{U}_w^T \nabla \varphi^* = 0 \quad (39)$$

这里 φ 的上标* 把 φ^* 与方程(31)的参考粒子 φ 的真实解相区别。其本质边界条件为

$$\varphi^* = \bar{\varphi} \quad \text{在 } \Gamma_{\varphi_1} \text{ 上} \quad (40a)$$

$$\varphi^*|_{t=0} = \bar{\varphi}|_{t=0}, \quad \partial \varphi^* / \partial t = \bar{\varphi}^* \quad \text{在 } \Gamma_{\varphi_2} \text{ 上} \quad (40b)$$

由空间域中标准 Galerkin 有限元离散

$$\varphi^* = \sum N_k \varphi_k^* \quad (41)$$

式中 φ_k^* 是函数 φ^* 在节点 k 的节点值。为考虑所施加的本质边界条件, 我们把 φ 的节点值排列于一全局节点值向量 $\mathbf{d}^T = [\mathbf{d}_1^T \quad \mathbf{d}_2^T \quad \mathbf{d}_3^T]$ 中, 其中下标 1, 2 和 3 分别表示自由节点变量和在 Γ_{φ_1} 与 Γ_{φ_2} 的函数节点值。按标准 Galerkin 有限元离散可获得方程(39)的半离散形式如下

$$\mathbf{d}_1^* = \mathbf{H} \mathbf{d}_1 + \bar{\mathbf{r}}_f \quad (42)$$

式中

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= -\mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{C}_{1,11} \\ \bar{\mathbf{r}}_f &= -\mathbf{M}_{11}^{-1} (\mathbf{C}_{1,12} \bar{\mathbf{d}}_2 + \mathbf{C}_{1,13} \bar{\mathbf{d}}_3 + \mathbf{M}_{13} \bar{\mathbf{d}}_3) \\ \mathbf{M} &= \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{N}^T d\Omega \\ \mathbf{C}_1 &= \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{U}_{w,j}^* \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} d\Omega \end{aligned} \quad (43)$$

方程(42)在时域 $\Delta t = [t_n, t_{n+1}]$ 的精细积分给出

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_1^*(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) &= \mathbf{T} \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \\ &= \mathbf{T} \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \end{aligned} \quad (44)$$

式中

$$\mathbf{T} = \exp(\mathbf{H} \Delta t) \quad (45)$$

$$\bar{\mathbf{R}}_f = (\mathbf{T} - \mathbf{I}) \mathbf{H}^{-1} \bar{\mathbf{r}}_f \quad (46)$$

由钟万勰等^[23]和 Angel 等^[24]基于 2^N 算法的计算指数矩阵的精细积分方法可描述如下

$$\exp(\mathbf{H} \Delta t) = [\exp(\mathbf{H} \frac{\Delta t}{m})]^m = [\exp(\mathbf{H} \hat{\Delta})]^m \quad (47)$$

式中 m 可选为 2 的整数幂, 即 $m = 2^N$ 。例如取 $N = 20$, 即有 $m = 1048576$ 。计算具如此小 $\hat{\Delta}$ ($\hat{\Delta} = \Delta t/m$) 值的指数矩阵 $\exp(\mathbf{H} \hat{\Delta})$, 我们能利用下列截断泰勒级

数展开而得到足够高精度的 $\exp(\mathbf{H} \hat{\Delta})$ 近似表示

$$\begin{aligned} \exp(\mathbf{H} \hat{\Delta}) &\approx \mathbf{I} + \mathbf{H} \hat{\Delta} + (\mathbf{H} \hat{\Delta})^2/2! + \\ &\quad (\mathbf{H} \hat{\Delta})^3/3! + (\mathbf{H} \hat{\Delta})^4/4! = \mathbf{I} + \mathbf{T}_4 \end{aligned} \quad (48)$$

特别要注意的是, 由于 $\hat{\Delta}$ 的值非常小, 因而 $\mathbf{H} \hat{\Delta}$ 的模非常接近于零, 指数矩阵 $\exp(\mathbf{H} \hat{\Delta})$ 非常接近于单位阵。因此, 矩阵 $\mathbf{T}_a$ 中元素的值与单位阵 $\mathbf{I}$ 中的元素值 1 相比非常小, 在计算 $\exp(\mathbf{H} \hat{\Delta})$ 时应该单独计算和存储它们以保证 $\mathbf{T}_a$ 中的元素保持足够的有效位数。

把式(47)和(48)代入(45)得到

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^N} = (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-1}} \times (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-1}} \\ &= (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-2}} \times (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-2}} \times (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-2}} \\ &\quad \times (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a)^{2^{N-2}} = \dots = \mathbf{I} + \mathbf{T}_a^* \end{aligned} \quad (49)$$

式中 $\mathbf{T}_a^*$ 为矩阵 $\mathbf{T}$ 中把单位阵 $\mathbf{I}$ 单独提取后的结果, 即 $\mathbf{T}_a^* = \mathbf{T} - \mathbf{I}$ 。注意到

$$(\mathbf{I} + \mathbf{T}_a) \times (\mathbf{I} + \mathbf{T}_a) = \mathbf{I} + 2\mathbf{T}_a + \mathbf{T}_a \times \mathbf{T}_a \quad (50)$$

同时, 纯对流方程(39)在空间域的有限元离散对全局自由节点变量 $\mathbf{d}_1$ 也给出

$$\mathbf{d}_1^*(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_n, t_n) \quad (51)$$

把式(44)代入方程(51)得到

$$\mathbf{d}_1(\mathbf{x}_n, t_n) = \mathbf{d}_1^*(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \mathbf{T} \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \quad (52)$$

需要指出的是, 本文中利用精细积分方法求解纯对流方程(39)仅是作为一个工具以获得 t_n 时刻特征面上参考粒子在有限元离散意义上的函数 φ^* 的精细值。这在保证本文的特征线 Galerkin 方法的无条件稳定性和精度上起到重要的作用。应该注意, 如 Zienkiewicz and Taylor^[18]所表明的, 采用通常数值积分过程, 方程(39)是不能利用标准 Galerkin 过程离散的; 然而, 若利用精细积分过程求解方程(42), 则方程(39)是完全可以利用标准 Galerkin 过程离散, 并为稍后所给出的数值例题所证实, 这要归功于基于 2^N 算法计算指数矩阵的精细积分方法。

4 非饱和土中溶混污染物运移模型的有限元过程及隐式算法

考虑对流-扩散-吸附方程(31)的特征线 Galerkin 离散, 首先把它改写为

$$\begin{aligned} L_c &= \frac{d(\theta_m c_m)}{dt} + A \theta_m c_m - \frac{1}{R_m} \text{div}(\theta_m \mathbf{D}_h \nabla c_m) + Q \\ &= 0 \end{aligned} \quad (53)$$

方程(53)在特征面上是自伴随的, 其边界条件可表示为

(a) 本质(Dirichlet)边界条件

$$\varphi \equiv \bar{\varphi} \quad \text{在 } \Gamma_{\varphi_1} \text{ 上} \quad (54a)$$

$$\varphi|_{t=0} = \bar{\varphi}|_{t=0}, \quad \partial \varphi / \partial t = \dot{\varphi} \quad \text{在 } \Gamma_{\varphi_2} \text{ 上} \quad (54b)$$

当含水量 θ_m 在空间域和边界上的值已为先前的渗流力学分析所确定, 浓度指定值边界条件将根据相应 $\varphi (= \theta_m c_m)$ 的非零指定值边界条件而给定

$$c_m = \bar{c}_m \quad \text{在 } \Gamma_c \text{ 上} \quad (55)$$

(b) 自然(Neuman)边界条件

$$-n^T D_h \nabla c_m = \bar{J}_n \quad \text{在 } \Gamma_J \text{ 上} \quad (56)$$

它指定了在 Γ_J 上的可扩散边界条件, 这里 φ 沿边界 Γ_J 法线的指定扩散率 $\bar{J}_n$ 须在弱形式下得以满足。当在部分 Γ_J 上指定 $\bar{J}_n = 0$ 时, 意味着这部份 Γ_J 对 φ 是不可扩散的。对在特征面上是自伴随的控制方程(56)与自然边界条件应用标准 Galerkin 有限元离散, 可得到

$$\int_{\Omega} W^* T_{L_c} d\Omega + \int_{\Gamma_J} W^* T(-n^T D_h \nabla c_m - \bar{J}_n) d\Gamma = 0 \quad (57)$$

式中 W^* 和 $\bar{W}^*$ 是任意权函数。

根据特征线 Galerkin 方法, U_w^* 被处理为方程(31)中的广义对流速度。对于任意参考粒子, 方程(53)左边第一项在时段 Δt 利用方程(38)离散, 而后面三项则能以类似方式离散如下

$$(A\theta_m c_m)_{t=t_{ref}} = \gamma(A\theta_m c_m)^{n+1} + (1-\gamma)(A\theta_m c_m)(\mathbf{x}(t_n), t_n) \quad (58)$$

$$\frac{1}{R_m} \text{div}(\theta_m D_h \nabla c_m) = \gamma \left[\frac{1}{R_m} \text{div}(\theta_m D_h \nabla c_m) \right]^{n+1} + (1-\gamma) \left[\frac{1}{R_m} \text{div}(\theta_m D_h \nabla c_m) \right](\mathbf{x}(t_n), t_n) \quad (59)$$

$$Q = \gamma Q^{n+1} + (1-\gamma) Q(\mathbf{x}(t_n), t_n) \quad (60)$$

式中 $\gamma \in [0, 1]$ 。对 Crank-Nicolson 算法可取 $\gamma = 0.5$, 而对向后 Euler 算法则可取 $\gamma = 1.0$ 。

参考物质粒子在时刻 t_{n+1} 的全局未知向量 $\mathbf{d}_1$ 及其时间导数能表示为

$$\mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \mathbf{d}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) + \gamma \Delta \mathbf{d}_1 \Delta t \quad (61)$$

$$\dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \dot{\mathbf{d}}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) + \dot{\Delta \mathbf{d}}_1 \quad (62)$$

式中 $\Delta \mathbf{d}$ 为待定的未知向量速率 $\dot{\mathbf{d}}$ 的修正值, 预测值 $\mathbf{d}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1})$ 和 $\dot{\mathbf{d}}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1})$ 定义为

$$\mathbf{d}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_n, t_n) + \dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_n, t_n) \Delta t \quad (63)$$

$$\dot{\mathbf{d}}_1^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_n, t_n) \quad (64)$$

式中

$$\mathbf{d}_1(\mathbf{x}_n, t_n) = T \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \quad (65)$$

$$\dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_n, t_n) = T \dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \dot{\bar{\mathbf{R}}}_f \quad (66)$$

$$\dot{\bar{\mathbf{R}}}_f = (T - I) H^{-1} \dot{\mathbf{r}}_f = - (T - I) H^{-1} M_{11}^{-1} C_{1,13} \dot{\mathbf{d}}_3 \quad (67)$$

注意到对于每个时间增量步, 渗流分析先于污染物输运分析进行。为符号的简明起见, 略去自由节点浓度向量的下标 1, 以 $\mathbf{c}_m$ 表示污染物浓度的自由节点值向量并能表示为

$$\mathbf{d}_1 = S_1 \mathbf{c}_m \quad (68)$$

式中 对角线矩阵 S_1 是对角线矩阵 $S = \text{diag}(\theta_{m1}, \theta_{m2}, \dots, \theta_{mn})$ 的子矩阵, 其中 n 是有限元网格节点总数。利用式(68), 我们可得到

$$\mathbf{c}_m(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = \mathbf{c}_m^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) + \gamma \Delta \mathbf{c}_m \Delta t \quad (69)$$

式中

$$\mathbf{c}_m^p(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) = S^{-1}(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) [\mathbf{d}_1(\mathbf{x}_n, t_n) + \dot{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_n, t_n) \Delta t] \quad (70)$$

$$\Delta \mathbf{c}_m = S^{-1}(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) \Delta \mathbf{d}_1 = (S^{n+1})^{-1} \Delta \mathbf{d}_1 \quad (71)$$

由于方程(53)为由沿特征面上的自伴随问题导出, 因而由标准 Galerkin 方法的空间离散化是最优的, 方程中 $(\theta_m c_m)$ 和 c_m 在空域将由标准 Galerkin 方法离散, 其有限元插值近似表示为

$$(\theta_m c_m) = \sum N_j (\theta_m c_m)_j \quad (72)$$

$$c_m = \sum N_j (c_m)_j$$

式中 $(*)_j$ 是函数 $*$ 在节点 j 的值, N_j 是函数 $*$ 在单元内插值时在节点 j 的形函数。对控制方程(53)中的扩散项应用 Green 定理, 并选用如下权函数

$$W^* = N \quad \text{在 } \Omega \text{ 上}; \quad \bar{W}^* = 0 \quad \text{在 } \Gamma_c \text{ 上}$$

$$\bar{W}^* = -\frac{\theta_m}{R_m} N \quad \text{在 } \Gamma_J \text{ 上} \quad (73)$$

可以得到向后 Euler 方案的隐式算法下特征 Galerkin 方法的有限元方程

$$\begin{aligned} & [M_{11} + K_{11}^{n+1} (S_1^{n+1})^{-1} \Delta t + C_{2,11}^{n+1} \Delta t] \Delta \mathbf{d}_1 = \\ & - [f^{n+1} + K_{12}^{n+1} \bar{c}_{m,2}^{n+1} + K_{13}^{n+1} \bar{c}_{m,3}^{n+1} + \\ & C_{2,12}^{n+1} \bar{d}_2^{n+1} + C_{2,13}^{n+1} \bar{d}_3^{n+1} + M_{13} \bar{d}_3^{n+1} + \\ & M_{11} (T(\dot{\mathbf{d}}_1^{n+1})^p + \bar{\mathbf{R}}_f) - \\ & \int_{\Gamma_c} N^T \frac{\theta_m}{R_m} n^T D_h \nabla c_m d\Gamma + \\ & \int_{\Gamma_J} N^T \frac{\theta_m}{R_m} \bar{J}_n d\Gamma + K_{11}^{n+1} (S_1^{n+1})^{-1} (T(\mathbf{d}_1)^n + \\ & \bar{\mathbf{R}}_f + T(\dot{\mathbf{d}}_1^{n+1})^p \Delta t) + C_{2,11}^{n+1} (T(\mathbf{d}_1)^n + \\ & \bar{\mathbf{R}}_f + T(\dot{\mathbf{d}}_1^{n+1})^p \Delta t)] \end{aligned} \quad (74)$$

式中 N 是由所有单元形函数矩阵组装的全局形函数矩阵, 以及

$$(\mathbf{d}_1)^n = \mathbf{d}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n)$$

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{R}}_f &= (\mathbf{T} - \mathbf{I}) \mathbf{H}^{-1} \bar{\mathbf{r}}_f \\
\bar{\mathbf{r}}_f &= -\mathbf{M}_{11}^{-1} (\mathbf{C}_{1,12} \bar{\mathbf{d}}_2 + \mathbf{C}_{1,13} \bar{\mathbf{d}}_3 + \mathbf{M}_{13} \bar{\mathbf{d}}_3) \\
\dot{\mathbf{R}}_f(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) &= (\mathbf{T} - \mathbf{I}) \mathbf{H}^{-1} \dot{\mathbf{r}}_f = \\
&\quad - (\mathbf{T} - \mathbf{I}) \mathbf{H}^{-1} \mathbf{M}_{11}^{-1} \mathbf{C}_{1,13} \bar{\mathbf{d}}_3(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) \\
\mathbf{K} &= \int_{\Omega} \frac{1}{R_m} \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_k} \theta_m D_{h,kl} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial x_l} d\Omega \\
\mathbf{f}^{n+1} &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T Q^{n+1} d\Omega \\
\mathbf{C}_2 &= \int_{\Omega} \mathbf{N}^T \mathbf{A} \mathbf{N} d\Omega \\
\mathbf{C}_1 &= \int_{\Omega} \mathbf{N} U_{w,j}^* \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} d\Omega \quad (75)
\end{aligned}$$

这就是控制非饱和土中污染物运移过程的对流-扩散-吸附方程(31)的隐式特征线 Galerkin 有限元方法的形式。在方程(74)和式(75)中矩阵的上标 $n+1$ 表示时刻 t_{n+1} 。 $\bar{\mathbf{d}}_1$ 在时刻 t_{n+1} 的初始预测值为

$$\begin{aligned}
(\bar{\mathbf{d}}_1^{n+1})_{i=0}^p &= \bar{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_n, t_n) \\
&= \mathbf{T} \bar{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) \quad (76)
\end{aligned}$$

方程(74)是非线性的,需迭代求解。把每次迭代所得 $\Delta \bar{\mathbf{d}}_1$ 值代入方程(61), (62), (71) 和(69)可循环更新 $\mathbf{c}_m, \bar{\mathbf{d}}_1$ 的预测值。

需要指出的是,矩阵 $\mathbf{T}$ 的计算涉及对流速度场 $\mathbf{U}_w^*$ 和时间步长 Δt 。通常 Δt 取为常数,因而对稳态速度场问题矩阵 $\mathbf{T}$ 仅需计算一次。对于非稳态对流问题,每个时间步的矩阵 $\mathbf{T}$ 将有变化,如果对每个时间步都重新计算一次矩阵 $\mathbf{T}$,将要求十分大的计算工作量,即使与显式特征线 Galerkin 方法,甚至与 SUPG(流线上峰 Petrov Galerkin)和其它隐式算法相比,本文的隐式特征线 Galerkin 方法可采用大得多的时间步长而同时保持稳定性和高精度,但对每个时间步都重新按上述精细积分过程计算一次矩阵 $\mathbf{T}$ 所需计算工作量还是太大,因而在实际问题中是不可接受的。为考虑速度场随时间的变化,我们首先把非稳态速度场 $\mathbf{U}_w^*$ 分离成一个常速度场 $\mathbf{U}_{w0}^*$ 和在此基础上的变化部分 $\Delta \mathbf{U}_w^*(t)$ 之和,即

$$\mathbf{U}_w^*(t) = \mathbf{U}_{w0}^* + \Delta \mathbf{U}_w^*(t) \quad (77)$$

方程(42)因而能写成

$$\dot{\bar{\mathbf{d}}}_1^* = (\mathbf{H}_0 + \Delta \mathbf{H}_1(t)) \bar{\mathbf{d}}_1^* + \bar{\mathbf{r}}_f \quad (78)$$

式中

$$\mathbf{H}_0 = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}_{1,11}^0$$

$$\mathbf{C}_{11}^0 = \int_{\Omega} \mathbf{N} U_{w0,j}^* \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} d\Omega$$

$$\Delta \mathbf{H}_1(t) = -\mathbf{M}^{-1} \mathbf{C}_{1,11}$$

$$\mathbf{C}_1(t) = \int_{\Omega} \mathbf{N} \Delta U_{w,j}^*(t) \frac{\partial \mathbf{N}^T}{\partial x_j} d\Omega \quad (79)$$

类似于方程(42)的积分过程,由方程(78)在 $\Delta t = [t_n, t_{n+1}]$ 的积分可得到

$$\begin{aligned}
\bar{\mathbf{d}}_1^*(\mathbf{x}_{n+1}, t_{n+1}) &= \mathbf{T} \bar{\mathbf{d}}_1^*(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \\
&= \mathbf{T} \bar{\mathbf{d}}_1(\mathbf{x}_{n+1}, t_n) + \bar{\mathbf{R}}_f \quad (80)
\end{aligned}$$

式中

$$\begin{aligned}
\mathbf{T} &= \exp(\mathbf{H}^* \Delta t) = \exp((\mathbf{H}_0 + \Delta \mathbf{H}_1) t \Delta) \\
&= \mathbf{T}_0(\Delta t) \quad (81)
\end{aligned}$$

$$\mathbf{T}_0 = \exp(\mathbf{H}_0 \Delta t) \quad (82)$$

$$\Delta \mathbf{T} = \exp(\Delta \mathbf{H}_1 \Delta t) \quad (83)$$

指数矩阵 $\mathbf{T}_0$ 仍按由方程(47)–(50)描述的 2^N 算法计算。假定 $\|\Delta \mathbf{U}_w^*(t)\| \ll \|\mathbf{U}_{w0}^*\|$, 则指数矩阵 $\Delta \mathbf{T}$ 可以由一阶近似计算而无需利用 2^N 算法,即

$$\Delta \mathbf{T} = \exp(\Delta \mathbf{H}_1 \Delta t) \approx \mathbf{I} + \Delta \mathbf{H}_1 \Delta t \quad (84)$$

指数矩阵 $\mathbf{T}_0$ 仅需计算一次或仅相当有限的次数。在上一情况,指数矩阵 $\mathbf{T}_0$ 将在必要时更新以保证指数矩阵 $\mathbf{T}$ 的足够精度。

5 稳定性分析

为对本文算法在时域计算的稳定性作出分析,我们考虑控制方程(53)的半离散有限元方程在时域离散的齐次形式

$$\begin{aligned}
&\mathbf{M}(\varphi^{n+1} - \mathbf{T} \varphi^n) + (\mathbf{K} + \mathbf{C}_2) \\
&(\gamma \varphi^{n+1} + (1 - \gamma) \mathbf{T} \varphi^n) \Delta t = 0 \quad (85)
\end{aligned}$$

经整理得

$$\begin{aligned}
&[\mathbf{I} + \gamma \Delta t \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{K} + \mathbf{C}_2)] \varphi^{n+1} = \\
&[\mathbf{I} - (1 - \gamma) \Delta t \mathbf{M}^{-1}(\mathbf{K} + \mathbf{C}_2)] \mathbf{T} \varphi^n \quad (86)
\end{aligned}$$

通过模态分解途径^[25],方程(86)能分解为一系列非耦合的标量方程

$$\begin{aligned}
&[1 + \gamma \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)] \varphi^{n+1} = \\
&[1 - (1 - \gamma) \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)] \mathbf{T} \varphi^n \quad (87)
\end{aligned}$$

注意到对于矩阵 $\mathbf{M}, \mathbf{K}, \mathbf{C}_2$ 中所有参数的许可值 $[1 + \gamma \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)] > 0$ 均成立,我们可把式(87)

改写为

$$\varphi^{n+1} = \lambda \varphi^n \quad (88)$$

式中 $\lambda = [1 - (1 - \gamma) \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)] \mathbf{T} / [1 + \gamma \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)]$ 是增幅因子。稳定性要求可表示为

$$-1 < \frac{[1 - (1 - \gamma) \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)] \mathbf{T}}{1 + \gamma \Delta t (\lambda_k + \lambda_l)} < 1 \quad (89)$$

可以注意到,根据公式(43)中矩阵 $\mathbf{H}, \mathbf{C}_1, \mathbf{M}$ 的定义 $\|\mathbf{H} \Delta t\| \leq 0$,因而在方程(89)中有 $0 \leq T \leq 1$,其右边不等式对式中参数的所有允许值皆满足,而其左边不

等式在 $\gamma \geq T/(1+T)$ 情况下满足, 即在 $\gamma \leq 1/2$ 条件下满足。

6 数值例题和结果

[例题 1] 考虑一个一维问题。30 m 高 1 m 宽的土柱划分为 30×1 均匀的四节点等参元网格。施加一个如图 1 所示中心位于 $x = 5.0$ 具初始单位幅值的高斯浓度分布。假定速度场 $U_{w,x} = 1$ 在整杆均匀和稳态。首先考虑纯对流情况, 即 Peclet 数为无限值的情况。注意到对于本纯对流问题, 显式特征线 Galerkin 方法稳定性条件所要求的临界时间步长 $\Delta t_{cr} = \sqrt{1/3}$, 即临界 Courant 数 $C_{r,crit} = \sqrt{1/3}$; SUPG (流线上峰 Petrov-Galerkin) 方法对于本例题在 $C_r \geq 2$ 时失效。而当利用本文隐式特征线 Galerkin 方法时, 我们采用了从 $C_r = 2$ 到 $C_r = 20$ 的一系列 Courant 数。值得注意的是, 如图 1 所示, 由本文方法采用不同的 Courant 数相应所获得的结果却完全相同, 其原因是由于采用了精细积分过程, 它在纯对流问题中完全确定了解的精度。同时, 可以看到, 本文方法所获得的结果与精确解相当一致, 而要比由 SUPG 方法^[23,24]和显式特征线 Galerkin 方法^[19,15]所获得的结果要好; 当浓度分布沿柱轴迁移时, 本文方法的高斯浓度分布幅值几乎没有任何数值衰减, 而对于 SUPG 方法这样的数值衰减能很明显地看到。同样对这个例题考虑情况二。情况二显示于本文模型在模拟所有控制现象, 包括物理和化学非平衡过程都存在时的能力。它与情况一具有相同的初始浓度分布和速度场, 但由不同的机制控制。所采用的参数为 $a_L = 0.1$, $\alpha_d^* = 8.0448 \times 10^{-3}$, $S_{w0} = 0.25$ ($S_w = 0.5$), $K_d = 0.01$, $p = 0.5$; $k_s = 0.5$, $k_m = k_{im} = 0.01$; $F_0 = 1.0$, $K_1 = 5.3466E-3$, $K_2 = 6.2234E-5$ 。图 2 给出了相应 $C_r = 0.25, 0.5, 1.0, 2.0$, 在 $t = 10$ s 时沿杆轴的浓度分布比较。它显示了当 C_r 数增加时本文方法在稳定性方面的良好性能, 同时显示了当 C_r 数减少时本文方法在收敛性方面也具有良好的性能。

[例题 2] 分析 Na^+ 和 Cd^{2+} 的水溶液在土柱试样中的输运过程, 并与实验结果^[17]相比较。土柱试样高 7.9 cm, 密度 $\rho_s = 2.57 \text{ g/cm}^3$, 划分为 50×1 均匀的四节点等参元网格, 全柱均匀不变的孔隙度 $n = 0.32$ 和饱和度 $S_w = 0.65125$, 在土柱顶部以达西速度 $\dot{w} = 1.3557 \text{ cm/h}$ 注入污染水流。第一个情况考虑注入污染水流含归一单位浓度的 Na^+ 。污染物输运过程由对流, 水力逸散(逸散系数 $a_L = 0.672 \text{ cm}$)和平衡吸附(吸附系数 $K_d = 0.1741 \text{ cm}^3/\text{g}$)控制。图 3 给出了在一系列时刻下从土柱底部流出的水流中 Na^+ 浓度的数值和

实验结果比较。可以看到, 利用不同的 Courant 数 $C_r = 20.586, 10.293, 5.147, 2.573$ 所得的数值结果与实验量测结果非常一致。第二个情况考虑注入污染水流含归一单位浓度的 Cd^{2+} 。假设污染物输运过程由对流, 水力逸散(逸散系数 $a_L = 0.3738 \text{ cm}$), 平衡吸附(吸附系数 $K_d = 0.1013 \text{ cm}^3/\text{g}$)和非平衡吸附(吸附系数 $K_1 = 5.3466E-4$, $K_2 = 6.2234E-5$, $F \setminus - 0 = 1.0$)控制。这里 Cd^{2+} 的 F_0 值也是归一化后的值。图 6 给出了利用不同的 Courant 数 $C_r = 20.586, 10.293, 5.147, 2.573$, 在一系列时刻下从土柱底部流出的水流中 Cd^{2+} 浓度的数值结果。

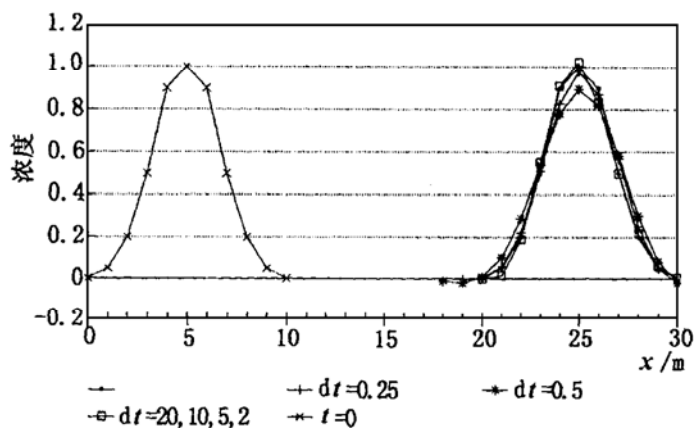


图 1 纯对流情况下在 $t = 20$ s 时的浓度分布

Fig. 1 Concentration distribution at $t = 20$ s for pure convection case

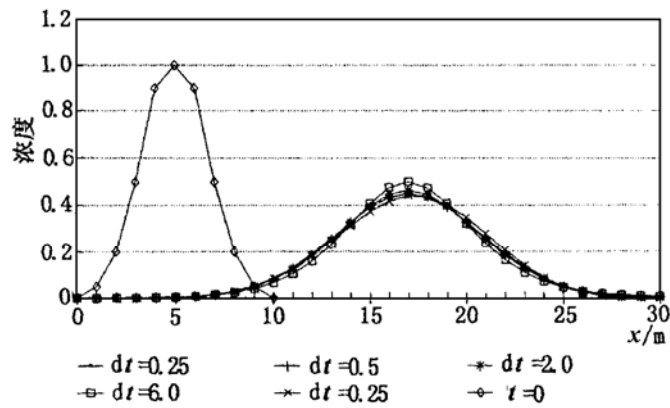


图 2 对流-扩散情况下在 $t = 12$ s 时的浓度分布

Fig. 2 Concentration distribution at $t = 20$ s for convection - diffusion case

[例题 3] 作为一个二维问题, 取自于 Brooks and Hughes^[23]。本例的瞬态解能看作为获得稳态解的手段, 因而在本例的数值表现成为判断所建议方法是否有效的一个参考准则。问题的域是一 $10 \text{ m} \times 10 \text{ m}$ 域并用 10×10 单元网格划分。在域的底边界和左边界的下方 3 m 指定单位浓度值, 而其余边界部分指定浓度值为零。假定均匀和稳态的固有对流速度场 $\|U_w\| = 1$, 且与底边界成 $\theta = 60^\circ$ 取向。输运过程的控制机制为对流和水力逸散(逸散系数 $a_L = a_T = 0$ 。

6)。图5给出了利用 $C_r = 1.732, 6.933$ 时达到稳态解时的浓度分布。SUPG 途径对于同样的例题, 如采用 $C_r > 1$, 全域的浓度分布将呈现严重的振荡而变得毫无意义^[24]。而图5(b)显示, 即使采用 $C_r = 6.933, 本文方法仍给出稳定的解, 虽然解的精度稍差些。$

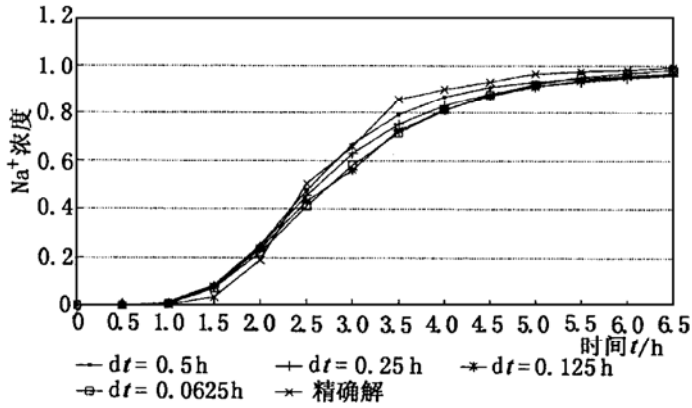


图3 污染物 Na^+ 输运过程的数值和实验结果比较

Fig. 3 Comparison between numerical and experimental results for pollutant transport of Na^+

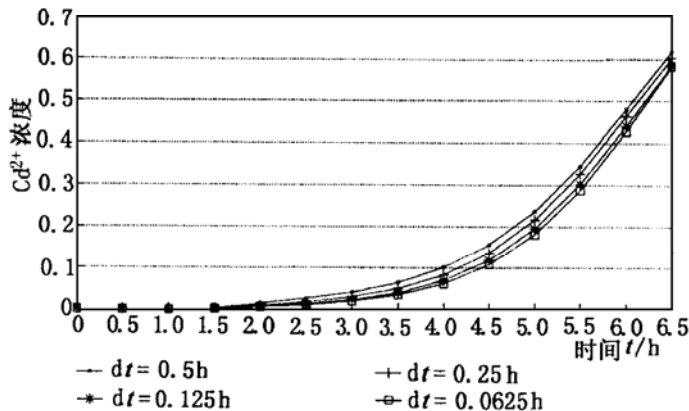


图4 在一系列时刻由土样流出液中 Cd^{2+} 的浓度

Fig. 4 Concentration of Cd^{2+} in outflow from the soil sample at a series of time instants

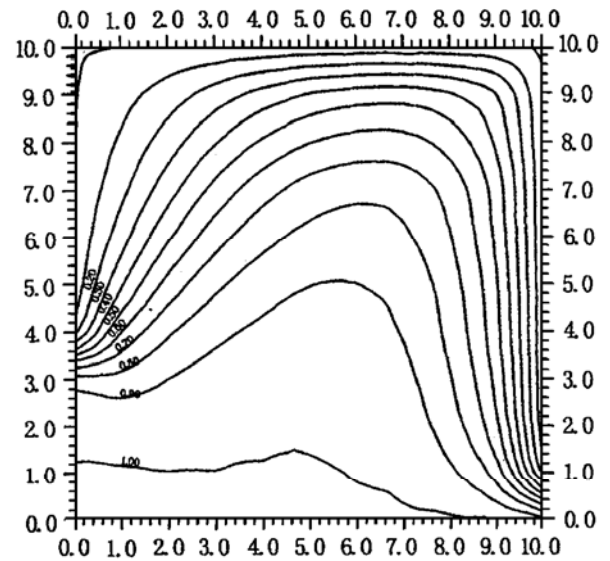
[例题4] 考察一2 m深6 m宽在水平方向无限长的非饱和土条。在顶部中央1 m宽以流量为 $1 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$ ($w = 1 \times 10^{-5} \text{ m/s}$) 注入污水。有限元分析网格和边界条件如图8所示, $\Phi = 0$ 表示非渗透边界。由于对称, 仅取6 m宽的区域的一半进行分析。吸力假定为饱和度的函数

$$p_c = (a_s \ln e)^{-1} \ln(1 - (S_r - S_w)/b_s) \quad (90)$$

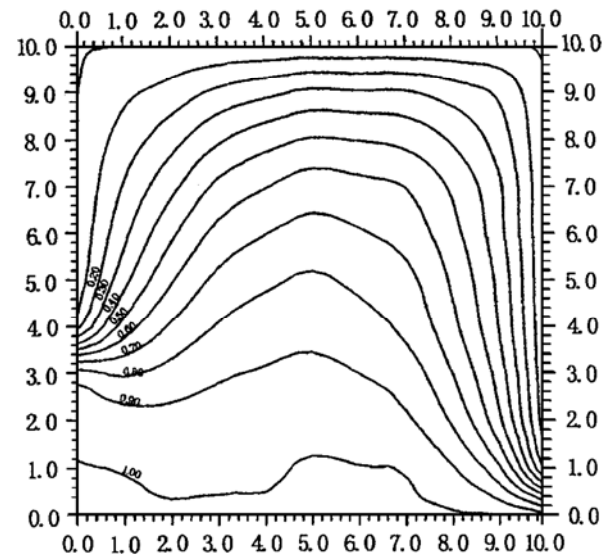
式中 e 是孔隙比, 所用参数 $a_s = 0.1 \text{ m}^2/\text{kN}$, $b_s = 0.85$ 和相应于饱和情况的饱和度 $S_r = 1.0$ 。体积模量 $K_w = 1.724 \text{ MPa}$ 和密度 $\rho_w = 1 \text{ g/cm}^3$ 。利用如下公式^[28] 计算孔隙水和气在非饱和土中依赖于饱和度的各向同性渗透系数

$$k_w = b_w \left| \frac{S_w - S_r}{1 - S_r} \right|^3 a_w^e$$

$$k_g = b_g \left[\beta_g (p_g + p_{at} \frac{\sigma}{\mu_g}) \right] [e S_g]^{a_g} \quad (91)$$



(a) $p_e = 2.31, \theta = 60^\circ, C_r = 1.732$



(b) $p_e = 2.31, \theta = 60^\circ, C_r = 6.933$

图5 Hughes' 二维问题: 对流和扩散情况

Fig. 5 Function contours of Hughes' 2D problem: convection diffusion case

式中 所用参数 $a_w = 1.0$, $b_w = 1.0 \text{ m/s}$, 残留饱和度 $S_r = 0.15$, $\mu_g = 0.185 \times 10^{-7} \text{ kPa}$, $a_g = 3.98$, $b_g = 0.97 \times 10^{-9} \text{ m/s}$, $p_{at} = 10 \text{ kPa}$, $g = 9.81 \text{ m/s}^2$ 。 p_g 为孔隙气压力。全域的初始饱和度为0.5, 根据式(90)和被动空气压力假定, 全域的初始孔隙水压力 $p_{w0} = -11.878 \text{ kPa}$ 。为模拟安排在右下边界处的抽水井的效应, 如图6所示, 一个不变均匀分布水压力(抽力为负) $\bar{p}_w = -14 \text{ kPa}$ 作用在右下边界处。例题的溶质输运过程由对流, 水力逸散($a_L = a_T = 0.7$)和平衡线性吸附($K_d = 0.17$)机制控制。图7和图8给出了在时刻 $t = 5, 20 \text{ h}$ 时饱和度和污染物浓度的演变。

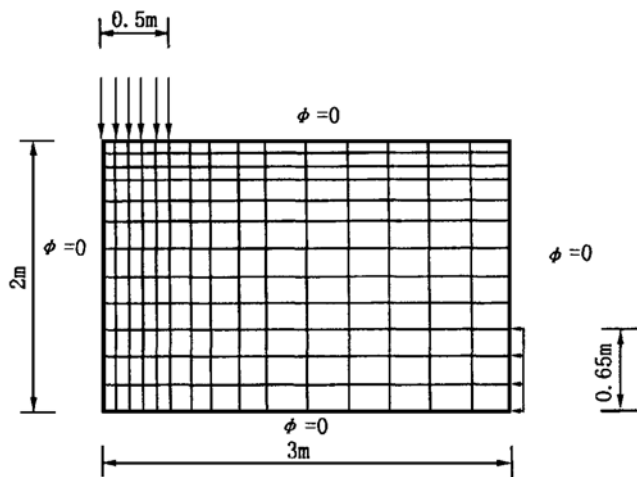


图6 排水非饱和沙粘土中水流和污染物输运过程的模拟边界条件和有限元网格

Fig. 6 Modelling of water flow and contaminant transport in drained unsaturated sandy clay. Boundary condition and finite element mesh

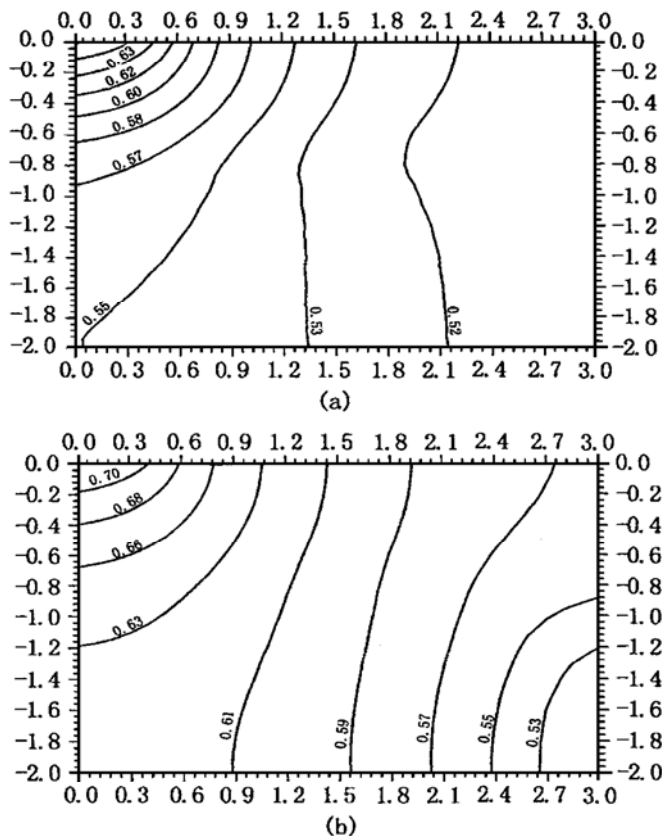


图7 土条在(a) $t = 5$ h (b) $t = 20$ h 饱和度轮廓线

Fig. 7 The saturation contours over the clay strip at (a) $t = 5$ h and (b) $t = 20$ h

参考文献

- 1 Bear J, Verruijt A. Modelling groundwater flow and pollution. D Reidel Publishing Company, Dordrecht, Netherlands, 1987
- 2 Yong R N, Mohamed A M O, Warkentin B P. Principles of contaminant transport in soils. Elsevier Science, Netherlands, 1992

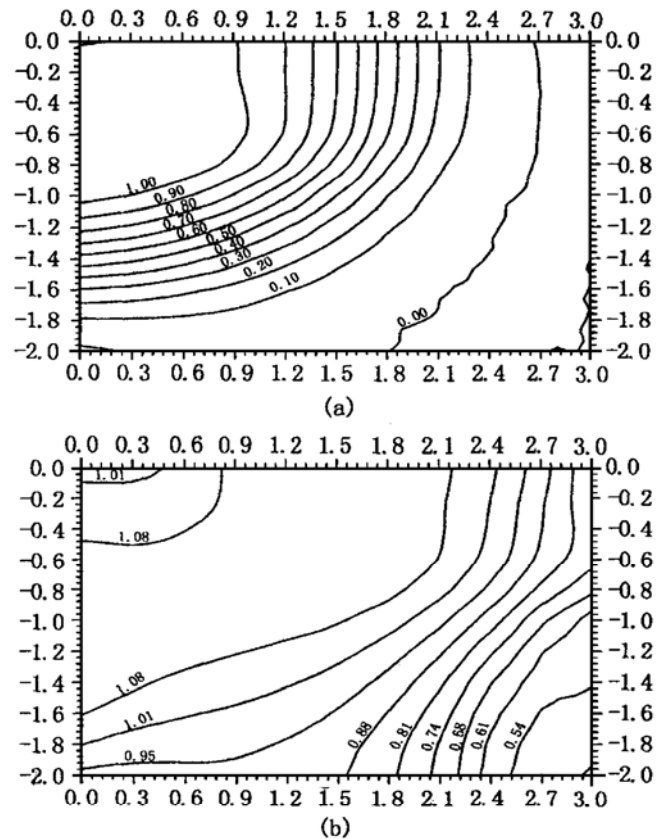


图8 土条在(a) $t = 5$ h (b) $t = 20$ h 浓度轮廓线

Fig. 8 The concentration contours over the clay strip at (a) $t = 5$ h and (b) $t = 20$ h

- 3 Brusseau M L, Jessup R E, Rao P S C. Modelling the transport of solutes influenced by multiprocess nonequilibrium. Water resources research, 1989, **25**: 1971~ 1988
- 4 Kandil H, Miller C T, Skaggs R W. Modelling long - term solute transport in drained unsaturated zones. Water resources research, 1992, **28**: 2799~ 2809
- 5 Smith D W, Rowe R K, Booker J R. The analysis of pollutant migration through soil with linear hereditary time - dependent sorption. Int J for Numer and Anal Methods in Geomechanics, 1993, **17**: 255~ 274
- 6 Schrefler B A, F. E. in environmental engineering: coupled thermo- hydro- mechanical processes in porous media including pollutant transport. Archives of Computational Methods in Engineering, 1995, **2**: 1~ 54
- 7 Yong R N, Thomas H R (Eds) . Proc of Geoenvironmental Engineering Conference, Cardiff, U. K. , 1997, 16~ 18
- 8 Lewis R W, Schrefler B A. The finite element method in the deformation and consolidation of porous media, John Wiley and Sons, Chichester, 1987
- 9 Li Xikui, Zienkiewicz O C, Xie Y M. A numerical model for immiscible two- phase fluid flow in a porous medium and its time domain solution. Int J Numer Methods Eng. 1990, **30**: 1195~ 1212
- 10 Li Xikui, Zienkiewicz O C. Multiphase flow in deforming porous media and finite element solutions. Computers & Structures,

- 1992, **45**: 211~ 227
- 11 李锡夔, 范益群. 非饱和土变形与渗流的有限元分析. 岩土工程学报, 1998, **20**(4): 20~ 24
- 12 Li Xikui, Thomas H R, Fan Yiqun. Finite element method and constitutive modelling and computation for unsaturated soils. *Computer Methods Appl Mech Eng.* 1999, **169**: 135~ 159
- 13 Biver P. Modelling transport in a double porosity medium: an alternative approach. *Proc of the Int Conf of Water Pollution: Modelling Measuring and Prediction*, Southampton, U. K. , 45~ 57, Computational Mechanics Publications, Elsevier Science, 1991
- 14 Radu J P, Biver P, Charlier R, Cescotto S. 2D and 3D finite element modelling of miscible pollutant transport in groundwater below the unsaturated zone, *Proc of Int Conf of Hydrodynamics, ICHD'94*, Wuxi, China, 1994
- 15 李锡夔. 饱和-非饱和土壤中污染物运移过程的数值模拟, 力学学报, 1998, **30**(3): 321~ 332
- 16 Li Xikui, Cescotto S, Thomas H R. Finite element method for contaminant transport in unsaturated soils. *ASCE, Journal of Hydrologic Eng*, 1999, **4**(3)
- 17 Li Baoyuan, Zhu Zhaohui, Zhang Aixiang, Zheng Hongho, Liu Suling, Jiang Liangru, Mu Weixian. The experimental study on the transport of Na^+ and Cd^{2+} in unsaturated soil. *Proc of 2nd Int Conf on Unsaturated Soils. UNSAT'98*, International Academic Publishers, Beijing, China, 1998. 491~ 496
- 18 Zienkiewicz O C , Taylor R L. The finite element methods, Chapter 12, 4th Edn. , Vol. 2, McGraw - Hill, U. K. , 1991
- 19 Zienkiewicz O C, Codina R. A general algorithm for compressible and incompressible flow: [Part I] The split, characteristic- based scheme. *Int J Numer Methods Fluids*, 1995, **20**: 869~ 885
- 20 Chorin A J. A numerical method for solving incompressible viscous problems, *J Comput Phys*, 1967, **2**: 12~ 26
- 21 Zhong Wanxie, Zhu Jianping, Zhong Xiangxiang. A precise time integration algorithm for nonlinear system. *Proc of 3th WCCM* , Tokyo, 1994, 12~ 17
- 22 Angel E, Bellman R. Dynamic programming and partial differential equations. Academic Press, New York, 1972
- 23 Brooks A N, Hughes T J R. Streamline upwind Petrov Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier Stokes equation. *Computer Methods in Appl Mechanics and Engng.* , 1982, **32**: 199~ 259
- 24 Radu J P. Annual report for EC project. University of Liege, Belgium, 1997
- 25 Lloret A, Ledesma A. Finite element analysis of deformations of unsaturated soils. *Unsaturated soils: recent developments and applications. Civil Engineering European Courses*, Barcelona, 15~ 17, 1993
- 26 Zienkiewicz O C, Taylor R L. The finite element methods, 4th Ed. , Vol. 1. McGraw- Hill, 1989