

利用熵格式计算地下水溶质运移方程

陈荣三, 王凡芮, 邹 敏

(中国地质大学(武汉)数学与物理学院, 湖北 武汉 430074)

摘要: 用分裂法将地下水溶质运移方程分成对流方程和弥散方程, 对流方程采用熵格式求解, 弥散方程采用中心格式求解. 数值试验表明, 该格式不会产生过量问题, 没有出现非物理振荡, 数值弥散较小.

关键词: 地下水溶质运移方程; 熵格式; 对流占优

中图分类号: X143; P641.2

文献标志码: A

Entropy Scheme for Solute Transport Equation in Groundwater

CHEN Rongsan, WANG Fanrui, ZOU Min

(School of Mathematics and Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China)

Abstract: The equation of solute transport in groundwater is divided into the convection equation and the diffusion equation by using the splitting method. The entropy scheme is applied to solve the conservation equation while the central difference scheme is applied to solve the diffusion equation. Numerical experiments show that the scheme does not produce excessive problems, and no physical oscillation occurs.

Key words: groundwater solute transport equation; entropy scheme; convection dominated

对流-弥散方程是地下水溶质运移的控制方程. 简单的理想的对流-弥散方程可以求出解析解, 对于复杂的方程还要借助于数值方法. 近年来, 国内外学者针对对流-弥散方程提出了大量的数值方法, 大致可以分成三类: Euler 法、Lagrange 法和混合 Euler-Lagrange 法. 这些方法都能较好地解决弥散占优的问题. 但是一旦对流占优, 数值解会出现过量问题、过多的数值弥散和非物理振荡问题.

有限差分法、有限体积法和有限元法是三种比较常见的 Euler 方法. Roache^[1]提出了上游加权法,

该方法可以消除非物理振荡, 但是增大了数值弥散. 随后许多学者^[2-3]提出了不同的上游加权法, 上游加权对减小解的振荡作用有限, 但却会减低解的精度. 为了提高解的精度, Brooks 等^[4]提出了沿流线上游加权的彼得罗夫-迦辽金方法. 彼得罗夫-迦辽金方法在消除了数值振动现象的同时增大了数值弥散. 梅一等^[5]发展了一种带弥散因子的上游加权法, 通过调整弥散因子可以控制非物理振荡但不降低解的精度. Leisman 等^[6]提出了引入人工扩散量和加权法, 可以使得系数矩阵对称正定. 刘扬^[7]发展了带加罚函数的改进的 Crank-Nicholson 方法, 该方法可以保证解的稳定性同时不会出现非物理振荡. 成建梅等^[8]总结了饱和水流中溶质运移方程求解的各种数值方法. 焦甜等^[9]分析了 Crank-Nicholson 方法, 上游加权法和人工增量法的截断误差、稳定性和收敛性. Cheng 等^[10]将局部间断有限元方法推广到了对流-弥散方程的计算.

近几年来, 茅德康等^[11-16]针对双曲守恒性方程提出了一种 Godunov 型的熵格式. 与传统 Godunov 不同的是, 熵格式除了数值计算数值解外, 还数值计算数值熵, 通过数值模拟多个物理量可以从多个侧面来刻画物理过程. 数值实验证明该方法可以有效地控制数值黏性并且适合长时间的数值计算, 在保证数值稳定的同时最大程度上减少了数值弥散. 崔艳芬等^[10]对熵格式进行了数值分析, 揭示了这种格式具有在计算中各步误差相互抵消的性质.

本文将熵格式推广到地下水溶质运移方程. 首先采用分裂方法将地下水溶质运移方程分成对流方程和弥散方程, 对流方程是一个双曲型方程, 利用熵格式求解, 弥散方程的空间离散用二阶中心格式离散, 时间离散用简单的向前差分离散. 通过数值实验, 对不同对流强度的地下水溶质运移方程进行了数值计算, 计算结果表明, 熵格式没有出现过量问

题,没有出现非物理振荡,数值弥散小,特别适合强对流问题的数值计算.

1 熵格式的描述

考虑如下的地下水溶质运移方程^[9]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = D_L \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (1)$$

式中: ρ 为质量浓度; D_L 为水动力弥散系数; u 为速度; x 为距离; t 为时间. 在式(1)两边同时乘以 2ρ , 整理得

$$\frac{\partial U(\rho)}{\partial t} + u \frac{\partial U(\rho)}{\partial x} = 2D_L \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \quad (2)$$

这里 $U(\rho) = \rho^2$, 把它称之为熵. 熵格式是 Godunov 型有限体积格式, 与传统的 Godunov 格式不同的是, 熵格式有两个数值实体, 即数值解和数值熵. 也就是说, 不仅要计算水溶质运移方程(1)还需要计算相应的熵方程(2). 为了描述的简单, 采用一致等分网格, 网格的宽度为 Δx , 时间步长为 Δt , 第 i 网格单元为 $I_i = (x_{i-1/2}, x_{i+1/2})$, 其中 $x_{i\pm 1/2} = x_i \pm 0.5\Delta x$, x_i 表示网格中心. 引入数值解 $\rho_{i,n}$ 为网格单元 I_i 在 t_n 时刻精确解的网格平均的近似, 即

$$\rho_{i,n} \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \rho(x, t_n) dx \quad (3)$$

另外引入了一个数值熵 $U_{i,n}$, 它是对精确解的熵的网格平均的逼近, 即

$$U_{i,n} \approx \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} U(\rho(x, t_n)) dx \quad (4)$$

采用分裂的方法来求解式(1)和式(2), 将式(1)和式(2)分成对流部分和弥散部分. 式(1)和式(2)的对流部分和弥散部分分别为

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + u \frac{\partial \rho}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial U(\rho)}{\partial t} + u \frac{\partial U(\rho)}{\partial x} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

和

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \\ \frac{\partial U(\rho)}{\partial t} = 2D_L \rho \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} \end{cases} \quad (6)$$

利用熵格式计算对流方程(5), 熵格式包含数值解 $\rho_{i,n}$ 和数值熵 $U_{i,n}$ 两个数值实体. 重构函数和 $\rho_{i,n}$ 和 $U_{i,n}$ 都有关. 熵格式按照重构、发展和网格平均三步来进行. 具体步骤如下:

(1) 重构. t_n 时刻第 i 个网格 I_i 内采用熵台阶重构, 它是一个阶梯函数, 如式(7)所示.

$$R(x; \rho_n, U_n) = \begin{cases} \rho_{i,n} - d_{i,n}, & x_{i-1/2} < x \leq x_i \\ \rho_{i,n} + d_{i,n}, & x_i < x \leq x_{i+1/2} \end{cases} \quad (7)$$

其中 $d_{i,n}$ 为重构斜率. 显然, 熵台阶重构式(7)自动满足

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} R(x; \rho_n, U_n) dx = \rho_{i,n} \quad (8)$$

首先计算熵台阶 $d_{i,n,e}$, 要求

$$\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} U(R(x; \rho_n, U_n)) dx = U_{i,n} \quad (9)$$

式(9)意味着重构解的熵的网格平均等于该网格的数值熵. 将式(7)代入式(9)可以计算出熵台阶 $d_{i,n,e}$

$$d_{i,n,e} = \text{sgn}(C_{i+1} - C_{i-1}) \sqrt{U_{i,n} - (\rho_{i,n})^2} \quad (10)$$

$d_{i,n,e}$ 符号取为和 $(\rho_{j+1,n} - \rho_{j-1,n})$ 相同. 另外, 定义一个总变差下降(TVD)的台阶 $d_{i,n,\text{TVD}}$

$$d_{i,n,\text{TVD}} = \min \text{mod}(\rho_{i,n} - \rho_{i-1,n}, \rho_{i+1,n} - \rho_{i,n}) \quad (11)$$

这里 $\min \text{mod}$ 定义为

$$\min \text{mod}(a, b) = \begin{cases} s \cdot \min(|a|, |b|), & \text{如果 } \text{sgn}(a) = \text{sgn}(b) = s \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \quad (12)$$

最终的台阶取为 $d_{i,n,e}$ 和 $d_{i,n,\text{TVD}}$ 的最小值, 符号取为和 $(\rho_{i+1,n} - \rho_{i-1,n})$ 相同, 即

$$d_{i,n} = \text{sgn}(\rho_{i+1} - \rho_{i-1}) \min(|d_{i,n,e}|, |d_{i,n,\text{TVD}}|) \quad (13)$$

(2) 发展. 以重构函数 $R(x; \rho_n, U_n)$ 作为 t_n 层的初值, 求解以下初值问题:

$$\begin{cases} v_t + u v_x = 0 \\ v(x, t_n) = R(x; \rho_n, U_n) \end{cases} \quad (14)$$

定解问题(14)的精确解为 $v(x, t) = R(x - ut; \rho_n, U_n)$.

(3) 网格平均. 在 $t = t_{n+1}$ 时的数值解和数值熵分别计算为

$$\rho_{i,n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} v(x, t_{n+1}) dx \quad (15)$$

$$U_{i,n+1} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} U(v(x, t_{n+1})) dx \quad (16)$$

利用中心格式计算弥散方程(6)中的二阶导数, 利用 Euler 向前差分进行时间离散. 最终的格式为

$$\begin{aligned} \rho_{i,n+1} &= \rho_{i,n} + \frac{2D_L \Delta t}{\Delta x^2} \cdot \\ &\quad (\rho_{i+1,n} - 2\rho_{i,n} + \rho_{i-1,n}) \end{aligned} \quad (17)$$

$$U_{i,n+1} = U_{i,n} + \frac{2D_L \rho_{i,n} \Delta t}{\Delta x^2} \cdot$$

$$(\rho_{i+1,n} - 2\rho_{i,n} + \rho_{i-1,n}) \quad (18)$$

2 数值试验和结果分析

算例1 均匀流场^[9]. 考虑如下地下水溶质运移问题,假设半无界均质砂砾,地下水的速度 u 是常数,初始质量浓度为 0,左边界为质量浓度边界,右边界为 0 边界,即右无穷远处的质量浓度为 0. 该问题的解析解为

$$\rho = \frac{\rho_0}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-ut}{2\sqrt{D_L t}}\right) + \frac{\rho_0}{2} e^{\frac{ux}{D_L}} \operatorname{erfc}\left(\frac{x+ut}{2\sqrt{D_L t}}\right) \quad (19)$$

式中: $\rho_0 = 1 \text{ mg} \cdot \text{L}^{-1}$; $u = 6 \text{ m} \cdot \text{d}^{-1}$; $D_L = u\alpha$, α 是纵向弥散率.

Peclet 数定义为 $P_e = \Delta x / \alpha$, P_e 是用来描述对流和弥散的相对大小,根据 P_e 的大小可以将对流-弥散方程分为两大类:当 $P_e > 2$ 时,称之为对流占优方程;当 $P_e \leq 2$ 时,称之为弥散占优方程. 计算区域为 $[0, 60] \text{ m}$,网格数取为 30. 图 1~4 是对流强度 P_e 分别为 1、4、16、32,时间分别为 1 d 和 4 d 的数值解和解析解的质量浓度分布对比图,图中圆圈表示数值解,实线表示解析解. 从图 1~4 中不难看出,熵格式没有出现过量问题,也没有出现非物理振荡,所产

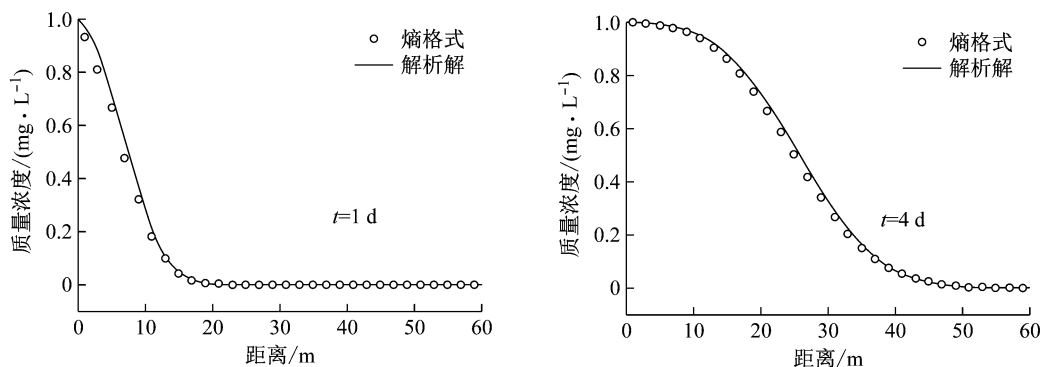


图 1 $P_e = 1$ 时质量浓度分布

Fig.1 Mass concentration distribution at $P_e = 1$

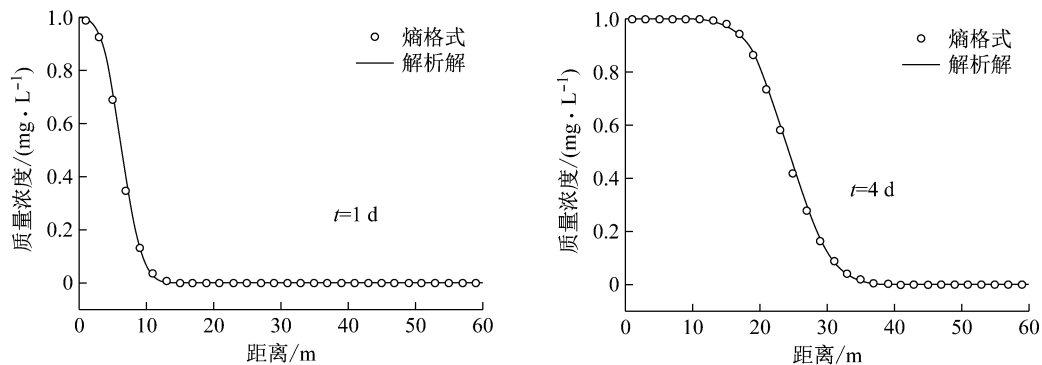


图 2 $P_e = 4$ 时质量浓度分布

Fig.2 Mass concentration distribution at $P_e = 4$

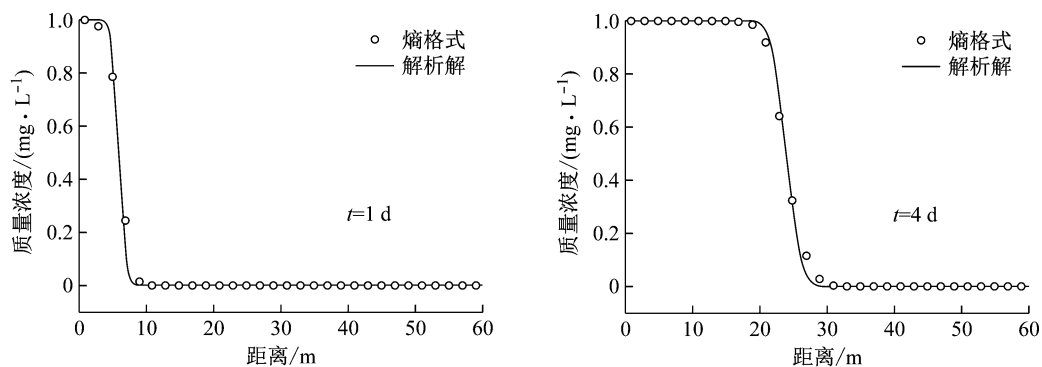
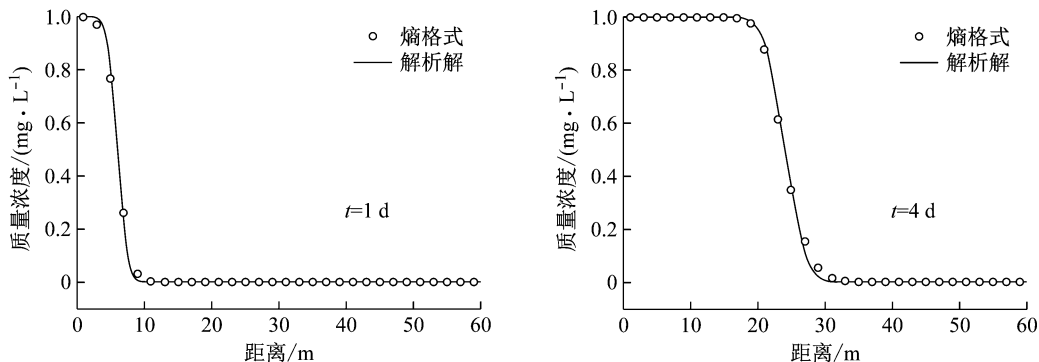


图 3 $P_e = 16$ 时质量浓度分布

Fig.3 Mass concentration distribution at $P_e = 16$

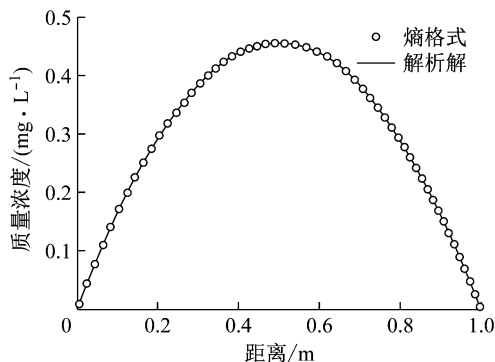
图 4 $P_e = 32$ 时质量浓度分布Fig.4 Mass concentration distribution at $P_e = 32$

生的数值弥散比较小。随着对流强度的增加,数值解和解析解吻合得更好,这说明熵格式在处理强对流问题方面具有很大优势。

算例 2 非均匀流场^[7]. 考虑如下对流扩散问题

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + (x-1) \frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{1}{2}(1-x) \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2} + 3\rho, \\ x \in (0,1), t > 0 \quad (20) \\ \rho(x,0) = x(1-x), \quad 0 \leq x \leq 1 \\ \rho(0,t) = \rho(1,t) = 0, \quad t > 0 \end{cases}$$

该问题的精确解为 $x(1-x)e^t$. 图 5 是 $t=0.6$ 的数值解和解析解的对比图,图中圆圈表示数值解,实线表示解析解.从图 5 不难看出,数值解和精确解几乎重合,没有出现非物理振荡也没出现过量现象。

图 5 $t = 0.6$ 时质量浓度分布Fig.5 Mass concentration distribution at $t = 0.6$

3 结论

地下水运移方程可以用对流-弥散方程来刻画,当对流占优的时候,数值解容易出现过量和非物理振荡,一些能克服非物理振荡的格式往往会引入过多的数值弥散,使得解的精度降低. 本文将针对双曲守恒型方程的熵格式推广到地下水运移方程的计算,具体做法是采用分裂的方法将地下水运移方程

分成对流方程和弥散方程,对流方程利用熵格式求解,弥散方程用中心格式进行求解. 数值试验表明,本文的格式不会产生过量问题也不会出现非物理振荡,特别适合强对流问题的数值计算。

参考文献:

- [1] ROACHE P J. Computational fluid dynamics [M]. Albuquerque: Hermosa Publishing, 1976.
- [2] HEINRICH J C, HUYAKORN P S, ZIENKIEWICKY C, *et al.* An upwind finite element scheme for two dimensional convective transport equation[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1977, 11:131.
- [3] SUN N Z, YEH W G. A proposed upstream weight numerical method for simulation pollutant transport in groundwater[J]. Water Resources Research, 1983, 19(6):1489.
- [4] BROOKS A N, HUGHES T J R. Streamline upwind Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flow with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equations [J]. Computer Methods Applied Mechanics and Engineering, 1982, 32:199.
- [5] 梅一, 吴吉春. 地下水溶质运移数值模拟中减少误差的新方法 [J]. 水科学进展, 2009, 20(5):640.
MEI Yi, WU Jichun. New method for reducing the numerical error in solving the problem of contaminant transport in groundwater [J]. Advances in Water Sciences, 2009, 20 (5):640.
- [6] LEISMAN H M, FRIND E O. A symmetric-matrix time integration scheme for the efficient solution of advection-dispersion problems[J]. Water Resources Research, 1989, 25 (6):1133.
- [7] 刘扬. 对流扩散方程的新型 Crank-Nicholson 差分格式[J]. 数学杂志, 2005, 25(4):464.
LIU Yang. A new Crank-Nicholson difference scheme for convection-diffusion equations [J]. Journal of Mathematics, 2005, 25(4):464.
- [8] 成建梅, 胡进武. 饱和水流溶质运移问题数值解法综述[J]. 水文地质工程地质, 2003, 30(2):99.
CHENG Jianmei, HU Jinwu. Reviews on numerical method for solving solute transport problems in the saturated porous media

- [J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2003, 30(2): 99.
- [9] 焦甜,王军霞,唐仲华,等. 地下水溶质运移方程有限差分格式的实证研究[J]. *安全与环境工程*, 2016, 23(3): 17.
- JIAO Tian, WANG Junxia, TANG Zhonghua, *et al.* Empirical study of the difference schemes of solute transport equation in groundwater[J]. *Safety and Environmental Engineering*, 2016, 23(3): 17.
- [10] CHENG Y, SHU C W. Superconvergence of local discontinuous galerkin methods for one-dimensional convection-diffusion equations[J]. *Computers & Structures*, 2009, 87: 630.
- [11] LI H X, WANG Z G, MAO D-K. Numerically neither dissipative nor compressive scheme for linear advection equation and its application to the Euler system[J]. *Journal of Scientific Computing*, 2008, 36: 285.
- [12] CUI Y F, MAO D-K. Numerical method satisfying the first two conservation laws for the Kortewegde Vries equation [J]. *Journal of Computational Physics*, 2007, 227: 376.
- [13] CUI Y F, MAO D-K. Error self-canceling of a difference scheme maintaining two conservation laws for linear advection equation [J]. *Mathematics of Computation*, 2012, 81: 715.
- [14] CHEN R S, MAO D-K. Entropy-TVD scheme for nonlinear scalar conservation laws [J]. *Journal of Scientific Computing*, 2011, 47: 150.
- [15] CHEN R S, MAO D-K. Improved Entropy-Ultra-bee scheme for the Euler system of gas dynamics [J]. *Journal of Computational Mathematics*, 2017, 35: 121.
- [16] CHEN R S, ZOU M, XIAO L. Entropy-TVD scheme for the shallow water equations in one dimension [J]. *Journal of Scientific Computing*, 2017, 71: 822.

~~~~~

(上接第 1136 页)

- LI Chunqiu, LI Kefei. Moisture transport in concrete cover under drying-wetting cycles: theory, experiment and modeling [J]. *Journal of the Chinese Ceramic Society*, 2010, 38 (17): 1151.
- [12] KOIEHI M, RAJESH C, TOSHIHARU K. Modeling of concrete performance [M]. London, E&FN Spon, 1999.
- [13] YOO J H, LEE H S, MOHAMED A I. An analytical study on the water penetration and diffusion into concrete under water pressure [J]. *Construction and Building Materials*, 2011, 25: 99.
- [14] 王传坤, 高祥杰, 赵羽习, 等. 混凝土表层氯离子含量峰值分布和对流区深度[J]. *硅酸盐通报*, 2010, 29(2): 262.
- WANG Chuankun, GAO Xiangjie, ZHAO Yuxi, *et al.* Peak value distribution of surface chloride concentration and convection depth of concrete [J]. *Bulletin of the Chinese Ceramic Society*, 2010, 29(2): 262.
- [15] 赵川, 宋晓冰. 有压溶液作用下混凝土中氯离子浓度分布研究[J]. *四川建筑科学研究*, 2013, 39(3): 186.
- ZHAO Chuan, SONG Xiaobing. Experimental research on distribution of chloride in concrete under stressed chloride solution[J]. *Sichuan Building Science*, 2013, 39(3): 186.
- [16] 岳著文, 李镜培, 杨博. 考虑对流条件下氯离子在混凝土中的输运计算[J]. *同济大学学报(自然科学版)*, 2015, 43 (1): 60.
- YUE Zhuwen, LI Jingpei, YANG Bo. Calculation of chloride ions transportation in concrete considering convection [J]. *Journal of Tongji University (Natural Science)*, 2015, 43 (1): 60.
- [17] DJERBI A, BONNET S, KHELIDJ A, *et al.* Influence of traversing crack on chloride diffusion into concrete[J]. *Cement and Concrete Research*, 2008, 38: 877.
- [18] GERARD B, MARCHAND J. Influence of cracking on the diffusion properties of cement-based materials. Part I: influence of continuous cracks on the steady state regime[J]. *Cement and Concrete Research*, 2000, 30: 37.
- [19] LU Z H, ZHAO Y G, YU Z W, *et al.* Probabilistic evaluation of initiation time in RC bridge beams with load-induced cracks exposed to deicing salts[J]. *Cement and Concrete Research*, 2011, 41: 365.
- [20] SARKAR S, MAHADEVAN S, MEEUSSEN J C L, *et al.* Numerical simulation of cementitious materials degradation under external sulfate attack [J]. *Cement and Concrete Composites*, 2010, 32(3): 241.
- [21] DE RINCON O T, CASTRO P, MORENO E I, *et al.* Chloride profiles in two marine structures-meaning and some predictions [J]. *Building and Environment*, 2004, 39(9): 1065.