

地下水问题数值方法简介

煤炭部地质勘探研究所 李谢淮

电子计算机的应用为解决复杂地下水问题提供了方法和工具。一旦对地下水问题作出数学描述,寻求有效的数值计算方案便成为应用计算机的关键。本文试就地下水问题的数值处理及计算方法作一概略介绍。

一、从 Q—S 曲线谈起

用 Q—S 曲线描绘涌水量与降深的关系(图1)具有简便、明确等优点。例如,有一类曲线关系可以写成:

$S = aQ + bQ^m$, ($a, b > 0$; $1 \leq m \leq 2$), 式中 a, b 分别为层流与紊流水阻系数; m 是紊流强度指数^[注]。如果将 a, b 及 m 看作经验常数,在作大降深推断时,必然受到“推算倍率”限制。为便于分析,假设只考虑 m 的变化(对于承压水将是允许的),为此,令

$$m = f(Q) + m_0,$$

式中 m_0 为天然条件下的流态指数; $f(Q)$ 是涌水情况下的紊流强度指数增长值。由水力学含义知道

$$f'(Q) > 0, \text{ 而 } f''(Q) < 0;$$

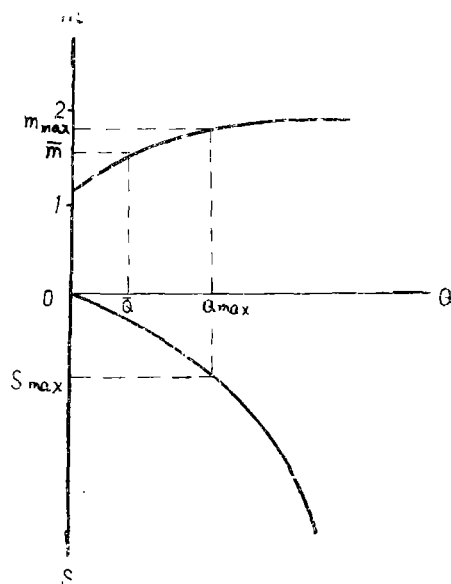


图1

[注] 严格地说, m 应是一个综合指标。根据国外文献所载资料及我们作检验计算的结果,对于抽水主孔, m 可大于 2。因而上面对于 $f(Q)$ 的描述一般只适用于观测孔,但容易推广到主孔情形。

且有极限

$$\lim_{Q \rightarrow 0} f(Q) = 0, \quad \lim_{Q \rightarrow Q_P} f(Q) = 2 - m_0 \leq 1,$$

式中 Q_P 是达到紊流极限强度 ($m_P = 2$) 的涌水量。设有半经验形式

$$f(Q) = 1 - e^{-CQ}, \quad (C > 0),$$

C 为待定系数。显见 $1 - e^{-CQ}$ 能够满足 $f(Q)$ 的数学特征。于是

$$m = m_0 - e^{-CQ} + 1,$$

而

$$S = aQ + bQ(m_0 - e^{-CQ} + 1)$$

成为半经验 $Q-S$ 公式。由于考虑了 m 的变化, 因此它能放宽“推算倍率”限制。但是确定系数 a 、 b 、 c 及常数 m_0 却是件困难的事情。为此, 利用抽水资料对上述参数作最小平方估计, 即把多元函数

$$E(a, b, c, m_0) = \sum \omega_i \left[S_i - aQ_i - bQ_i(m_0 - e^{-CQ_i} + 1) \right]^2$$

在参数条件 $a, b, c > 0$ 和 $1 \leq m_0 \leq 2$ 的限制下取极小的一组参数作为待求参数。式中 ω_i 为权因子, 在此处可以明确为对第 i 段降深资料的信用程度。这样, 问题归结到非线性数学规划, 简记成

$$(P): \min E(a, b, c, m_0), \quad (a, b, c > 0; 1 \leq m_0 \leq 2).$$

若用人工求解, 已属力不能及, 只能求助于电子计算机。

用电子计算机解算工程技术提出的实际问题, 需要进行一系列数学准备工作。首先要把问题数学化, 即建立一个能够反映问题本质或特征的数学模型, 这一步属于专业本身与应用数学方面的工作。公式 $S = aQ + bQ(m_0 - e^{-CQ} + 1)$ 就是依据 $Q-S$ 曲线特征建立起来的数学模型。进一步数学准备就是制定问题的数值(近似)解法。这是因为许多实际问题的解算过程已无法用解析方法作严密的表达, 一般只能作插值近似或用迭代方法逼近, 加上电子计算机对有效位数的限制, 因此必须选取合适的数值计算方法, 才能保证答案正确。

作为计算方法例子, 下面举出 (P) 的解算过程。

(1) 确定参数初值

我们把 (P) 近似成二次规划问题

$$(P_1): \min_{1 \leq m \leq 2} \bar{E}(a, b, \bar{m}) = \min_{1 \leq m \leq 2} \sum \omega_i (S_i - aQ_i - bQ_i^{\bar{m}})^2,$$

$$a, b > 0,$$

即在 $a, b > 0$ 限制下, 逐次固定 $\bar{m}$ 计算二次函数 $\bar{E}$ 的极小化系列^[注]。假若第 K 步有

$\bar{E}_K = \bar{E}_{m_{iK}}$, 则记初值 $\bar{m}^{(0)} = \bar{m}_K$, $a^{(0)} = a_K$, $b^{(0)} = b_K$ 。 m_0 初值经由

$$(P_2): \min_{1 \leq m_0 \leq \bar{m}^{(0)}} E_0(C, m_0) = \min_{1 \leq m_0 \leq \bar{m}^{(0)}} \sum \omega_i [S_i - a^{(0)}Q_i - b^{(0)}Q_i(m_0 - e^{-CQ_i} + 1)]^2,$$

$$C > 0$$

优选。如果第 j 步有 $(E_0)_j \leq \bar{E}_{m_{iK}} + \varepsilon$ (ε 是事先指定的精度), 则记 $m_0^{(0)} = (m_0)_j$,

相应地得到 $C^{(0)} = C_j$ 。在优选的每一步, $C^{(0)}$ 与 $m_0^{(0)}$ 可由下式估算^[注]:

$$\hat{C} = \frac{1}{2 Q_{m_{iK}} (m_0 - \bar{m}^{(0)} + 1)}, \quad (1 \leq m_0 \leq \bar{m}^{(0)}),$$

[注] 此处 $\bar{m}$ 及 (P_2) 的 m_0 可由单因素优选; $a, b > 0$ 的条件能用惩罚函数法处理。惩罚函数法请参看数学所讲义《最优化方法及其应用》(一)。

[注] 由图 1 知

$$\begin{aligned} \bar{m} Q_{m_{iK}} &= \int_0^{Q_{m_{iK}}} f(Q) dQ + m_0 Q_{m_{iK}} \\ &= Q_{m_{iK}} (1 + m_0) - \frac{1}{C} (1 - e^{-CQ_{m_{iK}}}) \\ &= Q_{m_{iK}} (1 + m_0) - \frac{1}{C} f(Q_{m_{iK}}) \end{aligned}$$

即有

$$\begin{aligned} m_0 &= \frac{1}{C Q_{m_{iK}}} (1 - e^{-CQ_{m_{iK}}}) + \bar{m} - 1, \\ C &= \frac{f(Q_{m_{iK}})}{Q_{m_{iK}} (m_0 - \bar{m} + 1)}, \end{aligned}$$

$Q_{m_{iK}}$ 表示最大降深抽水量。若令 $f(Q_{m_{iK}}) = m_{m_{iK}} - m_0 = 0.5$, 可得

$$C = \frac{1}{2 Q_{m_{iK}} (m_0 - \bar{m} + 1)},$$

再将 $\bar{m}$ 换成已算得的 $\bar{m}^{(0)}$ 便得文中的 $\hat{C}$ 与 $\hat{m}_0$ 的估算式。

$$\hat{m}_0 = \frac{1}{\hat{C} Q_{max}} (1 - e^{-\hat{C} Q_{max}}) + \bar{m}^{(0)} - 1。$$

C 和 m_0 是迭代中间值, 故不影响 $C^{(0)}$ 与 $m_0^{(0)}$ 的计算精度。

(2) 精选参数之值

从初值 $a^{(0)}$ 、 $b^{(0)}$ 、 $c^{(0)}$ 、 $m_0^{(0)}$ 出发, 作最优化问题。

(P_3): $\min E(a, b, c, m_0)。$

(3) 参数可靠性检验

第(2)步本身即可得到 S 的拟合值, 除此而外还可用所得参数将 $Q-S$ 曲线延拓一段, 以与实测曲线比较。

至此, 问题(P)的解算方案制定完毕, 即将(P)分解成(P_1)、(P_2)、(P_3)等三个问题, 以期逐步逼近。首先在(P_1)中, 将函数 E 依条件 $1 \leq \bar{m} \leq 2$ 逐次正定化为二次函数 $\bar{E}$, 这样便能保证(P_1)获得收敛的解 $a^{(0)}$ 、 $b^{(0)}$ 和 $\bar{m}^{(0)}$; 其次在(P_2)中利用条件 $1 \leq m_0 \leq \bar{m}^{(0)}$, 使 $m^{(0)}$ (及 $C^{(0)}$) 的计算变为单因素优选过程; 最后, 由于有了合适的初值 $a^{(0)}$ 、 $b^{(0)}$ 、 $c^{(0)}$ 和 $m_0^{(0)}$, 问题(P_3)的优化过程就简单易行了。下步便进入使用计算机实现计算方案的阶段。

在电子计算机上进行数值计算是通过程序来安排的。所谓“程序”就是使计算机按预定路线和确定运算去执行计算任务的一份“清单”。这份“清单”是由计算者事先拟写的, 通常称作“程序设计”。早先, 程序设计是一项专业性较强的工作, 自从程序自动化以来, 高级语言不断出现[注], 使得大多数工程人员略加训练便能胜任。然而就专业而言, 程序设计连同计算方法均属计算数学内容。

二、井函数的生成与 T 、 μ 的确定

近十余年来, 以单孔为基础的非稳定流试验方法, 在生产实践中得到推广, 而资料整理与计算是以泰斯型公式为依据的。这类公式在形式上能统一写成

$$S(r, t) = -\frac{Q}{4\pi T} F_i(u, v)。$$

[注] 目前最常用的科学计算语言有算法语言 (ALGOL) 和公式翻译语言 (FORTRAN)。一些典型数学问题的计算方法已编成标准程序, 参看《电子计算机常用算法》, 科学出版社。

$E_1(u, v)$ 称作井函数，它是作单孔非稳定流试验的含水层自身引出的特殊函数。在球型的泰斯解析条件下，有熟知的公式

$$S(r, t) = -\frac{Q}{4\pi T} \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du, \quad \left[u = u(\tau) = \frac{r^2}{4a(t-\tau)} \right],$$

其中 $a = \frac{T}{\mu}$ 。由于被积函数 $\frac{e^{-u}}{u}$ 的原函数不能作解析表示，因此右端积分只能用数值方法处理。为此用级数将 $\frac{e^{-u}}{u}$ 展成

$$\frac{1}{u} = 1 + \frac{u}{2!} + \frac{u^2}{3!} + \dots + (-1)^{n+1} \frac{u^n}{(n+1)!} + \dots,$$

逐项积分之后，整理得

$$\begin{aligned} \int_{\frac{r^2}{4at}}^{\infty} \frac{e^{-u}}{u} du &= -E_1(-u) \\ &= -0.5772 - \ln u + \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1} \frac{u^k}{K \cdot K!} \\ &= -0.5772 - \ln u + \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1} \frac{u^k}{K \cdot K!} + R_{n+1}(u), \end{aligned}$$

右端 $u = \frac{r^2}{4at}$ 。若将 $R_{n+1}(u)$ 视作截断误差，可用此式制作精度为 $n+1$ 阶的函数表，此时使用电子计算机是适宜的。

利用抽水资料确定 T 、 μ 的问题可以写成

$$\min_{T, \mu > 0} \psi(T, \mu) = \min \sum \omega_i \left\{ -\frac{Q}{4\pi T} [-E_1(-u)] - S_i \right\}^2,$$

S_i 是按降速法或坡降法选定的观测孔降深。因此 T 、 μ 的确定变成优选过程，並适于用计算机实现。

各类井函数均能用数值方法生成；而对于能将降深 S 写成解析公式的含水层（包括作群孔非稳定流试验且具有规整边界的含水层），都可套用上述优选格式确定参数。

三、地下水数字模拟

水位、流量及时间是地下水动态的基本量度。研究与分析在自然和人为因素作用下它们之间的数量联系规律，进而达到预测目的，是地下水定量评价工作的中心课题。现有的

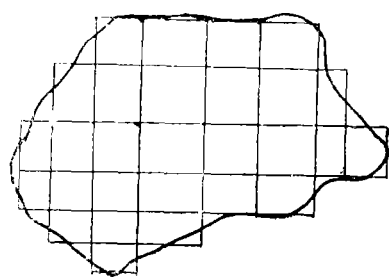
地下水定量评价方法较多，但可分成经验的（包括实验的）与动力学的两大类。前者，依据测量数据的数字特征，用几何方法和统计法则分析推断水位、流量变化（与时间动态）；后者，从地下水运动原理出发，通过求解数理方程，统一描述水位、流量、时间之间的数量联系。地下水数字模拟（或称计算机上的数值解法）是后一类方法最新进展，它为工程问题应用地下水动力学方法开辟了途径。

含水层中地下水运动在数学上归结为初边值问题。

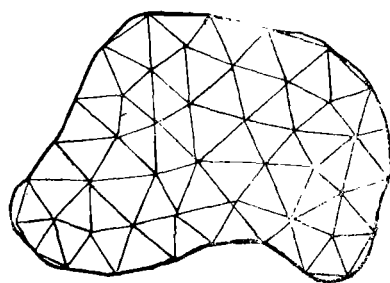
$$(M): \begin{cases} \Omega: L(h) = \frac{\partial}{\partial x} \left(mK_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(mK_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) \\ \quad + q + \frac{K'}{m'} (h' - h) - \mu \frac{\partial h}{\partial t} = 0, \quad t > 0 \\ h(x, y, 0) = h_0(x, y), \quad x, y \in \Omega, \\ \Gamma_1: h(x, y, t) = h_1(t), \quad t \geq 0, \\ \Gamma_2: mK_x \frac{\partial h}{\partial x} \cos(\hat{x}, n) + mK_y \frac{\partial h}{\partial y} \cos(\hat{y}, n) = -q_2(t), \quad t \geq 0, \end{cases}$$

式中， Ω 是被 Γ 包围的平面区域； $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$ ， Γ_1 为水位边界， Γ_2 为流量边界且单宽流量为 q_2 ， Γ_1 或 Γ_2 允许分段描述； K_x 、 K_y 、 μ 、 $\frac{K'}{m'}$ 在 Ω 内分片定义， $\frac{K'}{m'}$ 为弱透水顶底板越流系数（ h' 是相邻含水层水位）； q 为抽（注）水强度，可以是时间的阶梯函数，并且在抽水孔群和坑道系统密集地段，能够将 q 写成位置坐标的 δ 函数； m 是饱水层厚度。问题（M）描述了地下水在非均质各向异性含水层中作非稳定流动，并对含水层几何形态、边界水动力条件、初始水位分布以及与相邻含水层水力联系作了适当刻画。因此（M）成为模拟含水层中地下水运动的数学模型。在模型（M）上求解水位过程称作“正演”，并且是地下水动力学各种数值方法研究的起点。

模型（M）依存的空间和时间均是连续的，为了实现数值计算，必须使它数值化。为此需要进行空间剖分和时间分段。对于平面问题（M），剖分的基本图形为直边多边形或曲边多边形（图2，a、b），而将图形顶点和选定的其它几何点（如边中点、形心等）称做结点。由于区域剖分的结果，使得水位微商必须代以数值形式，水位的计算只能在结点上进行。同时，也仅仅因为水位微商离散的依据及手法不同，目前水位数值计算方法主要分成有限差分 and 有限单元两类。下面作一分述：



(a)



(b)

图 2

(1) 有限差分法

如图 2 a 所示, 常用差分网格由矩形组成^[注], 边界形状用折线近似。假设相邻结点之间水位作线性变化, 则结点上一阶和二阶水位微商可以直接离散成差商。比如能将图 3 第 0 号结点上的差商写成下述格式:

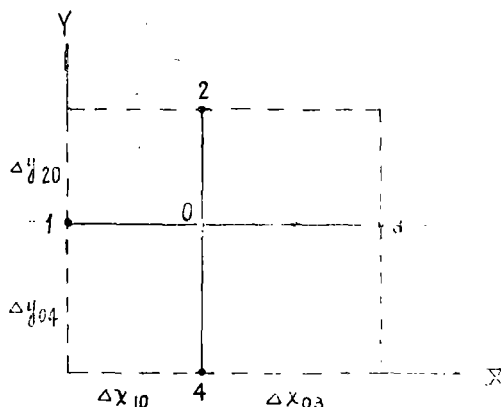


图 3 (图中 Δy_{20} 与 Δy_{04} 、2 与 4 的位置应互换)

先令

$$\left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{10} = \frac{h_1 - h_0}{\Delta x_{10}}, \quad \left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{03} = \frac{h_0 - h_3}{\Delta x_{03}},$$

于是

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial h}{\partial x}\right)_0 &= \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{10} + \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{03} \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{h_1}{\Delta x_{10}} + \frac{(\Delta x_{10} - \Delta x_{03}) h_0}{\Delta x_{10} \Delta x_{03}} - \frac{h_3}{\Delta x_{03}} \right), \\ \left(\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}\right)_0 &= 2 \left[\left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{10} - \left(\frac{\Delta h}{\Delta x}\right)_{03} \right] / (\Delta x_{10} + \Delta x_{03}) \\ &= 2 \left[\frac{h_1}{\Delta x_{10} (\Delta x_{10} + \Delta x_{03})} - \frac{h_0}{\Delta x_{10} \Delta x_{03}} + \frac{h_3}{\Delta x_{03} (\Delta x_{10} + \Delta x_{03})} \right] \end{aligned}$$

[注] 差分网格亦可由规则的三角形或六边形组成, 但计算格式比较复杂, 并且较难适应各向异性含水层, 故不常用。

$\left(\frac{\partial h}{\partial y}\right)_0$ 、 $\left(\frac{\partial^2 h}{\partial y^2}\right)_0$ 形式类推。

逐点进行差分之后，可得区域差分方程组

$$[K] \{h\} + [U] \frac{d\{h\}}{dt} = \{Q\},$$

式中 $[K]$ 、 $[U]$ 为差分系数矩阵， $\{Q\}$ 为结点流量。

(2) 有限单元法

上面已经看到，有限差分法是沿着网线将结点上水位微商直接离散成差商，而在有限单元法中，首先在单元域内构造一个逼近地下水水位面的几何面，从而得到用结点水位表示微商的数值公式。因此称图2a的剖分为网格剖分，图2b为单元剖分。

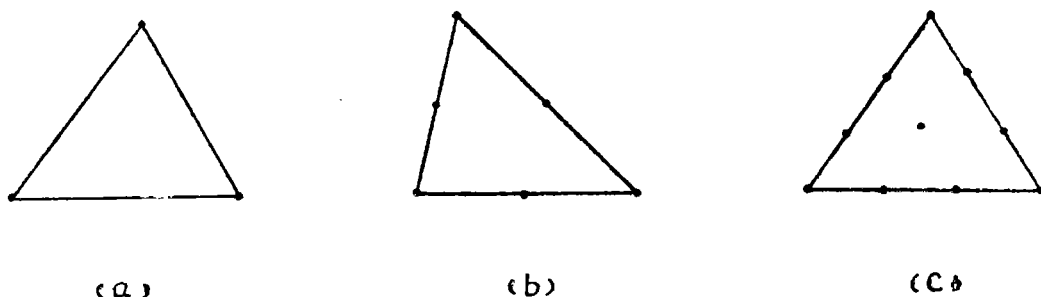


图4

对于直边多边形单元，逼近水位面的最简单方法是采用完全的 n 次多项式插值：

$$h = \sum_{k=1}^{T_n} \alpha_k x^i y^j, \quad (i+j \leq n).$$

式中 $T_n = (n+1)(n+2)/2$ 是 n 次多项式独立项的个数，用于地下水问题，可以使 T_n 与单元结点数相等。图4所示(a)、(b)、(c)单元分别为一、二、三次多项式插值的例子。于是单元域内任一点水位 h 可用单元结点水位 $\{h\}^e$ 表示：

$$h = [N] \{h\}^e.$$

式中 $[N] = [N_1, N_2, \dots, N_{T_n}]$ 称作单元形状函数，包涵了单元形状、尺寸以及水位插值形式等内容。因此是有限单元离散的基本要素。

由于形状函数 $[N]$ 刻划的是单元特征，因而描述地下水运动的微分方程不能直接作为离散的原型。为此，须要寻找一个在描述地下水运动的原理上是等价的，而数学表达不同

的替代形式。这种形式上的替代,可以用力学中的最小势能原理或者虚功原理作依据,而相应的数学表达便是变分方法和伽辽金方法。对于模型(M)的变换,这两种方法等效。但在叙述上,伽辽金方法比较简练^[注],并为本文所采用。于是我们用模型(M)'代替(M),

$$(M)': \begin{cases} \Omega: \iint L(h) \eta \, dx dy = 0 \\ \Gamma_1: h(x, y) = h_1(x, y), \quad \eta(x, y) = 0, \end{cases}$$

Γ_2 条件已在积分方程(伽辽金方程)中自动满足。模型(M)'只描述地下水非稳定运动的一个瞬间,即在短暂时间内,将 $\frac{\partial h}{\partial t}$ 看成常数。下面写出伽辽金方程具体形式:

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega} L(h) \eta \, dx dy \\ &= \iint_{\Omega} (mK_x \frac{\partial h}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + mK_y \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}) \, dx dy - \\ & \quad - \iint_{\Omega} [q + \frac{k'}{m'}(h' - h) - \mu \frac{\partial h}{\partial t}] \eta \, dx dy - \int_{\Gamma_2} q_2 \eta \, dl = 0 \end{aligned}$$

将该式数值化,是有限单元方法的中心内容。

区域剖分之后,上式积分分别在每个单元定义;而经单元水位插值之后,函数 $\eta(x, y)$ 可依形状函数 $[N]^T$ 近似。对于一个单元,能将伽辽金方程的数值离散形式写成

$$\begin{aligned} & \iint (mK_x [b]^T [b] + mK_y [c]^T [c] + \frac{K'}{m'} [N]^T [N]) \, dx dy \cdot \{h\}^* \\ & + \mu \iint [N]^T [N] \, dx dy \cdot \frac{d\{h\}^*}{dt} \\ & = \frac{K'}{m'} \iint [N]^T [N] \, dx dy \cdot \{h'\}^* + q \iint [N]^T \, dx dy + q_2 \int_{\Gamma_2} [N]^T \, dl \end{aligned}$$

数值积分之后,得到单元渗流方程

$$[k] \{h\}^* + [u] \frac{d\{h\}^*}{dt} = \{q\}^*。$$

式中 $[k]$ 称单元渗透矩阵,它包含了单元几何特征和透水性能,并反映水流状态,除了呈层流运动的承压水流之外, $[k]$ 总与 h 有关。如果依结点将单元渗流方程逐个迭加起来,便

[注] 变分及伽辽金方法请参看《高等分析近似方法》,科学出版社。

得区域渗流方程组

$$[K] \{h\} + [U] \frac{d\{h\}}{dt} = \{Q\},$$

式中 $[K]$ 称区域渗透矩阵。

至此，模型（M）数值离散的有限单元内容完毕。可以看出，经由积分方程离散的有限单元法在处理边界条件与适应含水层非均质性等方面比有限差分法灵活，而且对于一切经由积分方程离散的数值方法，这个优点是共同的。

因此，地下水非稳定流的数值方法归结为求解一个常微分方程组，如果它是非线性的，则可在时间 t 的序列上，逐次固定 $[K]$ 和 $[U]$ 中的 h ，以期线性化。常微分方程组的数值求解，可以用龙盖—库塔方法；但是通常的作法是将时间序列分成由密至疏的不等间隔（步长），对于一个时间步长、水位降速 $\frac{d\{h\}}{dt}$ 可以近似表成（图5）

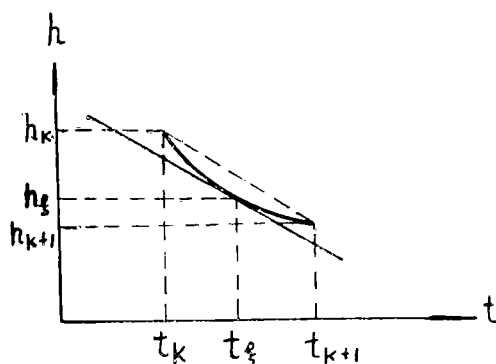


图5

$$\left(\frac{d\{h\}}{dt} \right)_{t_\xi} = \frac{\{h\}_{K+1} - \{h\}_K}{t_{K+1} - t_K},$$

$$(t_K < t_\xi < t_{K+1}),$$

实用上，可取 $t_\xi = \frac{1}{2}(t_{K+1} + t_K)$ ，即认为 $\left(\frac{d\{h\}}{dt} \right)_{t_\xi}$ 是 $\frac{1}{2}(t_{K+1} + t_K)$ 时刻的水位降速。如果 t_K 时刻水位已经算出，而 t_{K+1} 时刻边界条件已知，则 t_ξ 时刻水位经由代数方程组

$$[A] \{h\} = \{B\}$$

计算。利用此式在时间序列上作递推计算，便能获得指定时刻水位。[注]

对于地下水问题形成的形如 $[A] \{h\} = \{B\}$ 的线代数方程组，最常用的解法有改良平

[注]递推格式及时间步长同为非稳定流水位数值计算方法的难点。递推格式的构成以能保证计算收敛为原则；而时间步长的选择对于计算精度影响极大。由于含水层的实际条件往往比较复杂，只有把数值分析理论与计算经验结合起来，才能解决这个问题。

方根法和超松弛迭代法^[注]。研究适合电子计算机要求的线代数方程组解法,是当今数值分析领域的一个十分活跃课题;而系数矩阵 $[A]$ 的独特性质为研究方程组的解法提供了重要条件。首先,由于区域剖分的网络化及结点在网络系统上的编号规则造成了 $[A]$ 的稀疏性和对称性;其次,由于被离散的积分方程的物理背景是能量或者质量守恒原理,所以 $[A]$ 具有正定性。充分利用这些性质,将为节省计算机存储、提高计算速度和精度的解法带来效益。由于计算方法的进展,结合程序技巧,目前在中型计算机上解算上千个结点的地下水模型已无困难。

四、复杂含水层水力参数估计

根据野外试验资料定量评价复杂含水层的水理性质是一个长期没有得到解决的课题。因为:对于这类含水层,确定 K 、 μ 等参数的解析方法已不符应用;而用于水位计算的模拟装置由于做反问题的效能太低,故难以胜任这一任务。近年来,国内外都致力研究如何在计算机上攻克这个难关。

作为反问题之一,若在模型 (M) 上用数值方法直接求解这类参数,问题将是不适定的。为了说明这个问题,下面举一证例:

设有承压等厚含水层的一维稳定流动问题

$$\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{dh}{dx} \right) = 0 \quad (0 \leq x \leq l, h|_{x=0} = h_0, h|_{x=l} = h_1),$$

我们考察水位误差对渗透系数 $K(x)$ 计算值的影响程度。容易解出:

$$K(x) = C / \frac{dh}{dx} \quad (C = (h_1 - h_0) / \int_0^l \frac{dx}{K(x)}),$$

若水位观测误差为 $\varepsilon(x)$, 即有

$$h^* = h + \varepsilon(x), \quad \frac{dh^*}{dx} = \frac{dh}{dx} + \frac{d\varepsilon}{dx},$$

$$K^*(x) = C / \left(\frac{dh}{dx} + \frac{d\varepsilon}{dx} \right).$$

所以

[注]在有限差分方程组的递推计算方面,还采用了一些有效的格式;交替方向差分法(ADI)便是一例,递推过程的每一步,均用追赶法求解形同 $[A]\{h\}=\{B\}$ 的三对角线方程组。参《水文地质技术方法》第三辑或《数字计算机上的数学方法》第Ⅱ卷。

$$K^*(x) = K(x) / (1 + \frac{d\varepsilon}{dx} / \frac{dh}{dx})$$

由于 $\varepsilon(x)$ 具有随机性质,故渗透系数计算值 $K^*(x)$ 可能较大地偏离 $K(x)$,即对水位误差十分“敏感”。作为反问题之一,我们称它是不适定的。因此在作法上,常把参数确定问题化为一系列正演问题,並表达成非线性规划

$$(R): \min \varphi(x) = \min \sum \omega_{t,i} (h_{t,i}^c - h_{t,i}^0)^2 \quad (t=1,2,\dots,m_t; i=1,2,\dots,m_p),$$

$$g_K(X) \geq 0 \quad (K=1, 2, \dots, q)。$$

式中 $h_{t,i}^c$ 、 $h_{t,i}^0$ 分别为第 i 结点在 t 时刻的水位计算值和观测值, X 为 n 个待求参数组成的列向量($n \ll m_t \cdot m_p$), $g_K(X) \geq 0$ 是参数限制条件。

于是工作量集中在水位 h^c 的计算和参数优化过程上。首先,在参数条件限制之下设计或选定初值 $X^{(0)}$,同时给定水位拟合最小方差 $\varphi_{m,i}$,然后,根据模型(M)正演水位 h^c ;如果计算出的 φ 大于 $\varphi_{m,i}$,则在参数限制范围内修正参数,並重新正演水位。不断重复这一步骤,直至 $\varphi \leq \varphi_{m,i}$,最后被修正的参数 $X_{m,i}$ 即为所求。参数每一步修改均在最优意义下进行。

通常将 $\varphi(X)$ 称作目标函数(或评价函数),它是衡量参数值好坏的统计尺度。目标函数的选择应该符合:

- (1) 被比较的指标要能突出主要水文地质问题,并且是观测类别中精度最高的;
- (2) 应具有良好的函数性质。

目前,大多用水位方差作目标函数,因为水位数值计算比较成熟,而且对水位观测点的数量和分布限制较少。但是参数优选过程比较烦杂。

如果将 $\varphi(X)$ 中 $h_{t,i}^c$ 写成显式

$$h_{t,i}^c = - \frac{[D]_{t,i} \{X\}_i + Q_{t,i}}{[C]_{t,i} \{X\}_i},$$

其中 $[D]_{t,i}$ 与 i 结点相邻的结点水位和坐标有关, $[C]_{t,i}$ 包含 i 结点及其相邻结点坐标, $Q_{t,i}$ 为 i 结点流量。则可看出 $\varphi(X)$ 的函数性质很“坏”,因而给参数优选带来困难:首先要求参数初值 $X^{(0)}$ 十分“接近” $X_{m,i}$,否则只能得出局部极小点 $X^*_{m,i}$,从而导致优选失效;其次由于微商 $\frac{\partial h_{t,i}^c}{\partial x_s}$ 、 $\frac{\partial^2 h_{t,i}^c}{\partial x_s^2}$ ($s=1, 2, \dots, n$)不能精确表示,致使最优化算法中快速收敛的解析方法难于应用。因此目前用得较多的还是直接搜索方

法, 参数限制条件在这类算法中也比较容易加入。因此, 选好参数初值、加快水位正演速度和采用合适的最优化算法, 是在计算机上实现参数优选的重要条件。其中初值选择尤为关键。一般说来, 需要经过多次调整, 才能选好一组初值, 故要耗费大量机器时间。为了解决这个问题, 可按如下方法选取初值:

把 n 个参数初选问题写成

$$(R)' \quad \min \psi(Y) = \min \sum_{t,j} \omega_{t,j} (Q_{t,j}^c - Q_{t,j}^o)^2 \quad (t=1,2,\dots,m_t; j=1,2,\dots,m_j)$$

$$g_K(Y) \geq 0 \quad (K=1, 2, \dots, q),$$

式中 $Q_{t,j}^c$ 、 $Q_{t,j}^o$ 分别表示 t 时刻第 j 单元计算流量与抽水流量。 Q^c 用数值方法计算, 能够写成

$$Q_{t,j}^c = [E]_{t,j} \{y\}_{t,j},$$

式中 $[E]_{t,j}$ 与第 j 单元结点坐标以及 t 时刻结点水位有关。如果用 $g_K(Y) \geq 0$ 表示参数之间的相对大小: $Y_{sup} > Y_1 \geq Y_2 \geq \dots \geq Y_n > 0$, 问题 $(R)'$ 便为二次数学规划。用惩罚函数法(或其它带约束的最优化算法)容易求出 $(R)'$ 的解 Y_{opt} , 把它当作初值投入以 $\varphi(X)$ 为目标函数的参数精选过程。如有必要, 还可以在 Y_{opt} 附近建立参数约束区间, 对精选过程施行小范围限制。此法要求水位观测点的布置比较均匀, 同时在数值处理上, 需要对单元边上流速($K \frac{dh}{dn}$)进行插值, 使得相邻单元侧向进出流量连续。

为了检验参数可靠程度, 可以在模型 (M) 上作水位正演, 看看是否与参数优选段落之外的水位资料吻合。如果差异较大, 则需修改模型 (M) 所描述的水文地质条件(包括对含水层透水性与富水性的定性认识), 并重新确定参数。因此有助于对水文地质条件作深入的认识。

实际上, 我们是在统计意义下做参数确定工作的。问题 (R) 或 $(R)'$ 就是根据模型 (M) 的假设确定参数的统计模型。如果我们把一批水位数据看作被统计的“子样”(在抽水流量不变的条件下), 那么被确定的参数就可看成具有水文地质平均意义的“统计量”, 而目标函数 $\varphi(X)$ 或 $\psi(Y)$ 是这组参数“置信程度”的评价标准。也正是在这个含义下, 我们将本节叙述的方法与过程称作含水层水理参数估计; 同时在一定的程度上, 使问题 $(R)'$ 避免了不适定性。

以上粗浅地叙述了地下水计算问题的数学方法与过程, 而要用于工程计算, 还必须置

(下转第40页)

学性质和成因。KGA 值有可能作为判断沉积物成因的一方面的根据，因而具有一定的地球化学意义。

3. 本区煤中的镓绝大多数赋存于煤的矿物质中。镓在矿物质中有三种存在形式：主要的（约占2/3）形式为镓以类质同像方式取代铝而隐藏在含铝矿物中；次要的（约占1/3）则可能系玄武岩风化分解时产生的二氧化硅胶体以及细分散的粘土物质对玄武岩风化时离析出来的 Ga^{+3} 离子的吸附。煤的矿物质中的含钛矿物的多少与镓含量无关。泥炭聚积期间有机物质对 Ga^{+3} 离子的吸附作用不明显。

4. 由于各矿区煤中的镓含量主要受铝含量的控制并具有较稳定的 KGA 值，因此，能够利用煤灰化学组成的资料对那些尚未进行过镓含量测定的地区进行预测，並有可能以较少的工作量对较大含煤范围内镓的普查做出评价。

5. 鉴于有的报导称镓在煤中，特别是某些低灰煤中有很高的含量，煤灰的富集系数有的能达到 850 以上，因此，在一定条件下泥炭有机物质对镓的吸附、造泥炭植物在生命活动过程中选择吸取镓（原始浓聚），以及在有利的物质来源条件下镓在泥炭中以某种化学方式的可能性均不能排除。这是在研究含煤沉积过程中镓的地球化学行为和镓在煤中的分布时应当注意的。

（上接第53页）

于专业知识指导之下。因此水文地质人员的能动认识和实际经验是决定计算质量的主要因素。为了把工程与计算有机结合起来，水文地质计算人员至少要有阅读和使用程序的能力，即要掌握科学计算语言（ALGOL或FORTRAN）。此外，如能了解线代数计算方法和最优化思想，对于灵活使用程序与学习程序设计，也是很必要的。至于数值分析更高级内容，应由数学人员协助完成。

本文仅述及到确定性的地下水计算问题，一些用系统理论或统计原理描述地下水动态的随机模型，如果稍为复杂和深入一点，也只能用电子计算机解算；而且在模型调整阶段，即作地下水动态认识这一反问题的时候，最优化或数学规化方法同样不可缺少。可以相信，数值方法的应用与电子计算机的使用必将促进水文地质计算任务的深入解决。