



处理地下水模型单元疏干-湿润的两种算法对比研究

陆文, 陆垂裕, 何鑫, 孙青言, 张博, 贾仰文

Comparative study on two drying-rewetting algorithms of groundwater model cells

LU Wen, LU Chuiyu, HE Xin, SUN Qingyan, ZHANG Bo, and JIA Yangwen

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202311026>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

空间链接器式多维通用饱和-非饱和流模型研究

A generalized multi-dimensional saturated-unsaturated flow model based on spatial linkers

杨海, 姜月华, 周权平, 杨辉, 刘林 水文地质工程地质. 2020, 47(5): 31–42

一种改进的地下水模型结构不确定性分析方法

An improved method of groundwater model structural uncertainty analysis

孙晓卓, 曾献奎, 吴吉春, 孙媛媛 水文地质工程地质. 2021, 48(6): 24–33

基于高斯过程回归的地下水模型结构不确定性分析与控制

Quantification and reduction of groundwater model structural uncertainty based on Gaussian process regression

钟乐乐, 曾献奎, 吴吉春 水文地质工程地质. 2019, 46(1): 1–1

非饱和土蠕变力学特性试验及经验模型研究

An experimental study of the creep mechanical properties of unsaturated soil and empirical models

魏建柄, 刘卫斌 水文地质工程地质. 2019, 46(6): 67–73

基于改进稀疏网格替代模拟的地下水DNAPLs运移不确定性分析

Uncertainty analysis of groundwater DNAPLs migration based on improved sparse grids surrogate model

高鑫宇, 曾献奎, 吴吉春 水文地质工程地质. 2020, 47(1): 1–10

地下水机器学习方法研究

Application of machine learning to aquifer analyses: Locating hydrogeological boundaries with water table monitoring data

齐永强, 李文鹏, 郑跃军, 李慧, 王成见 水文地质工程地质. 2022, 49(1): 1–11



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

DOI: [10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202311026](https://doi.org/10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202311026)

陆文, 陆垂裕, 何鑫, 等. 处理地下水模型单元疏干-湿润的两种算法对比研究 [J]. 水文地质工程地质, 2024, 51(5): 22-34.
LU Wen, LU Chuiyu, HE Xin, et al. Comparative study on two drying-rewetting algorithms of groundwater model cells[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2024, 51(5): 22-34.

处理地下水模型单元疏干-湿润的两种算法对比研究

陆 文^{1,2}, 陆垂裕^{1,2}, 何 鑫^{1,2}, 孙青言^{1,2}, 张 博³, 贾仰文^{1,2}

(1. 中国水利水电科学研究院流域水循环模拟与调控国家重点实验室, 北京 100038;
2. 中国水利水电科学研究院水资源所, 北京 100038; 3. 中国长江三峡集团有限公司
科学技术研究院, 北京 100038)

摘要: 在使用网格单元中心差分格式的地下水模型中, 对地下水网格单元“疏干(干)-湿润(湿)转化”的模拟极易引发模型迭代不收敛等异常情况, 很大程度上影响模型的应用。本研究使用理想案例和丹麦应用实例, 综合比较了 MODFLOW 模型的试算法与 COMUS 模型的全有效单元法对网格单元“干-湿转化”问题的模拟能力及算法特性。结果表明: (1) 试算法的参数组合选取对模拟的收敛性和模拟结果都有明显影响, 使用试算法时需要不断优化参数组合以避免模型迭代不收敛或模拟失真等异常情况, 很大程度上增加了用户使用模型的难度和时间成本; (2) 全有效单元法的模拟结果比试算法的模拟结果更具可靠性, 全有效单元法的作用等同于理论上最优的试算法参数组合, 使用全有效单元法时用户无需进行复杂的参数组合工作, 因此该方法能有效降低模型的使用难度与模拟结果的不确定性; (3) 全有效单元法中单元间水平向水力传导度算法实现了可以与经典调和平均法相比较的数值计算精度, 说明全有效单元法在不涉及网格单元“干-湿转化”问题的地下水模拟中同样具有应用潜力。综上所述, 全有效单元法更适用于处理地下水模型单元的疏干-湿润转化问题, 并且有望在地下水数值模拟领域中得到更为广泛的应用。

关键词: 地下水模型; 网格单元疏干-湿润; 全有效单元法; 试算法; 饱和-非饱和

中图分类号: P641.2; P338 文献标志码: A 文章编号: 1000-3665(2024)05-0022-13

Comparative study on two drying-rewetting algorithms of groundwater model cells

LU Wen^{1,2}, LU Chuiyu^{1,2}, HE Xin^{1,2}, SUN Qingyan^{1,2}, ZHANG Bo³, JIA Yangwen^{1,2}

(1. State Key Laboratory of Simulation and Regulation of Water Cycle in River Basin, China Institute of Water Resources and Hydropower Research, Beijing 100038, China; 2. Department of Water Resources, China Institute of Water Resources and Hydropower Research, Beijing 100038, China; 3. Institute of Science and Technology, China Three Gorges Corporation, Beijing 100038, China)

Abstract: When simulating drying-rewetting process of grid cells in numerical groundwater modeling using the block-centered finite-difference approach, the models is highly probable to run into non-convergence, which could greatly affect the applicability of groundwater models. This study used ideal case and practical simulation in

收稿日期: 2023-11-13; 修订日期: 2023-12-26

投稿网址: www.swdzgcdz.com

基金项目: 黑龙江省重点研发计划项目(JD22B001); 流域水循环模拟与调控国家重点实验室自主研究课题(SKL2022ZD02); 中国长江三峡集团有限公司员工科研项目(NBZZ202200616)

第一作者: 陆文(1996—), 男, 博士研究生, 主要从事地下水数值模拟研究。E-mail: luwen@edu.iwhr.com

通讯作者: 陆垂裕(1976—), 男, 博士, 正高级工程师, 主要从事地下水数值模拟研究。E-mail: Cylu@iwhr.com

Denmark to comprehensively compare the simulation capabilities and characteristics of two algorithms, namely the empirical trial (ET) method proposed by MODFLOW and the always active cell (AAC) method proposed by COMUS, in the drying-rewetting simulation. The results show that: (1) For the ET method, the selection of parameter combination has a significant influence on the model convergence and the simulation results. It is compulsory to continuously optimize the parameter to avoid model failures such as non-convergence and large simulation errors when using the ET method, which greatly increases the difficulty of groundwater model application and time cost. (2) The simulation results from the AAC method are more reliable than those from the ET method. Theoretically, the effect of the AAC method is equivalent to the optimal parameter set in the ET method. Therefore, parameter optimization is no longer needed in the AAC method, which can effectively reduce the difficulty of using groundwater models and meanwhile reduce the uncertainty of simulation results. (3) The numerical accuracy of the intercell horizontal hydraulic conductance in the AAC method is consistent with that of the classical harmonic average method, demonstrating that the AAC method can also be used in the simulation without the drying-rewetting process. In summary, the AAC method is more suitable for simulating the drying-rewetting process of groundwater model cells and is expected to be more widely used in groundwater numerical simulation.

Keywords: groundwater model; drying and rewetting of grid cells; always active cell method; empirical trial method; saturated-unsaturated

在类似 MODFLOW 等采用网格单元中心差分格式模拟地下水饱和流动的数值模拟模型中(含水层上部可能耦合土壤水的饱和-非饱和流模拟,但地下水部分只模拟饱和流动),疏干单元指网格单元的模拟水头低于网格单元的底板高程,此时模拟水头只有计算意义而无水量意义,意味着网格单元中不存在重力水,由于不模拟非饱和流,这也意味着网格单元中没有任何水分存在;湿润单元指网格单元的模拟水头高于网格单元的底板高程,此时模拟水头具有水量意义,也即网格单元中存在重力水。网格单元一旦疏干,基于经典调和平均法计算的单元间水平向水力传导度为零,意味着地下水的侧向流动在该疏干单元处中断,这极有可能导致地下水运动差分方程组无法求解,即模型无法迭代收敛,使得模型模拟失败^[1-2]。为保证模型的可用性,疏干单元将被转化为无效网格单元,等同于隔水边界,不再模拟其水头,但也意味着作用于该网格单元之上的源汇项全部丢失^[3]。另一方面,当周边单元的水头高于疏干单元的底板高程时,又希望疏干单元能够重新湿润成为有效单元,模拟其水头和作用于其上的源汇项,以保证模拟的准确性,然而这一看似简单的问题在过去很长一段时间内都未能得到解决^[4]。总之,模拟“干-湿转化”容易引发模型迭代不收敛,而不模拟则会引发模拟结果失真等异常情况,使地下水模型的应用和准确性受到很大限制^[5-6]。

当前主要有 2 种应对“干-湿转化”问题的思路。

(1)类似 HYDRUS-2D、VS2DT 模型完整模拟地下水的饱和-非饱和流动,此时不存在“干-湿转化”问题。这一思路缺陷在于饱和-非饱和渗流方程的求解效率较低,难以适用于区域尺度的现实复杂三维模拟问题。(2)仍然在饱和地下水水流数值模拟模型中对“干-湿转化”问题进行考虑,目前这一思路发展出的方法总结起来主要有 3 类。第 1 类方法不具备物理意义,包括调大模型的收敛容许误差使得模型容易收敛;调低关键区域的底板高程^[7]、调整模型的垂向分层结构^[8]、为疏干单元赋以极小的饱和厚度^[9-10]、将接近疏干的非承压域转换为承压域模拟等^[11],从而避免模拟域疏干。这类方法在一些情况下能够获得可以接受的模拟效果,但不可避免会引入模拟失真等问题^[12]。第 2 类方法具有一定的物理意义,以 MODFLOW-2005 采用的试算法(empirical trial method, ET)为代表。该方法根据无效疏干单元周边相邻湿润单元的水头是否达到预设湿润条件,反复试算确定疏干单元能否被重新湿润^[13],然而试算法不能保证模拟结果的稳定性^[4, 12]。尽管如此,它仍然是当前最常用的“干-湿转化”模拟算法。第 3 类方法具有坚实的物理机制,主要包含 MODFLOW-NWT 模型提出的上游加权法^[14]和笔者近期在基于网格单元中心差分格式自主研发的 COMUS 模型^[15](C++ object-oriented model for undergroundwater simulation)中提出的全有效单元法^[16](always active cell method, AAC)。这类方法能够从地下水动

力学方程本身出发解决网格单元的“干-湿转化”模拟问题, 主要特点在于模拟区域内的单元无论是疏干还是湿润, 始终都是有效的单元, 都考虑其水量平衡, 建立其地下水运动差分方程, 并纳入整体矩阵方程计算, 网格单元“干-湿转化”能够无缝切换。然而由于上游加权法本身数值精度较低, 因此目前 MODFLOW-NWT 用户较少。

本文通过理想案例和丹麦应用实例, 比较传统的试算法和全有效单元法对“干-湿转化”问题的模拟能力和算法特性, 检验全有效单元法的可靠性和实用性, 并对全有效单元法的特点与适用性进行讨论。需要说明的是, COMUS 模型同样支持采用调和平均法计算单元间水平向水力传导度, 也支持使用试算法模拟网格单元的“干-湿转化”过程; 本研究中试算法和全有效单元法的模拟结果对比是基于 COMUS 模型平台。

1 试算法原理

对于疏干单元, 模型将在每次迭代过程中检查该单元下侧、前侧、后侧、左侧和右侧 5 个相邻单元的水头情况, 见图 1, 若发现某个相邻湿润单元的水头高于或等于湿润判断水头阈值, 则在下次迭代时对该疏干单元进行重新湿润尝试^[17]。湿润判断水头阈值(h_{Turnon})的计算公式如下:

$$h_{\text{Turnon}} = \text{Bot} + |WETDRY| \quad (1)$$

式中: Bot —疏干单元的底板高程/m;

$WETDRY$ —用户指定的湿润特征参数。

$WETDRY$ 的绝对值($|WETDRY|$)表示湿润饱和厚度阈值/m。 $WETDRY < 0$ 表示若下侧湿润网格单元的

水头值高于 h_{Turnon} , 则认为疏干单元能在下次迭代时被重新湿润; $WETDRY > 0$ 表示若 5 个相邻单元中有任一湿润网格单元的水头值高于 h_{Turnon} , 则认为疏干单元能在下次迭代时被重新湿润, 通常 $WETDRY < 0$ 有助于模型收敛; $WETDRY = 0$ 表示疏干单元不可被重新湿润。为了避免刚被重新湿润的网格单元下次迭代又被疏干, 还允许用户设置 $NWETIT$ 参数指定间隔多少次迭代才对疏干单元进行重新湿润尝试(例如 $NWETIT=2$ 表示间隔两次迭代才对疏干单元进行重新湿润尝试), 以提高成功率。

在判断疏干单元能够被重新湿润后, 下次迭代时该疏干单元将被赋予高于其底板高程的试算水头值(h_{Try}), 从而再次成为有效网格单元参与模拟计算:

$$\begin{cases} h_{\text{Try}} = \text{Bot} + WETFCT \cdot (h_n - \text{Bot}) & IHDWET = 1 \\ h_{\text{Try}} = \text{Bot} + WETFCT \cdot |WETDRY| & IHDWET = 2 \end{cases} \quad (2)$$

式中: $WETFCT$ —用户指定的调整系数, 一般取 $0 \sim 1$ 之间的值^[17];

h_n —驱动疏干单元重新湿润的相邻湿润网格单元的水头值/m;

$IHDWET$ —指定试算水头值计算方式的标志参数。

$IHDWET=1$ 表示试算水头值依据 h_n 计算, $IHDWET=2$ 表示试算水头值依据湿润饱和厚度阈值计算。

疏干单元重新湿润后基于调和平均法计算的单元间水平向水力传导度将不为 0, 地下水的流动在该单元处恢复, 该单元重新转变为有效网格单元, 该单元的水头和作用于该单元之上的源汇项将再次被模拟。由试算法原理可知, 试算法的参数组合对模拟结果有影响, 并且理论上 $|WETDRY|$ 越小, 单元间地下水流动受到的人为限制越小, 模拟结果越合理。

2 全有效单元法原理

全有效单元法中所有网格单元在整个模拟期内无论其是否疏干都是有效网格单元, 都需要建立单元的地下水运动差分方程, 模拟水头和源汇项。对任一网格单元(i, j, k)地下水运动差分方程为:

$$\begin{aligned} & CR_{i,j-1/2,k}(h_{i,j-1,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + CR_{i,j+1/2,k}(h_{i,j+1,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + \\ & CC_{i-1/2,j,k}(h_{i-1,j,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + CC_{i+1/2,j,k}(h_{i+1,j,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + \\ & CV_{i,j,k-1/2}(h_{i,j,k-1}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + CV_{i,j,k+1/2}(h_{i,j,k+1}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m,n}) + \\ & P_{i,j,k}h_{i,j,k}^{m,n} + Q_{i,j,k} = SS_{i,j,k}\Delta R_j\Delta C_i \frac{h_{i,j,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m-1}}{t^m - t^{m-1}} \end{aligned} \quad (3)$$

其中, 下标($i, j-1, k$)、($i, j+1, k$)、($i-1, j, k$)、($i+1, j, k$)、($i, j, k-1$)、($i, j, k+1$)分别代表网格单元(i, j, k)沿行

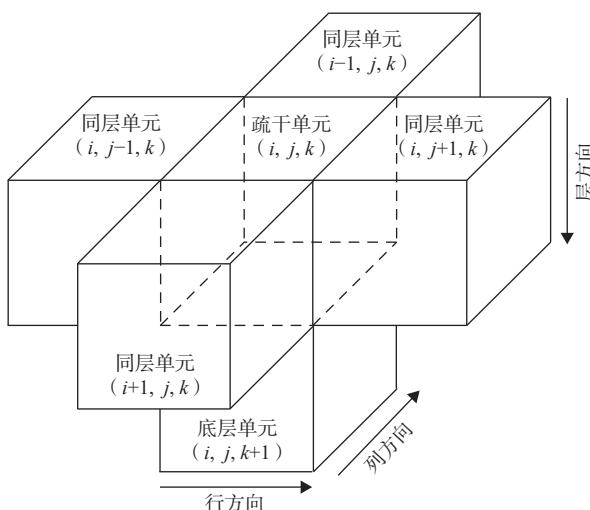


图 1 试算法概念图

Fig. 1 Schematic diagram of the ET method

(水平向)、列(水平向)、层(垂向)方向上的6个相邻网格单元,见图1; $CR_{i,j-1/2,k}$ 、 $CR_{i,j+1/2,k}$ 、 $CC_{i-1/2,j,k}$ 、 $CC_{i+1/2,j,k}$ 、 $CV_{i,j,k-1/2}$ 、 $CV_{i,j,k+1/2}$ 分别为网格单元(i, j, k)和周围6个网格单元之间的水力传导度/($m^2 \cdot d^{-1}$); $h_{i,j-1,k}^{m,n}$ 、 $h_{i,j+1,k}^{m,n}$ 、 $h_{i-1,j,k}^{m,n}$ 、 $h_{i+1,j,k}^{m,n}$ 、 $h_{i,j,k+1}^{m,n}$ 、 $h_{i,j,k-1}^{m,n}$ 分别代表各网格单元第 m 个模拟时段末第 n 次迭代待求解的水头值/m; $h_{i,j,k}^{m-1}$ 代表网格单元(i, j, k)在第 m 个模拟时段初的水头值/m; $P_{i,j,k}$ 为作用于网格单元(i, j, k)之上的与水头有关的源汇项相关系数/($m^2 \cdot d^{-1}$); $Q_{i,j,k}$ 代表作用于网格单元(i, j, k)之上的流量源汇项/($m^3 \cdot d^{-1}$); $SS_{i,j,k}$ 代表网格单元(i, j, k)的给水度或贮水系数; ΔR_j 和 ΔC_i 分别代表网格单元(i, j, k)的行宽和列宽/m; t^m 、 t^{m-1} 分别代表第 m 个模拟时段末和初的时刻/d。

2.1 单元间水平向水力传导度计算

全有效单元法采用不同于调和平均的新方法计算单元间水平向水力传导度,即 CR 、 CC 项。以沿行方向上任意2个相邻网格单元(i, j, k)、($i, j+1, k$)为例,沿列方向类同:

$$\begin{cases} MaxB = \max(Bot_{i,j,k}, Bot_{i,j+1,k}) \\ CR_{i,j+1/2,k} = 0 & h_{up} \leqslant MaxB \\ CR_{i,j+1/2,k} = \Delta C_i \frac{KR_{ave} \cdot HT_{ave}}{\Delta R_{j+1/2}} & h_{up} > MaxB \end{cases} \quad (4)$$

式中: $MaxB$ ——沿行方向上2个相邻网格单元相对较高的底板高程/m;

$Bot_{i,j,k}$ 、 $Bot_{i,j+1,k}$ ——相邻网格单元的底板高程/m;
 KR_{ave} ——相邻网格单元之间的平均渗透系数/($m \cdot d^{-1}$);

HT_{ave} ——相邻网格单元之间的平均有效饱和厚度/m;
 $\Delta R_{j+1/2}$ ——相邻网格单元中心点之间的距离/m;
 h_{up} ——相邻网格单元中水头相对较高的网格单元(即上风单元)的水头/m。

式(4)中单元间的平均渗透系数 KR_{ave} 采用加权调和平均法计算:

$$KR_{ave} = 2 \frac{\Delta R_{j+1/2} KR_{i,j,k} KR_{i,j+1,k}}{\Delta R_{j+1} KR_{i,j,k} + \Delta R_j KR_{i,j+1,k}} \quad (5)$$

式中: $KR_{i,j,k}$ 、 $KR_{i,j+1,k}$ ——网格单元(i, j, k)、($i, j+1, k$)沿行方向上的渗透系数/($m \cdot d^{-1}$);

ΔR_{j+1} ——网格单元($i, j+1, k$)的行宽/m。

下风单元为相邻网格单元中水头相对较低的网格单元。网格单元之间的平均有效饱和厚度 HT_{ave} 通过上风单元和下风单元的有效饱和厚度线性加权(图2)计算如下:

$$\begin{cases} HT_{up} = \min[\max(0, h_{up} - MaxB), Top_{up} - Bot_{up}] \\ HT_{down} = \min[\max(0, h_{down} - MaxB), Top_{down} - Bot_{down}] \\ HT_{ave} = \frac{HT_{up} \cdot \Delta R_{up} + HT_{down} \cdot \Delta R_{down}}{\Delta R_{up} + \Delta R_{down}} \end{cases} \quad (6)$$

式中: HT_{up} 、 HT_{down} ——上风单元、下风单元的有效饱和厚度/m;

h_{down} ——下风单元的水头/m;

ΔR_{up} 、 ΔR_{down} ——上风单元、下风单元的行宽/m;

Top_{up} 、 Top_{down} ——上风单元、下风单元的顶板高程/m;

Bot_{up} 、 Bot_{down} ——上风单元、下风单元的底板高程/m。

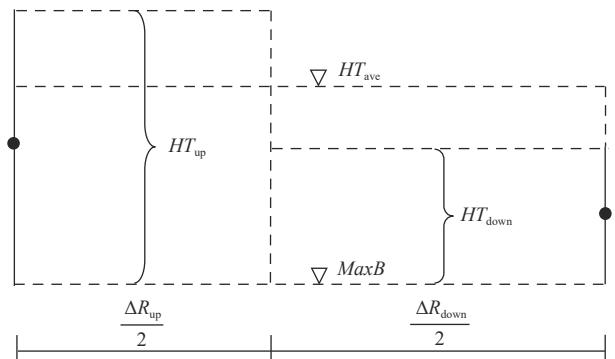


图2 全有效单元法下同层相邻网格单元之间的平均有效饱和厚度计算示意图

Fig. 2 Schematic diagram of calculating the average effective saturated thickness between adjacent grid cells in the same layer using the AAC method

在全有效单元法中,疏干单元的水头只有计算意义而无水量意义。图3展示了式(4)规定的水平向同层相邻网格单元在不同底板高程和水头状态下的8种地下水流动关系,根据式(4)和图3可知,尽管疏干单元有计算意义的水头,但不存在任何地下水流出疏干单元,见图3(a)(b)(e),因此不会破坏水量平衡原则;同时地下水可以从同层相邻的湿润单元向疏干单元流入,见图3(c)(g),即地下水的侧向流动不会在疏干单元处中断,网格单元能够在疏干-湿润状态之间无缝变化。据此可将疏干单元保持为有效单元进行模拟,也就避免了丢失源汇项。

2.2 垂向水力传导度计算

多层含水层模拟时涉及到网格单元间垂向水力传导度的计算。全有效单元法根据网格单元的垂向渗透系数和饱和厚度采用调和平均法动态计算越流系数和垂向水力传导度。用户还可以额外输入上、下2层网格单元之间低渗透性介质的厚度和垂向渗透系数,从而模拟“拟三维”的情况:

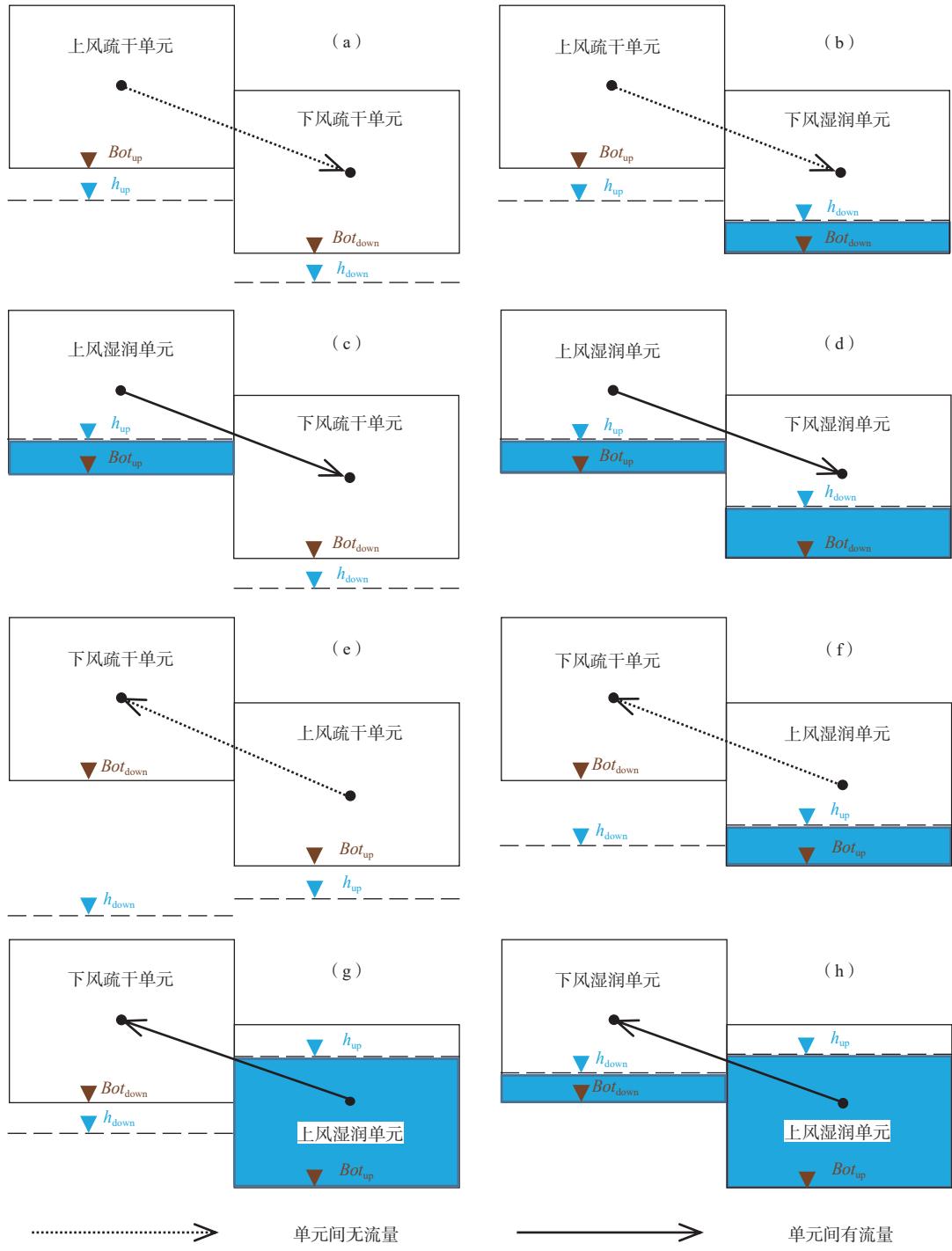


图 3 全有效单元法下同层相邻网格单元之间的水分流动关系

Fig. 3 Groundwater flow between adjacent grid cells in the same layer using the AAC method

$$CV_{i,j,k+1/2} = \frac{\Delta R_j \Delta C_i}{HSat_{i,j,k}/2 + TK_{i,j,k+1}/2 + TKCB} \quad (7)$$

式中: $HSat_{i,j,k}$ ——上层网格单元的含水层饱和厚度/m, 为水头减去底板高程的值, 当上层网格单元承压时, 该值等于该网格单元的含水层厚度;

$TK_{i,j,k+1}$ ——下层网格单元的含水层厚度/m, 全有效单元法规定下层网格单元无论是否疏干, 其含水层厚度都需要参与垂向水力传导度的计算, 从而可避免由垂向水力传导度计算不连续导致模型收敛失败的情况;

$TKCB$ ——上、下层网格单元之间低渗透性介质

的厚度/m;

$VK_{i,j,k}$ 、 $VK_{i,j,k+1}$ 、 VK_B ——上层网格单元、下层网格单元、低渗透性介质的垂向渗透系数/(m·d⁻¹)。

2.3 贮水项计算

全有效单元法中有效网格单元可以分为湿润-承压、湿润-非承压、疏干3种状态。在非稳定流模拟时,网格单元在3种状态下将分别采用贮水系数、给水度、零值贮水系数计算贮水项,见图4,网格单元的水头在不同状态之间切换时还需要考虑贮水项的连续性处理。假定网格单元模拟时段初处于疏干状态,模拟时段末处于湿润承压状态,时段内网格单元贮水项可表达为:

$$\begin{aligned} SS_{i,j,k} \Delta R_j \Delta C_i \frac{h_{i,j,k}^{m,n} - h_{i,j,k}^{m-1}}{t^m - t^{m-1}} = \\ \left[SC_{i,j,k} (h_{i,j,k}^{m,n} - Top_{i,j,k}) + SY_{i,j,k} (Top_{i,j,k} - Bot_{i,j,k}) \right] \Delta R_j \Delta C_i \end{aligned} \quad (8)$$

式中: $SY_{i,j,k}$ 、 $SC_{i,j,k}$ ——网格单元的给水度、贮水系数。

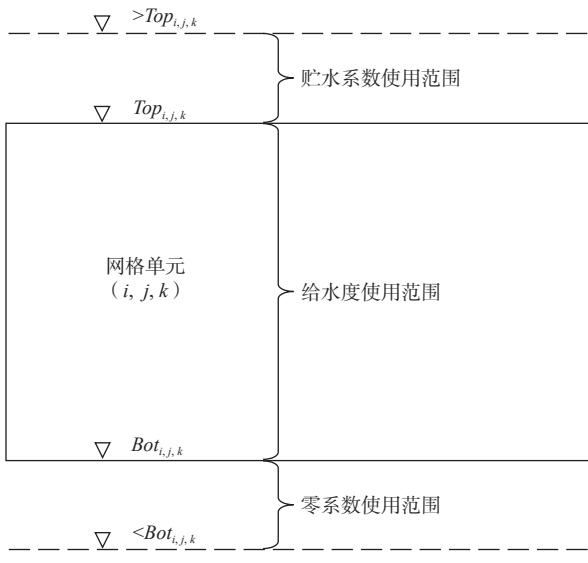


图4 全有效单元法不同贮水系数的适用范围

Fig. 4 Model cell for which storage factors are used during different states under the AAC method

除模拟时段初和模拟时段末网格单元分别处于疏干-湿润承压状态,还可能处于疏干-疏干、疏干-湿润非承压、湿润非承压-疏干、湿润非承压-湿润非承压、湿润非承压-湿润承压、湿润承压-疏干、湿润承压-湿润非承压、湿润承压-湿润承压状态,都需要对贮水项进行类似的连续性处理,详细过程可参考COMUS模型说明书^[16]。

2.4 源汇项处理

全有效单元法中疏干单元是有效网格单元,可以接受源汇项。补给性质的源项作用于疏干单元不存在计算问题,然而排泄性质的汇项作用于疏干单元会违反水量平衡原理,因此对汇项有针对性处理。

(1)与水头有关的汇项,此时仅需要进行数据合理性的检查。以常年性河流为例,在河水位低于地下水头时地下水向河流排泄;若网格单元有底板高程限制条件,此时只要用户输入的河水位参数合理,即河水位始终不低于网格单元的底板高程,就不会产生计算问题;若用户输入的河水位参数不合理,全有效单元法将会报错。类似的汇项还有通用水头、潜水蒸发、排水沟、季节性河流、湖泊等。

(2)与地下水头无关的汇项,此时需要对汇项进行修正处理。这类汇项主要是开采井,全有效单元法根据网格单元饱和厚度阈值对开采量进行线性衰减处理:

$$Q^{\text{Pump}} = \begin{cases} Q^{\text{Well}} & h - Bot > \Phi \\ \frac{h - Bot}{\Phi} Q^{\text{Well}} & 0 < h - Bot \leq \Phi \\ 0.0 & h - Bot \leq 0 \end{cases} \quad (9)$$

式中: Φ ——开采井网格单元的饱和厚度阈值/m,为用户输入值。一般 Φ 值取网格单元厚度的0.10~0.25倍比较合适,如果过小迭代计算不容易收敛;

Q^{Well} ——用户在网格单元指定的开采量/(m³·d⁻¹);

h ——网格单元当前的模拟水头/m;

Q^{Pump} ——模型在网格单元实际应用的开采量/(m³·d⁻¹)。

3 理想案例

理想案例用于验证全有效单元法模拟结果的可靠性。本案例由20层、21列网格单元组成,网格的长度、厚度均为5,2 m。模拟周期共20 d,等分为20个模拟时段。在第20层、第11列网格单元处有一开采井,模拟周期前10天开采量为30 m³/d,后10天开采量为10 m³/d,用于模拟水位下降到恢复的过程。左、右侧2列为40 m定水头网格单元,定水头和井流边界共同作用使得网格单元反复疏干-湿润。网格单元的初始水位为40 m,给水度取0.1,第11列网格单元的渗透系数取100 m/d,其他网格单元的渗透系数取1 m/d,分别使用试算法方案、全有效单元法方案和基于有限差分的饱和-非饱和二维水流模型VS2DT(variably

saturated two-dimensional flow and transport model, 由 USGS 开发)对本案例进行模拟。VS2DT 模型无需面对网格单元的“干-湿转化”问题, 可以作为参比标准比较试算法和全有效单元法模拟结果的可靠性。试算法方案参数为 $WETDRY = -0.001 \text{ m}$, $NWETIT = 1$, $WETFCT = 1$, $IHDWET = 2$, 由于 $WETDRY$ 取正值难以收敛, 因此取负值, 同时 $|WETDRY|$ 很小, 因此是试算法中较为理想的参数方案。COMUS 模型的水头控制精度和流量控制精度分别取 10^{-5} m 和 $10^{-4} \text{ m}^3/\text{d}$, 采用预处理共轭梯度求解器(preconditioned conjugate gradient solver, PCG)求解矩阵方程。

3 种方案第 10 天末和第 20 天末的模拟水位分布如图 5 所示, 可以看出不论在水位下降阶段还是在水位上升阶段, 试算法方案、全有效单元法方案的模拟水位都低于 VS2DT 模型的模拟水位, 但全有效单元法方案的模拟结果与 VS2DT 模型更为接近, 同时在水位上升阶段 3 种方案的模拟结果差别很小。水量平衡对比结果(表 1)与水位对比结果一致, 全有效单元法方案的模拟结果与 VS2DT 模型非常接近, 二者模拟结果都显示模拟域处于负平衡状态(蓄变量为负), 而试算法方案模拟结果显示模拟域处于正平衡状态。使用试算法方案时, 在模拟周期前 10 天的水位下降阶段, 一旦网格单元在某模拟时段内由时段初的湿润状态转化为时段末的疏干状态, 该疏干单元立

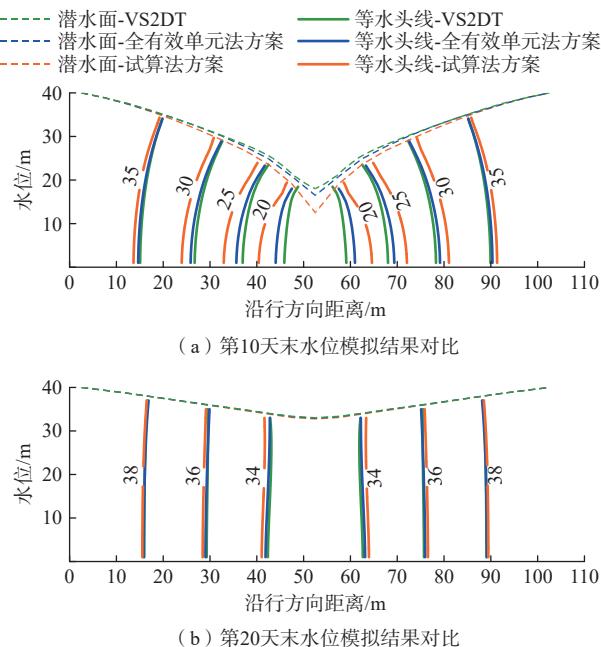


图 5 理想案例水位模拟结果对比

Fig. 5 Comparisons of simulated groundwater heads in the ideal case

表 1 理想案例水量平衡模拟结果对比

Table 1 Comparison of water balance in the ideal case /m³

水量平衡通量	VS2DT	试算法方案	全有效单元法方案
定水头边界流入量	364.659	416.470	362.310
井流开采量	-400.000	-400.000	-400.000
蓄变量	-35.341	16.470	-37.690
水量平衡误差	0.000	0.000	0.000

即被转变为无效网格单元, 不再参与计算, 该单元在模拟时段初处于湿润状态时的贮水量也不会被模型统计, 因此产生了水位总体下降但是蓄变量为正的悖论。综上所述, 全有效单元法模拟结果的可靠性优于试算法。

4 丹麦应用实例

本案例的目的在于检验全有效单元法的实用性, 同时全面比较试算法和全有效单元法对于网格单元“干-湿转化”问题的模拟能力和算法特性。

4.1 流域概况和模型配置与模拟方案设置

汉普(Hampen)湖流域位于丹麦日德兰半岛中部斯凯恩河上游地区, 临近日德兰半岛南北走向的主要地下水分水岭, 见图 6, 总面积 23.7 km^2 。流域地势东高西低, 地下水大致自东向西流出本流域, 见图 7(a), 流域内土地利用类型主要为森林和草地, 见图 7(b), 年均降水量 888 mm (1970—2007 年)。流域分为 4 个水文地质单元, 见图 7(c), 其中黏土层之上为非承压含水层, 之下为承压含水层^[18-20]。Hampen 湖总面积约为 0.76 km^2 , 湖泊水位与周围地下水位密切相关^[18], 湖水可通过河道向下游排泄。

基于试算法的模型配置已被证明在稳定流状态^[19, 21]和非稳定流状态^[18]下都能有效模拟 Hampen 湖流域的“河-湖-地下水”交互过程, 本文简要介绍。Hampen 湖流域分为 72 行、84 列、8 层共 36 712 个有效网格, 流域外围网格大小为 $100 \text{ m} \times 100 \text{ m}$, 在湖泊附近细化为 $50 \text{ m} \times 50 \text{ m}$, 见图 7(a)(c), 细致的含水层划分和水位升降使得大量网格单元反复疏干-湿润。流域西部概化为通用水头边界, 北、东、南部为隔水边界, 见图 7(a)。根据植被覆盖类型和非饱和带厚度将流域分为 4 个地下水补给区, 见图 7(b), 补给率由 HYDRUS-1D 模拟得到。每个网格平均意义上的水文地质参数由水文地质单元的水文地质参数求得, 见图 7(c)。湖泊采用 Lu 等^[22]提出的“倾斜湖底”算法模拟, 河流采用 Streamflow-Routing 模块模拟。模拟周期为 2003 年 12 月 10 日至 2012 年 1 月 7 日, 共 2 950 d。

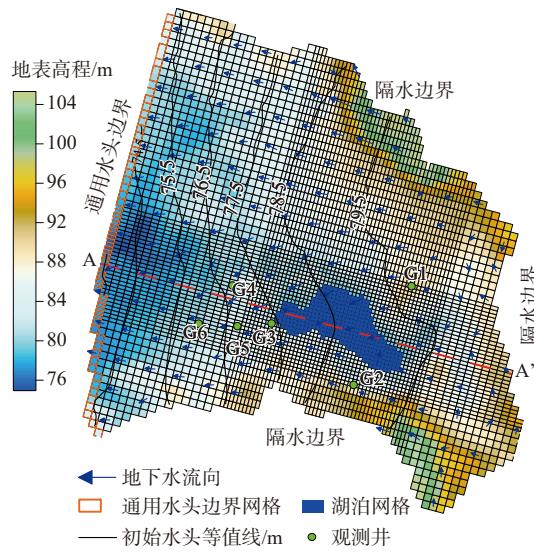
图 6 汉普湖流域概况^[18]Fig. 6 Information of the Lake Hampen basin in the practical simulation in Denmark^[18]

模拟方案设置如表 2 所示, 共包含 7 个试算法模拟方案和一个全有效单元法模拟方案。Hampen 湖流域模型原始试算法配置如试算法 5 方案所示^[18-19, 21], 本研究额外设置了 6 个试算法模拟方案, 共同说明试算法参数组合对模拟收敛性和模拟结果的影响。其中试算法 1、2、3、4 方案的 WETDRY 都相同, 其它参数有所不同; 试算法 5、6、7 方案只有 WETDRY 不同, 其它参数都相同。COMUS 模型水头控制精度和流量控制精度分别取 10^{-5} m 和 10^{-4} m³/d, 采用 PCG 求解器求解矩阵方程。

表 2 Hampen 湖流域模型模拟方案设置与模拟收敛性

Table 2 Simulation scheme settings and convergence of the Lake Hampen basin model

模拟方案参数	试算法 1	试算法 2	试算法 3	试算法 4	试算法 5	试算法 6	试算法 7	全有效单元法
WETDRY/m	0.3	0.3	0.3	0.3	1	2	-0.02	
NWETIT	2	2	2	4	2	2	2	
WETFCT	0.1	1	1	1	1	1	1	
IHDWET	1	1	2	2	2	2	2	
模拟结果	不收敛	不收敛	不收敛	收敛	收敛	收敛	收敛	收敛



(a) 水平向离散方式、初始条件与观测井位置

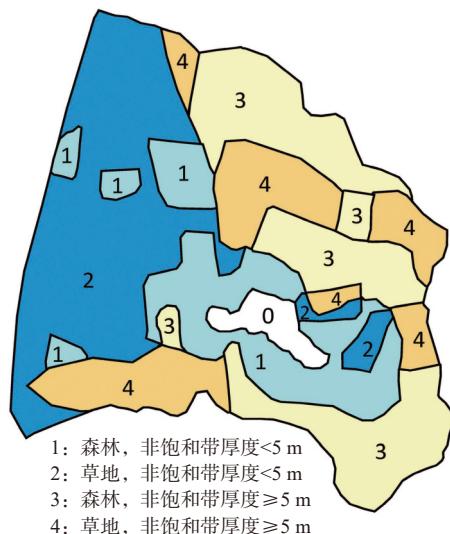
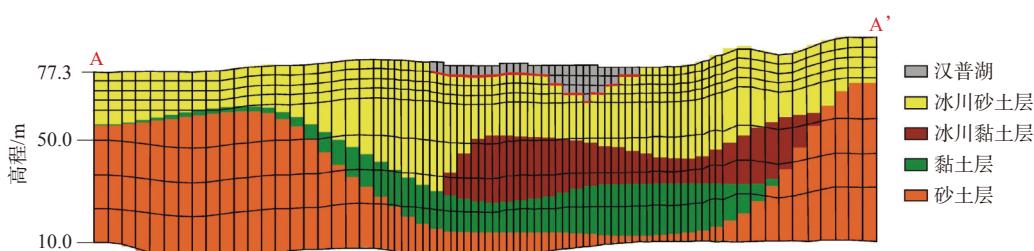
(b) 地下水补给区划分^[18](c) 垂向离散方式、A-A'断面侧视图与水文地质单元划分^[18]

图 7 Hampen 湖流域模型配置

Fig. 7 Model configuration of the Lake Hampen basin

4.2 模拟收敛性的比较与分析

采用试算法 1、2、3 方案模拟时, 模型迭代不收敛, 模拟失败; 采用试算法 4、5、6、7 方案时模型迭代收敛, 模拟成功, 见表 2。试算法参数组合选取对“干-湿转化”模拟的收敛性有明显影响, 这与前人的研究结论相符^[4, 12]。采用全有效单元法的模拟方案能够收敛, 后续模拟结果的对比只在试算法 4、5、6、7 方案和全有效单元法方案之间开展。

4.3 湿润地下水网格单元数量的比较与分析

各方案识别的湿润地下水网格单元数量对水位和水量平衡模拟结果有重要影响, 各方案下逐日湿润单元数量变化见图 8。全有效单元法方案识别的湿润单元数量最多, 试算法下各方案识别的湿润单元数量随着 $|WETDRY|$ 的升高而减少。除模拟初期外, $|WETDRY|$

最小的试算法 7 方案其余时段识别的湿润单元数量与全有效单元法方案基本一致。试算法下 $|WETDRY|$ 越大, 疏干单元越难重新湿润, 而全有效单元法网格单元可以在疏干-湿润状态间无缝转换, 可以认为 $|WETDRY|=0$, 因此全有效单元法方案和试算法 7 方案识别的湿润单元数量较多是可以预料的。试算法 4、5、6 方案识别的湿润单元数量在年内比较稳定, 年际间呈现阶梯状分布, 全有效单元法方案和试算法 7 方案识别的湿润单元数量变化与作为当地地下水主要补给来源的面上补给量的动态之间存在良好的一致性关系, 更好地体现了补给量变化引起的含水层连续“疏干-湿润”过程, 表明全有效单元法方案和试算法 7 方案的模拟结果更加合理。

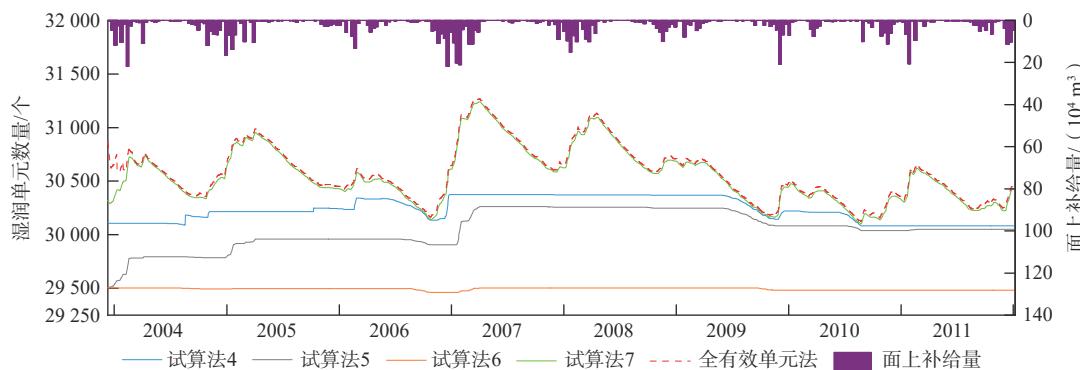


图 8 试算法方案与全有效单元法方案识别的湿润地下水网格单元数量对比

Fig. 8 Comparisons of the numbers of the wet cells identified by the ET schemes and the AAC scheme

4.4 模拟水位与水量平衡的比较与分析

图 9 为 Hampen 湖和位于非承压含水层的地下水位观测井 G1—G6(图 7a)在 2008 年全年和 2011 年部分时段的各方案水位模拟误差对比, 绝大多数水位模拟误差不超过 0.5 m。 $|WETDRY|$ 越小, 试算法方案与全有效单元法方案的模拟结果越相似, 主要是因为全有效单元法可以看作是 $|WETDRY|=0$ 的情况。同时也可以注意到, 在任意一个观测站点, 全有效单元法方案的模拟结果既存在误差大于试算法方案的情况, 也存在误差小于试算法方案的情况(图 9), 说明采用全有效单元法模拟时, 并未导致水位模拟精度出现系统性降低, 全有效单元法的单元间水平向水力传导度算法实现了可以与调和平均法相比较的数值计算精度。

各方案模拟的流域逐日平均潜水位与湖泊水位如图 10 所示。除模拟初期全有效单元法方案的模拟潜水位明显较高之外, 其余时段 2 种方案模拟的潜水位升降趋势基本一致, 见图 10(a)—(d)。随着 $|WETDRY|$

降低, 两种方案的模拟结果愈发一致, $|WETDRY|$ 最小的试算法 7 方案和全有效单元法方案模拟结果间的平均绝对误差(MAE)仅为 0.013 m, 见图 10(d)。对比图 8 和图 10(d)可知, 试算法 7 方案与全有效单元法方案识别的湿润单元数量差异与模拟潜水位差异之间具有高度相似性, 因此模拟期初两种方案较大的潜水位模拟偏差可能主要与识别的湿润单元数量差异有关。两种方案模拟的湖泊水位升降趋势基本相似, 见图 10(e)—(h)。特别地, 试算法 7 方案、全有效单元法方案模拟的湖泊水位几乎完全一致, $R^2=1$, MAE 仅为 0.003 m, 见图 10(h)。总之, 全有效单元法方案可以产生与理论上最为合理的试算法 7 方案类似的水位模拟结果。

水量平衡方面, $|WETDRY|$ 相对较小的试算法 4、5、7 方案和全有效单元法方案模拟的地下水系统水平衡状态总体一致, 见表 3, 即研究区地下水的主要补给来源为面上补给, 湖泊既向地下水系统渗漏, 也接

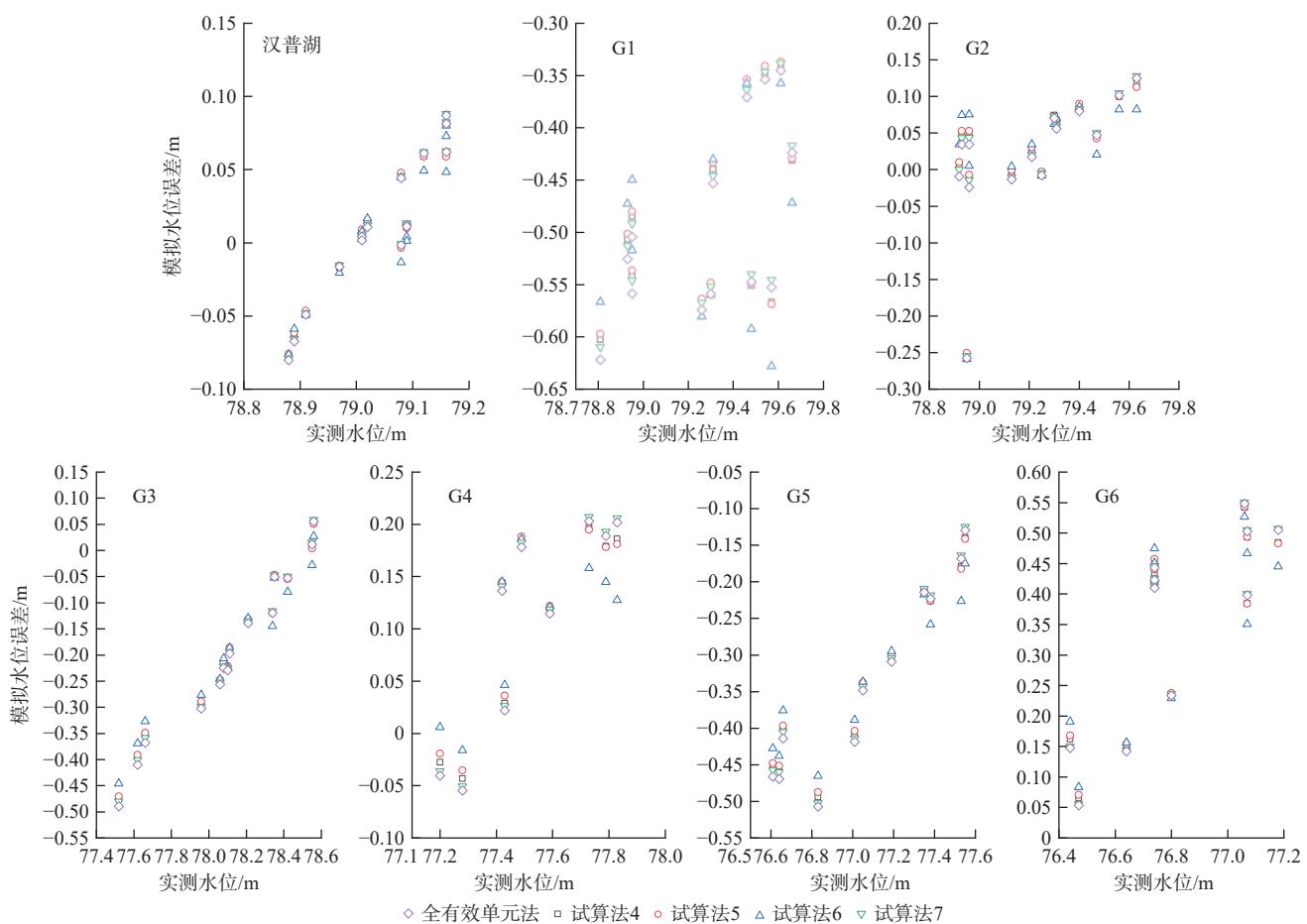


图 9 试算法方案与全有效单元法方案的水位模拟误差对比

Fig. 9 Comparisons of head errors simulated by the ET schemes and the AAC scheme

注: 模拟水位误差指实测值与模拟值之差。

受来自地下水系统的排泄,存在双向联系,地下水系统处于正平衡状态,贮水量增加。同时随着 $|WETDRY|$ 逐渐降低,2种方案模拟的地下水系统蓄变量愈发接近,也即识别的水平衡状态愈发一致。 $|WETDRY|$ 最大的试算法6方案模拟结果显示地下水系统处于负平衡状态,主要原因是该方案模拟的湖泊渗漏补给量较少,可能是因为等同于隔水边界的大量无效疏干单元阻碍了湖泊向地下水系统的渗漏。

5 讨论

地下水模型中对于网格单元“干-湿转化”过程的模拟长久以来是困扰模型应用的一个难点^[4, 7, 12]。目前被广泛应用的“干-湿转化”模拟算法是经验性的试算法,然而试算法参数组合对模拟的收敛性和模拟结果都有很大影响。例如在丹麦应用实例中试算法3、4方案只有 $NWETIT$ 参数不同,但模拟的收敛性完全相反。再比如拥有最大 $|WETDRY|$ 的试算法6方案虽

然能收敛,但模拟结果显示Hampen湖流域地下水系统处于负平衡状态,其他拥有相对较小 $|WETDRY|$ 的收敛方案都显示Hampen湖流域地下水系统处于正平衡状态。使用试算法时需要反复调整参数,在保证模型收敛的前提下,寻找 $|WETDRY|$ 最小的参数组合以保证模拟的相对准确性和合理性,很大程度上增加了用户使用模型的难度和时间成本。在过去数十年,包括人口增长和气候变化在内的多种因素导致全球干旱和半干旱地区地下水过度开采,进而使得含水层水位下降甚至枯竭^[23],具有鲁棒性的“干-湿转化”模拟算法对于科学合理地管理地下水系统的补给与排泄、恢复地下水具有重要支撑作用^[7, 24–25],目前基于试算法的模拟结果及衍生出的相关管理政策具有明显的不确定性。

全有效单元法的优点在于将疏干单元作为有效单元,从而能够从地下水动力学方程本身出发解决网格单元的“干-湿转化”模拟问题。理想案例模拟结果表明,全有效单元法模拟结果的可靠性优于试算法。

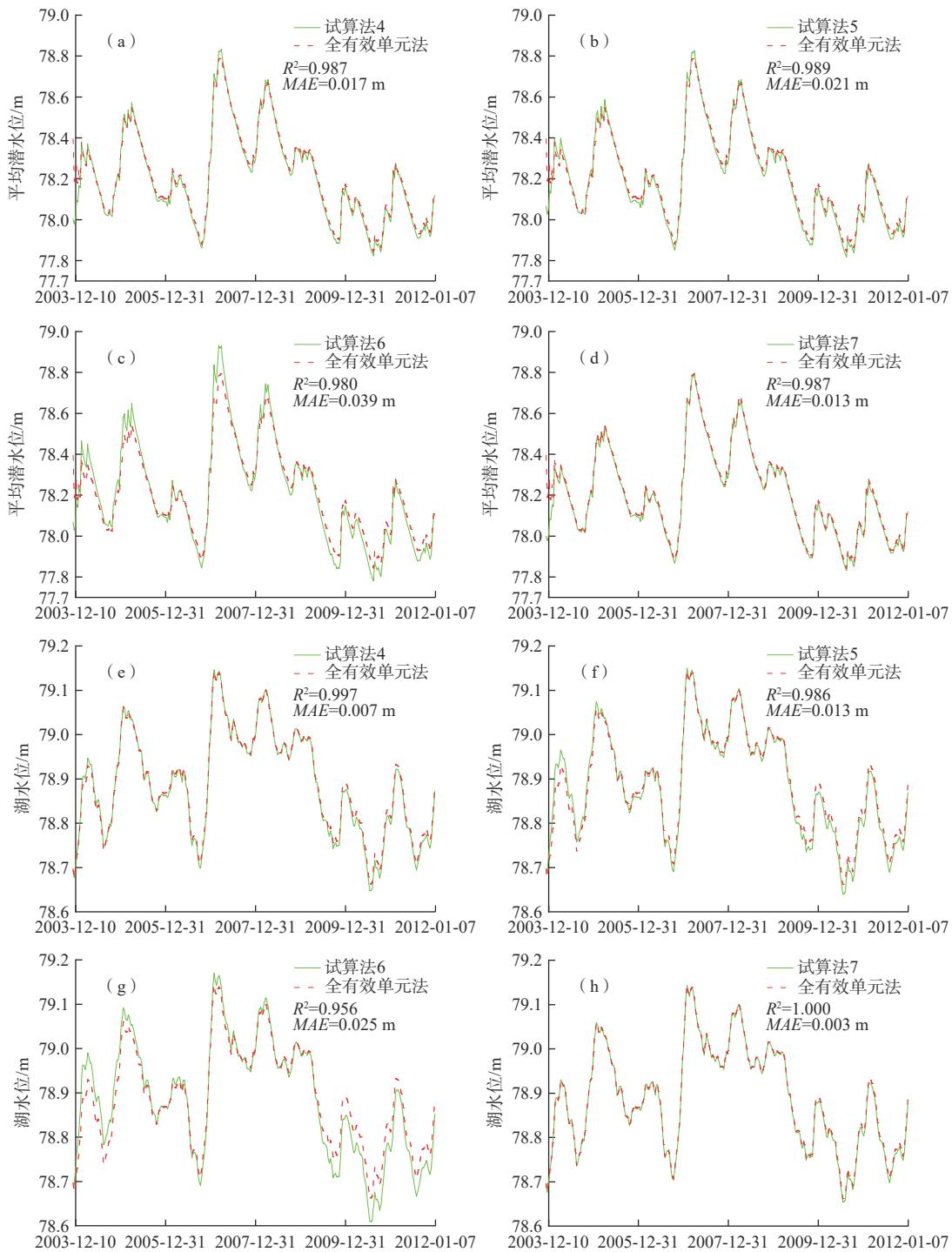


图 10 试算法方案与全有效单元法方案逐日平均潜水位和逐日湖泊水位模拟结果对比

Fig. 10 Comparison of simulated daily average water table and daily lake water level in the ET schemes and the AAC scheme

通过丹麦应用实例研究发现,随着 $|WETDRY|$ 的降低,试算法方案和全有效单元法方案的湿润单元数量、水位和水量平衡模拟结果愈发趋近,可以认为全有效单元法的作用等同于 $|WETDRY|$ 趋近于零的最优试算法参数组合。使用全有效单元法时无需进行复杂的参数组合工作,很大程度上降低了模型的使用难度和模拟

结果的不确定性。同时,全有效单元法方案和 $|WETDRY|$ 最小的试算法 7 方案模拟结果之间的高度相似性也说明全有效单元法中单元间水平向水力传导度算法实现了可以与经典调和平均法相比较的数值计算精度,这意味着全有效单元法在不涉及网格单元“干-湿转化”问题的地下水模拟中同样具有应用潜力。目前

表3 试算法方案与全有效单元法方案模拟的水量平衡对比

Table 3 Comparison of simulated water balance by the ET schemes and the AAC scheme

 $/10^4 \text{ m}^3$

水量平衡通量	试算法4	试算法5	试算法6	试算法7	全有效单元法
面上补给量	7 874.093	7 874.078	7 874.101	7 874.084	7 874.061
通用水头边界流入量	1 063.619	1 064.806	1 061.605	1 069.624	1 070.379
河道渗漏补给量	16.038	16.315	17.247	16.134	16.473
湖泊渗漏补给量	1 528.940	1 526.667	1 509.230	1 532.026	1 526.061
通用水头边界流出量	8 822.492	8 823.179	8 823.343	8 826.603	8 811.780
地下水向河道的排泄量	16.377	16.459	18.065	15.915	16.212
地下水向湖泊的排泄量	1 601.177	1 604.219	1 638.722	1 595.755	1 596.793
潜水蒸发量	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
蓄变量	42.641	38.008	-17.949	53.597	62.189
水量平衡误差	0.002	0.001	0.003	-0.002	0.000

在 MODFLOW-2005 等使用调和平均法计算单元间水平向水力传导度的模型中,是否启用试算法模拟网格单元的“干-湿转化”过程仍然被作为模型的可选项,全有效单元法的全场景应用潜力有助于弥补当前模型的不足,但这一潜力仍需要更多的理论案例和应用实例来验证,这也是下一步的研究方向。

最后需要说明的是,MODFLOW-USG^[26]等基于非结构化网格的地下水模型同样面临着由“干-湿转化”模拟引发的各种异常情况,尽管全有效单元法目前集成于基于结构化网格的 COMUS 模型之中,但该方法也可为基于非结构化网格的地下水模型应对“干-湿转化”问题提供有益借鉴。

6 结论

(1) 试算法的参数组合选取对模拟的收敛性和模拟结果都有明显影响,使用试算法时需要不断优化参数组合,在实现模型收敛的前提下寻找|WETDRY|最小的参数组合以保证模拟的相对准确性和合理性,很大程度上增加了用户使用模型的难度和时间成本。

(2) 相比于试算法,全有效单元法的模拟结果更为准确;全有效单元法的作用等同于理论上最优的试算法参数组合,使用全有效单元法时用户无需进行复杂的参数调优工作,因此该方法能有效降低模型的使用难度与模拟结果的不确定性。

(3) 全有效单元法中单元间水平向水力传导度算法实现了可以与经典调和平均法相比较的数值计算精度,因此全有效单元法在不涉及网格单元“干-湿转化”问题的地下水模拟中同样具有应用潜力。

参考文献 (References) :

simulator of flow in a surficial aquifer overlain by seasonally inundated wetlands[J]. *Groundwater*, 1994, 32(2): 286–292.

- [2] 郭子豪. 黄土丘陵沟壑区典型沟道土地整治工程对水系平衡影响研究 [D]. 杨凌: 中国科学院大学(中国科学院教育部水土保持与生态环境研究中心), 2021. [GUO Zihao. The impacts of typical gully land consolidation project on water system balance in Loess Hilly and Gully Region[D]. Yangling: Research Center for Eco-environments and Soil and Water Conservation, Chinese Academy of Sciences & Ministry of Education, 2021. (in Chinese with English abstract)]
- [3] ELZEHAIRY A A, LUBCZYNSKI M W, GURWIN J. Interactions of artificial lakes with groundwater applying an integrated MODFLOW solution[J]. *Hydrogeology Journal*, 2018, 26(1): 109–132.
- [4] HERRERA P A, LANGEVIN C, HAMMOND G. Estimation of the water table position in unconfined aquifers with MODFLOW 6[J]. *Groundwater*, 2023, 61(5): 648–662.
- [5] KOURAKOS G, HARTER T. Simulation of unconfined aquifer flow based on parallel adaptive mesh refinement[J]. *Water Resources Research*, 2021, 57(12): 1–25.
- [6] PREZIOSI E, GUYENNON N, PETRANGELI A B, et al. A stepwise modelling approach to identifying structural features that control groundwater flow in a folded carbonate aquifer system[J]. *Water*, 2022, 14(16): 1–16.
- [7] PAINTER S, BAŞAĞAOĞLU H, LIU Angang. Robust representation of dry cells in single-layer MODFLOW models[J]. *Groundwater*, 2008, 46(6): 873–881.
- [8] KEATING E, ZYVOLOSKI G. A stable and efficient numerical algorithm for unconfined aquifer analysis[J].

[1] MERRITT M L. A rewetting approximation for a

- Groundwater, 2009, 47(4): 569 – 579.
- [9] JEPPESEN J, CHRISTENSEN S, LADEKARL U L. Modelling the historical water cycle of the Copenhagen Area 1850–2003[J]. Journal of Hydrology, 2011, 404(3/4): 117 – 129.
- [10] LIN Lin, YANG Jinzhong, ZHANG Bin, et al. A simplified numerical model of 3-D groundwater and solute transport at large scale area[J]. Journal of Hydrodynamics, 2010, 22(3): 319 – 328.
- [11] FITTS C R. Modeling dewatered domains in multilayer analytic element models[J]. Groundwater, 2018, 56(4): 557 – 561.
- [12] HUNT R J, FEINSTEIN D T. MODFLOW-NWT: Robust handling of dry cells using a Newton formulation of MODFLOW-2005[J]. Groundwater, 2012, 50(5): 659 – 663.
- [13] BEDEKAR V, NISWONGER R G, KIPP K, et al. Approaches to the simulation of unconfined flow and perched groundwater flow in MODFLOW[J]. Groundwater, 2012, 50(2): 187 – 198.
- [14] NISWONGER R G, PANDAY S, IBARAKI M. MODFLOW-NWT, a newton formulation for MODFLOW-2005[R]. Reston: U. S. Geological Survey Techniques and Methods Report, 2011.
- [15] 张博. 跨流域调水下苏干湖盆地水循环响应数值模拟 [D]. 北京: 中国水利水电科学研究院, 2018. [ZHANG Bo. Numerical simulation of water cycle response of the Sugan Lake Basin under the influence of inter-basin water transfer project[D]. Beijing: China Institute of Water Resources and Hydropower Research, 2018. (in Chinese with English abstract)]
- [16] LU Chuiyu. C++ object-oriented model for underground water simulation[R]. Beijing: China Institute of Water Resources and Hydropower Research, 2023.
- [17] HARBAUGH A W. MODFLOW-2005: The U S geological survey modular ground-water model-the ground-water flow process[R]. Reston: U. S. Geological Survey Techniques and Methods, 2005.
- [18] LU Chuiyu, HE Xin, ZHANG Bo, et al. Comparison of numerical methods in simulating lake-groundwater interactions: Lake Hampen, Western Denmark[J]. Water, 2022, 14(19): 1 – 13.
- [19] KIDMOSE J, ENGESGAARD P, NILSSON B, et al. Spatial distribution of seepage at a flow-through lake: Lake Hampen, Western Denmark[J]. Vadose Zone Journal, 2011, 10(1): 110 – 124.
- [20] OLIVEIRA OMMEN D A, KIDMOSE J, KARAN S, et al. Importance of groundwater and macrophytes for the nutrient balance at oligotrophic Lake Hampen, Denmark[J]. Ecohydrology, 2012, 5(3): 286 – 296.
- [21] KIDMOSE J, ENGESGAARD P, OMMEN D A O, et al. The role of groundwater for lake-water quality and quantification of N seepage[J]. Groundwater, 2015, 53(5): 709 – 721.
- [22] LU Chuiyu, ZHANG Bo, HE Xin, et al. Simulation of lake-groundwater interaction under steady-state flow[J]. Groundwater, 2021, 59(1): 90 – 99.
- [23] REGNERY J, LI Dong, LEE J, et al. Hydrogeochemical and microbiological effects of simulated recharge and drying within a 2D meso-scale aquifer[J]. Chemosphere, 2020, 241: 1 – 9.
- [24] WU Ming, WU Jianfeng, LIN Jin, et al. Evaluating the interactions between surface water and groundwater in the arid mid-eastern Yanqi Basin, northwestern China[J]. Hydrological Sciences Journal, 2018, 63(9): 1313 – 1331.
- [25] SONG Jian, YANG Yun, SUN Xiaomin, et al. Basin-scale multi-objective simulation-optimization modeling for conjunctive use of surface water and groundwater in northwest China[J]. Hydrology and Earth System Sciences, 2020, 24(5): 2323 – 2341.
- [26] PANDAY S, LANGEVIN C D, NISWONGER R G, et al. MODFLOW-USG version 1: An unstructured grid version of MODFLOW for simulating groundwater flow and tightly coupled processes using a control volume finite-difference formulation[R]. Reston: U. S. Geological Survey Techniques and Methods Report Book 6, 2013.

编辑: 张若琳