

多孔介质中溶质 non-Fickian 运移模型与实验研究

钱家忠¹, 周 杨¹, 李福林², 刘 咏³

(1.合肥工业大学资源与环境工程学院,安徽合肥 230009; 2.山东省水利科学研究院,山东济南 250013;
3.合肥工业大学生物与食品工程学院,安徽合肥 230009)

摘要:为了量化多孔介质中的非费克(non-Fickian)运移,将弥散度处理为随运移距离呈线性变化的函数,提出了数学模型 LAF(linear-asymptotic function),并开展了不同条件下一维玻璃柱多孔介质溶质运移实验,根据实验数据对比分析了 LAF 模型与传统 ADE(advection-dispersion equation)模型的精度.结果表明:尽管在水流满足达西定律范畴,采用将弥散度在小尺度实验中设定为定值的 ADE 模型,其拟合值与实验值仍存在一定差异,最大误差为 1.57 g/L;将弥散度处理为线性函数的 LAF 模型模拟精度有了较大提高,最大误差为 0.62 g/L,从而能够更好地模拟均质有限柱溶质运移过程.上述结论是在均质介质中获得,对于非均质介质,情况更为复杂,其机理有待进一步研究.

关键词:溶质运移;LAF(linear-asymptotic function)模型;ADE(advection-dispersion equation)模型;弥散;弥散度

中图分类号:P641 **文献标识码:**A **doi:**10.3969/j.issn.0253-2778.2017.05.007

引用格式:钱家忠,周杨,李福林,等.多孔介质中溶质 non-Fickian 运移模型与实验研究[J].中国科学技术大学学报,2017,47(5):421-425.

QIAN Jiazhong, ZHOU Yang, LI Fulin, et al. Non-Fickian model and experimental study of solute transport in porous media[J]. Journal of University of Science and Technology of China, 2017,47(5): 421-425

Non-Fickian model and experimental study of solute transport in porous media

QIAN Jiazhong¹, ZHOU Yang¹, LI Fulin², LIU Yong³

(1. School of Resources and Environmental Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230000, China;

2. Shandong Academy of Water Conservancy, Jinan 250013, China;

3. School of Biotechnology and Food Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230000, China)

Abstract: To quantify the non-Fickian transport in porous media, a linear function was employed to characterize the relationship between the dispersivity and migration distance, a mathematical model LAF (Linear-Asymptotic Function) was presented, solute transport tests in one-dimensional glass column were carried out, and the accuracy of LAF was contrasted with the traditional ADE (advection-dispersion equation) models according to experimental data. The results show that, although the flow satisfies Darcy's law, there are some differences between the experimental values and the fitted values obtained from the ADE model treating the dispersivity as a constant (the maximal error value being 1.57 g/L). The

收稿日期:2016-04-11;修回日期:2016-06-22

基金项目:国家自然科学基金(41372245,41272251),山东省水生态文明试点科技支撑计划资助.

作者简介:钱家忠(通讯作者),男,1968年生,博士/教授.研究方向:地下水污染防治.E-mail:qianjiazhong@hfut.edu.cn

simulation accuracy is enhanced when the dispersivity is treated as a linear function of LAF; the maximal error value is 0.62 g/L. It can better simulate solute transport in the homogeneous finite column. These conclusions have been obtained in homogeneous media. The situation is more complicated in heterogeneous porous media, and the mechanism needs further research.

Key words: solute transport; LAF (linear-asymptotic function) model; ADE (advection-dispersion equation) model; dispersion; dispersivity

0 引言

地下水污染有效防治的前提是对地下水污染进行科学评价和预测.越来越多的实验室和现场研究表明,传统的 ADE(advection-dispersion equation)模型模拟出来的结果与实际差别较大,其原因在于 ADE 模型中使用的是等效的、平均意义上的参数,与实际情况不符^[1-6].Gelhar 等^[3]在自然界裂隙和多孔介质中发现了弥散度具有尺度效应.王子亭^[4]提出了尺度跃迁的概念,即根据小尺度上对流-弥散模型确定大时空尺度上的对流-弥散模型,并提出了跃迁的方法.在探究弥散度与溶质运移距离关系的基础上,Pickens 等^[7]提出利用线性函数和指数函数来表示弥散度与溶质运移距离的关系,从而建立了不同情况下 ADE 的有限元数值模型.Pang 和 Hunt^[8]还通过 8 m 长的土柱实验验证了该种模型的适用性.在 ADE 基础上建立起来的两区模型(two-region model, TRM)作为一种物理非平衡模型,将土壤孔隙中可能存在的不动水体考虑进来,更准确地描述了溶质运移过程中的提前穿透和拖尾等不规则现象^[9].然而,在两区模型基础上考虑弥散尺度效应将能更好地模拟非均质介质中溶质运移过程.但是,以往有关两区模型弥散尺度效应的研究比较少.张德生^[10]得到了非均质土壤中两区模型的准解析解,但推导过程和解的形式非常复杂,不易推广应用.此外,张德生并没有考虑带溶质的吸附和降解等反应过程,也没有用实验去检验模型的适用性^[11].

本文将弥散度设为运移距离的线性函数,并考虑溶质的吸附和降解以及弥散尺度效应,建立了一维溶质运移 LAF(linear-asymptotic function)模型.通过该模型模拟了在长度为 100 cm 的一维均质玻璃柱中的溶质运移过程,从而检验了模型的适用性.

1 数学模型

正如在引言中所讨论的,我们只研究了弥散度和运移距离的线性渐近模型.对于溶质运移的一维

有限域,如实验室玻璃柱试验,弥散度的线性渐近模型可以写成:

$$\alpha(x) = \begin{cases} \lambda x, & 0 \leq x \leq L_0 \\ \alpha_0, & L_0 < x \leq L \end{cases} \quad (1)$$

式中, $\alpha(x)$ 是弥散度; λ 是增长系数; x 是溶质运移距离; L_0 和 L 分别是弥散度线性增长的临界距离和保持恒定的临界距离; α_0 是弥散度在 L_0 和 L 之间的恒定值.

我们将坐标的原点设置在溶质注入处.式(1)表示列应分为两个区域:区域 1 在 $x=0$ 和 $x=L_0$ 之间弥散度和运移距离呈线性增加,区域 2 在 $x=L_0$ 和 $x=L$ 之间弥散度是恒定的.在区域 1 溶质运输是非费克,在区域 2 是费克.因此,这个一维溶质运移的控制方程在稳态流线性平衡吸附条件下可写成:

$$R \frac{\partial C_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} [D_1(x) \frac{\partial C_1}{\partial x}] - V \frac{\partial C_1}{\partial x}, \quad 0 \leq x \leq L_0 \quad (2)$$

$$R \frac{\partial C_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} - V \frac{\partial C_2}{\partial x}, \quad L_0 < x \leq L \quad (3)$$

式中, C_1 和 C_2 分别表示溶质在区域 1 和区域 2 中的浓度. R 是阻滞因子, V 是流速. D_1 和 D_2 是在区域 1 和区域 2 的弥散系数,分别根据式(1), D_1 和 D_2 可以写成:

$$D_1(x) = \lambda x V + D_0 \quad (4)$$

$$D_2 = \alpha_0 V + D_0 \quad (5)$$

式中, D_0 是分子扩散系数.

在野外试验中分子扩散通常是被忽视的,实验室实验中也常被忽略^[12].因为它通常比机械弥散系数小得多.然而,我们在本文中保留了分子扩散,因为有时在实验室柱状试验中分子扩散不可被忽略.此外,弥散度从零开始线性增加,因此分子扩散将发挥主要的作用.

Van Genuchten 等^[13]通过短的室内土柱研究了不同边界条件下的溶质运移,实验发现流量型进水边界与 Danckwerts 型出水边界相结合质量保持

不变.因此在研究中,我们采用这种组合作为边界条件.进水边界条件为

$$[VC_1 - D_1(x) \frac{\partial C_1}{\partial x}] |_{x=0} = VC_0 \quad (6)$$

出口的边界条件可写成:

$$\frac{\partial C_2}{\partial x} |_{x=L} = 0 \quad (7)$$

假定最初土柱是游离示踪剂,并可以得到

$$C_1(t=0, x) = C_2(t=0, x) = 0 \quad (8)$$

式中, t 是时间.

示踪剂的浓度在区域 1 和区域 2 是连续的,因此有

$$C_1(t, x=L_0) = C_2(t, x=L_0) \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial x} |_{x=L_0} = \frac{\partial C_2}{\partial x} |_{x=L_0} \quad (10)$$

为了计算方便,下面的无量纲参数被定义为

$$C_{1D} = \frac{C_1}{C_0}, C_{2D} = \frac{C_2}{C_0}, C_D = \frac{C}{C_0}, x_D = \frac{x}{L},$$

$$t_D = \frac{tV}{RL}, \beta = \frac{L_0}{L}, D_{0D} = \frac{D_0}{LV}, P_e = \frac{L}{\alpha_0} \quad (11)$$

将式(11)代入到式(2)~(8)中可以得到溶质运移模型无量纲形式如下:

$$\frac{\partial C_{1D}}{\partial t_D} = (\lambda x_D + D_{0D}) \frac{\partial^2 C_{1D}}{\partial x_D^2} + (\lambda - 1) \frac{\partial C_{1D}}{\partial x_D} \quad (12)$$

$$\frac{\partial C_{2D}}{\partial t_D} = (\lambda\beta + D_{0D}) \frac{\partial^2 C_{2D}}{\partial x_D^2} - \frac{\partial C_{2D}}{\partial x_D} \quad (13)$$

$$C_{1D}(t_D=0, x_D) = C_{2D}(t_D=0, x_D) \quad (14)$$

$$[C_{1D} - D_{0D} \frac{\partial C_{1D}}{\partial x_D}] |_{x_D=0} = 1 \quad (15)$$

$$\frac{\partial C_{2D}}{\partial x_D} |_{x_D=1} = 0 \quad (16)$$

$$C_{1D}(t_D, x_D=\beta) = C_{2D}(t_D, x_D=\beta) \quad (17)$$

$$\frac{\partial C_{1D}}{\partial x_D} |_{x_D=\beta} = \frac{\partial C_{2D}}{\partial x_D} |_{x_D=\beta} \quad (18)$$

下标有“D”的表示无量纲项.应该注意的是,根据式(12), λ 应小于 1.如果 λ 等于或大于 1,负向弥散将会很大,等于或超过正向弥散和对流,这是不合理的^[14].在数学上我们可以从式(12)中看到,对流项前面的系数应该总是负数来保证式(12)合理.

将式(12)~(18)由拉普拉斯变换得到

$$\bar{C}_{1D} = A\epsilon^r K_r(2r\sqrt{s\epsilon}) + B\epsilon^r I_r(2r\sqrt{s\epsilon}) \quad (19)$$

$$\bar{C}_{2D} = Ee^{\alpha_1 x_D} + Fe^{\alpha_2 x_D} \quad (20)$$

式中, s 是无量纲拉普拉斯变换的参数,有上划线的是拉普拉斯里的变量; I_r 和 K_r 是第一类和第二类贝塞尔函数的 r 阶修正参数,分别为

$$r = 1/\lambda; \epsilon = \sqrt{\lambda x_D + D_{0D}};$$

$$a_1 = \frac{1 + \sqrt{1 + 4(\lambda\beta + D_{0D})s}}{2(\lambda\beta + D_{0D})};$$

$$a_2 = \frac{1 - \sqrt{1 + 4(\lambda\beta + D_{0D})s}}{2(\lambda\beta + D_{0D})}$$

以下将该模型称为 LAF 模型^[15].

文中 ADE 一维问题解析解公式为

$$C(x, t) = \frac{c_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{x - u_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) + \exp \left(\frac{u_x x}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{x + u_x t}{2\sqrt{D_L t}} \right) \right] \quad (21)$$

式中, erfc 为余误差函数; \exp 为指数; D_L 是纵向弥散系数; u_x 是 x 轴向实际流速.

2 实验与方法

2.1 实验装置

实验装置由 4 部分组成:进水箱、实验物理模型主体、出水箱、测压管(图 1).进水装置由一个可以调节高度的水箱及进水连接管组成,在实验过程中可以根据需要调节出不同的供水水位;出水系统是由出水箱和与之连接的出水管组成,同样地可以调节出不同的排水水头;实验模型的主体是一根有机玻璃管(直径为 4 cm,长 100 cm),玻璃管内充填直径为 1.5 mm 的均匀玻璃珠.

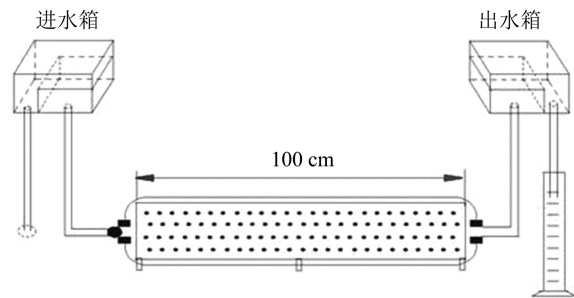


图 1 实验装置图

Fig.1 Diagram of the experimental setup

2.2 实验实施和检测

(I)实验前将装置装满水,检查模型是否漏水;

(II)水力实验完成后,配置浓度为 10 g/L 的 NaCl 溶液,分别开展不同流速非反应性溶质运移实验,用秒表和量筒测定流速,且测定每个流速都要重

复 3 遍确保准确性;

(III)采用电导率仪进行测样,记录数据.

3 实验与模拟结果分析

3.1 NaCl 浓度和电导率关系标准曲线测定

以 NaCl 为溶质,试验中测量的是溶液的电导值,通过电导测量推求溶液浓度.使用 DDS-11A (T)数字电导率仪测量确定溶液浓度与电导值的关系,推得 NaCl 溶液的浓度真实值,测定对应 NaCl 浓度下的电导值 σ ,得出电导率值与 NaCl 浓度的关系曲线,其关系式为

$$Y = 2072 * X \quad (22)$$

式中, X, Y 分别为 NaCl 浓度(单位 g/L)和溶液电导值 σ (单位 $\mu\text{S/cm}$).样本数为 11.其标线结果见图 2.

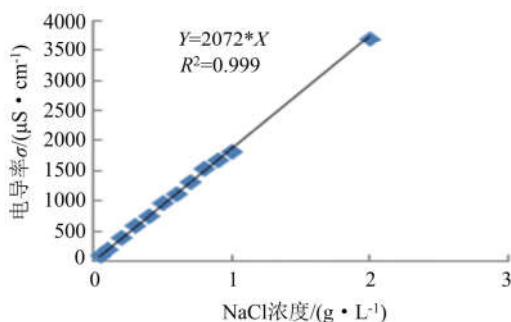


图 2 NaCl 浓度对电导率的影响

Fig.2 The effect of concentration of NaCl on the electrical conductivity

3.2 渗流速度与水力梯度的关系

为了探究实验是否在达西流下进行,开展了水力实验,结果见图 3.

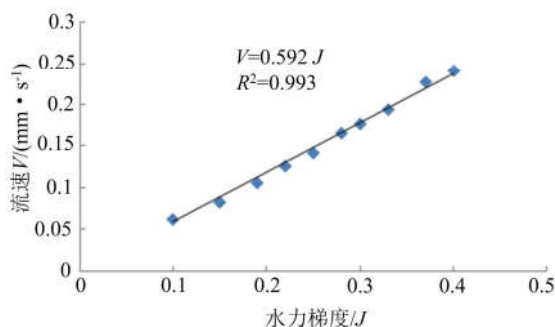


图 3 水力实验

Fig.3 Hydraulic experiment

由图 3 可见,水力梯度和渗流速度呈线性关系,即 $V = 0.592 J$, 决定系数为 0.993,说明本实验在达西流下完成.

3.3 实测数据与模拟结果对比分析

NaCl 溶质在 50 cm 处取样,流速分别为 0.5, 1.0 mL/s 的溶质运移穿透曲线如图 4 和图 5 所示.由图 4 和图 5 可知,ADE 模型模拟(参数 $R=1.0$, 在流量为 0.5 mL/s 时, $D=0.005968 \text{ m}^2/\text{s}$;在流量为 1.0 mL/s 时, $D=0.01194 \text{ m}^2/\text{s}$)的曲线与实测值相比,浓度从零开始变化的时间较早,达到稳定的时间较晚,有一定的类似早到和拖尾的现象.而 LAF 模型模拟(模型参数 $\lambda=0.1, \alpha_0=15 \text{ m}$)的曲线和实测值拟合较好.

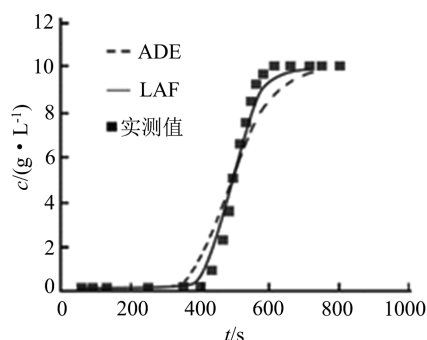


图 4 50 cm 处取样,流量 0.5 mL/s 的 NaCl 穿透曲线

Fig.4 Break-through curve of NaCl at flux=0.5 mL/s sampled at 50 cm

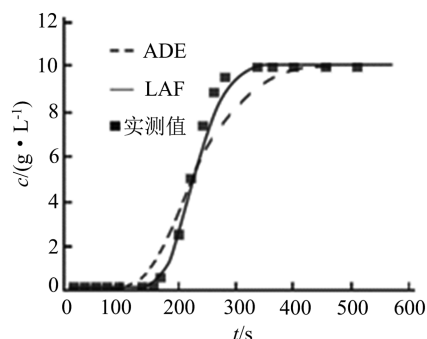


图 5 50 cm 处取样,流量 1.0 mL/s 的 NaCl 穿透曲线

Fig.5 Break-through curve of NaCl at flux=1.0 mL/s sampled at 50 cm

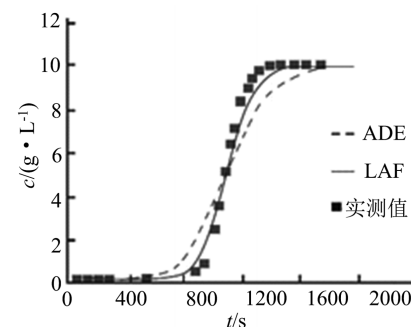


图 6 100 cm 处,流速 0.5 mL/s 的 NaCl 穿透曲线

Fig.6 Break-through curve of NaCl at flux=0.5 mL/s sampled at 100 cm

NaCl 溶质在 100 cm 处取样,流速分别为 0.5, 1.0 mL/s 的溶质运移穿透曲线如图 6 和图 7 所示.由图 6 和图 7 可知,ADE 模型模拟曲线与实测值相比较,同样发现浓度从零开始变化的时间较早,达到稳定的时间较晚,有一定的早到和拖尾的现象.而 LAF 模型模拟的曲线和实测值拟合较好.ADE 与 LAF 模型参数同前.

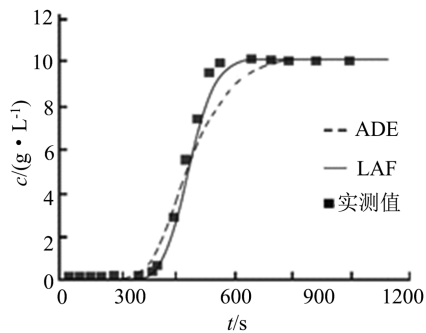


图 7 100 cm 处,流速 1.0 mL/s 的 NaCl 穿透曲线
Fig.7 Break-through curve of NaCl at
flux=1.0 mL/s sampled at 100 cm

综合比较图 3~图 6 可以看出,无论是在 50 cm 或 100 cm 处取样,还是流速为 0.5 mL/s 或 1.0 mL/s, ADE 模型模拟出的曲线都存在一定的误差,而 LAF 模型模拟的曲线拟合较好.ADE 拟合的绝对误差最大值为 1.57 g/L,平均误差为 0.49 g/L; LAF 拟合的绝对误差最大值为 0.62 g/L,平均误差为 0.13 g/L.这可能是由于 ADE 模型中弥散度设为恒定值,而 LAF 模型中弥散度设为变量.在实验室尺度下,弥散度的变化不可忽略.所以,LAF 模型模拟的穿透曲线精度较好,与实验值更加吻合.

4 结论

通过实验和模拟研究,得出的主要结论如下:

(I)水力梯度和渗流速度呈线性关系,说明本实验在达西流下完成.

(II)尽管在水流满足达西定律范畴,采用将弥散度在小尺度实验中设定为定值的 ADE 模型,其拟合值与实验值存在一定差异,最大误差为 1.57 g/L,平均误差为 0.49 g/L.

(III)将弥散度处理为线性函数的 LAF 模型模拟精度有了较大提高,ADE 拟合的绝对误差最大值为 1.57 g/L, LAF 拟合的绝对误差最大值为 0.62 g/L.能够更好的模拟均质有限柱溶质运移过程.

这说明,在均质介质中弥散度在小尺度的实验条件下是变化的,弥散度为线性函数的 LAF 模型能够较好地模拟溶质在实验室小尺度下的溶质运移过

程.这个结论改变了传统的 ADE 模拟方法,提出了弥散度呈线性变化这一规律,为以后模拟小尺度模型提供了一种方法.

参考文献(References)

- [1] 魏峰,王全九,周蓓蓓.考虑尺度效应的瞬时输入溶质运移模型及解析解[J].农业工程学报,2014,30(16):129-135.
- [2] SHARMA P K, OJHA C S P, SWAMI D, et al. Semi-analytical solutions of multiprocess non-equilibrium transport equations with linear and exponential distance-dependent dispersivity [J]. Water Resources Management, 2015,29(14): 5255-5273.
- [3] GELHAR L W, WELTY W, REHFELDT K R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers [J]. Water Resources Research, 1992, 28: 1955 - 1974.
- [4] 王子亭.对流-弥散问题的随机过程方法[J].石油大学学报,1996,20(6):29-31.
- [5] GELHAR L W, WELTY C, REHFELDT K R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers [J]. Water Resources Research, 1992, 28(7): 1955-1974.
- [6] 黄康乐.多孔介质水动力弥散尺度效应研究—现状与展望[J].水文地质工程地质,1991,18(3):25-26.
- [7] PICKENS J F, GRISAK G E. Modeling of scale-dependent dispersion in hydrogeologic systems [J]. Water Resources Research, 1981, 17(6): 1701-1711.
- [8] PANG L P, HUNT B. Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2001, 53(1/2): 21-39.
- [9] VAN GENUCHTEN M Th, WIERENGA P J. Mass transfer studies in sorbing porous media I. Analytical solutions [J]. Soil Science Society of America Journal, 1976, 40 (4): 473-480.
- [10] 张德生.土壤溶质运移数学模型研究[D].西安:西安理工大学,2004.
- [11] 高光耀.考虑弥散尺度效应与不动水体的反应性溶质运移动力学模型及半解析解[J].水动力学研究与进展: A 辑,2010,25(2):207-208.
- [12] PANG L P, HUNT B. Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model [J]. Journal of Contaminant Hydrology,2001,53: 21 - 39.
- [13] VAN GENUCHTEN M T, PARKER J C. Boundary conditions for displacement experiments through short laboratory soil columns [J]. Soil Science Society of America Journal, 1984, 48: 703 - 708.
- [14] ZHOU L, SELIM H M. Scale-dependent dispersion in soils: An overview [J]. Advances in Agronomy, 2003, 80: 223 - 263.
- [15] YOU Kehua, ZHAN Hongbin. New solutions for solute transport in a finite column with distance-dependent dispersivities and time-dependent solute sources [J]. Journal of Hydrology, 2013,487: 97-97.