

# 基于单裂隙开度算法的溶质运移研究

吴 蓉,周志芳

(河海大学土木工程学院,江苏 南京 210098)

**摘要** 鉴于变异函数的优点,引用了 L. Smith 自回归过程随机模拟开度的方法,使研究区域的开度满足对数正态分布.利用对数正态分布密度函数的两个参量形成不同的开度,在此基础上从流量、纵向弥散系数及滞留时间三方面来研究开度对水流和溶质运移的影响.

**关键词** 开度;自回归过程;变异函数;溶质运移

**中图分类号** P64      **文献标识码** A      **文章编号** 1000-1980(2004)01-0087-04

近年来,国内外众多学者对单裂隙进行了室内、野外溶质运移的研究.例如,1999 年 A. K. Arturo 借助 CT 扫描仪观测了单裂隙的开度分布和溶质运动的路径,并采用挠动理论分析了弥散度;1999 年 P. A. Lapcevic 进行了野外单裂隙试验,从纵向、横向弥散度和基质内的分子扩散,对示踪剂在单裂隙地下水中的运移进行了研究;2003 年 Jaehyoung 采用阶跃式输入的 Moment 方法对弥散度进行了分析.这些学者都希望通过一系列单裂隙试验结果来解决裂隙岩体中的复杂问题.但是,仅仅从室内、野外的试验数据来获得理论性的结论是不够的,还要通过数值模拟的办法来研究单裂隙中的问题.

国外在数值模拟方面的研究卓有成效,1988 年 L. Moreno 在模拟单裂隙开度随机分布的基础上又研究了溶质运移与开度的关系,1995 年 S. P. Neuman 基于单裂隙的分形特点研究了弥散度与分形维数的关系,1999 年 P. A. Lapcevic 采用 Monte Carlo 方法分析研究示踪剂的运移规律.国内的众多学者主要采用分形原理和 Monte Carlo 方法对此进行了模拟和研究,但是运用随机方法分析溶质运移现象的较少,1995 年李国敏等研究了空隙介质的分形特征,并分析了分形维数与弥散度之间的关系.

单裂隙的非均质性、各向异性及各个方向的相关性是模拟单裂隙开度分布要充分考虑的三方面因素.在研究变开度对溶质运移数学模型的影响时,这三方面因素是关键因素,因而数值模拟方法十分重要.L. Smith 在对地下水水流进行随机分析时采用了自回归过程方法,此方法的优点是把变开度的结构性和随机性从理论上进行了统一,并充分考虑了非均质性、各向异性及相关性三方面因素.本文运用此方法从单裂隙的非均质性、各向同性及各个方向的相关性对模拟单裂隙开度分布进行了分析,并从流量、纵向弥散系数及滞留时间三方面来研究开度对溶质运移的影响,解释单裂隙中出现的沟槽流现象.

## 1 张开度的求解

通常,裂隙面上粗糙不平的曲面可看成一种平稳的随机过程,本文开度  $b(x)$  采用对数正态分布函数,其均值为  $\mu_b = \exp(\mu + \sigma^2/2)$ ,方差  $\sigma_b^2 = \exp(2\mu + \sigma^2) [\exp(\sigma^2) - 1]$ ,其中,  $\mu$  和  $\sigma^2$  分别为正态分布中的均值和方差.令  $Y = \ln b$ ,在谱分析中,假定开度的自斜方差函数为一指数形式<sup>[1]</sup>:

$$R_Y(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\omega\tau) S(\omega) d\omega = \sigma^2 \exp(-\tau/\lambda) \tag{1}$$

式中:  $S(\omega)$  ——谱;  $\sigma^2$  ——  $Y$  的方差;  $\tau$  ——空间上的间隔距离;  $\lambda$  ——积分尺度,也是随机变量的自相关长度.

由于  $Y = \ln b$ ,故  $Y$  满足正态分布.某一点  $Y_{i,j}$  值可由相邻域(见图 1)的参数求得<sup>[2]</sup>:

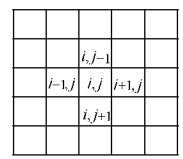


图 1 网格示意图  
Fig.1 Sketch of grids

$$Y_{i,j} = \phi_1 Y_{i-1,j} + \phi_2 Y_{i+1,j} + \phi_3 Y_{i,j-1} + \phi_4 Y_{i,j+1} + Z_{i,j}$$

(2)

式中: $\phi_1, \phi_2$ —— $Y_{i,j}$ 对*i*方向上相邻域的空间依赖程度; $\phi_3, \phi_4$ —— $Y_{i,j}$ 对*j*方向上相邻域的空间依赖程度.式(2)写成*p*阶线性矩阵形式为

$$WY = Z$$

(3)

式中: $W$ 为*p*×*p*阶矩阵,是自相关系数矩阵; $Z$ ——均值为零、方差为 $\sigma_\epsilon^2$ 的独立同分布随机变量序列,也称为白噪声.

当*Z*是满足正态分布的独立同分布的随机变量序列时,给定*W*,即可求得*Y*, $Y = W^{-1}Z$ .*Y*的均值为

$$E(Y) = E(W^{-1}Z) = W^{-1}E(Z) = 0$$

自斜方差矩阵:

$$\text{Cov}(Y) = E((Y - E(Y))(Y - E(Y))^T) = E(YY^T) = E((W^{-1}Z)(W^{-1}Z)^T) = (W^T W)^{-1}\sigma_\epsilon^2$$

(4)

比较式(1)和式(4):

$$(W^T W)^{-1}\sigma_\epsilon^2 = \sigma_Y^2 \exp(-\tau/\lambda)$$

(5)

求解式(5)便可得到积分尺度 $\lambda$ .

为了调节*Y*的均值和方差,对式(3)进行修正,令 $Y = W^{-1}\eta Z + \epsilon$ ,则*Y*的均值为 $\epsilon = \mu$ ,方差为 $\eta(W^T W)^{-1}\sigma_\epsilon^2 = \sigma^2$ ,即可以求得开度*b*的均值和方差.

2 溶质运移分析

模拟区域(见图1)上下两边为隔水边界,左边水头 $H_1 = 1\text{ cm}$ ,右边水头 $H_2 = 0$ ,左边取相对浓度 $C/C_0 = 1$ .从数学角度看,方差控制着估计区域的非均质程度,式(3)中的相关系数矩阵控制着模拟区域开度相互依赖的程度.因此,本文将从生成的不同随机数、*Y*的均值 $\mu$ 和方差 $\sigma^2$ 及积分尺度 $\lambda$ 三方面来模拟变开度.在此基础上分3种情况从流量*Q*、纵向弥散系数 $D_L$ 及滞留时间 $t_w$ 三方面分析开度对溶质运移的影响<sup>[3]</sup>.

根据文献[1]采用图解法求得 Peclet,再根据 $D_L = \alpha_L v$ 求得 $D_L$ .根据达西定律,平行板中的流量和滞留时间分别为

$$Q = \frac{1}{12\mu} \rho g b^3 L \Delta H \qquad t_w = b l_x l_y / \left( \frac{1}{2} \sum_j |Q_{ij}| \right)$$

(6)

式中: $l_x, l_y$ ——网格距; $\frac{1}{2} \sum_j |Q_{ij}|$ ——流经节点*i*的流量; $t_w$ ——溶质颗粒在网格中滞留的时间.

2.1 开度的 $\mu, \sigma$ 和积分尺度 $\lambda$ 不变时,生成不同的随机数(情况1)

均值 $\mu_b = 0.8\text{ mm}$ ,均方差 $\sigma_b = 0.293$ , $\mu = -0.125$ , $\sigma = 0.16$ , $\alpha_L = 0.031\text{ mm}$ ,积分尺度 $\lambda = 0.5L$ ,*L*为模拟区域的边长,结果见表1.

表1 随机数生成不同的模拟结果  
Table 1 Simulated results of different random values

| 模拟值 | a 组                               |                |                                       | b 组                               |                |                                       | c 组                               |                |                                       |
|-----|-----------------------------------|----------------|---------------------------------------|-----------------------------------|----------------|---------------------------------------|-----------------------------------|----------------|---------------------------------------|
|     | $Q/(\text{mL}\cdot\text{s}^{-1})$ | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL}\cdot\text{s}^{-1})$ | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL}\cdot\text{s}^{-1})$ | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2\cdot\text{s}^{-1})$ |
| 平均值 | 0.443                             | 0.064          | 0.0144                                | 0.483                             | 0.068          | 0.0154                                | 0.521                             | 0.068          | 0.014                                 |
| 最小值 | 0.075                             | 0.020          | 0.005                                 | 0.048                             | 0.019          | 0.005                                 | 0.052                             | 0.019          | 0.006                                 |
| 最大值 | 2.029                             | 0.163          | 0.047                                 | 1.635                             | 0.209          | 0.048                                 | 1.940                             | 0.202          | 0.048                                 |

可以看出,表1中生成的3组不同随机数(分别对应图2、图3中的*a, b, c*曲线),除*Q*值相差较大外, $D_L$ 和 $t_w$ 的平均值、最大值、最小值较为相近.*Q*值的差异对 $t_w$ 没有太大的影响,可以忽略.同时, $D_L$ 均值相近,平均流速也相近.这说明由不同随机数生成的开度对示踪剂运移的平均速度没有影响,即浓度相当时,示踪剂到达出口处的平均时间相近.从图2、图3可以看出,同一时刻进出口处的浓度曲线交织在一起,平均浓度相当,所以当开度的方差和均值一定时,生成的随机数不同对溶质运移的影响可以忽略.

2.2 积分尺度 $\lambda$ 不变时,改变 $\mu$ 和 $\sigma$ 值(情况2)

$\mu$ 和 $\sigma$ 值如表2所示. $\lambda = 0.1L$ , $\mu_b = 0.8\text{ mm}$ ,随着 $\mu$ 的减少, $\sigma$ 从0.43增加到1.31, $\sigma_b$ 逐渐增加,*Q*从0.342 mL/s逐渐减小到0.051 mL/s.这可以用开度分布函数来解释, $\sigma$ 越大,小开度的比例越大,开度越小,从而*Q*总体减小, $t_w$ 增加.同时,随着 $\mu$ 的减少,以及 $\sigma$ 和 $\sigma_b$ 的增加, $\alpha_L$ 减小,但是,由于平均流速只与 $\mu_b$ 有

关,所以  $\mu_b$  不变平均流速也不变,则  $D_L$  随着  $\alpha_L$  的减小而减小.

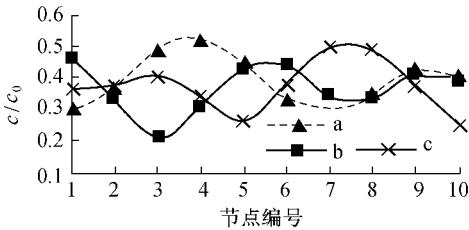


图 2 情况 1 初始时刻进口 0.1L 处的浓度分布

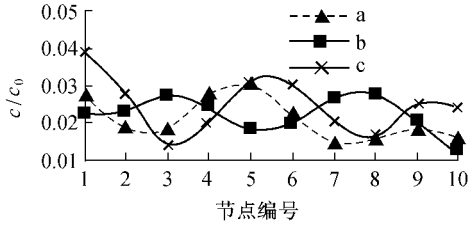


图 3 情况 1 t 时刻出口处的浓度分布

Fig.2 Concentrated distribution for initial time at 0.1L away from inlet Fig.3 Concentration distribution for moment t at outlet

表 2 开度分布函数  $\mu, \sigma$  值不同的模拟结果

Table 2 Simulated results under different values of  $\mu$  and  $\sigma$  of aperture distribution function

| 模拟值 | a 组 ( $\mu = -1.059, \sigma = 1.31, \sigma_b = 1.37, \alpha_L = 1.478 \text{ mm}$ ) |                |                                         | b 组 ( $\mu = -0.473, \sigma = 0.69, \sigma_b = 0.76, \alpha_L = 0.232 \text{ mm}$ ) |                |                                         | c 组 ( $\mu = -0.318, \sigma = 0.43, \sigma_b = 0.42, \alpha_L = 0.035 \text{ mm}$ ) |                |                                         |
|-----|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|
|     | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                                                 | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                                                 | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                                                 | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ |
| 平均值 | 0.342                                                                               | 0.105          | 1.673                                   | 0.299                                                                               | 0.325          | 0.264                                   | 0.051                                                                               | 28.623         | 0.024                                   |
| 最小值 | 0.036                                                                               | 0.021          | 0.595                                   | 0.003                                                                               | 0.017          | 0.028                                   | 7.4                                                                                 | 0.045          | 0.005                                   |
| 最大值 | 1.475                                                                               | 1.270          | 6.587                                   | 2.676                                                                               | 3.096          | 0.770                                   | 0.084                                                                               | 305.1          | 0.066                                   |

图 4 的浓度曲线均值,从曲线 a 到曲线 c 逐渐下降,3 条曲线的变化与  $D_L$  的变化相符.出口处曲线(图 5)也说明了这一点(c 曲线的  $D_L$  很小,故图 5 中未画出), $D_L$  越大, $t_w$  越小,示踪剂到达出口的速度越快.图 4 中每条曲线的变幅较大,正是因为开度分布不均,大开度区域较小开度区域对流弥散的速度快,所以形成了图 4 每条曲线变幅较大.图 5 中 b 曲线右段浓度接近 a 曲线,b 曲线的开度分布图可以说明虽然 a,b 曲线的  $D_L$  相差大,但是当大开度区域的连通性较好时会形成一条示踪剂运动的快速通道,使浓度增加.

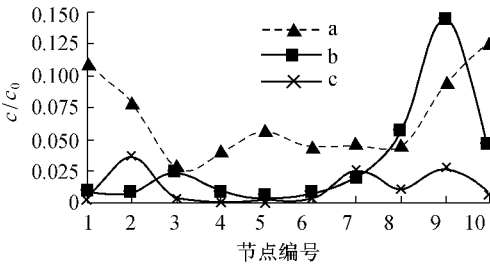


图 4 情况 2 初始时刻进口 0.1L 处的浓度分布

Fig.4 Concentration distribution for initial time at 0.1L away from inlet

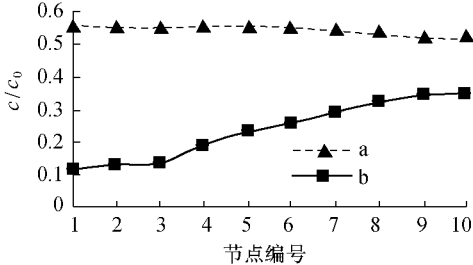


图 5 情况 2 t 时刻出口处的浓度分布

Fig.5 Concentration distribution for moment t at outlet

2.3 开度的  $\mu$  和  $\sigma$  不变时,改变积分尺度  $\lambda$  (情况 3)

$\mu$  约为  $-0.43$ ,  $\sigma$  约为  $0.67$ ,  $\sigma_b$  约为  $0.73$ ,  $\mu_b = 0.8 \text{ mm}$ ,积分尺度  $\lambda$  见表 3.在表 3 中,随着  $\lambda$  的增加, $Q$  和  $D_L$  亦增加,  $t_w$  随之减小.因此,随着  $\lambda$  增加,同一时刻出口的浓度平均值应存在着增加的趋势,从图 7 看到,曲线 a 和 b 确实如此,同一时刻曲线 c 的浓度值比曲线 a 和 b 的浓度值大得多.当曲线 a 和 b 的  $D_L$  变化不大时,可以看出,图 6、图 7 中 a 和 b 的浓度曲线接近,说明  $\lambda$  变化不大时对开度影响也不大.

表 3 积分尺度  $\lambda$  不同的模拟结果

Table 3 Simulated results under different integral scales of  $\lambda$

| 模拟值 | a 组 ( $\lambda = -0.1L, \alpha_L = 0.262 \text{ mm}$ ) |                |                                         | b 组 ( $\lambda = 0.2L, \alpha_L = 0.523 \text{ mm}$ ) |                |                                         | c 组 ( $\lambda = 0.5L, \alpha_L = 1.308 \text{ mm}$ ) |                |                                         |
|-----|--------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|-------------------------------------------------------|----------------|-----------------------------------------|
|     | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                    | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                   | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ | $Q/(\text{mL} \cdot \text{s}^{-1})$                   | $t_w/\text{s}$ | $D_L/(\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1})$ |
| 平均值 | 0.421                                                  | 0.270          | 0.298                                   | 0.315                                                 | 0.175          | 0.549                                   | 0.783                                                 | 0.146          | 1.702                                   |
| 最小值 | 0.001                                                  | 0.018          | 0.051                                   | 0.011                                                 | 0.020          | 0.092                                   | 0.008                                                 | 0.012          | 0.136                                   |
| 最大值 | 2.506                                                  | 4.270          | 0.616                                   | 1.739                                                 | 1.243          | 1.964                                   | 5.025                                                 | 0.693          | 4.791                                   |

综合以上 3 种情况,比较表 2 和表 3 可知,  $t_w$  和  $D_L$  受随机数影响不大,与  $\lambda, \sigma_b$  成正比例关系,且受  $\sigma_b$  的影响较受  $\lambda$  的影响大.图 2、图 3 中 3 条浓度曲线均值变化不大,说明不同的随机数对溶质运移没有影响.

2.2 节中,  $\sigma_b$  值变大, 相应的曲线浓度最大变幅为 20% ~ 30%;  $\sigma_b$  越大, 曲线变幅越大. 其中原因在于:  $\sigma_b$  越大, 开度的差异越大, 相同水头差条件下流速变化也越大, 所以形成的浓度变幅越大, 因而沟槽流明显.

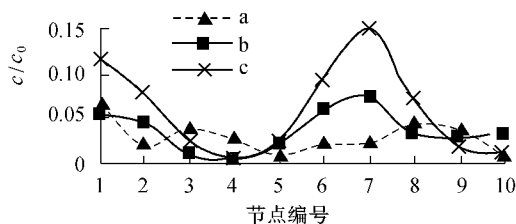


图6 情况3 初始时刻进口 0.1L 处的浓度分布

Fig.6 Concentration distribution  
for initial time at 0.1L away from inlet

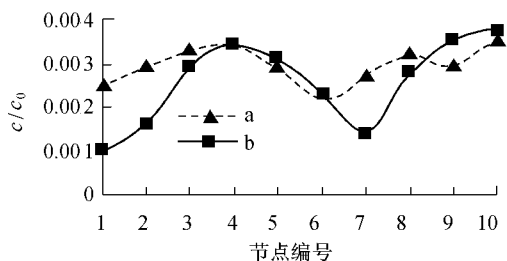


图7 情况3 初始时刻出口处的浓度分布

Fig.7 Concentration distribution for initial time at outlet

### 3 结 论

尽管本文对单裂隙变开度的随机模拟实现只考虑了各向同性的情况,但是,应用这种方法模拟各向异性的情况同样是可行的<sup>[4]</sup>,可以说它是一种有效的模拟计算方法.本文对进口、出口处示踪剂的流量情况、浓度分布进行了描述,讨论了溶质运移受开度模拟参数的影响情况,得到的结论与 L. Moreno 等人对单裂隙模拟研究溶质运移得到的结论<sup>[5]</sup>是一致的.方差的影响程度较积分尺度的影响程度大.此外,从总体上证实了变开度与平行板溶质运移的特点有很大差异.对于变开度的情况存在着沟槽流现象,此时裂隙中的溶质运移严格地受平行板接触程度的影响.

最近十几年来,单裂隙地下水运移的随机模拟研究是一个十分活跃的研究领域,许多国家的学者都致力于这方面的研究,并且取得了丰硕的成果.然而,单裂隙岩体中示踪剂运移特征的研究需要对单裂隙自身的特征进行描述,必须在随机性模拟分析的基础上考虑到确定性特征,这并不是一件简单的事情.如何结合确定性数据、随机性数据和描述性地质信息,考虑弥散度的尺度效应和空间相关性,从而解决单裂隙开度的统计特征与弥散度的定量关系,这一问题有待进一步研究.

### 参考文献:

- [1] BROCKWELL P J, DAVIS R A 著. 时间序列的理论与方法[M]. 田铮译. 北京: 高等教育出版社, 2001. 55.
- [2] SMITH L, FREEZE R A. Stochastic analysis of steady groundwater flow in a bounded domain 2. Two-dimensional simulations[J]. Water Resour Res, 1979, 15(6): 1543—1559.
- [3] LEE J. Experimental analysis on the effects of variable apertures on tracer transport[J]. Water Resour. Res., 2003, 39(1): 7.
- [4] TSANG C F, TSANG Y W, HALE F V. Tracers transport in fractures: analysis of field data based on a variable-aperture channel model [J]. Water Resour Res, 1991, 27(12): 3095—3105.
- [5] MORENO L, TSANG Y W, TSANG C F, et al. Flow and tracer transport in a single fracture: a stochastic model and its relation to some field observations[J]. Water Resour Res, 1988, 24(12): 2033—2048.

## Stochastic single fissure aperture simulation-based research of solute transport

WU Rong, ZHOU Zhi-fang

(College of Civil Engineering, Hohai Univ, Nanjing 210098, China)

**Abstract:** Based on the advantages of the variogram, the autoregression process for aperture simulation developed by L. Smith is adopted for solution of the aperture of single fissures, which accords with the log-normal distribution. Different apertures are formed with the two parameters of the log-normal density function, and the effects of the aperture on water flow and solute transport are studied from the angles of flow rate, longitudinal dispersivity, and retention time.

**Key words:** aperture; autoregression process; variogram; solute transport