

用随机方法研究地下水溶质传输概况

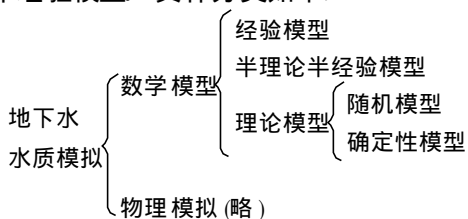
陈守伦 潘海英

(河海大学水力发电工程系 南京 210098)

摘要 地下水系统中溶质传输机理是一个十分复杂的问题,产生这一现象的根本原因在于水文地质结构的复杂性。近十年来,人们试图通过建立随机数学模型来解决它。本文通过介绍这一领域研究成果,阐述这种模型的建立过程、约束条件和主要变量的概率表达形式,讨论其应用范围及存在问题,在此基础上,对有关扩散系数的典型成果加以分析。

关键词 随机数学模型 地区尺度 概率分布 扩散系数

地下水系统中的溶质传输是一种物理、化学和生物学等方面的复杂联合作用过程,对这一问题的研究可通过地下水水质数学模拟来实现。根据推导过程的不同,大致可分为以下几种类型^[1]: 理论模型、经验模型、半理论半经验模型。具体分类如下:



按传统途径,通过均匀介质的溶质传输常结合实验室试验来确定某些参数,这是因为假设浓度 C 满足对流-弥散方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V_j \frac{\partial C}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} (D_{jl} \frac{\partial C}{\partial x_l}) \quad (1)$$

而 C 随时间 t 的变化可以在实验室中测得,因此可以得到试验条件下的弥散系数 D_{jl} ,然后假设此方程适用于自然结构中大范围溶质传输,仅将弥散系数 D_{jl} 作相应的放大并用于野外自然结构。在实际操作中常将 D_{jl} 分解为两部分,即纵向分量 D_L 和横向分量 D_T ,且用 $D_L = D_0 + U^2 L$ 和 $D_T = D_0 + U^2 T$ 来表示

野外的一些试验表明,溶质作大扩散时,有效分子扩散系数 D_d 和实验室测得的值相比,要高出几个数量级^[2]。另外,弥散度 Γ 将随溶质传输时间延续而增长,即它是时变量。更为重要的是传输方程的解是在渗透速度场基础上得到的,而在非均质含水层中,速度场和水力传导特性有关,都是非确定性的变量,所以浓度分布也被视为具有随机性。在这种情况下,仍以某一确定性模型来描述这种现象,显然不合理。于是人们就提出以随机方法来研究这种无规则的质点运动,目的是通过建立随机模型表达影响传输的主、次要因素,提供计算溶质浓度空间分布和时间演变统计特性的数学工具。本文重点介绍的是溶质浓度 C 的统计特性,建立起浓度场 C 和水力传导系数 K 、介质孔隙度 n 之间的统计关系。

1 随机理论数学模型建立过程

1.1 概 要

假设本文讨论的流动为饱和、非恒定流,溶质为低浓度、不腐蚀的物质,含水层为非均匀多孔介质。目前,研究人员将野外多孔介质非均匀尺度划分成局部型和区域型两种情

况^[4,5]。所谓局部型是指水力传导系数 K 的空间变化范围在垂向和水平向均为含水层厚度数量级,其非均匀尺度为米的数量级,在此范围内 K 值是相关的;区域型尺度是指整个含水层规模,其水平方向展延可达数千米,远远大于厚度量级,在垂向,流动参数常取平均值,将流动处理为二维问题,空间点的特性用点的导水率来表示,可由抽水试验来确定。本文将讨论局部非均匀尺度。

据文献^[5,6]介绍,大量野外试验显示水力传导系数 K 可以用随机变量来表示,一般写成 $Y = \ln K$ 形式,而 Y 呈稳定正态型分布,在直角坐标系中协方差 $C_Y(X)$ 可表示为:

$$C_Y(x, y, 0) = \sigma_Y^2 \exp[-(x^2/I_1^2 + y^2/I_2^2)^{1/2}]$$

$$C_Y(0, 0, z) = \sigma_Y^2 \exp(-|z|/I_3) \quad (2)$$

式中 $X(x, y, z)$ 是空间二点间的向量; σ_Y^2 是方差; I_1, I_2 是水平面内相关比尺; I_3 是垂向相关比尺。

1.2 泰勒连续运动扩散理论^[7]

假设 $t = t_0$ 时,将浓度为 C_0 的一团溶质注入到体积 V_0 的多孔介质中去,而周围浓度为 $C = 0$,溶质将随流体运动并逐渐扩散到含水层中,然后寻求 $t > t_0$ 时的浓度场。依据该理论,将溶质颗粒视为具有质量 $dM = n_0 C_0 da$ 的无穷小,其初始向量 $a = X(t_0; a, t_0)$,并沿轨迹线 $x = X(t; a, t_0)$ 运动。由此可以得到浓度分布 ΔC 和颗粒位移关系,即:

$$\Delta C(x, t, a, t_0) = dM W(x - X) / n$$

$$= \sigma_0 W(x - X) da n_0 / n \quad (3)$$

式中 W 为狄拉克分布,在体积 V 内,平均浓度可表示为

$$\bar{C}(x, t, t_0) = \frac{1}{V} \int_V C(X', t) dX'$$

$$= \frac{1}{V} \int_V \int_{V_0} \Delta C(X', t; a, t_0) da dX'$$

$$= \frac{C_0}{V} \int_V \int_{V_0} W[X' - X(t; a, t_0)] da dX' \quad (4)$$

若设 $f(X, t; t_0, a)$ 为位移 X 的概率密度函数

(p, d, f) , 则 $f dX$ 是颗粒起始于 $X = a (t = t_0)$ 至 t 时刻位于 dX 内的概率,由期望值定义,从式 (3) 中可得到

$$\Delta C = f(X, t; t_0, a) dM / n \quad (5)$$

可见浓度期望值由颗粒迹线的 P, d, f 确定,它是 X 和 t 的函数,位移 X 的密度函数常用多变量正态分布函数来表示,即

$$f(X, t; t_0, a) = \frac{1}{(\pi)^m |X_{jl}|} \cdot \exp[-\frac{1}{2} \sum \sum (X_j - \langle X_j \rangle) \cdot (X_l - \langle X_l \rangle) X_{jl}^{-1}] \quad (6)$$

在稳态条件下,协方差 $X_{jl} = \langle X_j' \cdot X_l' \rangle$ 是由时间滞后 $(t - t_0)$ 决定的,若取 $t_0 = 0$ 则 $X_{jl} = X_{jl}(t)$ 。上式中 m 为流场维数, $|X_{jl}|$ 为协方差行列式, X' 为位移残差 $X - \langle X \rangle$ 。至此,已建立起浓度期望值 $\langle \Delta C \rangle$ 和位移 X 的密度函数之间的关系,而泰勒理论主要讨论 $f(X)$ 和流场的关系,所以还必需建立起位移和欧拉速度场关系。

1.3 溶质传输和欧拉速度场关系

首先设 $V(X, t)$ 为欧拉速度场,并有 $V = U + u(x, t) = V + u(x, t)$, 其中 U 是由 t 确定的随机空间函数,而 $X = X + X_d$, X 和 X_d 分别由对流和分子扩散的布朗运动产生的位移。由此可导出

$$\frac{dX_l}{dt} = U + u(X_l, t) + \frac{dX_d}{dt} \quad (7)$$

$$\frac{dX}{dt} = U + u(X_l, t) = U + \frac{dX'}{dt}$$

由上式可见,协方差 X_{jl} 不能从 u 的统计矩中直接求出,因此人们试用各种方法来解决此问题,其中较有成效的方法是谱分析,即通过 u 的傅里叶变换获得溶质质点位移协方差和欧拉速度场的傅里叶变换关系^[8]。为简化,现将结果整理如下:

$$\frac{d^2 X_{jl}}{dt^2} = \frac{2}{(\pi)^m} \iint \tilde{w}(K') \cdot 0$$

$$\tilde{w}^*(K'', t) e^{iK'' \cdot X'} \times \exp(iK' \cdot \langle X \rangle)$$

$$- D_{d,pq} K_p'' K_q''(t) dK' dK'' \quad (8)$$

($j, l = 1, 2, \dots, m; m = 2$ 或 3)

公式 (8) 是研究传输问题的基本公式, 在不同约束条件下可导出不同结果, 本文仅讨论两种含水层情况。

1.3.1 分层含水层

在水力梯度平行于不同传导系数的各层含水层中, 溶质沿流线对流, 侧向混合是通过孔隙尺度扩散形成的, 具有随机特性的 K 值仅是 Z 的函数。文献 [9, 10] 分别对有限厚度和无界分层情况进行了分析, 这些研究均涉及 Taylor-Aris 约束。若令 $L = Ut$ 为质点水平传输距离, 对 $L/B \gg B/L_T$ 情况, 可以实现通过孔隙尺度扩散使整个含水层达到完全侧向混合。在自然结构中由于弥散度 T_r 很小, 受约束传输距离 $L (\gg B^2/L_T)$ 很大, 在这种范围内要保持连续不变的分层结构几乎不可能, 因而传输应该是二维或三维的, 分层仅是一种特殊情况, 文献 [10] 的研究成果反映了这种特殊情况。通过式 (8) 也可以获得这种简化解, 即:

$$\frac{d^2 X_{11}}{dt^2} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{U}_{11}(K) \exp(iKvt) - D_T K^2 t) dK \quad (9)$$

1.3.2 二、三维非均匀含水层

当公式 (8) 应用在二、三维含水层时, 可令 $X' = 0$, 从而有:

$$\frac{d^2 X_{jl}}{dt^2} = \frac{2}{(\pi)^m} \iint \langle \hat{U}_j(K', 0) \hat{U}_l^*(K'', t) \rangle \cdot \exp[iK'' \cdot \langle X \rangle - D_{d,pq} K_p'' K_q''(t)] dK' dK'' \quad (10)$$

以积分变换 $\langle \hat{U}_j(K', 0) \hat{U}_l^*(K'', t) \rangle = (\pi)^{m/2} \hat{U}_{jl}(K'', t) W(K' - K'')$ 代入上式, 有:

$$\frac{d^2 X_{jl}}{dt^2} = \frac{2}{(\pi)^{m/2}} \int \hat{U}_{jl}(K, t) \cdot \exp[iK \cdot \langle X \rangle - D_{d,pq} K_p K_q t] dK \quad (11)$$

这是一个适用于非均匀、时间相关流的通用公式, 文献 [11] 中介绍了数值模拟结果和式

(11) 的比较, 结果收敛于速度谱。当流动稳定, 平均速度为常数时, 式 (11) 又可简化为

$$\begin{aligned} \frac{d^2 X_{jl}}{dt^2} &= \frac{2}{(\pi)^{m/2}} \int \hat{U}_{jl}(K) \exp(iK \cdot ut) \\ &\quad - D_{d,pq} K_p K_q t) dK \\ &= \frac{2}{(\pi)^{m/2}} \iint U_{jl}(X') \exp[-iK \\ &\quad \cdot (X' - ut) - D_{d,pq} K_p K_q t] dK dX' \end{aligned} \quad (12)$$

2 非均匀结构特性对模型的影响

2.1 欧拉速度场和非均匀结构关系

在建立了欧拉速度场与浓度关系后, 要建立非均匀结构和浓度场关系, 先要建立欧拉速度场和非均匀结构关系。为此, 考虑一多孔介质, 区域为 K , 过界为 E , 其流动方程为

$$q = -K \nabla H; \quad \nabla \cdot q = 0 \quad (13)$$

若定义水头波动为 $h = H - J^0 \cdot X$, 利用 $H = \frac{p}{r} + Z$ 和 $V = q/h = -K \nabla H/h$ 以及 $K = \ln Y$ 等关系, 消去式 (13) 中之 q , 则有

$$\nabla^2 h + \nabla Y \cdot \nabla h = J^0 \cdot \nabla Y \quad (X \in K); \quad h = 0, \quad (X \in E) \quad (14)$$

在均匀介质中 $\nabla Y = 0$, 所以流动也是均匀的。若假设 Y 是一稳态随机函数, 且具有给定的期望值 $\langle Y \rangle$ 和两点协方差 $C_Y(X'', X''')$, 方程 (14) 在两种情况下可以解出结果。

2.1.1 分层含水层

设流动发生在 $X \sim Z$ 平面, 水平流速 $v = U + u$, 竖向流速 $v_z = V$, 按达西定律 $U = K_A J_x/h$; $v = K_H J_z/h$; $u = K' J_x/h$, 此处 $K_A = \langle K \rangle$ 为算术平均数; $K_H = \langle K^{-1} \rangle^{-1}$ 为调和平均数; $K' = K - \langle K \rangle$, 速度二阶矩为

$$\langle V \rangle = U; \quad \langle V^2 \rangle = V;$$

$$\begin{aligned} u_{11}(Z) &= J_x^2 C_K(Z)/h^2 \\ &= U^2 C_K(Z)/K_A^2 \end{aligned} \quad (15)$$

而 $u_{12} = u_{22} = 0$, $C_K(Z)$ 是稳态随机变量 $K(Z)$ 的协方差。结合式 (15) 和式 (9) 就可以求解分层含水层溶质传输问题。

2.1.2 二 三维非均匀含水层

在这种条件下,需对 ϵ^2 作一阶近似,即可建立起速度场和非均匀结构间关系,且不影响精度 为此对式 (14)进行线性化

$$\nabla^2 h = J \cdot \nabla Y \quad (X \in K);$$

$$h = 0 \quad (X \in E) \quad (16)$$

采用格林函数 $G(X'', X''')$ 可以表达其解如下

$$H(X) = -J \cdot \int_K \nabla Y'(X') G(X, X') dX'$$

$$= J \cdot \int_K Y'(X') \nabla G(X, X') dX' \quad (17)$$

若对式 (13)进行线性化处理,可得

$$\langle V \rangle = U = \frac{1}{n} e^{i\eta} J,$$

$$u = V - U = \frac{1}{n} e^{i\eta} (Y'J - \nabla H) \quad (18)$$

联立式 (17), (18)可获得含水层非均匀特性和流速场的关系,

$$\hat{U}_j(K) = U_p U_q (W_{pj} - \frac{K_j K_p}{K^2})$$

$$\cdot (W_q - \frac{K_q K_l}{K^2}) \hat{C}_Y(K) \quad (19)$$

2.2 溶质传输和非均匀结构特性关系

在建立了欧拉速度场和浓度、非均匀结构关系前提下,就能获得浓度场的时、空分布,以及浓度场和含水层统计特性之间的关系,为此分两类情况讨论

2.2.1 分层含水层

设流动平行于含水层,即有 $J_z = 0$,对式 (9)中 t 积分,则有

$$\begin{cases} \frac{dX_{11}}{dt} = (\frac{2}{\pi})^{1/2} \frac{1}{D_T} \int_{-\infty}^{\infty} u_{11}(K) \\ \frac{1 - \exp(-K^2 D_T t)}{K^2} dK \\ \frac{dX_{t,11}}{dt} = \frac{dX_{11}}{dt} + D_L \end{cases} \quad (20)$$

当水力传导积分模数 $I = (1/\epsilon^2) \int_0^\infty C_K(z) dz$,

而 $D_L t / l^2 \ll 1$ 时,则有

$$\frac{dX_{11}}{dt} = \frac{2J_x^2 \epsilon_K^2 t}{n^2} = 2 \frac{\epsilon_K^2}{K_A^2} U^2 t,$$

$$D_{11} = \frac{1}{2} \frac{dX_{11}}{dt} = \frac{\epsilon_K^2}{K_A^2} U^2 t \quad (21)$$

这就是著名的泰勒短时约束条件,说明扩散系数随时间线性增加。在长时约束 $D_T t / l^2 \gg 1$ 条件下,式 (20)中 $K \rightarrow 0$,则有 Matheron 和 de Marsily 的近似结果^[10],即

$$\frac{dX_{11}}{dt} = \frac{4}{\pi} \cdot \frac{\epsilon_K^2}{K_A^2} U^2 (\frac{l^2 t}{D_T})^{1/2} \quad (22)$$

此式表明扩散系数随 $\sqrt{t}$ 线性增大,这显然不是费克型传输。但是,当流动与 x 轴倾斜时,即 $J_x \neq 0$,仍可进行类似分析,并获得如下结论:在短时约束时,结论同前,横向流动不影响传输;长时约束时,近似解为

$$\frac{dX_{11}}{dt} = 2 \frac{\epsilon_K^2}{K_A^2} \cdot \frac{UJ}{V} \quad (23)$$

可见,倾斜于层面的流动属费克型传输。

2.2.2 二 三维非均匀含水层

二、三维非均匀含水层中溶质传输问题是目前研究的重点,也更接近于自然界真实情况。Dagan 和 Gelhar & Axness^[12] 都进行过系统的研究,两者都对流场和浓度场作了一阶近似,但其结论不同。前者应用拉格朗日法,采用格林函数形式,其结果较适用于各向同性多孔介质;而后者应用欧拉法,并假设有一渐近无限时域,采用谱分析计算有效扩散系数,其结论更适合各向异性多孔介质。它们本质上都基于同一基本公式,仅求解途径不同,若联立式 (12), (19),可得到

$$\frac{d^2 X_{jl}}{dt^2} = \frac{2}{(2\pi)^{m/2}} U_p U_q \int (W_{pj} - \frac{K_j K_p}{K^2})$$

$$\cdot (W_q - \frac{K_l K_q}{K^2}) \hat{C}_Y(K)$$

$$\cdot \exp(iK U t - D_{d,pq} K_p K_q t) dK \quad (24)$$

假设各种约束条件;并对上式积分,可得一系列结果,现忽略推导过程,将积分结果列在附表之中。

附表 两种模型 (Dagan和 Gelhar& Axness)成果对比表

模 型		三 维	二 维
Dagan	短时约束 $tU/l \ll 1$	$X_{l,11} \rightarrow \frac{8}{15} \frac{e^2}{\gamma} U^2 t^2 + 2D_L t$ $X_{l,22} \rightarrow \frac{1}{15} \frac{e^2}{\gamma} U^2 t^2 + 2D_T t$	$X_{11} \rightarrow \frac{3}{8} \frac{e^2}{\gamma} U^2 t^2$ $X_{22} \rightarrow \frac{1}{8} \frac{e^2}{\gamma} U^2 t^2$
	长时约束 $tU/l \gg 1$	$X_{l,11} \rightarrow 2 \frac{e^2}{\gamma} U l t + 2D_L t$ $X_{l,22} \rightarrow \frac{2}{3} \frac{e^2}{\gamma} l^2 + 2D_T t$	$X_{11} \rightarrow 2 \frac{e^2}{\gamma} U l t [1 - \frac{3}{2} \frac{\ln(tU/l)}{(tU/l)} + \dots]$ $X_{22} \rightarrow \frac{e^2}{\gamma} l^2 [\ln(tU/l) + \dots]$
Gelhar & Axness	$t \rightarrow \infty$	$D_{11} = \frac{1}{2} dX_{11} / dt = \frac{e^2}{\gamma} IU$ $D_{22} = D_{33} = \frac{1}{15} \frac{e^2}{\gamma} T_L (1 + 4 \frac{T_T}{T_L}) U$	$D_{11} = \frac{e^2}{\gamma} IU$ $D_{22} = D_{33} = \frac{1}{8} \frac{e^2}{\gamma} T_L (1 + 3T_T / T_L) U$

3 结 束 语

在非均匀结构中,水力传导特性空间分布呈现不稳定性,溶质在传输过程中的浓度分布无法直接用扩散方程来描述,因而人们转向以随机方式来描述它。大量野外试验成果表明,浓度期望值是由纵向和横向扩散所决定的,当传输距离相当长时(L 达到 $50l_T$ 以上的量级),扩散系数才趋近于某一常数值,这是一个重要的结论。本文介绍的随机数学模型基本思路是先建立非均匀结构和欧拉速度场的关系,再建立溶质传输和欧拉速度场关系,最后推导出非均匀结构和溶质传输关系,这也就是溶质在非均匀介质中传输的随机数学模型。在这种模型中,浓度场的时空分布是以一种特殊的方式来表达的,即用浓度场的期望值 $\langle C \rangle$ 和渗透系数 K 或导水系数空间统计矩的关系来描述浓度场。

参考文献

1 李俊亭,王愈吉.地下水动力学.北京:地质出版社,1987
2 Klotz D, et al. Dispersivity and velocity relationship from laboratory and field experiments. J Hydrol, 1980,45 169~ 184
3 Dagan G. Stochastic modeling of groundwater flow by unconditional and conditional probabili-

ty. Water Resour Res, 1982,18 813~ 833
4 Dagan G. Solute transport in heterogeneous porous formations. J Fluid Mech, 1984,145
5 Dagan G. Statistical theory of groundwater flow and transport. Water Resour Res, 1986, In press
6 Sudicky E A. Spatial variability of hydraulic conductivity at the Borden tracer site. Presented at Symp Stochastic Approach to Subsurf Flow, Int Assoc Hydrol Res, 1985, Montvillargeme, Fr.
7 Taylor G I. Dispersion of solubic matter in solvent flowing slowly through a tube. Proc R Soc, London Ser, 1953, A 219 186~ 203
8 Dagan G. A note on the higher-order corrections of the head covariances in steady aquifer flow. Water Resour Res, 1985,21 573~ 578
9 Gelhar L W, et al. Stochastic analysis of macrodispersion in a stratified aquifer. Water Resour Res, 1979, 15 1387~ 1397
10 Matheron G, de Marsily G. Is transport in porous media always diffusiv? A counterexample. Water Resour Res, 1980,16 901~ 917
11 Phythian R. Dispersion by random velocity fields. J Fluid, Mech 1975, 67 145~ 153
12 Gelhar L W, Axness C L. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifer. Water Resour Res, 1983

(收稿日期: 1994- 12- 08)