一维变密度溶质运移实验及参数推求

马建良[1],陈 喜[1],程勤波[2],宋 轩[2],鲍振鑫[2]

(1.河海大学水文水资源与水利工程科学国家重点实验室,江苏 南京 210098;2.河海大学水文水资源学院,江苏 南京 210098)

摘要:通过室内土柱注水实验,观测沙质土壤中氯离子浓度的变化过程。以变密度水流连续性方程、溶质运移方程和达西方程为基础,运用有限单元法和差分法对这 3 个方程进行联立求解,建立了一维变密度水流和溶质运移数值模型。利用实验数据反求变密度渗透系数、弥散系数等水动力参数。

关键词:变密度水流;一维对流—弥散方程;土柱实验;海水入侵

中图分类号:O351.2 文献标识码:A 文章编号:1004-6933(2008)03-0008-04

Identification of hydrodynamic parameters based on one-dimensional variable density and solute transport numerical model

MA Jian-liang[1], CHEN Xi[1], CHENG Qing-bo[1], SONG Xuan[2], BAO Zhen-xin[2]

(1. *State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering, Hohai University, Nanjing* 210098, *China*; 2. *College of Hydrology and Water Resources, Hohai University, Nanjing* 210098, *China*)

Abstract: The concentration of chloride ions in sandy soil was observed through water-filling soil column tests in the laboratory. A one-dimensional numerical model for groundwater flow of variable density and solute transport was developed on the basis of equations of variable density groundwater flow and solute transport as well as Darcy's Law. The equations were solved using the finite element and finite difference methods. The hydrodynamic parameters for variable density flow, such as infiltration coefficients and dispersion coefficients, were calibrated against the observed data.

Key words: variable density groundwater flow; one-dimensional convection-diffusion equation; soil column experiment; seawater intrusion

20 世纪 70 年代以来我国沿海地区陆续出现海水入侵。进入 80 年代中期,随着沿海地区工农业生产的迅速发展,地下水开采日益增加,致使海水入侵范围迅速扩大。山东的龙口、莱州、昌邑、寿光,辽宁的大连,河北的秦皇岛,浙江的宁波和广西的北海等沿海城市相继出现较为严重的海水入侵,严重影响这些地区社会经济发展[1]。

海水入侵规律分析以及数学模型研究可以追溯到 19 世纪末。Ghyben 和 Herzberg 分别发现咸淡水突变界面,并估算出咸淡水界面水头约为淡水水头的 40 倍。Hubbert 根据压力平衡求解出突变界面数学表达式。Bear 和 Wheatcraft 等许多学者探讨突变界面问题的解析解。20 世纪 60 年代中期提出以混溶流体溶质运移弥散理论为基础的对流—弥散模型,模拟海水入侵动态变化过程。

随着现代数值计算和计算机发展,20 世纪 70 年代起建立一系列二维、三维数值计算模型,应用在纽约长岛、夏威夷和墨西哥城等地,取得良好的效果。薛禹群等[2]结合山东龙口滨海含水层野外实验数据,建立三维变密度水流特征有限元模型,成功地分析海水入侵规律。成建梅等[3]结合烟台夹河地区野外实验数据,建立三维变密度过渡带改进特征有限元数值模型。模型参数的准确估算是海水入侵模拟研究的关键,由于数值模型涉及众多参数,仅靠数值模拟反演求参数仍存在很多不确定性,为此,利用实验手段分析海水入侵规律、确定模型参数,可以为

基金项目:国家自然科学基金(50679025)、教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET-04-0492)、高等学校学科创新引智计划(B08048)

作者简介:马建良(1982—),男,山东乐陵人,硕士研究生,研究方向为地下水数值模拟。E-mail:maliang@hhu.edu.cn

较大范围海水入侵模拟研究提供参考依据。笔者通过室内土柱实验,观测 Cl^- 离子在饱和土柱中运移过程,建立一维变密度水流运动和溶质运移数学模型,并进行反演有效孔隙度、弥散度等水动力参数。

1 变密度水流、溶质运移基础理论和计算方法

1.1 基本方程

在海水入侵时会因为浓度差异引起混溶液体的水动力弥散,液体浓度的变化引起密度的改变,从而影响水头的变化,变密度水流运动方程

$$\frac{\partial\left[K\left(\frac{\partial H}{\partial x}+\eta c\right)\right]}{\partial x}=S_s\frac{\partial H}{\partial x}+n_e\eta\frac{\partial c}{\partial t}-\frac{\rho}{\rho_o}q \quad (1)$$

$$H=\frac{P}{\rho_0 g}+Z \qquad H^*=\frac{P}{\rho g}+Z$$

$$\rho=\rho_0\left(1+\varepsilon\frac{c}{c_s}\right)=\rho_0(1+\eta c)\ [4]$$

$$\eta=\varepsilon/c_s \qquad \varepsilon=(\rho-\rho_0)/\rho$$

$$S_s=\rho g(\alpha+n_e\beta)\ [5]$$

式中:K 为多孔介质的渗透系数;H 为参考水头(淡水水头);ρ_0 为淡水密度;H^* 为实际水头;c 为混合溶液中 Cl^- 浓度;ρ 为混合溶液的密度;η 为密度耦合系数;c_s 为海水中的 Cl^- 浓度;ε 为密度变化率;n_e 为有效孔隙度;S_s 为贮水率,随浓度线性变化;α 为多孔介质压缩系数;β 为液体体积压缩系数;$\alpha+n_e\beta$ 为一个常数;q 为单位体积多孔介质的流量。

由式(1)可知,土柱中的变密度水流运动不仅取决于压力水头,还与海水中的 Cl^- 浓度有关,其在饱和土柱中运动可以采用下列一维对流—弥散方程:

$$\frac{\partial\left[D\frac{\partial c}{\partial x}\right]}{\partial x}-\frac{\partial(vc)}{\partial x}+\frac{q}{n_e}c=\frac{\partial c}{\partial t} \quad (2)$$

式中:D 为弥散系数,v 为多孔介质平均流速。

方程(1)、(2)描述了变密度水流和 Cl^- 溶质运移的一维数学模型,这是一个非线性模型,要求解此模型还需通过达西运动方程来进行耦合求解:

$$v=\frac{k\rho_o}{n_e\mu}\left(\frac{\partial H}{\partial x}+\eta c\right) \quad (3)$$

$$K=\frac{k\rho}{\mu}$$

式中:k 为渗透率,取决于多孔介质特性,不随溶液浓度变化;μ 为动力黏滞系数,$\mu\sim c$ 关系[6]如图 1 所示。

方程(1)、(2)、(3)将密度、水头与浓度分布有机地耦合在一起,可以描述海水中 Cl^- 在土柱中运移规律。

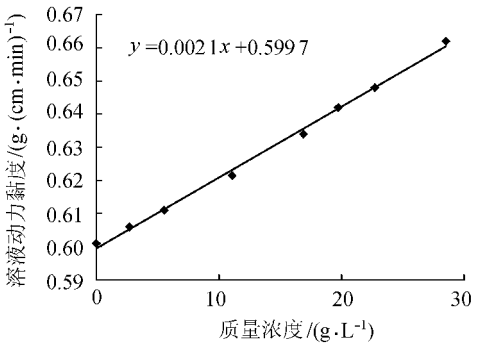

图 1 动力黏度与质量浓度的关系

1.2 数值计算方法

将式(1)转化为

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(-K\frac{\partial H}{\partial x}\right)=-S_s\frac{\partial H}{\partial t}-n_e\eta\frac{\partial c}{\partial t}+\eta\frac{\partial}{\partial x}(Kc)+\frac{\rho}{\rho_o}q \quad (4)$$

用 Galerkin 有限单元法对式(4)进行离散,可得

$$AH_i=-B\frac{\partial H_i}{\partial t}+C \quad (5)$$

$$A=\sum\int_R K\frac{\partial n_{e_{i-1}}}{\partial x}\frac{\partial n_{e_i}}{\partial x}\mathrm{d}x$$

$$B=\sum\int_R S_s n_{e_i}\mathrm{d}x$$

$$C=\sum\int_R\left[-n_e\eta\frac{\partial c}{\partial t}+\eta\frac{\partial}{\partial x}(Kc)+\frac{\rho}{\rho_o}q\right]n_{e_i}\mathrm{d}x$$

使用 Crank-Nicolson 差分格式对式(5)中的 $\frac{\partial H_i}{\partial t}$ 离散,得

$$\frac{1}{2}AH_i^t+\frac{B}{\Delta t}H_i^t=\frac{B}{\Delta t}H_i^{t-1}-\frac{1}{2}H_i^{t-1}+C \quad (6)$$

将方程(2)转化为

$$-\frac{\partial\left[D\frac{\partial c}{\partial x}\right]}{\partial x}+v\frac{\partial c}{\partial x}+\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{q}{n_e}\right)c=-\frac{\partial c}{\partial t} \quad (7)$$

用 Galerkin 有限单元法对式(7)进行离散,得

$$Ac_i=-B\frac{\partial c_i}{\partial t} \quad (8)$$

$$A=\sum\int_R\left[\alpha v\frac{\partial n_{e_{i-1}}}{\partial x}\frac{\partial n_{e_i}}{\partial x}+v\frac{\partial n_{e_{i-1}}}{\partial x}n_{e_i}+\left(\frac{\partial v}{\partial x}+\frac{q}{n_e}\right)n_{e_{i-1}}n_{e_i}\right]\mathrm{d}x$$

$$B=\sum\int_R n_{e_i}\mathrm{d}x$$

使用 Crank-Nicolson 差分格式对式(8)中的 $\frac{\partial C_i}{\partial t}$ 离散,得

$$\frac{1}{2}Ac_i^t+\frac{B}{\Delta t}c_i^t=\frac{B}{\Delta t}c_i^{t-1}-\frac{1}{2}c_i^{t-1} \quad (9)$$

使用中心差分法对达西方程进行离散,得

$$v_i^t = \frac{k\rho_o}{n_e\mu}\left[\frac{1}{2}\left(\frac{H_{i+1}^t - H_i^t}{h_i} + \frac{H_i^t - H_{i-1}^t}{h_i}\right) + \eta c_i^t\right] \quad (10)$$

按土柱高度进行计算单元的节点划分，n 个节点每个节点可以建立一个线性方程。建立达西运动方程组，用迭代法进行求解。编制了 VB 计算程序，程序具有可视化输入、输出及图形显示功能，可用来进行 Cl^- 在土柱中运移模拟及参数反演计算。

模型参数包括渗透率 k、有效孔隙度 n_e、弥散度 α、贮水率 S_s。其中，k 反映的是土壤渗透的物理特性，它与溶液的浓度密度无关，可以通过淡水测流实验方法确定。模型参数灵敏度分析（表 1）表明，S_s 为不敏感参数，故 S_s 根据土壤特性采用水文地质手册中给定的数据[7]，n_e 和 α 使用变步长法（脊线搜索法）进行寻优[8]。

表 1　模型参数敏感性分析

参数	α/cm			n_e/%			S_s/cm		
	0.10	0.297	0.50	30.0	33.4	36.0	10^{-4}	10^{-5}	10^{-6}
Cl^- 浓度相对误差/%	-55.09	0.00	24.71	171.08	0.00	-72.03	-1.38	0.00	0.16

2　实验装置及分析结果

2.1　实验装置

供试土样为长江江心的黄色粗河沙和威海海边的白色细沙。利用筛分法得到土样的粒径分析数据，分析野外原状土得到密度。渗透率取决于沙土性质，不受浓度影响，故先用淡水测流的实验方法求出。具体做法是保持固定水头，将淡水注入土柱并测定土柱底部出流，以此求得土柱中水流速度。为减少观测误差，多次反复测量出流流量，求得平均流速。由测压管读数，实测求得水力坡度，平均流速除以水力坡度得到渗透系数 K。再由

$$K = \frac{k\rho}{\mu}$$

求出渗透率 k。沙土物理性质见表 2。

表 2　沙土物理性质

沙样	k/($cm^3 \cdot min^{-2}$)	ρ/($g \cdot cm^{-3}$)	不同粒径所占比例/%				
			<0.075 mm	0.075~0.25 mm	0.25~0.5 mm	0.5~2.0 mm	>2.0 mm
长江河沙	1.09	1.40	0.28	19.12	52.52	23.65	4.43
威海沙土	0.55	1.55	0.12	35.58	37.40	26.43	0.47

实验所用的土柱为高 70 cm，内径为 28 cm 的有机玻璃管（图 2）。土柱填入沙土 67.5 cm。玻璃管壁上每隔 10 cm 钻孔 1 个，共有 5 个孔，用于插入 4 个导流玻璃管和 1 个测压水管，土柱底板上方 69.1 cm 处有一溢流孔，土柱底部设置出流管、测压管。沙样晾晒风干后过 2 mm 筛，控制密度，采用分层填装法填装土柱，用马里奥特瓶进行供水。实验前先用自来水由下至上将土柱饱和。以威海近岸水域水样的 Cl^- 质量浓度（18 g/L），用纯度 99.5% 的分析纯 NaCl 药品配置同样 Cl^- 浓度的溶液作为注水实验水样。用精度为 1 mL 的量筒接取出流液测定体积，用 $AgNO_3$ 滴定法测定出流液中 Cl^- 浓度。

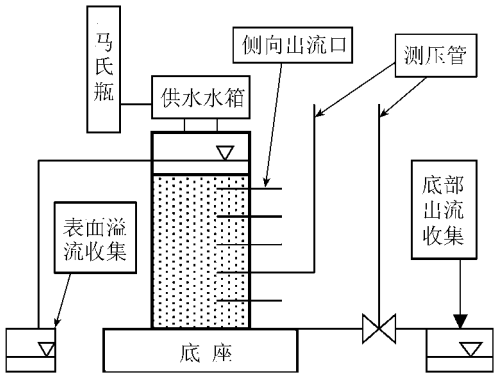

图 2　实验仪器装置

在收集出流的时候，除了按照常规的底部出流外，还增加了侧向出流，具体做法是将厚壁玻璃管一端用多层硬塑纱网布包扎，埋入土柱中；另一端套上软皮管，在皮管上设置止水夹以控制出流。因为本次实验选用的是沙土，而且实验条件为饱和，所以出流比较顺畅，且控制方便，可以满足实验预期要求。浓度的变化会引起水头的变化，故分别在土柱底部和侧向一处设置测压管，以观测水头变化。在向土柱灌入海水前，先用淡水测出土柱的出流速度，算出达西渗透系数，然后向马里奥特瓶中灌入配好的 Cl^- 质量浓度为 18 g/L 的溶液，将马里奥特瓶和供水水箱相连接。按照模型预测的设计时间收集侧向与底部出水口的出流溶液，并记录侧向出水口出流溶液体积。

2.2　实验数据及参数拟合

2.2.1　长江河沙实验

向长江河沙注入海水的实验进行了两次：第一次实验进行了侧向出流收集和底部出流收集，侧向出流口分别距土柱的土层表面 16.5 cm、56.5 cm、67.5 cm。高于土层表面 1.6 cm 处有一溢流管，马里奥特瓶中溶液的 Cl^- 质量浓度为 17994.42 mg/L。实验前用自来水将土柱饱和，自来水中的 Cl^- 质量浓度为 14.34 mg/L。实验中按照模型预测的设计时间在出流口观测取样。利用第一次实验的数据对模型参数进行率定，求得参数 α 为 0.297 cm，n_e 为 33.389%，标准差为 0.465。为了验证参数的合理性和检验模型的正确性，第一次实验后用自来水冲刷土柱，直到土柱底部出流 Cl^- 浓度与自来水中 Cl^- 浓度相同。进行第二次海水注入实验，马里奥特瓶中溶液 Cl^- 质量浓度为 17 984.31 mg/L，自来水中的

Cl^- 质量浓度为 15.27 mg/L，第二次实验只进行了底部测流，利用第一次实验求得参数带入所建立的数学模型，模拟出 Cl^- 质量浓度随时间变化的过程，并与实测结果进行比较，拟合结果非常一致（图 3(a)），标准差为 0.352。说明所建立模型是正确的，实验所得参数是可靠的。

2.2.2 威海沙土实验

用已经验证好的模型和方法对威海沙土进行注入海水的实验，实验前用自来水将土柱饱和，马里奥特瓶中溶液 Cl^- 质量浓度为 17 607 mg/L，自来水中 Cl^- 质量浓度为 15.59 mg/L。实验只进行了底部测流。实验结果参见图 3(b)。用实验数据对模型参数进行优选，求得参数 α 为 0.369 cm，n_e 为 37.78%，标准差为 0.383。

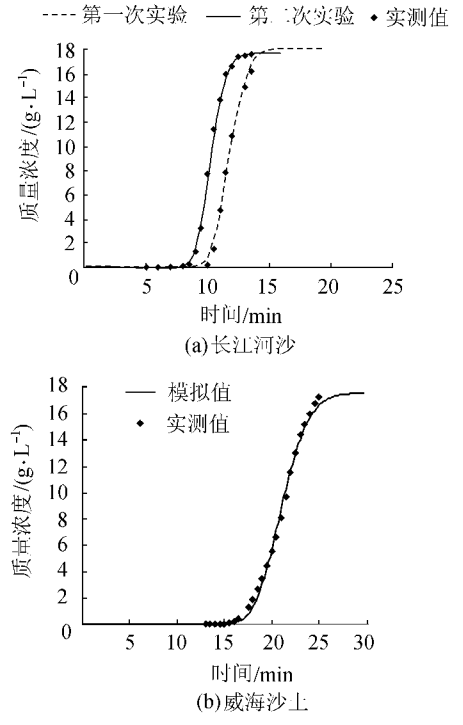

图 3 Cl^- 质量浓度随时间变化

3 结 论

a. 一维变密度水流弥散和溶质运移受土壤特性（有效空隙度、贮水率、弥散度）、水力特征（达西流速、水头）及溶液特性（浓度）的综合影响。其中，土壤特性对水动力过程和溶质运移影响较大。一般情况下，土壤的粒径大、结构松散，则达西渗透系数大、弥散度小、海水进入土壤中受到的阻力小，海水中 Cl^- 在土柱中运移速度快，反映在图像上曲线斜率较大。

b. 与野外实验相比较，用室内土柱进行变密度水流弥散和溶质运移的模拟，大大简化自然条件中降雨、蒸发和下垫面的复杂性和不确定性，具有容易实现、可以灵活控制边界条件、在溶液运移过程中观察方便等优点。但是土柱实验并不能完全反映实际情况，所以由土柱实验测出的数据只是一种近似结果，要运用到实际当中还需要进行一定的修正。

c. 与已有研究成果相比较，本研究得出孔隙度在沙土孔隙度 30% ~ 40% 范围内[7]。弥散度是一个和实验尺度有关的参数，即弥散度随着实验尺度的增大而增大。大量实验结果表明[9-10]：土柱实验测得的弥散度为 0.01 ~ 1 cm，野外小范围实验测得的弥散度为 0.1 ~ 2 m，大范围实验的测定值为 1 ~ 10 m，本实验得出的弥散度在土柱实验结果范围内。该参数应用在区域尺度海水入侵研究，还需考虑参数的尺度效应进行修正。

d. 本模型针对室内土柱实验建立一维变密度水流和溶质运移模型，能够快速建立土柱模型，并能很好地模拟变密度水流下海水中 Cl^- 在土柱中的运移规律。

e. 本次实验是与威海地区海水入侵机理研究相结合，采取威海海滨区土样进行室内土柱实验，在较短的时间内得出该地区土样渗透率、有效孔隙度、弥散度等水文地质参数，为海水入侵模型参数取值提供参考依据。

参考文献：

[1] 刘杜鹃. 中国沿海地区海水入侵现状与分析[J]. 地质灾害与环境保护，2004，15(1)：31-36.

[2] 薛禹群，谢春红，吴吉春. 山东龙口：莱州地区的海水入侵[J]. 地质学报，1992，66(3)：280-291.

[3] 成建梅，陈崇希，吉孟瑞，等. 山东烟台夹河中、下游地区海水入侵三维水质数值模拟研究[J]. 地学前缘，2001，8(1)：179-184.

[4] HUYAKORN P S，ANDERSON P F，Mercer J W，et al. Saltwater intrusion in aquifers：development and testing of a three dimensional finite element model [J]. Water Resour Research，1987，23(2)：293-312.

[5] 薛禹群. 地下水动力学原理[M]. 北京：地质出版社，1986：6-7.

[6] REILLY T E，GOODMAN A S. Quantitative analysis of saltwater - freshwater relationships in groundwater systems—A historical perspective[J]. Journal of Hydrology，1985，80：125-160.

[7] 刘玉峰. 水文地质手册[M]. 长春：银声音像出版社，2005：722-723.

[8] 甘应爱，田丰，李维铮，等. 运筹学[M]. 北京：清华大学出版社，1990：171-173.

[9] 郑西来，钱会，杨喜成. 地下水含水介质的弥散度测定[J]. 西安工程学院学报，1998，20(4)：33-36.

[10] 成建梅. 考虑可信度的弥散度尺度效应分析[J]. 水利学报，2002，2(2)：90-94.

（收稿日期：2007-04-05 编辑：舒 建）