

非均匀含水层中污染物的输送及 生物降解的流动研究*

孙 菽 芬

中国科学院大气物理研究所, 北京 100080

提要 介绍了受污染的地下水中化学物质与微生物相互作用的生化与动力过程。作为例子, 提出了一个定量描述非均匀地下水流中有机物与细菌迁移变化的数学模型, 并简要介绍了出现在控制方程中几个应关注的问题, 如变量大梯度与特征时间尺度问题, 以利于数值求解。

关键词 有机物; 微生物; 非均匀地下水流; 生物降解; 数学模型

1 引言

由人类活动引起的各种有毒、有害的有机污染物(如致癌的含氯芳香族及脂肪族)污染地下水问题已引起人们的重视^[25]。地下水是重要的饮用水源, 在美国有一半人口饮用地下水, 在中国远远超过一半, 所以地下水水质问题引起各国关注, 在多种处理地下水有机污染物的方案中, 科学家们比较推崇可行性较强的生物降解方案^[34]。

利用地下微生物(主要指细菌, 下文统称细菌)改良地下污染环境的想法由来已久。关于地下水环境中存在具有各种代谢能力的细菌^[10], 已有大量文献报道。近来, 在不同的地下水环境中, 甚至在很深处已经发现了某些细菌能够降解一些极为稳定且毒性很大的有机物^[1,9,12,18,27], 改变了以往认为恶劣地下环境中没有且不能生存细菌的观点, 给生物降解改良地下水环境的技术带来极为乐观的前景。有人认为这种技术不久将进入商用^[40], 它可以降解那些致癌物质(如三氯乙烯、四氯乙烯), 处理高氮浓度地下水, 改善因酸雨而受损的土壤。

为了使这种改良技术能最终应用, 必须解决若干难点^[34]。其中之一, 就是要正确定量描述地下水环境中细菌和有机物的变迁、运动及它们之间相互作用。虽然已有很多模拟这种运动的模型, 但都不能恰当描述许多复杂的情况, 原因在于, 对复杂地下水环境构造本身, 对在这种环境中的细菌生化动力学, 以及细菌与有机物相互作用等过程的认识还不够, 此外

* 国家自然科学基金资助项目

又没有足够的实验室及现场观察结果去证实这些模型。所以就目前研究而言，应从理论模拟，实验室研究和现场观察三方面加强工作，取得进展。

2 地下水环境中生化动力学及物质输运动力学

2.1 多孔介质中细菌生化动力学

在地下水环境中，细菌微生物生长和死亡取决于许多环境变量，如营养物质浓度，pH值，温度及与其它微生物的竞争等，也与它们所经历的环境历史状况有关。但在实际应用中，精确描述它们的全部过程细节是不可能的，所以有关生化动力学的数学关系必须利用较少变数，引入某些经验及半经验关系^[27]。在许多自然及人工系统中，已经证明这些关系是合适的，并得到了广泛的应用。

常见地下水环境中存在3类细菌：好氧菌，厌氧菌及氮还原菌。它们为了生长发育，均能利用不同的有机物作为碳源及能源，配以电子受体及其它营养物，实现新陈代谢。好氧菌以氧为电子受体，而厌氧菌则以有机物、CO₂或者碳酸盐为电子受体，氮还原则以氮的氧化物作电子受体，所以不同环境对不同细菌生长的利弊不一。

令 S ， O ， N ， X 分别代表有机物、电子受体、辅助营养物和细菌浓度，根据 Monod 公式，细菌摄取限制性物质的速率 V 为

$$V = V_m U / (K_s + U) \cdot X$$

其中 V_m 为最大渐近摄取速率，限制性物质浓度 U 是代表有机物浓度还是氧浓度，取决于谁是限制性物质；在有机物摄取速率与氧摄取速率之间存在一定比例，即

$$V_o / V_s = Y_o / Y_s$$

其中 Y_o 及 Y_s 分别为各自的生长系数。上述公式中，认为营养物质足够丰富，不考虑其影响。

上述公式是实验室中得到的规律，如何推广到多孔介质中去，还需进一步研究。但在地下水中有几种抑制因子明显限制对有机物及氧的摄取。Kindred^[16] 提出了3类抑制因子对此公式进行修正。他引入抑制因子 I 来描述三类抑制因子：

$$I = 1 + Q_i / K_i$$

其中 Q_i 为产生抑制作用物质的浓度（或 S ，或 O 或 X ）。当 I 乘以 K_s 、或除以 V_m 及 X 时，就表达以下3类抑制作用：

1. 竞争性抑制 (I_c)：两种有机物被同一细菌微生物摄取时，其中一种有机物 (S_1) 可能会对另一种有机物 (S_2) 的摄取产生抑制就属这一类。这时，在被约束的物质提取公式中 K_s 要乘以 I_c 。

2. 非竞争性抑制 (I_m)：氧对厌氧菌摄取有机物的能力产生抑制就属该类。此时，在厌氧菌摄取公式中， V_m 要除以 I_m 。

3. 自限制性抑制 (I_b)：上述总速率公式不可能随 $X \rightarrow \infty$ ， $V \rightarrow \infty$ ，这时要除以 $I_b = 1 + X / K_x$ 。

细菌微生物在生长同时还会死亡，所以它的纯生长速率为

$$dX/dt = Y \cdot V - K_m \cdot X$$

其中 K_m 为单位质量细菌微生物的死亡速率， Y 为 Y_o 或 Y_s ，而 V 为修正后的值，即

$$V = V_m / I_m \cdot U / (U + K_n I_c) \cdot X / I_b$$

2.2 多孔介质中的细菌生化动力学模型

多孔介质中细菌生长动力学模型可分为二类：结构性 (Structured) 模型及非结构性 (unstructured) 模型。

2.2.1 结构性模型^[21,23,40]

结构性模型一般更注重描述机理，把细菌生长引起的细胞内部生理过程及有关生理因子 (如 DNA, RNA, ATP 等) 和外部环境因素变数相关连结。结构性模型很复杂，它在多孔介质中的潜在应用可以参看有关文章^[21]，目前主要应用非结构性模型。随着多孔介质中的细菌生化动力学知识逐步加深，结构性模型可能会提供在地下水环境中描述细菌生化动力学的更好方法。

2.2.2 非结构性模型^[27]

非结构性模型则不考虑细胞内过程，将细菌生长死亡只与外部的环境因素相关联，2.1 节所述的内容，就是非结构性模型的细菌生化动力学。已经发展了许多用于地下环境中细菌与化学物质相互作用的生化动力学模型，它大致可以分为二类：多相模型及单相模型，它的划分主要由元素各相之间交换特性决定。

• **多相模型** 多相模型认为细菌及化学物质各物相 (固、液、气相) 之间交换受到各种因子约束，而不能达到一种简单平衡关系，因而每一种物质及菌种的每一个相态必须提供相应方程^[7,15,24,30]。目前比较集中是固、液二相^[30]，原因在于有很多工作表明多孔介质中细菌多数以贴附 (clogging) 于固体颗粒表面的形式出现^[11]，有不少文章讨论了与贴附表面的细菌变化过程^[24,25] 有关的渗透，变形，沉降、吸附及解吸、生长，死亡及衰减等过程。这里需特别提出生物膜的概念。聚集在固体颗粒表面的细菌集合体称为生物膜。由于生物膜构成不同的形状，会影响其本身生长及与周围各种物质的交换过程。Bareye 及 Volocchi^[2] 把生物膜分成三类。第一类认为生物膜形成一个连续薄层，均匀地分布在颗粒介质的表面，Tayer 及 Jaffe^[33] 提出的多孔介质中生物膜动力学就属这一类。第二类认为细菌集合体具有一定形状，其中 Widdowson 等^[39] 提出了圆柱状生物膜模型。第三类对生物膜结构不作任何^[43,44] 假定。一般认为第三类更适合，原因在于至今缺乏可靠证据去支持某种特定的结构假定。关于生物膜研究有时显得十分重要，已有证据表明由于生物膜生长会堵塞孔隙介质中流动截面，使导水度下降，甚至达二至三个量级，大大地影响水流运动^[3,11,31,35,36]，当然也影响溶液、溶质的对流扩散及反应。

• **单相模型** 细菌及化学物质都以溶液形式存在，或者说某一物质有固、液二相，但二相间达到平衡，故每一种组元 (细菌和化学物质) 只要有一个控制方程的模型就是单相模型^[4,8,15,27]。单相模型应用较广泛，原因在于它较简单，要求给定参数少，避免了复杂的相间交换动力学。对于某种二相物质，由于二相间达成平衡，一般采用 Freundlich 关系 (即 $S_{液} = K S_{固}^n$)，使该物质的描述方程也归结为一个。

也许在上述分类之中还可以有中间一类，我们提出的模型就属这一类^[48]。在我们发展的模型中 (见下文)，溶液中细菌与贴附在颗粒表面上细菌并不达成平衡，它们有各自的控制方程，而其它化学物质则处于单相模型状态。

2.3 多孔介质中物质与细菌的输运动力学

地下含水层可以分为均质及非均质两类, 研究其流动的方法各不一样. 下面先阐明均匀多孔介质中物质与细菌的输运动力学, 然后分别对各种非均匀介质的情况作扩展补充.

2.3.1 均匀多孔介质中的输运动力学 在均匀孔隙介质中, 各种化学物质随水源运动, 并因自身浓度作弥散运动 (弥散系数 $D = \alpha |V| + D^*$, 其中 D^* 为分子扩散系数). 至于化学物质被颗粒表面的吸附, 在单相模型中则引入滞止系数 K_V (见下文方程) 来表示. 对于细菌这样的生命体, 其尺寸又在 $0.1\mu\text{m}$ 之上, 比一般分子大, 带来若干新运动特征, 它们与土壤颗粒的相互作用可以不达到平衡, 故以下另作描述.

1 布朗运动 根据物理化学流体动力学^[22]知识, 对于尺度大于 $0.1\mu\text{m}$ 以上悬浮颗粒, 分子扩散运动应为布朗运动, 这时 D^* 应由布朗运动扩散系数 D_{B_i} 代替, 而

$$D_{B_i} = \frac{K_b T}{3\pi\mu_w d_i}$$

D_{B_i} 为布朗运动扩散系数, K_b 为波尔兹曼常数, d_i 为细菌团粒尺寸, μ_w 为流体动力粘性系数.

2 趋食运动及泳动 由于细菌要摄取有机物才能生长. 对于那些可动的细菌, 有一种寻食的本领, 产生了朝有机物浓度较高方向的趋食运动^[10]. 另外, 可动的细菌的鞭毛总是随机摆动, 产生一种平均附加运动, 称之为泳动^[41], 它们通量为

$$J_{c_i} = \varphi \frac{K_{c_i} X_i}{S_i} \text{grad } S_i$$

$$J_{T_i} = -\varphi (D_{T_{x_i}}) \text{grad } X_i$$

J_{c_i} 为趋食运动通量, J_{T_i} 为泳动运动通量, X_i 及 S_i 分别为 i 种细菌浓度及其摄取的有机物浓度, K_{c_i} 及 $D_{T_{x_i}}$ 为相应的速率常数.

3 下沉运动 由于细菌团粒与水的比重并不一样, 会在重力方向上产生沉浮运动, 其速度为 V_{g_i} :

$$V_{g_i} = \frac{(\rho_{X_i} - \rho_w)}{18\mu_w} g d_i^2$$

其中 ρ_{X_i} 及 ρ_w 为细菌及水的密度.

4 附体与脱体运动 由于吸附及沉降, 细菌会在颗粒表面堆积形成薄层; 又由于生物膜不断的吸附及生长, 增厚的膜在水流冲击下脱离返回到水流中去, 这一正一反过程正是附体及脱体运动. 如果 i 种菌附体的比体积用 σ 表示, 则比体积净变化率为 R_{d_i}/ρ_{d_i} , 而 R_{d_i} 则为

$$R_{d_i} = K_{c_i} (\varphi - \sigma) X_i - K_{d_{c_i}} \rho_{x_i} \sigma_i^{h_i}$$

其中, K_{c_i} 及 $K_{d_{c_i}}$ 为附体及脱体运动速率常数, $\sigma = \sum \sigma_i$; $(\varphi - \sigma)$ 为实际水流的空间大小, 一般认为 σ 很小时, $(\varphi - \sigma) = \varphi$; h_i 一般假定为 1.

2.3.2 非均匀多孔介质输运动力学 关于均匀多孔介质中水流及溶液运动的研究已很多^[46,47]. 关于非均匀多孔介质的研究, 尤其是含裂隙含水层的研究是当今地下水流动研究中一个前沿课题. 常见的非均匀介质有各向异性介质, 分层介质及含裂隙地下含水层. 关于多孔介质中细菌及有机物的运动^[41], 主要是处理好交界面上的交换动力学. 对于含裂隙的分层介质^[46], 至今尚无一个很好的方法. 根据一般理论, 裂隙及其周围孔隙介质, 起着完

全不同的作用,前者导水度高,流动快,溶液溶质传送速度大且锋面移动快;后者导水度低,流动慢,但占总孔隙度的百分数大,通过与裂隙界面的交换,起着似仓库一样的贮存污染物作用。本文采用 Barenblatt^[48] 提出的二重孔隙介质模型来模拟裂隙含水层细菌及有机物的运动,即认为在同一个原生孔隙基础上存在着广泛的随机分布的裂隙,二者都当作多孔介质,同时充满整个区域,形成二个既空间重叠又独立运动的连续统,称为裂隙介质及孔隙介质,上述均匀介质中各种生化动力学及运动动力学规律皆可用于这二个连续统,所不同的是有关系数各不相同,这二个连续统之间的耦合通过它们之间的界面交换来实现。二重孔隙介质模型难点在于如何确定界面上的交换,因为界面形状可以各种各样,裂隙走向可以随机取向,笔者沿用 Bibby 等人对裂隙形状、走向进行理想化处理的方法,认为裂隙主要为平面片状构造(图1),且为等间隔、等宽度裂缝,孔隙度为 φ 。裂隙与孔隙界面上交换通量则由孔隙介质在该处的通量值决定,具体关系下文还会谈及。

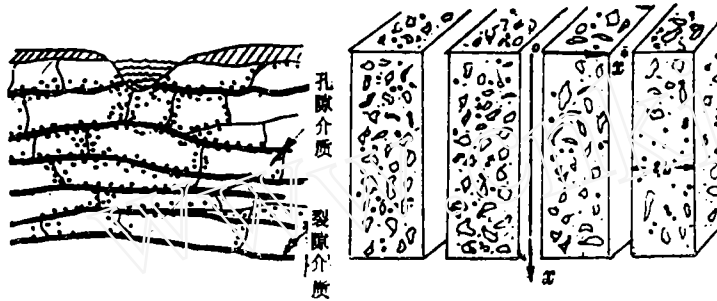


图1 二重孔隙介质模型示意图

3 多孔介质中有生物降解的化学物质流动模拟研究

如前所述,多孔介质中生物降解流动研究十分复杂,必须抓住主要因素,针对具体问题建立数学模型,决不可能存在一个适用于任何情况的模型。对于均匀介质中单相流动情形,Kindred 及 Celia^[15] 给出了有好氧菌,厌氧菌及氮还原菌分别存在或同时存在的控制方程组,并考虑几种化学物质共同出现和有三种抑制作用的情形;Wood 等^[41] 给出了分层介质中单相流动的例子;对于多相流动,Widdowson^[39] 等给出了在均匀介质中有1种细菌,4种化学物质的控制方程组。由于化学物质为二相,细菌只以生物膜形式存在,所以共由9个方程组成。以下详述前面提到的裂隙含水层中的流动模型。可以看出,笔者提出的模型介于单相与多相流动之间。

作为范例^[48],研究系统由好氧菌(浓度为 X_1 及 X_1^*)与厌氧菌(浓度为 X_2 及 X_2^*)组成。好氧菌摄取的有机物浓度为 S_1 、 S_1^* ,氧浓度为 O_1 、 O_1^* ,厌氧菌所需的有机物浓度(同样是电子受体)为 S_2 、 S_2^* ,吸附在土壤颗粒表面的比体积分别为 σ_1 、 σ_1^* 和 σ_2 、 σ_2^* 。在好氧菌生长中,氧为假定的限制性物质;在厌氧菌生长中,氧气对厌氧菌活动产生非竞争性抑制。各种物质在裂隙中沿 x 方向运动,而在孔隙中沿 x^* 方向运动。 x 与 x^* 相互垂直(见图1)。在不同的 x 位置,细菌及化学物质通过界面产生交换。设裂隙中流速为 V ,孔隙中流速 $V^* = 0$ 。今后凡带上标*的量均属孔隙中量,不带上标*的量则为裂隙中量,凡

X_1, X_2, S_1, S_2 及 O 当作下标时, 均表示与该物质有关的量.

若用 Y 代表 S_1, S_2, O, X_1 和 X_2 时, 则裂隙介质通用方程为

$$\frac{\partial Y}{\partial t} = -\frac{1}{K_Y} \frac{\partial VY}{\partial x} + \frac{1}{K_Y} \frac{\partial}{\partial x} D_Y \frac{\partial Y}{\partial x} + \frac{R_Y}{K_Y \varphi}$$

其中 K_Y 为前面提及的滞止系数, 细菌的吸附过程另作处理, 故 $K_Y=1$. D_Y 为前面提及的弥散系数与泳动运动速率系数之和. φ 为裂隙所占的孔隙度. R_Y 则为生长速率项、细菌脱体及附体项、趋食运动项及界面上交换项之和, 重力作用产生的下沉运动本文暂不考虑, 有必要时可加上.

对于 S_1 , 则有

$$\frac{R_{S_1}}{K_{S_1} \varphi} = \frac{F_{S_1}}{K_{S_1} \varphi} - \frac{Y_0^1}{Y_S^1 K_{S_1} \varphi} \cdot \frac{V_m^1 O}{K_m^1 + O} \left(\frac{X_1 \varphi}{1 + \frac{X_1}{K_i^1}} + \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{1 + \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{K_i^1}} \right)$$

对于氧, 则有

$$\frac{R_0}{K_0 \varphi} = \frac{F_0}{K_0 \varphi} - \frac{1}{K_0 \varphi} \cdot \frac{V_m^1 O}{K_m^1 + O} \left(\frac{X_1 \varphi}{1 + \frac{X_1}{K_i^1}} + \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{1 + \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{K_i^1}} \right)$$

对于 S_2 , 则有

$$\frac{R_{S_2}}{K_{S_2} \varphi} = \frac{F_{S_2}}{K_{S_2} \varphi} - \frac{1}{K_{S_2} \varphi} \cdot \frac{V_m^2 S_2}{K_m^2 + S_2} \left(\frac{X_2 \varphi}{1 + \frac{X_2}{K_i^2}} + \frac{\rho_{X_2} \sigma_2}{1 + \frac{\rho_{X_2} \sigma_2}{K_i^2}} \right) \frac{1}{1 + \frac{O}{K_h^0}}$$

对于 X_1 , 则有

$$\begin{aligned} \frac{R_{X_1}}{\varphi} = & \frac{F_{X_1}}{\varphi} + \frac{V_m^1 O}{K_m^1 + O} \cdot Y_0^1 \frac{X_1}{1 + \frac{X_1}{K_i^1}} - K_{g_1} X_1 - K_{e_1} X_1 + K_{d_{e_1}} \rho_{X_1} \frac{\sigma_1}{\varphi} \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{m_1} X_1 \frac{\partial}{\partial x} (\ln S_1) \right] \end{aligned}$$

对于 X_2 , 则有:

$$\begin{aligned} \frac{R_{X_2}}{\varphi} = & \frac{F_{X_2}}{\varphi} + \frac{V_m^2 S_2}{K_m^2 + S_2} \cdot Y_0^2 \frac{X_2}{1 + \frac{X_2}{K_i^2}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{O}{K_h^0}} - K_{g_2} X_2 - K_{e_2} X_2 + K_{d_{e_2}} \rho_{X_2} \frac{\sigma_2}{\varphi} \\ & - \frac{\partial}{\partial x} \left[K_{m_2} X_2 \frac{\partial}{\partial x} (\ln S_2) \right] \end{aligned}$$

其中 $V_m^1, V_m^2, Y_0^1, Y_S^1, Y_S^2, K_{S_1}, K_0, K_{S_2}, K_m^1, K_m^2, K_i^1, K_i^2, K_h^0, K_{g_1}, K_{e_1}, K_{d_{e_1}}, K_{g_2}, K_{e_2}, K_{d_{e_2}}, K_{m_2}$ 均为相应的速率常数. σ_1, σ_2 为 X_1, X_2 吸附在固体表面上相应的比体积, 控制方程为

$$\frac{d\sigma_1}{dt} = \frac{1}{\rho_{X_1}} \left(K_{e_1} \varphi X_1 - K_{d_{e_1}} \rho_{X_1} \sigma_1 + Y_0^1 \cdot \frac{V_m^1 O}{K_m^1 + O} \cdot \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{1 + \frac{\rho_{X_1} \sigma_1}{K_i^1}} - K_{g_1} \rho_{X_1} \sigma_1 \right)$$

$$\frac{d\sigma_2}{dt} = \frac{1}{\rho_{X_2}} \left(K_{d,2} \varphi X_2 - K_{d,2} \rho_{X_2} \sigma_2 + Y_{S_2}^* \cdot \frac{V_m^* S}{K_m^* + S_2} \cdot \frac{1}{1 + \frac{O}{K_o}} \cdot \frac{\rho_{X_2} \sigma}{1 + \frac{\rho_{X_2} \sigma}{K_i}} - K_{d,2} \rho_{X_2} \sigma_2 \right)$$

在孔隙介质中也有与以上类似的方程组，不同的是令 $V_m^* = 0$, $F_{S_1}^*$, $F_{S_2}^*$, $F_{X_1}^*$, $F_{X_2}^*$ 及 F_0^* 为 0, 而所有变数及参数均应为孔隙介质中的值。

交界面上通量值为 (参见图 1)

$$F_{S_1} = \frac{\theta_{S_1}^* \varphi^* D_{S_1}^*}{L} \cdot \frac{\partial S_1^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0}$$

$$F_0 = \frac{\theta_0^* \varphi^* D_0^*}{L} \cdot \frac{\partial O^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0}$$

$$F_{S_2} = \frac{\theta_{S_2}^* \varphi^* D_{S_2}^*}{L} \cdot \frac{\partial S_2^*}{\partial x^*} \Big|_{x^*=0}$$

$$F_{X_1} = \theta_{X_1}^* \frac{\varphi^*}{L} \left\{ \left[D_{X_1}^* \frac{\partial X_1^*}{\partial x^*} \right] \Big|_{x^*=0} - K_{m_1}^* X_1^* \frac{\partial}{\partial x^*} (\ln S_1^*) \Big|_{x^*=0} \right\}$$

$$F_{X_2} = \theta_{X_2}^* \frac{\varphi^*}{L} \left\{ \left[D_{X_2}^* \frac{\partial X_2^*}{\partial x^*} \right] \Big|_{x^*=0} - K_{m_2}^* X_2^* \frac{\partial}{\partial x^*} (\ln S_2^*) \Big|_{x^*=0} \right\}$$

其中 $\theta_{S_1}^*$, θ_0^* , $\theta_{S_2}^*$, $\theta_{X_1}^*$ 及 $\theta_{X_2}^*$ 分别为有机物, 氧气及细菌在运动于多孔介质中的弯曲性 (Tortuosity) 系数。

上述方程可以很易退化为仅考虑好氧菌或厌氧菌的简单情形。

4 简单情况下的解析解和复杂情况下的计算模拟

4.1 解析解

解析解可以给出清晰结果, 并为数值模拟方法提供检验的标准, 但只能在一些简单情况下有解, 以下给出若干解例, 它们都是通过 Laplace 变换而获得的^[5]。

• 解例 1 一维均匀介质中溶液浓度 C 在对流、扩散及化学反应作用下的解。方程为

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + V \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \mu C + \gamma$$

其中 R, V, D, μ 及 γ 均为常数, 当边界条件为

$$\begin{cases} C(x, 0) = C_0; \\ \left(-D \frac{\partial C}{\partial x} + VC \right) \Big|_{x=0} = \begin{cases} VC_0 & 0 < t \leq T_0 \\ 0 & t > T_0 \end{cases} \\ \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=\infty} = 0 \end{cases}$$

或

$$\begin{cases} C(x, 0) = C_i \\ (-D \frac{\partial C}{\partial x} + VC) = VC_0 \exp(-\lambda t) \\ \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=-\infty} = 0 \end{cases}$$

或

$$\begin{cases} C(x, 0) = C_i \\ C(0, t) = \begin{cases} C_0 & 0 \leq t \leq t_0 \\ 0 & t > t_0 \end{cases} \\ \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=-\infty} = 0 \end{cases}$$

或

$$\begin{cases} C(x, 0) = C_i \\ C(0, t) = C_0 \exp(-\lambda t) \\ \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=-\infty} = 0 \end{cases}$$

时, Van Genuchten^[37] 给出解析解.

• 解例 2 多孔介质中可运动水溶液及不可运动水溶液各自被土壤颗粒吸附遵守 Freundlich 线性关系的组元浓度 C_m (在可运动水溶液中) 及 C_{im} (在不可运动水溶液中) 的解. 控制方程为

$$\begin{aligned} \beta R \frac{\partial C_m}{\partial t} + (1 - \beta) \frac{\partial C_{im}}{\partial t} &= \frac{1}{P} \cdot \frac{\partial^2 C_m}{\partial x^2} - \frac{\partial C_m}{\partial x} \\ (1 - \beta) \frac{\partial C_{im}}{\partial t} &= \bar{\alpha} (C_m - C_{im}) \end{aligned}$$

当边界条件为

$$\begin{aligned} \left(C_m - \frac{\partial C_m}{\partial x} \cdot \frac{1}{P} \right) \Big|_{x=0} &= \begin{cases} 1 & 0 \leq t \leq t_0 \\ 0 & t > t_0 \end{cases} \\ \begin{cases} C_m(x, t) = 0 \\ C_m(x, 0) = C_{im}(x, 0) = 0 \end{cases} \end{aligned}$$

时 Van Genuchten^[38] 给出了解析解

• 解例 3 裂隙含水层简单情况下的解. C 为裂隙中组元浓度, C_M 为孔隙介质中组元浓度, 界面上交换通量为 $\frac{D\theta}{b} \cdot \frac{\partial C_M}{\partial y} \Big|_{y=0}$, 控制方程为

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{V \partial C}{\partial x} = \frac{Dy}{b} \cdot \frac{\partial C_M}{\partial y} \Big|_{y=0} \\ \frac{\partial C_M}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C_M}{\partial y^2} \end{cases}$$

当边界条件为

$$\left\{ \begin{array}{l} C_M|_{y=\infty} = 0 \\ C_M|_{y=0} = C(x, t) \\ C(x=0, t) = C_0 \\ C(x, t=0) = 0 \\ C_M(x, y, t=0) = 0 \end{array} \right.$$

时有解析解。

4.2 数值解的计算方法

一般情况下，多孔介质中细菌降解的流动问题只能依靠计算机。参看裂隙介质中流动方程组，运动方程有对流、扩散及反应项（源、汇项等）组成，在构造差分格式时必须注意解决以下几个问题，才能得到一个既省时又有相当精度的结果。

• 特征时间尺度问题

对于一个形式如

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - f(x, t, C)$$

的方程，反应项往往与对流扩散项具有不同的特征时间尺度，有时甚至可差几个量级，给数值模拟带来较大困难，如果仅用一个时间步长，必然费时或者结果精度差，为了克服这一困难，Zyset^[44] 建议用劈裂算子，其中值得推荐的方法是

$$C^{n\Delta t + \Delta t} = \Lambda^T(\Delta t/2) \Lambda^K(\Delta t) \Lambda^T(\Delta t/2) C^{n\Delta t}$$

其中算子 $\Lambda^T(\Delta t/2)$ 为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{D\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x}$$

而算子 $\Lambda^K(\Delta t)$ 为

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -f(x, t)$$

在 $\Lambda^K(\Delta t)$ 算子中，由于 $f(x, t)$ 有很快的变化速率，可以在 Δt 内又分为若干步，并采用高精度的格式，以与 $\Lambda^T(\Delta t/2)$ 步的精度相配合。

• 变量大梯度问题

观察表明^[20]，现场中发现变量分布经常出现大梯度情形，尤其在分层介质的界面附近，经常出现这种问题，为了改善精度，就需要采取一定措施。Molz 及 Widowson^[20]，Chieng 等^[8] 及 Smith 等^[20] 采用了不同方法，他们的文章引举了许多工作解决大梯度锋面问题，均可作参考。

参 考 文 献

- 1 Balkwill D L, Fredrickson J K, Thomas J M. Vertical and horizontal variations in the physiological diversity of the aerobic chemoheterotrophic bacterial microfilm in deep southeast coastal plain subsurface sediments. *Appl. Environ. Microbiol.*, **55** (1989): 1058—1065

- 2 Baveye P, Valocchi A. An evaluation of mathematical models of the transport of biologically reacting solutes in saturated soils and aquifers, *Water Resour. Res.*, **25** (1989) : 1413—1421
- 3 Baveye P, et al. Comment on biofilm growth and the related changes in the physical properties of a porous medium, 1, Experimental investigations, *Water Resour. Res.*, **28** (1992) : 1481—1482
- 4 Borden R C, Bedient P B. Transport of dissolved hydrocarbons influenced by oxygenlimited biodegradation, 1, Theoretical development, *Water Resour. Res.*, **22** (1986) : 1973—1982
- 5 Caslaw H S, Jaeger J C. Conduction of heat in solids, 2nd edition Oxford University Press (1978): 510
- 6 Characklis W G, Marshall K C. Biofilms, John Wiley, New York (1990)
- 7 Chen Y M, et al. Modelling transport and biodegradation of benzene and toluence in sandy aquifer material: comparisons with experimental measurements, *Water Resour. Res.*, **28** (1992) : 1833—1847
- 8 Chiang C Y, et al. A modified method of characteristics technique and mixed finite element method for simulation of groundwater solute transport, *Water Resour. Res.*, **25** (1989) : 1541—1549
- 9 Colwell F S. Microbiological comparison of surface soil and unsaturated subsurface soil from a semiarid high desert, *Appl. Environ. Microbiol.*, **55** (1989) : 2420—2423
- 10 Corapcioglu M Y, Haridas A. Transport and fate of microorganism in porous medium: A theoretical investigation, *J. Hydrol.*, **72** (1984) 149—169
- 11 Cuuningham A B, et al. Influence of biofilm accumulation on porous media hydrodynamics, *Environ. Sci. Technol.*, **25** (1991) : 1305—1311
- 12 Fredrickson J K, et al. Physiological diversity and distributions of heterotrophic bacteria in deep cretaceous sediments of the Atlantic coastal plain, *Appl. Environ. Microbiol.*, **57** (1991) : 402—411
- 13 Ghiorse W C, Wilson J T. Microbial ecology of the terrestrial subsurface, *Adv. Appl. Microbiol.*, **33** (1988) : 107—172
- 14 Harvey R W, et al. Effects of organic contamination upon microbial distributions and heterotrophic uptake in a Cape Cod, Mass., aquifer, *Appl. Environ. Microbiol.*, **48**, 6 (1984) : 1197—1202
- 15 Kindred J S, Celia M A. Contaminant transport and biodegradation, 2, Conceptual model and test simulation, *Water Resour. Res.*, **25** (1989) : 1149—1159
- 16 Kinzelbach W, et al. Numerical modelling of nitrate and enhanced denitrification processes in aquifers, *Water Resour. Res.*, **27** (1991) : 1123—1135
- 17 Madsen E L. Determining in situ biodegradation, *Environ. Sci. Technol.*, **25** (1991) : 1663—1773
- 18 MacQuarrie K T B, et al. Simulation of biodegradable organic contaminants in groundwater, 1, Numerical formulation in principal directions, *Water Resour. Res.*, **26**, 2 (1990) : 207—222
- 19 Madsen E L, Ghiorse W C. Ground water microbiology: Subsurface ecosystem process, In: Fred T(ed) Aquatic Microbiology: An Ecological Approach, Blackwell Scientific, Boston, Mass (1992) : 42—51
- 20 Molz F J, Widdowson M A. Internal inconsistencies in dispersion-dominated models that incorporate chemical and microbial kinetics, *Water Resour. Res.*, **24**, 4 (1988) : 615—619
- 21 Pamment N B. Absence of external causes of lag in *Saccharomyces cerevisiae*, *J. Gen. Microbiol.*, **105** (1978) : 297—304
- 22 Probst R F 著, 戴干策等译, 物理-化学流体动力学导论, 华东化工学院出版社, 上海 (1992)
- 23 Ramkrishna D, et al. The dynamics of microbial propagation, models considering inhibitors and valuable cell composition, *Biotechnol. Bioeng.*, **9** (1967) : 129—170
- 24 Rittmann B E, et al. Traces-organics biodegradation in aquifer recharge, *Ground Water*, **18** (1980): 236—243
- 25 Rittmann B E. The significance of biofilm in porous media, *Water Resour. Res.*, **29**, 7 (1993) : 2195—2202
- 26 Ryan C W, Jaros E. Hazardous waste in our drinking water: town-by-town analysis for Mass., Public Interest Research Group, Boston (1986)
- 27 Roels J A. Energetics and kinetics in biotechnology Elsevier, New York (1983) : 330
- 28 Severso K J, et al. Hydrogeologic parameters affecting vadose-zone microbial distributions, *Geomicrobiol. J.*, **9** (1992) : 197—216
- 29 Smith R L. Importance of closely spaced vertical sampling in delineating chemical and microbiological gradients in groundwater studies, *J. Contam. Hydrol.*, **7** (1991) : 285—300
- 30 Sykes J F, et al. Modelling of leachate organic migration and attenuation in ground waters below sanitary landfills, *Appl. Environ. Microbiol.*, **18** (1982) : 135—145

- 31 Taylor S W, Jaffe P R. Biofilm growth and related changes in the physical properties of a porous medium, experimental investigation. *Water Resour. Res.*, **26**, 9 (1990) : 2153—2159
- 32 Taylor S W, Jaffe P R. Biofilm growth and related changes in the physical properties of a porous medium, 3. Dispersivity and model verification. *Water Resour. Res.*, **26**, 9 (1990) : 2171—2180
- 33 Taylor S W, Jaffe P R. Substrate and biomass transport in a porous medium. *Water Resour. Res.*, **26**, 9 (1990) : 2184—2194
- 34 Tarsman J F, Cork D J. Subsurface contaminant bioremediation engineering. *Critical Review in Environmental control*, **22**, 1, 2 (1992) : 1—26
- 35 Vandevivere P, Baveye P. Saturated hydraulic conductivity reduction caused by aerobic bacteria in sand columns. *J. Soil Sci. Soc. Am.*, **56** (1992) : 5—13
- 36 Vandevivere P, Baveye P. Effect of bacterial extracellular polymers on the saturated hydraulic conductivity of sand columns. *Appl. Environ. Microbiol.*, **58** (1992) : 1690—1698
- 37 Van Genuchten M th. Analytical solutions for chemical transportation with simultaneous adsorption, zero-order production and first order decay. *J. Hydrol.*, **49** (1981) : 213—233
- 38 Van Genuchten M th, Wierenga P J. Mass transfer studies in sorbing porous media I. analytical solutions. *J. Soil Sci. Soc. Am.*, **40**, 4 (1976) : 473—480
- 39 Widdowson M A, et al. A numerical transport model for oxygen and nitrate-based respiration linked to substrate and nutrient availability in porous media. *Water Resour. Res.*, **24** (1988) : 1553—1565
- 40 Williams F M. A model of cell growth dynamics. *J. Theor. Biol.*, **15** (1967) : 190—207
- 41 Wood B D, et al. Modelling contaminants transport and biodegradation in a layered porous media system. *Water Resour. Res.*, **30**, 6 (1994) : 1833—1845
- 42 Young T R, Boris J P. A numerical technique for solving stiff ordinary differential equations associated with the chemical kinetics of reactive-flow problems. *J. Phys. Chem.*, **81**, 25 (1977) : 2424—2427
- 43 Zysset A, et al. Modelling of reactive groundwater transport governed by biodegradation. *Water Resour. Res.*, **30**, 8 (1994) : 2423—2434
- 44 Zysset A, et al. Modelling of chemical reactive groundwater transport. *Water Resour. Res.*, **30**, 7 (1994) : 2217—2228
- 45 日本发酵工程学会编, 张震元等译. 微生物工程的基础和应用. 轻工业出版社, 北京 (1988年)
- 46 孙训正. 地下水流的数学模型和数值方法. 地质出版社, 北京 (1981年)
- 47 孙训正. 地下水污染——数学模型和数值方法. 地质出版社 (1989年)
- 48 孙菽芬, 廖文根. 生物降解处理地下有机污染物的模型研究. 水利学报, 8 (1994) : 1—10
- 49 参考消息. 日本研究用微生物净化环境 (1994年6月24日)

STUDY OF TRANSPORT AND FATE OF CONTAMINANTS AND BIODEGRADATION IN NONHOMOGENEOUS ACQUIFER

Sun Shufen

Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080

Abstract In this paper, the biochemical and dynamical processes of chemical substance and biomass in contaminated ground water are presented. As an example, a mathematical model to quantify the interaction and movement of organism and bacteria in nonhomogeneous ground water flow is developed. Some important problems such as large gradient and different characteristic time occurring in the governing equations are briefly described, which is important for numerical modelling.

Keywords *organism; biomass; biodegradation; nonhomogeneous ground water flow; biodegradation; mathematical model*

• 367 •