

文章编号:0559-9350(2011)06-0631-10

考虑弥散尺度效应的一维反应性溶质运移两区模型及应用

高光耀^{1,3}, 冯绍元^{2,3}, 马英², 詹红兵⁴

(1. 中国科学院 生态环境研究中心 城市与区域生态国家重点实验室, 北京 100085;

2. 扬州大学 水利科学与工程学院, 江苏 扬州 225009;

3. 中国农业大学 中国农业水问题研究中心, 北京 100083;

4. 美国德克萨斯农工大学 地质与地球物理系, 美国 德克萨斯州 77843)

摘要: 为考虑溶质运移的弥散尺度效应, 将弥散度概化为运移距离的线性和指数函数, 并考虑溶质的吸附和降解, 建立了非均质介质中溶质运移的一维两区模型(TRM), 采用 Laplace 变换和 de Hoog 数值逆变换方法求得了模型的半解析解, 分析了考虑弥散尺度效应与弥散度为常数的 TRM 之间的对应关系, 利用算术平均方法计算了考虑弥散尺度效应的 TRM 的等效弥散度, 并应用模型模拟了长度为 1 250cm 的一维非均质土柱中的溶质运移过程。结果表明: 等效弥散度反应了弥散尺度效应的影响, 可以近似作为区域弥散度的平均值, 但当弥散尺度效应增强时, 这种近似会有一定误差; 不考虑弥散尺度效应或将弥散度概化为运移距离线性函数的 TRM 的模拟结果与实测值存在较大偏差, 而弥散度为运移距离指数函数时的 TRM 的模拟精度有了较大提高, 能够更好地模拟非均质长土柱中溶质的不规则运移过程。这说明, 非均质介质中弥散度并不是随距离无限地增加, 弥散度为运移距离指数函数时的 TRM 能够较好地模拟溶质在较大尺度上的运移过程。

关键词: 弥散尺度效应; 两区模型; 反应性溶质; 模型应用

中图分类号: S152

文献标识码: A

1 研究背景

溶质在多孔介质中运移时, 表征其扩散特征的参数是弥散度^[1]。大量实验和理论研究表明, 在采用对流-弥散方程(Convection-Dispersion Equation, CDE)研究溶质运移问题时, 求得的弥散度不是常数, 而会随着运移距离的增加而增加, 而且由野外弥散试验确定的弥散度一般比室内土柱实验确定的弥散度大 2 到 6 个数量级^[2]。这种多孔介质中弥散度随着溶质运移距离和研究问题尺度增大而增大的现象称为水动力弥散的尺度效应^[3-6]。研究表明, 多孔介质在不同尺度上的非均质性, 特别是介质沉积特性和水力传导度的空间变异性是产生弥散尺度效应的主要原因^[2,4,7]。

基于非均质介质的水力特性具有随机分布的特点, 有关学者提出应用随机理论来克服弥散尺度效应的影响^[2,4,8]。但是, 建立水力参数的随机分布模型需要大量有代表性的点尺度资料, 而详细和准确资料的获取成本很高, 使得随机方法在实际问题中的应用有限^[9]。许多学者在探寻弥散度与运移距离的关系基础上, 采用 CDE 等确定性模型但将弥散度概化为运移距离的函数来模拟较大尺度上的溶质运移过程。Pickens 和 Grisk^[7]提出利用线性和指数函数来表征弥散度与平均运移距离的关系, 建立了相应情况下 CDE 的有限元数值模型, 许多学者研究了考虑弥散尺度效应的 CDE 的解析或半解析解^[10-13], Pang 和 Hunt^[12]还利用 8m 长的土柱实验资料验证了解的适用性。

在 CDE 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, 考虑了

收稿日期: 2009-09-17

基金项目: 十二五国家科技支撑计划课题; 国家自然科学基金(91025018)和黄土高原土壤侵蚀与旱地农业国家重点实验室开放基金(10501-280)

作者简介: 高光耀(1984-), 男, 湖北仙桃人, 博士, 助理研究员, 主要从事生态水文的模拟研究。E-mail: ggycau@gmail.com

土壤孔隙中可能存在的不动水体,更好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^[14-16]。因此,在TRM基础上考虑弥散尺度效应将能更有效地模拟非均质介质中溶质在较大尺度上的运移过程。但是,以往关于TRM弥散尺度效应的研究却较少。张德生^[17]得到了非均质土壤中TRM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。另外,张德生^[17]没有考虑溶质的吸附和降解等反应过程,没有探讨模型的物理意义和特性,也没有用实验结果检验模型的适用性。

为此,本文将弥散度概化为运移距离的线性和指数函数,并考虑溶质的吸附和降解,建立了考虑弥散尺度效应的一维溶质运移两区模型,并应用模型模拟了长度为1250cm的一维非均质土柱中的溶质运移资料,检验模型的适用性。

2 数学模型的描述

2.1 溶质运移方程 两区模型将土壤液相分为一个可动的“动态”区域和一个不可动的“停滞”区域,且可动区域内土壤水流动状态相近或一致。对流和弥散仅被限定在可动区域,不可动区域的溶质仅以扩散形式与可动区域发生质量交换,且假设质量交换速率与两区的溶质浓度差成正比^[14]。在考虑溶质吸附和降解的情况下,土壤固相(吸附区)也被分为两部分,分别与土壤液相中可动区域内和不可动区域内的溶质发生吸附作用。假设土壤液相中可动和不可动区域内的溶质吸附过程满足线性平衡方程,且土壤液相和固相中的溶质满足一阶降解方程,但降解系数不相等。根据以上物理化学过程,一维稳定流条件下两区模型的控制方程为^[18]:

$$(\theta_m + f\rho_b K_d) \frac{\partial C_m}{\partial t} = \theta_m \frac{\partial}{\partial x} \left[D_m(x) \frac{\partial C_m}{\partial x} \right] - q \frac{\partial C_m}{\partial x} - \omega(C_m - C_{im}) - (\theta_m \mu_{lm} + f\rho_b K_d \mu_{sm}) C_m \quad (1)$$

$$[\theta_{im} + (1-f)\rho_b K_d] \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \omega(C_m - C_{im}) - [\theta_{im} \mu_{lim} + (1-f)\rho_b K_d \mu_{sim}] C_{im} \quad (2)$$

式中: θ_m 和 θ_{im} 分别为土壤液相中可动和不可动区域的体积含水率(L³/L³); C_m 和 C_{im} 分别为可动和不可动区域的溶质浓度(M/L³); $q(=v\theta_m)$ 为水流通量(L/T), v 为可动区域的平均孔隙流速(L/T); ω 为质量交换系数(1/T); f 为直接与可动区域中液相溶质接触的平衡吸附区的比例; ρ_b 为土壤的干容重(M/L³); K_d 为线性吸附的经验分配系数(L³/M); μ_{lm} 和 μ_{lim} 分别为可动和不可动区域中液相溶质的一阶降解系数(1/T); μ_{sm} 和 μ_{sim} 分别为可动和不可动区域中吸附相溶质的一阶降解系数(1/T); x 为距离变量(L); t 为时间变量(T)。 $D_m(x)$ 为可动区域的水动力弥散系数(L²/T),忽略分子扩散时, $D_m(x)$ 可以表示为^[1]:

$$D_m(x) = \alpha(x)v \quad (3)$$

式中: $\alpha(x)$ 为纵向弥散度(L)。

为使方程(1)和方程(2)更加简洁,引入如下变量: $R_m=1+f\rho_b K_d/\theta_m$, $R_{im}=1+(1-f)\rho_b K_d/\theta_{im}$, $\mu_m=\mu_{lm}+f\rho_b K_d \mu_{sm}/\theta_m$ 和 $\mu_{im}=\mu_{lim}+(1-f)\rho_b K_d \mu_{sim}/\theta_{im}$,则两区模型的控制方程可以简化为:

$$\theta_m R_m \frac{\partial C_m}{\partial t} = \theta_m \frac{\partial}{\partial x} \left[D_m(x) \frac{\partial C_m}{\partial x} \right] - v\theta_m \frac{\partial C_m}{\partial x} - \omega(C_m - C_{im}) - \theta_m \mu_m C_m \quad (4)$$

$$\theta_{im} R_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \omega(C_m - C_{im}) - \theta_{im} \mu_{im} C_{im} \quad (5)$$

根据Pickens和Grisk^[7]的研究结果,本文采用线性和指数函数来表征弥散度与运移距离的关系,此时弥散度的表达式分别为:

$$\alpha(x) = kx \quad (6)$$

式中: k 为弥散度与运移距离的斜率。

$$\alpha(x) = a(1 - e^{-bx}) \quad (7)$$

式中: a 为弥散度在无穷远处的渐进值(L); b 为常数(L⁻¹)。

从式(6)和式(7)可以看出,当弥散度为距离的线性函数时,弥散度会随着距离无限制地增加,而当弥散度为距离的指数函数时,弥散度在某一距离之前会随着距离的增加而增大,之后则会趋于

渐进值 a 。另外, k , a 或 b 增加时, 弥散度随距离增加的速率都会增大, 使得弥散作用增强和弥散尺度效应越明显。将式(3)、式(6)和式(7)代入方程(4)和方程(5)即为考虑弥散尺度效应的溶质运移两区模型。为方便起见, 将弥散度为运移距离的线性函数时的两区模型简称为 TRML(Two-Region Model with Linear Scale-dependent Dispersivity), 将弥散度为运移距离的指数函数时的两区模型简称为 TRME(Two-Region Model with Exponential Scale-dependent Dispersivity), 而将不考虑弥散尺度效应即弥散度为常数的两区模型简称为 TRMC(Two-Region Model with Constant Dispersivity)。

2.2 初始和边界条件 溶质的初始浓度设为 C_i , 即:

$$C_m(x, 0) = C_{im}(x, 0) = C_i \quad 0 < x < \infty \quad (8)$$

溶质运移的下边界设为:

$$\frac{\partial C_m}{\partial x}(\infty, t) = 0 \quad 0 < t < \infty \quad (9)$$

本文考虑 3 种不同类型的上边界条件, 分别为浓度已知边界、浓度通量边界和溶质瞬时注入边界, 其数学表达式分别为式(10), 式(11)和式(12):

$$C_m(0, t) = C_0 \quad 0 < t < \infty \quad (10)$$

$$vC_m|_{x=0} - D_m(x)\frac{\partial C_m}{\partial x}|_{x=0} = vC_0 \quad 0 < t < \infty \quad (11)$$

$$vC_m|_{x=0} - D_m(x)\frac{\partial C_m}{\partial x}|_{x=0} = M\delta(t) \quad (12)$$

式中: C_0 为注入溶质的浓度 (M/L^3); M 为单位面积注入的溶质质量 (M/L^2); $\delta(t)$ 为单位脉冲函数。值得注意的是, 对 TRML 和 TRME 而言, $D_m(x=0)=0$, 此时浓度通量边界与浓度已知边界等价。

3 模型半解析解的推导

3.1 模型在 Laplace 空间的解析解 将方程(4)和方程(5)分别对 t 作 Laplace 变换, 得:

$$\theta_m D_m(x) \frac{d^2 \overline{C_m}}{dx^2} + \theta_m [D_m'(x) - v] \frac{d \overline{C_m}}{dx} - (\omega + \theta_m \mu_m + p\theta_m R_m) \overline{C_m} + \omega \overline{C_m} + \theta_m R_m C_i = 0 \quad (13)$$

$$\theta_{im} R_{im} (p \overline{C_{im}} - C_i) = \omega (\overline{C_m} - \overline{C_{im}}) - \theta_{im} \mu_{im} \overline{C_{im}} \quad (14)$$

式中: $\overline{C_m}$ 和 $\overline{C_{im}}$ 分别为 C_m 和 C_{im} 的 Laplace 变换形式; p 为 Laplace 变换参数。

由方程(14)得:

$$\overline{C_{im}} = \frac{\omega \overline{C_m} + \theta_{im} R_{im} C_i}{\omega + p\theta_{im} R_{im} + \theta_{im} \mu_{im}} \quad (15)$$

将式(15)代入方程(13)并整理得:

$$\theta_m D_m(x) \frac{d^2 \overline{C_m}}{dx^2} + \theta_m [D_m'(x) - v] \frac{d \overline{C_m}}{dx} - \left(\frac{\omega \theta_{im} R_{im}}{\omega + p\theta_{im} R_{im} + \theta_{im} \mu_{im}} + \theta_m R_m \right) (p \overline{C_m} + \varphi \overline{C_m} - C_i) = 0 \quad (16)$$

式中: $\varphi = \frac{\omega \theta_{im} \mu_{im} + \theta_m \mu_m (\omega + p\theta_{im} R_{im} + \theta_{im} \mu_{im})}{\omega \theta_{im} R_{im} + \theta_m R_m (\omega + p\theta_{im} R_{im} + \theta_{im} \mu_{im})}$ 。

令 $Y = \overline{C_m} - C_i / (p + \varphi)$, 方程(16)可简化为:

$$D_m(x) \frac{d^2 Y}{dx^2} + [D_m'(x) - v] \frac{dY}{dx} - \psi Y = 0 \quad (17)$$

式中: $\psi = \left[\frac{\omega \theta_{im} R_{im}}{\theta_m (\omega + p\theta_{im} R_{im} + \theta_{im} \mu_{im})} + R_m \right] (p + \varphi)$ 。

3.1.1 TRML 在 Laplace 空间的解析解 将式(6)代入方程(17), 引入变量 ξ , $\xi^2 = kxv$ 且 $\xi > 0$, 整理方程(17)得:

$$\xi^2 \frac{d^2 Y}{d\xi^2} + \left(1 - \frac{2}{k}\right) \xi \frac{dY}{d\xi} - \left(\frac{2}{kv}\right)^2 \psi \xi^2 Y = 0 \quad (18)$$

方程(18)属于下面类型的 Bessel 方程^[19]:

$$\xi^2 \frac{d^2 Y}{d\xi^2} + (1 - 2r) \xi \frac{dY}{d\xi} + \left(-\lambda^2 \chi^2 \xi^{2\chi} + r^2 - r^2 \chi^2\right) Y = 0 \quad (19)$$

式中: $r=1/k$, $\lambda=2\sqrt{\psi}/kv$, $\chi=1$ 。

方程(19)的通解为^[19]:

$$Y = \xi^r \{A_1 K_r(\lambda \xi) + B_1 I_r(\lambda \xi)\} \quad (20)$$

式中: $I_r(x)$ 和 $K_r(x)$ 分别为 r 阶的第一类和第二类虚宗量 Bessel 函数; A_1 和 B_1 为由边界条件确定的待定函数。故 TRML 中可动区域溶质在 Laplace 空间的浓度为:

$$\bar{C}_m = \xi^r \{A_1 K_r(\lambda \xi) + B_1 I_r(\lambda \xi)\} + C_i / (p + \varphi) \quad (21)$$

由下边界条件式(9), 当 $\xi \rightarrow \infty$ 时, $d\bar{C}_m/d\xi$ 必须有限, 结合虚宗量 Bessel 函数的性质, B_1 必须为0^[19]。根据不同的上边界条件, 可以很简单地推导出 A_1 的表达式, 具体结果见表1。根据 A_1 与式(21)和式(15), 即可得到 TRML 在 Laplace 空间的解析解。

表1 不同上边界条件下 TRML 和 TRME 在 Laplace 空间的解析解中系数 A_1 和 A_2 的表达式

上边界条件	A_1 (TRML)	A_2 (TRME)
浓度已知边界	$A_1 = \frac{C_0/p - C_i/(p + \varphi)}{2^{r-1} \Gamma(r)} \lambda^r$	$A_2 = \frac{C_0/p - C_i/(p + \varphi)}{F(\gamma, \gamma + 1; \gamma - \eta + 1; 1)}$
浓度通量边界	$A_1 = \frac{M - vC_i/(p + \varphi)}{2^{r-1} v \Gamma(r)} \lambda^r$	$A_2 = \frac{M - vC_i/(p + \varphi)}{v F(\gamma, \gamma + 1; \gamma - \eta + 1; 1)}$

3.1.2 TRME 在 Laplace 空间的解析解 将式(7)代入方程(17), 引入变量 $z=e^{-\xi}$, 则方程(17)变为:

$$z(1-z) \frac{d^2 Y}{dz^2} - \left(1 - \frac{1}{ab}\right) z \frac{dY}{dz} + \frac{1}{avb^2} \psi Y = 0 \quad (22)$$

方程(22)属于下面类型的 Gauss 超几何方程^[19]:

$$z(1-z) \frac{d^2 Y}{dz^2} - [Q - (1 + \gamma + \eta)] z \frac{dY}{dz} + \gamma \eta Y = 0 \quad (23)$$

式中: $Q=0$, $\gamma = \frac{1}{2ab} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{4a}{v} \psi}\right]$, $\eta = \frac{1}{2ab} \left[-1 - \sqrt{1 + \frac{4a}{v} \psi}\right]$ 。

由于方程(23)的自变量范围为 $1 \leq z < \infty$, 其通解可以表示成超几何函数的形式^[19]:

$$Y = A_2 z^{-\gamma} F(\gamma, \gamma + 1; \gamma - \eta + 1; z^{-1}) + B_2 z^{-\eta} F(\eta, \eta + 1; \eta - \gamma + 1; z^{-1}) \quad (24)$$

式中: $F(m, n; c; x)$ 为 Gauss 超几何函数, A_2 和 B_2 是由边界条件确定的待定函数。

故 TRME 中可动区域溶质在 Laplace 空间的浓度为:

$$\bar{C}_m = A_2 z^{-\gamma} F(\gamma, \gamma + 1; \gamma - \eta + 1; z^{-1}) + B_2 z^{-\eta} F(\eta, \eta + 1; \eta - \gamma + 1; z^{-1}) + C_i / (p + \varphi) \quad (25)$$

根据下边界条件式(9), 当 $z \rightarrow \infty$ 时, $d\bar{C}_m/d\xi$ 必须有限, 根据超几何函数的性质, B_2 必须为0^[19]。根据不同的上边界条件, 可以很简单地确定 A_2 的表达式, 具体结果如表2所示。根据 A_2 , 即可得到 TRME 在 Laplace 空间的解析解。当 $\theta_{im}=0$, 且 $\omega=0$ 和 $f=1$ 时, TRM 就转化为 CDE。因此, 由上述推导的解可直接得到考虑弥散尺度效应的 CDE 在 Laplace 空间的解析解。

3.2 Laplace 数值逆变换解 对于已经得到的模型在 Laplace 空间的解, 可以通过解析或数值 Laplace 逆变换方法得到溶质在实空间的浓度。解析逆变换需要用到复变函数理论, 反演过程比较复杂, 而且上述推导的解形式比较复杂, 不一定能通过解析逆变换得到模型在实空间的解析解。数值逆变换是一种非常有效而且简单的 Laplace 逆变换方法, 在地下水流和溶质运移问题的研究中得到广泛应用^[10-11,13]。因此, 采用合适的数值逆变换方法推求模型的半解析解是从解析的角度求解模型的最优方法。

本文采用 de Hoog 数值逆变换算法, 该方法是基于 Fourier 级数展开的逆变换算法, 不仅计算精度高, 也克服了 Stehfest 数值逆变换算法易发生数值弥散和振荡的缺点, 而且在加快级数收敛速度方面, de Hoog 所采用的 QDAL 算法 (quotient differences algorithm) 比 Crump 数值逆变换方法采用的 EPAL 算法 (epsilon partial sums algorithm) 更有效^[20]。de Hoog 算法的计算公式为^[20]:

$$C(t) = \frac{1}{T} \exp(p_0 t) \left\{ \frac{1}{2} \bar{C}(p_0) + \sum_{j=1}^{2N} \operatorname{Re} \left[\bar{C} \left(p_0 + \frac{j\pi i}{T} \right) \right] \exp \frac{j\pi i t}{T} \right\} \quad (26)$$

式中: $2T$ 是近似逆变换函数的 Fourier 级数的周期, T 要大于 $t_{\max}/2$, 一般取 $T = 0.8t_{\max}$, 其中 t_{\max} 为计算时间的上限值; $p_0 = \mu - \ln(E)/(2T)$, μ 要大于逆变换函数所有奇点坐标的实部, E 为所期望的相对误差, 实际计算中一般取 $\mu = 0$ 和 $E = 10^{-6}$; $2N$ 为级数的项数, 一般取 $N=20$ 就可以达到收敛; Re 表示复数的实部; $i = \sqrt{-1}$ 。本文编制了相应的 Matlab 计算程序, 计算模型在实空间的解。

本文所得到的 TRML 和 TRME 的半解析解在 Laplace 空间是完全连续且准确的, 而大量研究已经表明由 de Hoog 数值逆变换方法造成的误差非常微小。因此, 有理由相信半解析解的精度完全满足计算要求, 结果会比一般数值解更精确。对于所得到的半解析解, 一方面更有利于研究溶质运移的机理规律, 也可以为检验数值求解方法的精度提供参考。当然, 对于一些实际的溶质运移问题, 有可能得不到模型在 Laplace 空间的解析表达式。此时, 只能采用有限差或有限元等数值方法求解, 所得到的结果更具有有一般性。

4 模型分析

为分析模型的相关特征, 特别是弥散尺度效应对溶质运移过程的影响, 本文比较了 TRML 和 TRME 与 TRMC 模拟的穿透曲线, 分析了两者之间的对应关系。为了分析简单, 不考虑溶质的吸附和降解, 溶质的初始浓度设为 0。模型其它参数设置如下: 水流量 $q=0.4\text{m/d}$, 土壤含水量 $\theta=0.4$, 可动水体含量 $\beta(\theta_m/\theta)=0.75$, 质量交换系数 $\omega=0.01/\text{d}$, 溶质输入为瞬时输入, 注入溶质的质量 $M=100\text{kg/m}^2$ 。

图 1 为 $x_0=10\text{m}$ 处 TRML 和 TRMC 描述的穿透曲线的比较。在图 1(a) 和图 1(b) 中, TRML 中的 k 分别为 0.05 和 0.2, 而对应的 TRMC 弥散度 α_c 则取常数 $k \cdot x_0$, 即 TRMC 的弥散度为 TRML 在 0 到 x_0 运移区域之间弥散度的最大值 ($\alpha_c = \alpha_{\max} = k \cdot x_0$), 分别为 0.5m 和 2m。此时, TRML 描述的穿透曲线的分布范围要小于 TRMC 穿透曲线的分布范围, TRML 在穿透曲线的前端和尾部溶质浓度要小于 TRMC 穿透曲线的对应浓度值, 而且 TRML 穿透曲线的峰值和达到峰值所需的时间也都分别大于 TRMC 穿透曲线的对应值, 如图 1 所示。这是由于 TRML 的弥散度是从 0 线性递增至 $k \cdot x_0$, 其在整个区域的弥散度平均值要小于 TRMC 的弥散度, 即 TRML 的弥散效应要小于 TRMC 的弥散效应。图 2 为 $x_0=10\text{m}$ 处 TRME 和 TRMC 描述的穿透曲线的比较。在图 2a 和 2b 中, TRME 中弥散度的系数分别为 $a=2\text{m}$, $b=0.02/\text{m}$ 和 $a=5\text{m}$, $b=0.05/\text{m}$ 。TRMC 中的弥散度 α_c 取 TRME 弥散度的最大值, 即 $\alpha_c = \alpha_{\max} = a(1 - e^{-bx_0})$, 分别为 0.36m 和 1.97m。很明显, 从 TRME 和 TRMC 穿透曲线的比较中可以得到与前面 TRML 和 TRMC 对比分析一致的结果, 这可从图 2 中得到证实。

根据上面的分析, 如果 TRMC 的弥散度取小于 α_{\max} 的某一个值, 则 TRMC 穿透曲线有可能与 TRML 或 TRME 描述的穿透曲线一致, 本文将满足这个结果的弥散度定义为考虑弥散尺度效应的两区模型的等效弥散度 (α_e)。等效弥散度反映了整个运移区域弥散尺度效应的累积效应, 是整个区域弥散度的平均值。本文采用算术平均的方法来近似计算 α_e , 即:

$$\alpha_e = \int_0^{x_0} \alpha(x) dx / \int_0^{x_0} dx \quad (27)$$

根据式(27)和式(6), 可得 TRML 的等效弥散度为:

$$\alpha_e = \frac{1}{x_0} \int_0^{x_0} kx dx = \frac{1}{2} kx_0 \quad (28)$$

TRME 的等效弥散度由式(27)和式(7)计算:

$$\alpha_e = \frac{1}{x_0} \int_0^{x_0} a(1 - e^{-bx}) dx = \frac{a(x_0 + e^{-bx_0}/b) - a/b}{x_0} \quad (29)$$

根据式(28), 当 k 为 0.05 和 0.2 时, 计算的图 1(a) 和图 1(b) 中 TRML 的等效弥散度 α_e 分别为 0.25m 和 1m。当 TRMC 的弥散度取 TRML 等效弥散度时 ($\alpha_c = \alpha_e$), 其模拟的穿透曲线见图 1。当 $a=2\text{m}$, $b=0.02/\text{m}$ 和 $a=5\text{m}$, $b=0.05/\text{m}$ 时, 由式(29)计算的图 2(a) 和图 2(b) 中 TRME 的等效弥散度 α_e 分别为 0.19m 和 1.07m。此时, TRMC 模拟的穿透曲线见图 2。从图 1 和图 2 可以看出, 采用 α_e 时, TRMC 描述的穿透曲线与 TRML 和 TRME 的模拟结果吻合较好, 特别是 $k=0.05$ 和 $a=2\text{m}$, $b=0.02/\text{m}$ 时, 结果非常一致。但当 k 增加到 0.2, a 和 b 分别增加到 5m 和 0.05/m 时, 即弥散尺度效应增强时, TRMC 的模拟结果与 TRML 和 TRME 之间有一定偏差, TRMC 在浓度峰附近的模拟值要稍大于 TRML 和 TRME 的计算结果, 如图 1(b) 和图 2(b) 所示。以上对比分析的结果表明, 采用算术平均方法计算的等效弥散度 α_e 反映了弥散尺度效应的影响, 可以近似作为区域弥散度的平均值。采用等效弥散度时, TRMC 描述的穿透曲线可以近似作为考虑弥散尺度效应的 TRML 和 TRME 的模拟结果, 但是这种近似的精确程度会随着弥散尺度效应的增大而有所降低。

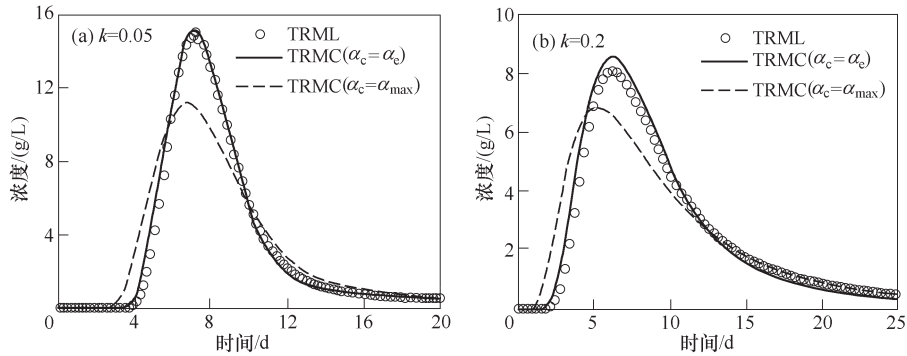


图 1 $x_0=10\text{m}$ 处 TRML 和 TRMC 模拟的穿透曲线比较

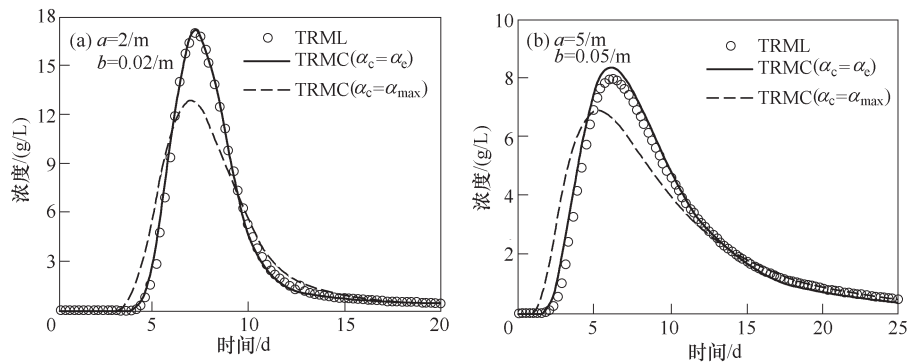


图 2 $x_0=10\text{m}$ 处 TRME 和 TRMC 模拟的穿透曲线比较

5 模型应用

为检验模型的适用性, 分别采用 TRML、TRME 和 TRMC 对一维非均质长土柱中 NaCl 运移的实验资料进行模拟。该实验是 Huang 等^[21] 在室内采用长度为 1 250cm, 横截面为 10cm×10cm 的水平土柱进行的。到目前为止, 该实验是在实验室进行的尺度最大的非均质土柱实验之一。土柱中装填黏土、细砂、中砂、粗砂、砾石和卵石(粒径 1~2cm)等介质, 装填过程中通过混合形成各种层状、透镜状等不规则的形状使介质具有和天然土壤相似的强非均质结构。在土柱装填过程中, 每隔 100cm 埋设

一个电导率测定探头，且均埋设在土柱横断面的中部。当土柱饱和并获得稳定流场条件后，注入浓度为 $C_0=6\text{g/L}$ 的 NaCl 溶液。实验测得的非均质土柱的总孔隙率和水流量分别为 0.37 和 0.239cm/min 。实验过程中，通过电导率读数以及 NaCl 溶液浓度和相应电导率值的校正曲线来确定各测点不同时刻 NaCl 的实测浓度值，从而得到各测点的穿透曲线。实验装置和详细过程可参见文献[21]。

对保守性溶质 NaCl 而言，土柱中土样的有机质含量可以忽略不计^[21]，故不考虑溶质的吸附和降解作用。模拟过程中，首先利用 TRMC 拟合 1 200cm 处的穿透曲线，得到可动水体含量 $\beta=0.6901$ ，质量交换系数 $\omega=2.9417\times 10^{-5}/\text{min}$ 和弥散系数 $D_m=60.484\text{cm}^2/\text{min}$ 。TRML 和 TRME 中的 β 和 ω 取 TRMC 拟合得到的结果，即分别为 0.690 1 和 $2.9417\times 10^{-5}/\text{min}$ 。TRML 中的系数 k ，TRME 中的 a 和 b ，则通过拟合 1 200cm 处的穿透曲线得到，结果为 $k=0.0832$ ， $a=56.292\text{cm}$ 和 $b=0.0179/\text{cm}$ 。利用以上拟合的 1 200cm 处的参数，分别采用以上 3 种模型对 1 200cm 之前其它位置处的的穿透曲线进行预测。模拟效果采用决定系数 r^2 和均方根误差 RMSE (Root Mean Square Error) 这两个指标评价， r^2 和 RMSE 表示如下：

$$r^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_{io} - C_{ie})^2}{\sum_{i=1}^N (C_{io} - \bar{C}_{io})^2} \quad (30)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_{io} - C_{ie})^2} \quad (31)$$

式中： C_{io} ， C_{ie} 分别为实测和模拟浓度值； N 为观测点处的浓度数据个数； \bar{C}_{io} 为实测浓度的平均值。

图 3 为土柱 1 200cm 处溶质穿透曲线实测值与 TRME、TRMC 和 TRML 的拟合结果比较，其中 TRME 拟合的 $r^2=0.9786$ 和 $\text{RMSE}=0.0489$ ，TRMC 拟合的 $r^2=0.9903$ 和 $\text{RMSE}=0.0330$ ，TRML 拟合的 $r^2=0.9847$ 和 $\text{RMSE}=0.0414$ ，都比较接近。从图 3 也可以看出，TRME、TRMC 和 TRML 的拟合值比较一致，与实测结果都比较吻合。

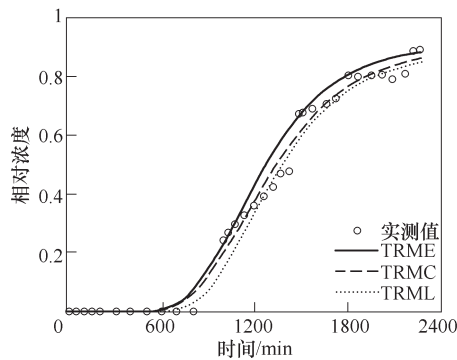


图 3 土柱 1 200cm 处穿透曲线实测值与 TRME、TRMC 和 TRML 拟合结果比较

图 4 分别是 400cm、600cm、800cm 和 1 000cm 处浓度实测值与 TRME、TRMC 和 TRML 的预测结果比较，模型预测效果的指标系数值 r^2 和 RMSE 见表 2。从图 4 可以看出，TRMC 和 TRML 都不能较好地模拟不同位置处的穿透曲线，预测结果与实测穿透曲线的形状有较大偏差，而且 TRMC 和 TRML 在穿透曲线前端和中部的模拟值要明显小于实测值。与 TRMC 和 TRML 相比，TRME 的模拟精度有了较大提高，预测结果与实测值比较吻合，较好地描述了穿透曲线的不规则特征，如图 4 所示。从表 2 也可以看出，TRME 预测结果的 r^2 要大于 TRMC 和 TRML 对应的 r^2 值，而 RMSE 则要小于 TRMC 和 TRML 对应的 RMSE 值。

需要指出的是，尽管长土柱溶质运移实验是在饱和稳定流场条件下开展的，由于装填介质的非均质性，各个断面处的渗透流速不相等。模型预测采用的是 1 200cm 断面处得到的渗透流速，但该流速并不能代表其它各断面的实际渗透流速，会有一些偏差。TRM 控制方程的弥散项在概念上可以反映孔隙流速在微观和宏观尺度上的不均匀性对溶质运移的影响，但忽略流速随位置的变化也会对

TRME、TRMC和TRML预测结果与实测值的差异产生一定影响。因此，非均质介质中弥散尺度效应和流速差异对溶质运移过程的综合影响需要更深入的研究。

表2 TRME, TRMC和TRML预测结果的决定系数 r^2 和均方根误差RMSE

距离/cm	TRME		TRMC		TRML	
	r^2	RMSE	r^2	RMSE	r^2	RMSE
200	0.844 3	0.119 5	0.726 2	0.158 5	0.497 1	0.214 9
300	0.799 1	0.141 8	0.827 3	0.131 4	0.795 5	0.143 0
400	0.900 7	0.097 7	0.841 3	0.123 5	0.755 1	0.153 4
500	0.879 7	0.128 4	0.750 6	0.184 9	0.632 5	0.224 4
600	0.919 2	0.094 0	0.799 1	0.148 2	0.650 3	0.195 5
700	0.875 3	0.112 5	0.934 3	0.081 7	0.873 4	0.113 3
800	0.955 2	0.074 0	0.904 8	0.107 9	0.833 7	0.142 6
900	0.981 0	0.050 4	0.953 6	0.078 7	0.914 9	0.106 6
1000	0.990 3	0.034 9	0.993 0	0.029 6	0.982 1	0.047 4
1100	0.984 9	0.040 0	0.989 7	0.033 1	0.968 7	0.057 6

以上模拟结果的对比分析表明：假定弥散度为常数或者随距离无限制地线性增加时，TRM都不能很好地模拟非均质土柱中溶质的运移过程；而当弥散度随运移距离呈指数递增关系时(即弥散度在某一距离范围内随运移距离增加而增大，之后趋于常数)，TRM则能较好地描述非均质土柱中溶质运移的不规则特征。许多研究也都表明，非均质介质中弥散度并不是随距离无限制地增加，而会逐渐趋于稳定值^[7-8]。因此，指数函数较适宜描述非均质土柱中弥散度随距离的变化规律，在此基础上建立的考虑弥散尺度效应的TRM能够较好地模拟非均质介质中溶质在较大尺度上的运移规律。

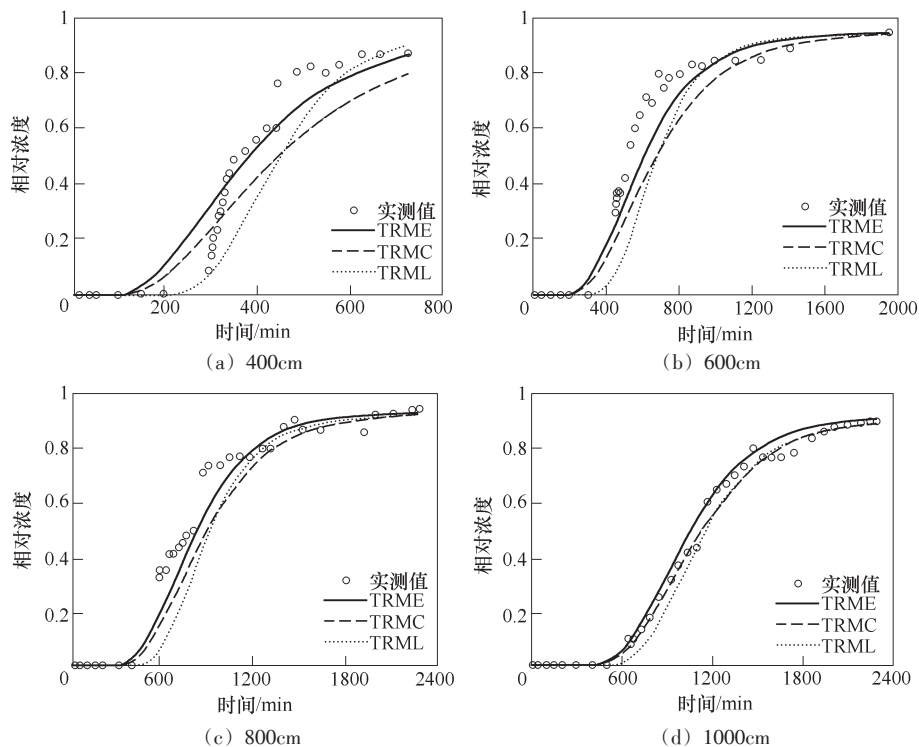


图4 土柱不同位置处穿透曲线实测值与TRME、TRMC和TRML预测结果比较

6 结论

本文建立了考虑弥散尺度效应的反应性溶质运移的一维两区模型(TRM)，分析了考虑弥散尺度

效应与弥散度为常数的TRM之间的对应关系,提出了考虑弥散尺度效应的TRM的等效弥散度的计算方法,通过模拟一维非均质长土柱中溶质的运移过程来检验模型的适用性,得到以下结论:采用算术平均方法计算的等效弥散度反应了弥散尺度效应的影响,可以近似作为区域弥散度的平均值,但这种近似的精确程度会在弥散尺度效应增强时有所降低;相比于不考虑弥散尺度效应或将弥散度概化为运移距离的线性函数的TRM,弥散度为运移距离的指数函数时的TRM的模拟结果与实测值吻合更好,因此,在应用TRM模拟较大尺度上溶质运移过程时,应该考虑弥散尺度效应的影响,而非均质介质中弥散度并不是随距离无限制地增加。将弥散度概化为运移距离的指数函数可以较好地表征弥散尺度效应的影响,在此基础上建立的TRM能够较好地模拟非均质介质中溶质在较大尺度上的运移规律。

致谢: 本文非均质长土柱实验资料由中山大学张仁铎教授提供,并得到了西安理工大学张德生教授的帮助,在此致谢。

参 考 文 献:

- [1] Bear J. 多孔介质流体力学[M]. 李竞生,等译,北京:中国建筑工业出版社,1982.
- [2] 杨金忠,蔡树英,黄冠华,等. 多孔介质中水分及溶质运移的随机理论[M]. 北京:科学出版社,2000.
- [3] 黄康乐. 多孔介质水力弥散尺度效应的研究-现状与展望[J]. 水文地质工程地质,1991,18(3): 25-26, 31.
- [4] 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.
- [5] 李国敏,陈崇希. 空隙介质水力弥散尺度效应的分形特征及弥散度初步估计[J]. 地球科学-中国地质大学学报,1995,20(4): 405-409.
- [6] 成建梅. 考虑可信度的弥散尺度效应分析[J]. 水利学报,2002(2): 90-94.
- [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] Zhang D. Stochastic methods for flow in porous media: coping with uncertainties[M]. Academic Press, San Diego, 2002.
- [9] Wang H, Persaud N, Zhou X. Specifying scale-dependent dispersivity in numerical solutions of the convection-dispersion equation[J]. Soil Science Society of America Journal, 2006, 70(5): 1843-1850.
- [10] Yates S R. An analytical solution for one-dimensional transport in heterogeneous porous media[J]. Water Resources Research, 1990, 26(10): 2331-2338.
- [11] Yates S R. An analytical solution for one-dimensional transport in porous media with an exponential dispersion function[J]. Water Resources Research, 1992, 28(8): 2149-2154.
- [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] 冯绍元,高光耀,霍再林,等. 考虑弥散尺度效应的抽水井附近溶质运移模型及半解析解[J]. 水利学报,2010,41(9): 1024-1031.
- [14] 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.
- [15] 王丽,王金生,杨志峰,等. 不流动水对包气带溶质运移的影响研究进展[J]. 水利学报,2001(12): 68-73.
- [16] 高光耀,冯绍元,黄冠华,等. 不同数学模型模拟非均质土壤中溶质大尺度运移的对比分析[J]. 水利学报,2010,41(2): 164-172.
- [17] 张德生,沈冰,沈晋,等. 稳态条件下土壤溶质运移的两区模型及其解析解[J]. 水利学报,2003,34(10): 44-50.
- [18] van Genuchten M Th, Wagenet R J. Two-Site/Two-Region Models for pesticide transport and degradation: theoretical development and analytical solutions [J]. Soil Science Society of America Journal, 1989, 53(5):

1303–1310.

- [19] Abramowitz M, Stegun I A . Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables [M]. Washington, U. S. Government Printing Office, 1972 .
- [20] de Hoog F R, Knight J H, Stokes A N . An improved method for numerical inversion of Laplace transforms[J] . SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, 1982, 3(3): 357–366 .
- [21] Huang K, Toride N, van Genuchten M Th . Experimental investigation of solute transport in large, homogeneous and heterogeneous, saturated soil columns[J] . Transport in Porous Media, 1995, 18(3): 283–302 .

One-dimensional two-region model for reactive solute transport with scale-dependent dispersion and its application

GAO Guang-yao^{1, 3}, FENG Shao-yuan^{2, 3}, MA Ying², ZHAN Hong-bin⁴

(1. *Research Center for Eco-Environmental Sciences, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100085, China;*
2. *Yangzhou University, Yangzhou 225009, China;* 3. *China Agricultural University, Beijing 100083, China;*
4. *Texas A&M University, College Station, TX 77843, USA*)

Abstract: This study proposed a two-region model (TRM) to describe reactive solute transport with scale-dependent dispersion in heterogeneous porous media. The model was derived from the conventional TRM but assumed the dispersivity to be a linear and exponential function of travel distance. The linear adsorption and first-order degradation of solute were also considered in the model. The Laplace transform technique and de Hoog numerical inversion method were applied to solve the developed model. The breakthrough curves (BTCs) obtained from TRM with scale-dependent and constant dispersion were compared, and the effective dispersivity for TRM with scale-dependent dispersion was calculated by averaging the distance-dependent dispersivity with arithmetic method. This effective dispersivity could reflect the accumulated scale-dependent dispersion effect over the entire travel domain, but discrepancy will occur if the dispersion effect is great. The applicability of the proposed model was tested with concentration data obtained from a 1250cm long and highly heterogeneous soil column. The simulation results indicated that the TRM with constant and linear distance-dependent dispersivity were unable to describe the measured BTCs in the column adequately, while the TRM with exponential distance-dependent dispersivity satisfactorily captured the evolution of BTCs. Therefore, the proposed TRM with scale-dependent dispersion by assuming the dispersivity to be a function of distance is a simple and practical approach to describe solute transport at relatively large scale in heterogeneous porous media, but the increase of dispersivity with distance is limited as it has bounds.

Key words: scale-dependent dispersion; two-region model; reactive solute; model application

(责任编辑: 吕斌秀)