初始浓度分布对一维含水层中溶质运移的影响

曹孟雄,陈 刚*,胡 成 (中国地质大学(武汉)环境学院,湖北 武汉 430074)

摘要:为了研究含水层中任意初始浓度分布条件下一维含水层介质中的溶质运移规律,采用对流-弥散方程构建考虑任意初始浓度分布条件下一维含水层介质中溶质运移动力学数学模型,模型采用持续注入示踪剂、瞬时注入示踪剂和脉冲注入示踪剂 3 种不同的边界条件,数学模型的求解采用格林函数数法.并通过开展室内一维砂柱实验进一步验证模型的科学性和适用性.结果表明:初始条件对溶质运移结果的影响不容忽视,新模型能够模拟不同初始条件下的一维溶质运移过程;新模型通过将流速变化处理为线性变化可以用来研究非稳定流条件下溶质运移过程;新模型是前人模型的完善,模型包含 3 种不同类型的内边界条件和任意的初始条件,新模型也能为地热开发利用提供理论依据.

关键词:初始条件;溶质运移;解析解;格林函数法

中图分类号:X523 **文献标识码**:A **文章编号**:1000-6923(2021)05-2226-06

Impact of initial concentration distribution on solute transport in the one-dimensional aquifer. CAO Meng-xiong, CHEN Gang*, HU Cheng (School of Environmental Studies, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China). *China Environmental Science*, 2021,41(5):2226~2231

Abstract: This paper developed a novel mathematical model to study the impact of arbitrary initial condition on solute transport in the one-dimensional aquifer. The new mathematical model was developed by including the arbitrary initial condition and three types of boundary conditions (continuous solute input condition、instantaneous solute input condition and pulse-type boundary condition), and analytical solution was derived using the Green's function method. To test the assumptions used in the mathematical model, a laboratory experiment was conducted. Results showed that: The influence of initial conditions on the solute transport results could not be ignored. The experimental results showed that the new model could simulate the one-dimensional solute transport process under arbitrary initial conditions; The new model could be used to study the solute transport process in unsteady flow by linearizing the flow velocity change; The new model improved the previous model by including three different types of inner boundary conditions and arbitrary initial conditions, it could also provide theoretical basis for improving geothermal exploitation and utilization.

Key words: initial conditions; solute transport; analytical solution; Green's function method

受污染的地下水会给人类健康带来危害,如何高效修复受污染含水层的问题日益受到重视.受污染的含水层修复的核心内容是溶质在含水层运移过程的机理研究,查明含水层的物理化学参数,这一直是国内外研究的热点问题.到目前为止,国内外学者先后从不同的角度建立了一系列研究溶质在含水层介质中运移的理论与模型,这些模型主要是对流弥散模型(ADE)、两区模型(MIM)、连续时间随机游走模型(CTRW)、对流对数正态传递函数模型(CLT)、传递函数模型(TFM)、分数阶 ADE 模型(FADE)和边界层弥散模型(BLD)等[2-4].MIM 模型已经广泛用于模拟室内一维均质砂柱[5-7]、非均质砂柱[8]和团聚结构土壤等[9-11]中的溶质运移规律.基于水动力弥散理论,ADE 模型已经成为经典的溶质运移模型,被广泛用于研究重金属、有机污染物、化肥等在含水层介质中的运移机理.

为了获取含水层的与溶质运移有关的物理化学参数,往往会开展一系列的溶质运移实验展开研究.其中,一维砂柱已经广泛用于获取含水层重要的物理化学参数,例如孔隙度、弥散度、化学反应速率和吸附解吸系数等参数[12-15].但是现有的模型中包含一个重要的假定条件:假定含水层中的初始污染物浓度是一个恒定的值,即现有的研究往往忽略了初始条件对溶质运移的影响.事实上,在受污染的含水层中,污染物的分布往往不是均一的,特别是重金属矿体污染的地区,由于重金属矿体的零星分布造成含水层中重金属的污染物呈现出较强的非均匀分布.此外,针对河岸带和滨海地区含水层,水位波动除了会造成含水层中污染物呈现出不同情况的分布

收稿日期:2020-10-03

基金项目:国家自然科学基金资助项目(41772259)

* 责任作者, 副教授, chengang@cug.edu.cn

以外,还会造成地下水流速的变化.

因此,本研究将采用 ADE 模型构建任意初始条件下的一维溶质运移动力学数学模型,模型采用持续注入示踪剂、瞬时注入示踪剂和脉冲注入示踪剂 3 种不同的边界条件,数学模型的求解采用格林函数法,为了研究非稳定流对溶质运移的影响,本研究将流速变化处理为线性变化来刻画非稳定流,最后,通过开展室内一维砂柱实验进一步验证模型的科学性和适用性.

1　模型构建

假定含水层介质为均质、各项同性,含水层中的渗流满足达西定律,含水层介质中的溶质迁移转化满足对流弥散方程.本研究采用一维坐标建立考虑含水层中任意初始污染物浓度条件的溶质运移模型,因此,描述含水层介质中的溶质运移的动力学方程可以表示为:

$$\frac{\partial C}{\partial t}=D\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}-v\frac{\partial C}{\partial z},\ z\geqslant 0 \tag{1}$$

式中:C 表示污染物的浓度;v 是地下水的实际流速,且 $v=u/\theta$,u 是地下水的达西流速;θ表示孔隙度(无量纲);t 是时间;z 是距离变量;D 表示水动力弥散系数.以上变量是无量纲化办法,无单位,下同.考虑分子扩散系数时,水动力弥散系数可以表示为:

$$D=\alpha v+D_0 \tag{2}$$

式中:α表示含水层的弥散度, L.

相比前人的研究,本研究考虑了任意初始条件对溶质运移结果的影响,因此,含水层中污染物的初始条件表示为:

$$C(z,t=0)=f(z) \tag{3}$$

式中: $f(z)$ 表示任意函数.

本研究建立的模型考虑了 3 种不同的内边界条件,3 种边界条件的区别在于示踪剂的注入类型,第一种是持续注入,第二种是脉冲注入,第三种是瞬时注入,3 种内边界表示如下:

$$C(z=0,t)=C_0, \tag{4a}$$

$$C(z=0,t)=\begin{cases}C_0 & t\leqslant t_0\\ 0 & t>t_0\end{cases}, \tag{4b}$$

$$C(z=0,t)=\frac{M\delta(t)}{v} \tag{4c}$$

式中:C_0 表示注入示踪剂的浓度;t_0 是脉冲注入示踪剂的时间; M是单位面积上的示踪剂总质量;$\delta(t)$是单位脉冲函数.

基于模型的假定条件,本研究所采用的外边界条件为:

$$C(z\to\infty,t)=0 \tag{5}$$

2　新解析解的推导

方程(1)~(5)构成了任意初始条件下考虑 3 种不同的内边界条件的一维溶质运移模型,现有的研究将初始条件假定为均一的背景值,在求解该类模型时采用无量纲变换的方法将初始值化为零,从而采用拉普拉斯变换方法求解模型的解析解.为进一步研究任意初始条件对含水层中溶质运移结果的影响,本研究采用格林函数方法求解该模型获取时域空间下的解析解.类似于前人的研究,格林函数法可以表示为[16-18]:

$$\iint G(z,x;t,\tau)L(C)\mathrm{d}x\mathrm{d}\tau-\iint CL^*(C)\mathrm{d}x\mathrm{d}\tau=\text{边界项}+\text{初始项} \tag{6}$$

式中: $L=\frac{\partial}{\partial t}-D\frac{\partial^2}{\partial z^2}+v\frac{\partial}{\partial z}$, $L^*=-\frac{\partial}{\partial t}-D\frac{\partial^2}{\partial z^2}-v\frac{\partial}{\partial z}$, x 和 τ分别表示空间和时间的虚拟积分变量, $G(z,x;t,\tau)$表示半无限空间下本研究描述问题的格林函数,因此,数学模型(1)~(5)的解可以表示为:

$$C(z,t)=\int_0^\infty G(z,x;t,\tau)\Big|_{\tau=0}f(x)\mathrm{d}x+\int_0^t C(x=0,\tau)\left[vG+D\frac{\partial G}{\partial x}\right]\Bigg|_{x=0}\mathrm{d}\tau \tag{7}$$

式中: $G(z,x;t,\tau)$是一个未知的函数,类似于前人的研究,$G(z,x;t,\tau)$采用以下函数获取:

$$L^*(C)=\delta(z-x,t-\tau) \tag{8}$$

求解方程(8)得:

$$G(z,x;t,\tau)=\frac{\mathrm{e}^{\left[v\frac{2(z-x)-v(t-\tau)}{4D}\right]}}{2\sqrt{D\pi(t-\tau)}}\left\{\mathrm{e}^{\left[-\frac{(z-x)^2}{4D(t-\tau)}\right]}-\mathrm{e}^{\left[-\frac{(z+x)^2}{4D(t-\tau)}\right]}\right\} \tag{9}$$

将方程(9)带入方程(7)可得任意初始条件下一维含水层中溶质运移模型的解析解:

$$C(z,t)=\int_0^\infty\frac{1}{2\sqrt{D\pi t}}\exp\left[v\frac{2(z-x)-vt}{4D}\right]$$

$$\left\{\exp\left[-\frac{(z-x)^2}{4Dt}\right]-\exp\left[-\frac{(z+x)^2}{4Dt}\right]\right\}f(x)\mathrm{d}x+$$

$$\int_0^t \frac{zC(z,x=0;t,\tau)}{2\sqrt{D\pi(t-\tau)^3}}\exp\left[v\frac{2z-v(t-\tau)}{4D}\right]\exp \tag{10}$$

$$\left[-\frac{z^2}{4D(t-\tau)}\right]\mathrm{d}\tau$$

3 新解析解的校准

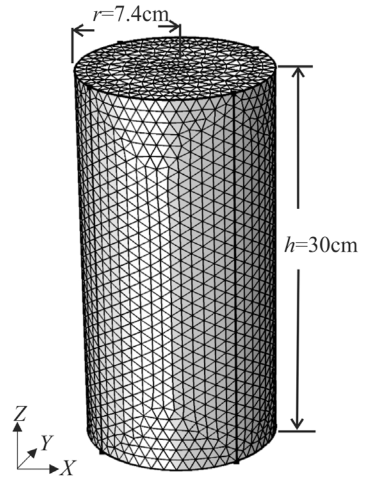

图 1 采用 COMSOL 软件建立的数值模型网格剖面图

Fig.1 The grid mesh of the aquifer system used in the Galerkin finite-element COMSOL Multiphysics program

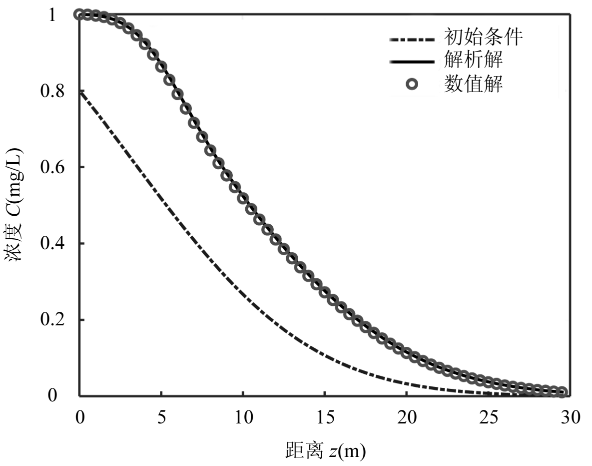

图 2 解析解和数值解的对比

Fig.2 Comparison of analytical solution and numerical solution

本研究构建了考虑任意初始条件下一维溶质运移模型,为了检验新构建模型的精度,采用 COMSOL 数值模拟软件构建任意初始条件下的一维溶质运移数值模型,构建数值模型网格剖分系统如图 1 所示.编写相应的 MATLAB 计算机程序用于计算本研究构建的解析解模型.为了使得砂柱中的示踪剂的初始分布不是一个常数值,首先采用公式(10)在初始浓度为零进行计算,模型计算参数为 t=20min, v=0.1m/min, α=20m,注入示踪剂的浓度为 0.8mg/L,计算的浓度分布如图 2 中虚线所示,以这个浓度分布作为解析解和数值解的初始值在其他参数下进行重新计算,计算结果如图 2 所示,解析解和数值解能够很好的拟合,进而验证解析解的精度,校准采用模型参数是 t=50min, v=0.1m/min, α=0.5m.

4 模型的影响因素分析

4.1 不同初始条件的影响

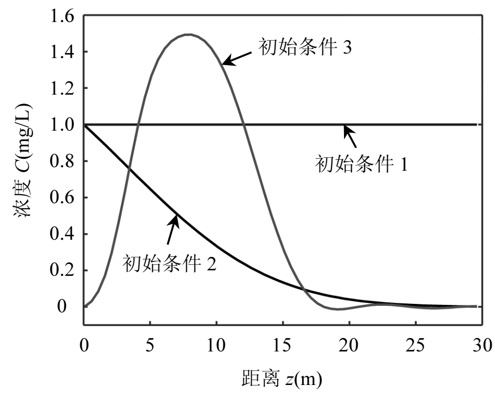

图 3 含水层中初始浓度分布

Fig.3 Distribution of initial concentration in the porous medium

为了研究不同初始条件下溶质运移的机理,设置情景 1、情景 2 和情景 3 分别对应图 3 中的初始条件 1、初始条件 2 和初始条件 3.在 3 种初始条件下分别采用持续注入、脉冲注入和瞬时注入 3 种边界条件在 t=50min,v=0.1m/min,α=0.5m,C_0=2mg/L 进行模拟,模拟结果如图 4 所示.对于情景 1,现有的研究均通过无量纲变换将均一的初始值化为零,从而不考虑初始条件对结果的影响,然而,实际含水层通常已经遭受了不同程度的污染,含水层中通常有着非均匀的污染物分布,此外,现有研究中报道的一维溶质运移实验数据除了存在严重的拖尾现象以外,还存在双峰现象[19-20], Xie 等[19]采用双重孔隙介质模型来解释双峰现象,事实上,初始条件也可能造成这种现象,本研究的模型提供了一种解释该现象的思路.由图 4 可知,不同的初始条件对模型计算结果

存在较为明显的影响,本研究建立的模型能很好的模拟任意初始条件下溶质的运移情况.

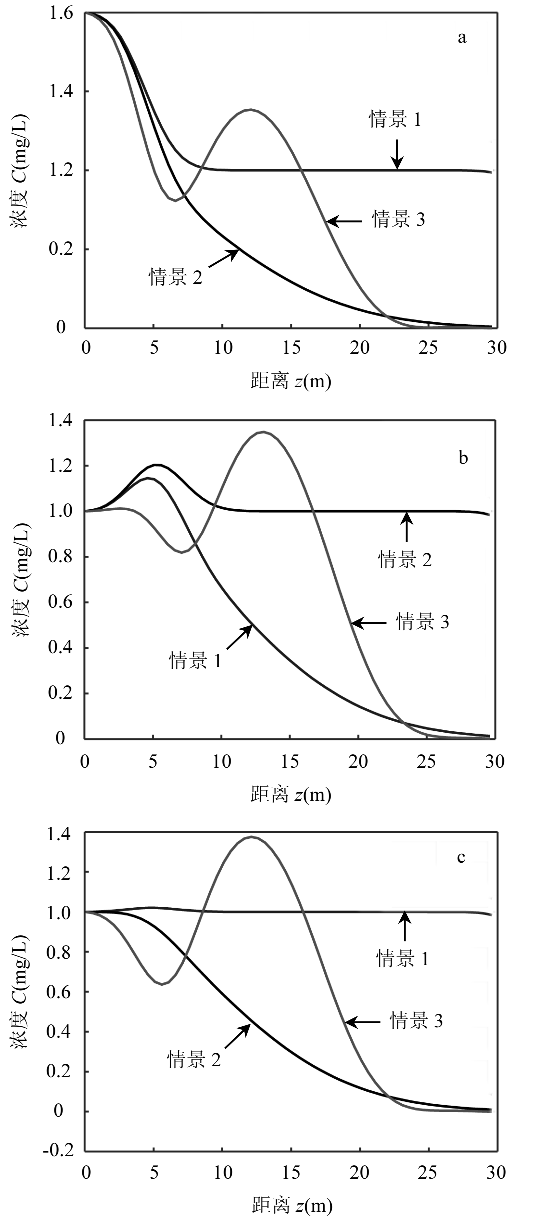

图 4　不同初始条件下含水层介质中浓度分布情况

Fig.4　Distribution of concentration with different initial condition

a:第一种边界条件; b:第二种边界条件; c:第三种边界条件

4.2　非稳定流条件对结果的影响

对于实际含水层,特别是滨海海岸带和河岸带含水层,由于潮汐作用或者河水位波动会引起含水层中地下水流速的变化.为研究河水位或者河水位上升条件对溶质运移的影响,本研究采用类似于 Chen 所采用的方法,将流速变化处理为线性变化来刻画非稳定流[21],结合前文采用的初始条件 2,本研究采用图 5 所示的流速变化来模拟非稳定流条件下的溶质迁移过程.模型中所采用的参数为:t=50min, v=0.1m/min, α=0.5m,C_0=1mg/L.图 6 是稳定流和非稳定流条件下含水层介质中溶质迁移情况对比,结果表明,当地下水流速随时间逐渐增加时,含水层介质中的溶质迁移范围比较大,采用本研究建立的模型能用于刻画非稳定流条件下溶质运移过程.

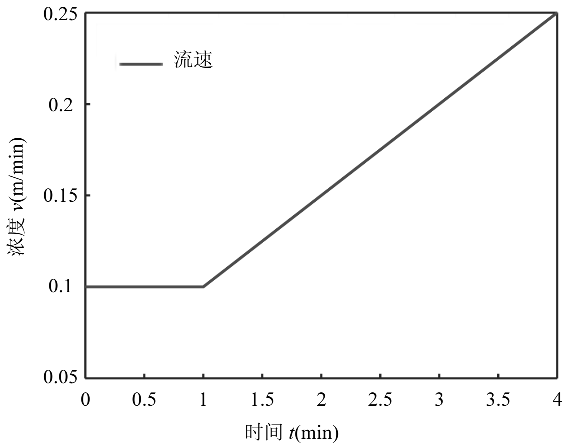

图 5　流速变化曲线

Fig.5　The curve of velocity

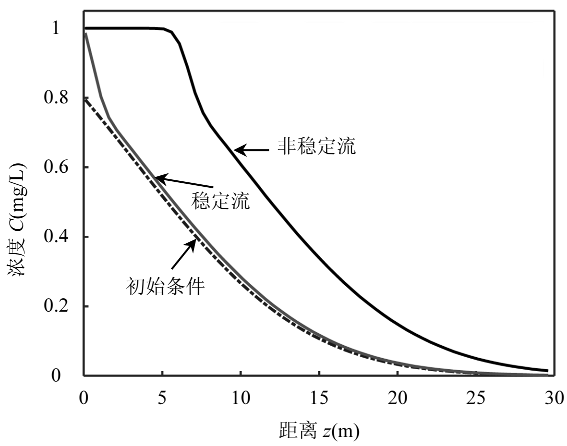

图 6　稳定流和非稳定流条件下溶质运移结果

Fig.6　Comparation of steady and unsteady flows

5　模型的应用

为了检验模型的适用性,本研究选取一个长为 100.00cm、内径为 6.50cm 的一维均质砂柱开展溶质运移实验,研究不同初始条件和非稳定流条件下溶质运移过程.选取粒径为 0.75~0.90mm 的石英砂作为含水层介质,为了避免石英砂中存在反应性物质,在装填石英砂前,首先采用稀盐酸进行 5 次清洗,然后用自来水清洗;填充的石英砂高度为 30cm,含水

层介质两端的水头差为 60cm,采用体积法测量得到的含水层介质孔隙度为 0.42,下游出水口流量为 $0.0019m^3/d$,结合上述实测数据,计算得到的渗透系数为7.2m/d,实际流速为0.0238m/min,由砂柱底部每隔 5cm 安装有一个阀门用于安装盐分传感器进行浓度监测,实验中选取距离砂柱底部分别为 5, 10 和 20cm 位置处进行监测(后文分别称为观测孔 1、观测孔 2 和观测孔 3).在开展实验前,首先以恒定流量 $0.0019m^3/d$ 将清水注入砂柱中,使得含水层介质中的溶液浓度均一.为了排除生物化学反应以及吸附解吸作用等因素对溶质运移结果的影响,采用 NaCl 作为溶质.为了研究初始条件对溶质运移的影响,类似于前文情景 2 的模拟,需要先配置好 100 和 200mg/L 的 NaCl 溶液.首先将 100mg/L 的 NaCl 溶液以 $0.0019m^3/d$ 的流量注入砂柱中,注入时间为 1min,然后立即采用清水以相同的流量注入 5min,此时砂柱中的污染物分布作为初始条件,再将配置的 200mg/L 的 NaCl 溶液以相同的流速注入砂柱.

本研究采用新建立的模型解释观测孔 1 和观测孔 2 的实测数据进一步研究模型的适用性,首先将模型的初始条件设置为 0,然后拟合观测孔 1、观测孔 2 和观测孔 3 处的穿透曲线,模型参数设置如下:v=0.0238m/min,α=0.1cm,C_0=100mg/L.拟合的结果如图 7 所示,观测孔 1 和观测孔 2 的实测数据能和解析解模型很好的拟合,此时,整个砂柱中的溶质分布如图 8 所示.

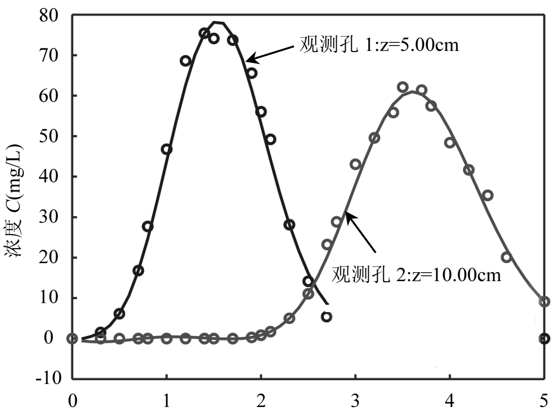

图 7 初始条件拟合

Fig.7 Besting fitting the observed data

○为观测孔,曲线为解析解

以图 8 中的溶质分布作为初始值,将 200mg/L 的 NaCl 溶液以 $0.0019m^3/d$ 的流量注入砂柱中,持续对观测孔 1 和观测孔 2 进行观测,本研究建立的模型拟合观测数据结果如图 9 所示,模型参数设置和图 7 一致.结果表明,本研究建立的一维溶质运移模型能较好的刻画任意初始条件下溶质迁移过程,需要注意的是,为了确保流场是稳定的,整个实验过程不是间断的.

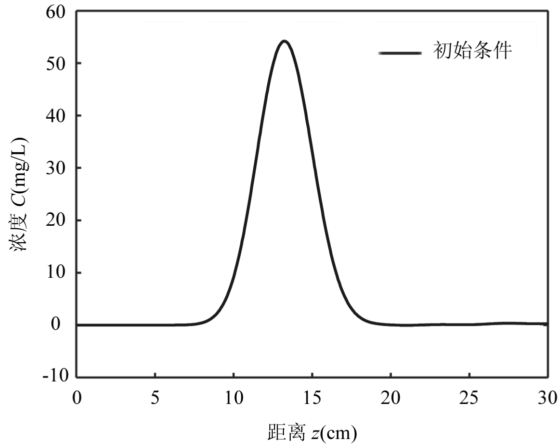

图 8 砂柱中溶质分布

Fig.8 Distribution of tracer in the column

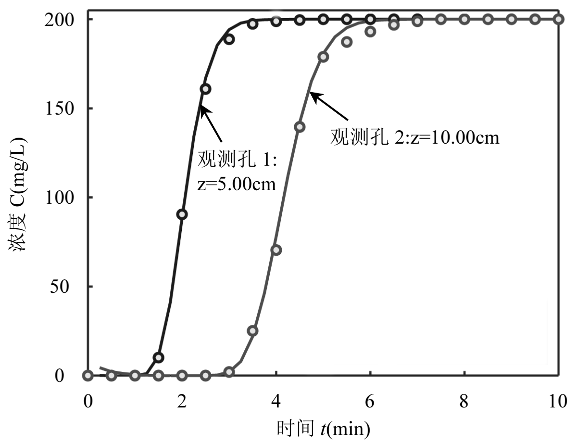

图 9 解析解拟合实测数据结果

Fig.9 Besting fitting observed data and analytical solution

○为观测孔,曲线为解析解

本研究新建立的模型考虑任意初始条件和 3 种不同类型的内边界条件:持续注入示踪剂、瞬时注入示踪剂和脉冲注入示踪剂.新建立的溶质运移模型是许多前人的模型的推广,例如,当初始条件设置为均一的值,本文的模型便还原为一维零初始值溶质运移模型[15];本研究中采用将流速变化处理为线性变化来刻画非稳定流,值得注意的是,速度线性增加过程中所采用的时间增量越小越好,当时间增量较大的时

候,这种处理相当于阶梯流量注入示踪剂.尽管本研究建立的模型涵盖了任意初始条件和 3 种不同类型的内边界条件,然而,根据前文介绍的模型中的假定条件,新模型的适用范围主要是:(1)正如控制方程(1)所示,模型主要考虑惰性示踪剂的运移机理,本研究建立的模型不适用于反应性溶质的生物地球化学迁移转化过程模拟;(2)本研究建立的模型没有考虑尺度效应[15]、混合效应[15]、表皮效应[22]和含水层介质非均质性等因素对溶质运移过程的影响;(3)类似于 Chen 的研究,本研究将流速变化处理为线性变化来刻画非稳定流,能够近似的模拟河水位或者海水位上升/下降对溶质运移的影响,对于实际情况可能存在不可忽视的误差[21].如果需要综合考虑上述因素的影响,可能需要建立相应的数值模型进行求解.

6　结论

6.1　本研究建立的模型能够用于模拟任意初始条件下持续注入示踪剂、瞬时注入示踪剂和脉冲注入示踪剂情况下一维溶质运移过程.

6.2　通过将流速变化处理为线性增加或减小来刻画非稳定流条件下溶质运移过程,可将本模型运用到河水或海水位上升/下降条件对溶质运移的影响研究中.

6.3　通过室内一维砂柱实验的实测数据与解析解计算结果进行拟合对比,说明采用格林函数法建立的任意初始条件下一维溶质运移模型能够很好的解释任意初始条件下一维溶质运移过程.

参考文献：

[1] 薛禹群,张幼宽.地下水污染防治在我国水体污染控制与治理中的双重意义 [J]. 环境科学学报, 2009,39(3):474-481.
Xue Y Q, Zhang Y K. The dual significance of groundwater pollution prevention and control in water pollution control and treatment in China [J]. Journal of Environmental Sciences, 2009,39(3):474-481.

[2] Raats P A C. Dynamics of fluids in porous media [J]. Soil Science Society of America Journal, 1973,37(4):174-175.

[3] 陈崇希,李国敏.地下水溶质运移理论及模型 [M]. 武汉:中国地质大学出版社, 1996.
CHEN C X, LI G M. Theory and model of solute transport in groundwater [M]. Wuhan: China University of Geosciences Press, 1996.

[4] 郑春苗, Bennett G. 地下水污染物迁移模拟 [M]. 北京:高等教育出版社, 2009.
Zheng C M, Bennett G. Simulation of pollutant transport in groundwater [M]. Beijing: Higher Education Press, 2009.

[5] Bond W J, Wierenga P J. Immobile water during solute transport in unsaturated sand columns [J]. Water Resources Research, 1990,26(10): 2475-2481.

[6] Padilla I Y, Yeh T C J, Conklin M H. The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media [J]. Water Resources Research, 1999,35(11):3303-3314.

[7] Williams T J. Effects of temperature and moisture content on transport of organic vapours in dual-porosity soil [J]. 2000.

[8] 高光耀,冯绍元,黄冠华.饱和非均质土壤中溶质大尺度运移的两区模型模拟 [J]. 土壤学报, 2008,45(3):398-404.
Gao G Y, Feng S Y, Huang G H. Simulation of solute large-scale transport in saturated heterogeneous soil by two-zone model [J]. Acta Pedologica Sinica, 2008,45(3):398-404.

[9] van, Genuchten, M, et al. Mass Transfer Studies in Sorbing Porous Media: II. Experimental Evaluation with Tritium ($3H_2O$)1 [J]. Soil Science Society of America Journal, 1977,41(2):272-272.

[10] Nkedi-Kizza P, Biggar J W, Van Genuchten M T, et al. Modeling tritium and chloride 36 transport through an aggregated Oxisol [J]. Water Resources Research, 1983,19(3):691-700.

[11] Brusseau M L, Gerstl Z, Augustijn D, et al. Simulating solute transport in an aggregated soil with the dual-porosity model: measured and optimized parameter values [J]. Journal of Hydrology, 1994,163(1/2): 187-193.

[12] Nielsen K K, Nellis G F, Klein S A. Numerical modeling of the impact of regenerator housing on the determination of Nusselt numbers [J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013,65(1):552-560.

[13] Gelhar L W, CWelty C, Rehfeldt K R.. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers [J]. Water Resources Research, 1992, 28(7):1955-1974.

[14] Bhattacharya P, Jacks G, Ahmed K M, et al. Arsenic in groundwater of the Bengal delta plain aquifers in Bangladesh. [J]. Bull Environ Contam Toxicol, 2002,69(4):538-545.

[15] Wang Q, Gu H, Zhan H, et al. Mixing effect on reactive transport in a column with scale dependent dispersion [J]. Journal of Hydrology, 2019,582:124494.

[16] Leij F J, Genuchten M T V. Analytical modeling of nonaqueous phase liquid dissolution with green's functions [J]. Transport in Porous Media, 2000,38(1):141-166.

[17] Leij F J, Priesack E, Schaap M G. Solute transport modeled with Green's functions with application to persistent solute sources [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2015,41(1/2):155-173.

[18] Chen K, Zhan H. A Green's function method for two-dimensional reactive solute transport in a parallel fracture-matrix system [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2018,213:15-21.

[19] Xie Shuang, Wen Zhang, Hamza J. A new model approach for reactive solute transport in dual-permeability media with depth-dependent reaction coefficients [J]. Journal of Hydrology, 2019,577(2019):123946.

[20] Gao G, Fu B, Zhan H, et al. Contaminant transport in soil with depth-dependent reaction coefficients and time-dependent boundary conditions [J]. Water Research, 2013,47(7):2507-2522.

[21] Chen K, Zhan H, Wang Q. An innovative solution of diurnal heat transport in streambeds with arbitrary initial condition and implications to the estimation of water flux and thermal diffusivity under transient condition [J]. Journal of Hydrology, 2018,567:361-369.

[22] Li X, Wen Z, Zhan H, et al. Skin effect on single-well push-pull tests with the presence of regional groundwater flow [J]. Journal of Hydrology, 2019,577:123931.

作者简介：曹孟雄(1996-),男,天津人,中国地质大学(武汉)硕士研究生,主要从事地下水流及溶质运移数值模拟研究.