

多孔介质溶质运移边界层理论初探*

刘春平^{1,2} 邵明安²

(1 湖南师范大学资环系, 湖南长沙 410006)

(2 中国科学院 水土保持研究所, 陕西杨凌 712100)
水 利 部

摘 要 研究了溶质运移边界层条件和边界层运动方程。采用一个小的运移通量脉冲定义边界层应满足的特征值。应用 Laplace 变换方法求解边界层问题的浓度解, 并推导出边界层运动方程。边界层问题浓度解与精确解比较表明在计算浓度方面误差很小。边界层运动方程的一个重要应用是估算溶质运移参数。这个估算参数的新方法是应用边界层随时间运动的观测信息。这个方法简单, 节省时间, 并能充分利用边界层运动观测资料。

关键词 多孔介质, 溶质运移, 边界层理论, 估计参数

中图分类号 S153.5

污染物质在多孔介质中的迁移研究对农作物生长和地下水质量控制具有重要意义。至今已有大量的理论模型描述多孔介质中化学物质运移机理^[1,2]。随着研究的深入, 模型复杂性增加, 估算不同模型的运移参数也成为研究和关注的焦点^[3-8]。在多孔介质溶质迁移模型中一般包括弥散系数和延迟因子两个参数。模型参数估计有统计方法和确定性方法。统计方法因存在参数的不惟一性和不确定性等问题, 在实际应用中受到限制。确定性方法是根据室内和现场实验条件下多孔介质中溶质运移模型的解析解或近似解析结果确定运移参数, 该解析结果一般表示为溶质浓度和运移参数之间的隐式关系, 因此可供求参利用的只是某些特殊点上浓度与参数之关系, 或在时空上测定若干浓度样本并按标准曲线尺度点绘曲线, 由配线法反求参数^[6,7]。这些方法普遍存在信息利用不够充分, 而且只能求解一个参数。另外操作复杂, 很难避免随意性。

众所周知, 溶质运移中另一个可供观测的信息是边界层随时间的运动过程。通过对边界层条件的简化研究多孔介质中热和质量运移问题^[9,10], Shao 等应用多项式方法近似溶质浓度分布, 研究土壤溶质运移对流——弥散方程 (CDE) 的边界层解^[11]。这些研究都在试图寻找边界层的运动规律。

利用边界层信息推求溶质运移参数的关键是获得准确的边界层随时间运动规律及与运移参数之关系。本文首先分析了边界层应满足的条件及边界层特性。运用 Laplace 变换推导出瞬时点源作用下边界层与时间和运移参数的解析解。利用这些简单的解析关系, 根据边界层随时间的运动变化可以方便地同时求解多类运移参数。最后根据分析得到边

* 国家自然科学基金强化项目 (批准号: 59879026)

收稿日期: 1999-10-12; 收到修改稿日期: 2000-12-27

边界层问题浓度解,与精确解计算结果比较,基本是一致的。

1 边界层条件

在多孔介质溶质运移解析模型中,一般给定当空间坐标值趋于无限大时,溶质浓度或梯度趋于零。因此在任一时间内溶质分布于 $(-\infty, \infty)$ 或 $(0, \infty)$ 空间域内。从理论上讲,这类模型是没有边界层或边界层在无穷远处。由于物质运移速度是有限的,任一时间溶质在多孔介质中的运移空间也是有限的。如图 1 所示溶质浓度随空间坐标 x 轴的变化曲线,在时间 (t_1, t_2) 内,溶质分布在 $[0, L_{(t_1)}]$, $[0, L_{(t_2)}]$ 空间域上。随着时间增加,分布域向 x 轴正向扩大。假设有一个边界层 $L_{(t)}$, 这里 $L_{(t)}$ 是溶质锋至原点的距离,它是时间的函数。边界层运动是多孔介质中溶质质点运动的宏观表现。边界层本身不对溶质运动的大小和方向产生约束,而是相当于自由边界(例如潜水面),具有可观测性,但不具有可控性。根据多孔介质微观弥散理论,质点在任一时刻的速度等于平均速度和随机振动速度之和。前者满足某些流体运动定律(如达西定律),而后者还只能由统计(正态分布)模型描述,因此溶质质点运动尚无确定性规律可遵循。本文所研究的是边界层这一特定点随时间的运动规律。

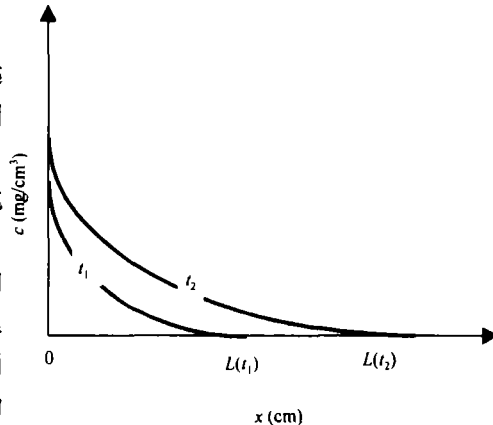


图1 边界层示意图

Fig.1 Sketch map of boundary layer

在时间域 $(0, t)$ 上,溶质分布在空间 $[0, L_{(t)}]$ 上,从 $x = 0$ 至 $x = L_{(t)}$ 断面上,溶质通量逐渐减少。当 $x \rightarrow L_{(t)}$ 时,边界层上的溶质通量可定义为:

$$-D \frac{\partial c}{\partial x} + Vc|_{x=L_{(t)}} = \frac{\epsilon_0}{n} \delta(\tau - t) \quad (1)$$

这里 $c = c(L, t)$ 表示边界层上溶质浓度 (M/L^3); D 是弥散系数 (M/L^2T); V 是孔隙水流速度 (L/T); τ 表示时间; ϵ_0 是一个很小的正数,表示在 $(0, t)$ 时段内通过边界层 $x = L_{(t)}$ 的溶质质量 (M); n 是孔隙度;用 dirac- δ 函数

$$\delta(\tau - t) = \begin{cases} \infty & \tau = t \\ 0 & \tau \neq t \end{cases} \quad (2)$$

表示边界层上溶质通量脉冲。(1)式和(2)式表明,只有当时间 $\tau = t$ 时,从 x 负方向有一微小的溶质通量脉冲 $\frac{\epsilon_0}{n} \delta(\tau - t)$ 通过 $L_{(t)}$ 点。当 $\tau < t$, 通过 $L_{(t)}$ 处溶质质量为零;当 $x > L_{(t)}$, 溶质质量亦为零。所以边界层是空间域有无溶质通量的临界点,这也是界定边界层与非边界层的标准。在 $(0, t)$ 时段内积分得到边界层上总质量为:

$$J_s = \int_0^t -D \frac{\partial c}{\partial x} + Vc|_{x'-L^s} = \frac{\varepsilon_0}{n} \int_0^t \delta_{(\tau-t)} d\tau = \frac{\varepsilon_0}{n} \quad (3)$$

(1)或(3)式就是边界层上应该满足的边界条件。

2 浓度的形式解

在稳态水流条件下,多孔介质中任意时刻任一点的溶质运移可由对流——弥散方程(CDE)描述:

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V \frac{\partial c}{\partial x} = R \frac{\partial c}{\partial t}, \quad -\infty < x < \infty \quad (4)$$

这里 $c = c(x, t)$ 是多孔介质中某一组份溶质浓度 (M/L^3); R 为延迟因子(无量纲)。为表述简便,下文推导过程先不考虑多孔介质与溶质之间的吸附与离子交换作用,即令 $R = 1$ 。

在 x 方向无限长的多孔介质柱, $t = 0$ 时,一片非常薄的由示踪剂标示的流体栓子于 $x = 0$ 处注入到多孔介质柱中。示踪剂的浓度分布可用方程(4)描述,对于和平均流动一起运动的观察者,方程(4)变成

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x'^2} = \frac{\partial c}{\partial t'} \quad (5)$$

这里 $x' = x - Vt$, $t' = t$ 。对于 $c(x', t')$ 确定的边界条件是

$$\lim_{|x'| \rightarrow \infty} c(x', t') = 0, \quad (6)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} c(x', t') dx' = M/n \quad (7)$$

这里 M 是 $t = 0$ 瞬间投入的示踪剂质量。由式(5)~(7)构成描述无限域中瞬时点源作用下浓度分布定解问题。

在(5)式两边对 x' 从 $(-\infty, \infty)$ 积分并利用边值(6)、(7)式得:

$$\int_0^t \left(D \frac{\partial c}{\partial x'} \Big|_{-\infty}^0 + D \frac{\partial c}{\partial x'} \Big|_0^{\infty} \right) d\tau = \frac{M}{n} \quad (8)$$

因 x' 从正、负方向趋于零时弥散通量大小相等方向相反,故有

$$\int_0^t -D \frac{\partial c}{\partial x} \Big|_{x'=-L^s} = \frac{M}{2n} \quad (9)$$

由此将(6)、(7)式转化为 $x = 0$ 处内边界条件(9)式。为推求边界层移动规律,假设在边界层上浓度为零,则有:

$$c(L', t') = 0 \quad (10)$$

$$\int_0^t -D \frac{\partial c}{\partial x'} \Big|_{x'=-L^s} = \frac{\varepsilon_0}{n} \quad (11)$$

由(5)和(9)、(10)构成对边界层条件下浓度定解问题,结合(11)构成对边界层运动距离 L' 的定解问题。

将(5)及(9)、(10)、(11)对浓度 $c(x', t')$ 作 Laplace 变换,并应用到齐次初始条件 $c(x,$

0) = 0 得到拉氏空间定解问题为

$$D \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial x'^2} - p \bar{c} = 0 \quad (12)$$

$$D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \Big|_{x'=0} = -\frac{M}{2n} \quad (13)$$

$$\bar{c}(L', p) = 0 \quad (14)$$

$$D \frac{\partial \bar{c}}{\partial x'} \Big|_{x'=L'} = \frac{\varepsilon_0}{n} \quad (15)$$

式中 $\bar{c} = (x', p)$, p 为拉氏因子 ($0 \leq p < \infty$)。方程(12)之通解为

$$\bar{c}(x', p) = c_1 e^{bx'} + c_2 e^{-bx'} \quad (16)$$

其中 $b = \sqrt{p/D}$; c_1, c_2 为待定系数。将边界条件(13), (14)代入求得拉氏空间边界层问题浓度解为

$$c(x', p) = \frac{M}{2nDb} \cdot \frac{\text{sh}[b(L' - x')]}{\text{ch}(bL')} \quad (17)$$

(17)式是关于拉氏空间浓度的形式解,因为式中边界层弥散距离 L' 尚未确定,即边界层运动规律还待求解。

3 运移解及参数分析

利用(17)式求 $x' = L'$ 处的弥散通量并代入(15)式得到

$$\varepsilon_0 \text{ch}(bL') = \frac{M}{2}$$

将 $\text{ch}(bL')$ 展开成指数并整理后得到

$$ke^{-2bL'} - e^{-bL'} + k = 0$$

即:

$$ky^2 - y + k = 0$$

这里 $y = e^{-bL'}$; $k = \varepsilon_0 / M$ 是边界层溶质质量与输入多孔介质柱总质量之比。以上方程是关于 y 的一元二次方程,求解得:

$$y = \frac{1}{2k} (1 \pm \sqrt{1 - 4k^2})$$

上面方程中关于 $e^{-bL'}$ 有两个非负解。为了使物理意义更明了,符号取舍将在时间域边界层方程中叙述。利用拉氏逆变换公式得到时间域之解为

$$L'_{(t)} = 2A\sqrt{Dt'} \quad (18)$$

其中

$$A = \sqrt{-Ln \left[\frac{1}{2k} (1 \pm \sqrt{1 - 4k^2}) \right]} \quad (19)$$

从边界层弥散距离公式(18)的分析可知,系数 A 表达式右边第二项取正号时,只有当 $k = \varepsilon_0 / M = 0.5$ 时才有意义。当 $k = 0.5$ 时, $A = 0$, 弥散距离 $L' = 0$, 反映 $t = 0$ 瞬时情况。一

般只考虑 $t > 0$ 情况, 系数 A 右边取负号, 即

$$A = \sqrt{-\text{Ln} \left[\frac{1}{2k} (1 - \sqrt{1 - 4k^2}) \right]}$$

$$= \sqrt{-\text{Ln} [4k^2 / 2k(1 + \sqrt{1 - 4k^2})]} \approx \sqrt{-\text{Ln} k}$$

将(18)式换回到原 (x, t) 坐标得到边界层距离表达式

$$L(t) = vt + 2A\sqrt{Dt} \tag{20}$$

当溶质与多孔介质之间存在吸附和离子交换作用时 $R \neq 1$ 。在方程(4)中令 $t = t' / R$ 得到关于 $c(x, t)$ 的微分方程与 $R = 1$ 时 $c(x, t)$ 微分方程在形式上一致, 故可将(20)式中 t 替换成 t' / R , 边界层运移公式为

$$L_{(t')} = \frac{V}{R}t' + 2A\sqrt{\frac{D}{R}}t' \tag{21}$$

方程(20)是(21)式在 $R = 1$ 时的特例。至此完成了边界层运动与时间和运移参数之间关系的公式推导。利用(18)~(21)式可以预测溶质边界层随时间的推进距离, 另一个

更为重要的应用是利用边界层随时间变化数据求运移参数。

由(18)~(21)式可知, 边界层距离与时间成双曲线关系, 与运移参数 D, R 之间也是简单的初等函数关系。因此可以通过边界层运动随时间变化确定参数。

如果孔隙水流速度 V 是已知的常数, 且溶质为惰性, 不与多孔介质发生吸附和离子交换, 则弥散系数与边界层弥散距离之关系如(18)所示, 两边取平方得:

$$L'^2 = 4A^2Dt'$$

L'^2 与 t' 成线性关系。取 $k = 10^{-4}$, 即定义边界层溶质质量 e_0 为总溶质质量 M 的万分之一, 并设 $V = 0.003 \text{cm min}^{-1}$, $R = 1.0$,

图2 边界层弥散距离随时间变化

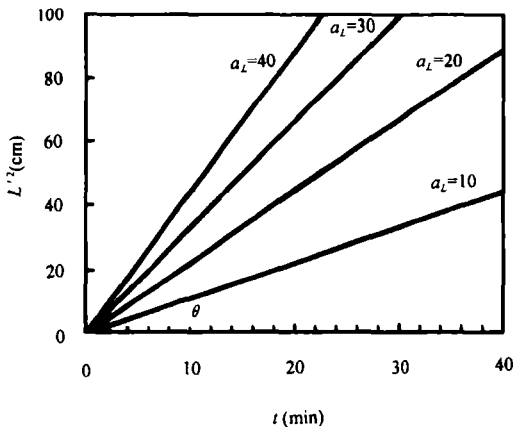
Fig.2 The dispersion distance of boundary layer with time

$D = a_L V$, a_L 为弥散度 (cm), 分别计算出不同时间 L'^2 值点绘如图 2。从图看出, 直线的斜率对 a_L 值有较高的分辨率。因此可以根据不同时间边界层运移(弥散)距离的观测数据, 点绘成 $L'^2 \sim t'$ 直线, 根据直线的斜率 $\text{tg} \theta = 4A^2D$, 确定弥散系数 D 或弥散度 a_L 值。

如果考虑吸附及离子交换作用, 要同时确定弥散系数和延迟因子, 为此可将(21)式改写成

$$L / \sqrt{t} = 2A\sqrt{D/R} + \frac{V}{R}\sqrt{t}$$

根据不同时间 t 观测得到的 $L_{(t)}$ 值, 点绘 L / \sqrt{t} 与 \sqrt{t} 直线图, 直线斜率 $\text{tg} \beta = \frac{V}{R}$, 截距 $y = 2A\sqrt{D/R}$, 如果孔隙水流速度 V 已知, 可据 $\text{tg} \beta$ 和 y 的值计算 R 和 D 。取 $V = 0.07 \text{cm}$



min⁻¹, D = 1.4cm² min⁻¹, 当 R 值为 1.0、1.3、1.5 和 2.0 时 L / √t ~ √t 直线如图 3 所示。

Sauty 将浓度解析解 (参见 (22) 式), 转化成为由无量纲浓度 c_R 和无量纲时间 t_R 变量组成的方程, 并通过拟合标准曲线方法求得弥散度 a_L^[12,13]。

边界层法利用边界层距离随时间变化的一组数据可同时估算 a_L 和 R。而且只要求点绘直线, 相对于点绘曲线并与标准曲线重迭配线而言, 操作更简单且减少随意性, 提高计算精度。从测量技术上, 在本文输入 (边界) 条件下, 运用时域反射仪可以测量每一根 TDR 探棒的平均浓度并将此换算为探棒长度 L 的溶质总量 M_c^[14]。将 M_c 与溶质输入量 M 比较, 当

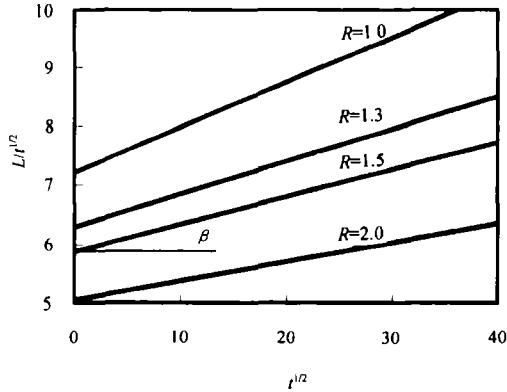


图3 边界层运输与R的关系

Fig.3 The relationship between boundary layer transport and R

$$|m_c - M| \leq \epsilon_0$$

$$\text{或 } \frac{|M_c - M|}{M} \leq k$$

时, 可近似认为溶质锋在时刻 t 已到达探棒末端^[15], 由此确定出时刻 t 的边界层 L_(t)。关于边界层测量技术及参数估计方法的进一步应用和评价将在另文中作深入探讨。

4 误差分析

因边界层解是在 x = L_(t) 处人为设计一类齐次边界条件 C(L, t) = 0, 由该有限域所计算的溶质浓度与无限域比较将产生误差, 需要检验在 x = L_(t) 处的一类边界条件对无限域浓度分布产生的影响大小。为此, 将无限域和边界层浓度解进行比较, 分析边界层解之误差。

由偏微分方程及初边值条件 (5) ~ (8) 式通过作 Fourier 或 Laplace 变换得到无限域瞬时点源作用下溶质浓度精确解^[16]

$$C(x', t') = f(x') = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} e^{-x'^2/4Dt'} \tag{22}$$

将边界层浓度解公式 (17) 中 chz, shz 展开成 e 指数, 利用无穷级数公式

$$1 / (1 + e^{-2bL}) = \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m e^{-2mbL}$$

和拉氏逆变换公式

$$L^{-1} \left(\frac{1}{\sqrt{p}} e^{-\alpha\sqrt{p}} \right) = \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-\alpha^2/4t}$$

求得时间域边界层问题浓度解为

$$c(x', t') = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m [f(2mL' + x') - f(2mL' + 2L' - x')] \quad (23)$$

式中

$$f(z) = e^{-z^2/4Dt'} \quad (24)$$

由于偏微分方程及边界条件均为线性，满足叠加原理，因此(23)式也可由无限域解(22)式通过对一类边界 $c(L', t') = 0$ 映射得到。

在(23)式中，首先近似取 $m = 0$ 进行分析。 $m = 0$ 时

$$c_0(x', t') \approx \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} [f(x') - f(2L' - x')] \quad (25)$$

将(25)与(22)式比较可知，边界层解相对于精确解之误差为

$$a_0 = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} \cdot f(2L' - x')$$

由(24)可知，在 $f(z)$ 函数中，当 z 增加， f 减小，故

$$f(2L' - x') \leq f(2L' - x')|_{x'=L'} = f(L')$$

即最大误差 $\max(a_0)$ 出现在 $x' = L'$ 处，其值为

$$\max(a_0) = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} f(L') = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} e^{-L'^2/4Dt'}$$

将公式(19)代入上式得到

$$\max(a_0) = \frac{M}{2n\sqrt{\pi Dt'}} e^{-k^2} = \frac{k \cdot M}{2n\sqrt{\pi Dt'}}$$

容易验证，随 m 增加 ($m = 1, 2, \dots$)，当 k 值适当小时，(23)式中各级数项均趋于零，因此边界层浓度解(23)式只需计算 $m = 0$ 就可满足计算精度。

设计算参数 $n = 0.2$ ， $D = 1.4\text{cm}^2 \text{min}^{-1}$ ， $M = 1.0 \text{kg}$ ， $\varepsilon_0 = 10^{-4} \text{kg}$ ，则 $k = 10^{-4}$ ，当 $t' = 50, 100 \text{min}$ 时，由边界层和精确解计算结果如图4所示。从图4说明两个解结果十分接近。当 $t' = 50\text{min}$ 时，最大绝对误差为 $1.69 \times 10^{-5} \text{kg cm}^{-3}$ ，当 $t = 100 \text{min}$ 时，最大绝对误差为 $1.19 \times 10^{-5} \text{kg cm}^{-3}$ 。由此可见，本文假设条件下所研究的边界层运移规律满足无限域条件下浓度分布，即边界层条件对浓度时空分布所产生影响可忽略不计。

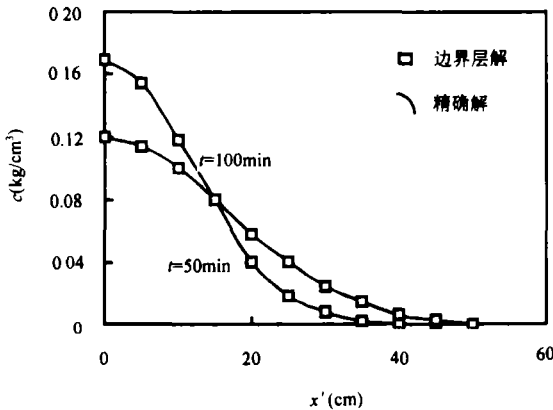


图4 边界层解与精确解比较

Fig.4 The comparison of boundary layer and exact solution

移规律满足无限域条件下浓度分布，即边界层条件对浓度时空分布所产生影响可忽略不计。

参 考 文 献

1. J. 贝尔著，李竞生，陈崇希译. 多孔介质流体动力学. 北京: 中国建筑工业出版社, 1983

2. 杨大文, 杨诗秀, 莫汉宏. 农药在土壤中迁移及其影响因素初步研究. 土壤学报, 1992, 29(4): 383~391
3. Parker J C, van Genuchten M T. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments, VA. Agric. Exp. Stn. Bull., 1984, No.84(3)
4. Buchter B, Hinz C, Flury M, Fluhler H. Heterogeneous flow and solute transport in an unsaturated stony soil monolith. Soil Sci. Soc. Am. J., 1995, 59:14~21
5. Elprince A M, Day P R. Fitting solute breakthrough equations to data using two adjustable parameters. Soil Sci. Soc. Am. J., 1977, 41:39~41
6. Kool J B, Parker J C, van Genuchten M T. Parameter estimation for unsaturated flow and transport models: A review. J. Hydrol., 1987, 91:255~293
7. Rifai M N E, Kaufman W J, Todd D K. Dispersion phenomena in laminar flow through porous media. Inst. of Eng. Res., Ser. No. 93(2). Sanitary Eng. Res. Lab., Univ. of Calif., Berkeley, 1956
8. Yamaguchi T, Moldrup P, Yokosi S. Using breakthrough curves for parameter estimation in the convection-dispersion model of solute transport. Soil Sci. Soc. Am. J., 1989, 53:1635~1640
9. Kumar I J, Narang H N. A boundary-layer method in porous body heat and mass transfer. Int. J. Heatmass Transfer., 1967, 10:1095~1107
10. Gupta L N. An approximate solution of the generalized stefan's problem in a porous medium. Int. J. Heat Mas Transfer., 1974, 17:313~321
11. Shao M, Horton R, Miller R K. An approximate solution to the convection-dispersion equation of solute transport in soil. Soil Sci., 1998, 163:339~345
12. Sauty J P. An analysis of hydrodispersive transfers. Water Resour. Res., 16(1):1980, 145~158
13. 李韵珠, 李保国编著. 土壤溶质运移. 北京: 科学出版社, 1998
14. Kachanoski R G, Pringle E, Ward A. Field measurement of solute travel times using time-domain reflectometry. Soil Sci. Soc. Am. J., 1992, 56:47~52
15. Rudolph D L, kachanoski R G, Celta M A, *et al.* Infiltration and solute transport experiments in unsaturated sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts: Experimental design and overview of results. Water Resour. Res., 1996, 32(3), 519~532
16. Grank J. Mathematics of Diffusion. New York and Landon: Oxford University Press, 1956

A PRELIMINARY STUDY OF BOUNDARY-LAYER THEORY OF SOLUTE TRANSPORT IN POROUS MATERIALS

Liu Chun-ping^{1,2} Shao Ming-an²

(1 Department of Resource and Environment, Hunan Normal University, Changsha Hunan 410006)

(2 Institute of Soil and Water Conservation, Chinese Academy of Sciences, Yangling Shaanxi 712100)

Summary

The boundary layer condition and describing equation of boundary layer for solute transport are studied in this paper. A small flux is defined as the representative value of boundary layer. Laplace transfer method is used to solve the concentration of boundary-layer problem (CSBL). The comparison of CSBL with the exact solution is conducted. Results show that the CSBL is in good agreement with the exact solution.

An important application of the theory is the estimation of transport parameters of solute transporting through porous materials. This leads to a new method for the estimation of parameters by using the observation information of the advance of the boundary-layer with time. This new method is simple, saving time and can sufficiently utilize the observation data of boundary layer transport.

Key words Porous materials, Solute transport, Boundary-layer theory, Estimation of parameters