

DOI: 10.11779/CJGE201410017

考虑加速效应的多孔介质中颗粒三维迁移模型研究

陈星欣¹, 白冰², 俞缙¹, 蔡奇鹏¹

(1. 华侨大学土木工程学院, 福建 厦门 361021; 2. 北京交通大学土木建筑工程学院, 北京 100044)

摘要: 基于已有的颗粒一维迁移模型, 建立一个考虑加速效应的颗粒三维迁移模型。通过 Laplace 变换和 Fourier 变换, 给出点源和面源形式下的颗粒瞬时注入和周期形式注入问题的解析表达式, 分析了点源瞬时注入情况下时间、距离、沉积系数、弥散系数等的影响机理。研究结果表明: 随着时间增大, 迁移颗粒浓度峰值逐渐减小, 并且浓度峰值所对应的 x 坐标值逐渐增大。其次, 浓度等值线在 $x-y$ 平面上呈椭圆形状, 在 x 方向上靠近颗粒注入口的等值线排列较密, 远离注入口的等值线排列较疏。随着时间增大, 低浓度等值线的范围逐渐向四周扩大, 高浓度的等值线的范围逐渐缩小。另外, 沉积系数越大, 浓度等值线的范围越小。然而, 随着 x 方向的弥散系数增大, 等值线在 x 方向上逐渐向两侧拉长, 而等值线在 y 方向上的范围逐渐缩小。

关键词: 颗粒; 加速迁移; 沉积; 多孔介质; 理论研究

中图分类号: TU411

文献标识码: A

文章编号: 1000-4548(2014)10-1888-08

作者简介: 陈星欣(1984-), 男, 讲师、博士, 主要从事环境岩土工程方面的教学和科研。E-mail: chenxx@hqu.edu.cn。

Three-dimensional modeling of particle transport in porous media considering accelerated effects

CHEN Xing-xin¹, BAI Bing², YU Jin¹, CAI Qi-peng¹

(1. School of Civil Engineering, Huaqiao University, Xiamen 361021, China; 2. School of Civil Engineering, Beijing Jiaotong University, Beijing 100044, China)

Abstract: Based on a one-dimensional particle transport model, a theoretical model considering accelerated transport effects of particles is established. General solutions are derived with the help of the Laplace and Fourier transforms. According to the general solutions, specific solutions (instantaneously injected and periodically injected) are presented for point and areal inflow regions. The analytical solution for point source under instantaneous injection is taken as an example of specific solutions. A detailed discussion of the effect of time, distance, deposition and dispersion on particle transport is conducted. The studies show that the peak values of concentration decrease and the corresponding distance increases with the increasing time. Furthermore, the concentration contours exhibit ellipses on $x-y$ plane, those near the particle inlet in the x -direction are arranged densely, and those far from the particle inlet are arranged sparsely. The range of low concentration contours increases and the range of high-concentration contours decreases with the increasing time. Besides, the concentration contours decrease with the increasing deposition rate. However, the range of concentration contours decreases with the increasing deposition rate. The contours in the x -direction increase and those in the y -direction decrease with the increasing D_x .

Key words: particle; accelerated transport; deposition; porous medium; theoretical study

0 引言

地下污染物不仅可以通过液体和气体传输, 也可吸附在粒径小于 $10\text{ }\mu\text{m}$ 的颗粒上随渗流进行移动^[1-5]。室内土柱试验和现场试验表明^[1-5]: 多孔介质中颗粒迁移速度往往大于水流速度, 呈现一种加速迁移现象, 颗粒的出现加速了水中污染物扩散。实际上, 关于颗粒加速迁移机理的研究已得到国内外研究者的重视, 并进行了很多试验研究和理论分析。Subramanian 等^[5]

通过室内试验对碳粒子和溴化钾示踪剂的迁移特性进行了研究, 重点评价了碳粒子迁移较溴化钾的优先程度。Göppert 等^[6]通过现场试验发现渗流速度较大时, 颗粒的迁移速度和溶质的速度基本相同。Massei 等^[7]通过室内土柱试验发现大颗粒的迁移速度要大于小颗粒的速度, 这进一步证实了颗粒迁移过程中的尺寸排

基金项目: 国家自然科学基金项目 (51308235, 51279002, 51374112);

华侨大学科研基金项目 (13BS304)

收稿日期: 2013-12-31

除效应。陈星欣等^[8]通过试验认为重力和渗流速度是影响多孔介质中颗粒输运的重要因素, 渗流速度越小, 重力的作用越明显。Weisbrod 等^[9]通过试验研究发现示踪剂的迁移速度要远小于颗粒迁移速度, 并认为颗粒迁移速度和其粒径有很大关系。

目前, 关于颗粒加速迁移机理的认识主要有两方面^[3-7, 10-14]: ①尺寸排除效应, 颗粒只在孔隙尺寸大于其粒径的孔隙中进行迁移, 这些尺寸较大孔隙中的渗流速度要大于尺寸小的孔隙中的渗流速度; ②流体动力色谱现象, 由于流体和孔隙侧壁的摩擦力作用, 孔隙中央处的流体流速最大, 越靠近孔隙侧壁的流速越小, 而颗粒一般只在孔隙中央处运动, 所以其运动速度要大于流体的运动速度。多孔介质中颗粒迁移特性一般用标准模型进行描述, 标准模型以现象过滤系数为基础, 并没有包含真实的物理参数, 该模型中不能考虑颗粒迁移的各种物理机理^[7-8, 11-14]。其次, 标准模型中颗粒迁移速度和渗流速度相同, 这与试验结果有很大差异^[7-8, 11-14]。针对标准模型的上述缺陷, 一些研究者开展了颗粒加速迁移机理的模型研究, Scheibe 等^[10]通过在微观模型中忽略低渗流区的速度场来对经典模型中的颗粒迁移速度进行修正。Santos 等^[11]建立了考虑尺寸排除效应的颗粒平衡模型, 并建立了低浓度颗粒迁移的解析方法。James 等^[12]假设在裂隙中的渗流速度是按 Poiseuille 形式分布, 颗粒随裂隙中央处速度较大的渗流进行移动, 但没有考虑水动力、重力、静电力以及范德华力的影响。Panflov 等^[4]假设颗粒加速效应与孔隙结构以及颗粒粒径相关, 在颗粒运动方程中引入了速度增强因子。可见, 已有的加速迁移模型只是对颗粒一维模型进行简单修正来考虑加速效应, 并且沉积动力方程中忽略了弥散作用的影响, 这样造成已有模型并不能准确地描述天然含水层中颗粒在三维空间中的迁移特性。

本文基于已有的颗粒一维迁移模型, 建立饱和多孔介质中颗粒三维加速迁移模型, 该模型既考虑了颗粒加速迁移效应的影响, 也在沉积动力方程中考虑了弥散效应的影响。其次, 通过 Laplace 变换和 Fourier 变换求出颗粒加速迁移问题的解析解的通解, 并给出点源和面源形式下的颗粒瞬时注入和周期形式注入问题的解析解的具体形式。最后, 以点源瞬时注入的解析解为例, 从时间、距离、沉积系数、弥散系数等方面进行详细分析, 进一步验证解析解的正确性和有效性。由于可溶混污染物不存在沉积作用和加速迁移效应, 本文求得的解析解仅适用于粒径在 1 nm 至 10 μm 范围内的颗粒的迁移特性研究, 研究成果可为地下污染物治理、地下水开采、核废料处置以及城市固体废弃物填埋等提供理论基础。

1 颗粒三维迁移问题控制方程及数学变换

1.1 控制方程的建立

本文在建立方程时假定饱和、均质和各向同性的多孔介质中存在一维稳定流, 颗粒在三维空间进行迁移, 其中在 x 方向的迁移考虑对流和弥散作用, 而在其它两个方向仅考虑弥散作用^[7-8, 13-14]。弥散作用包括分子扩散和机械弥散, 颗粒主要受机械弥散的影响。其次, 假定多孔介质中颗粒在特定的范围内进行加速迁移, 通过对颗粒加速迁移范围内的含水率和渗流速度进行修正来考虑颗粒加速迁移效应, 定义 $\theta_c = \theta_w - \varepsilon\gamma$ 为颗粒加速迁移区域的含水率, 无量纲, 其中 θ_w 为饱和多孔介质的含水率, ε 为多孔介质的孔隙率, γ 为颗粒加速迁移范围以外的含水率; $q_c = q_w k_{rc} / k_r$ 为颗粒加速迁移范围内渗流速度, $[LT^{-1}]$, 其中 k_r 为水的相对渗透性, k_{rc} 为颗粒加速迁移范围内水的相对渗透性, q_w 为达西渗流速度。因此, 颗粒的加速迁移速度为 $V_c = q_c / \theta_c$ 。

基于上述假定, 考虑颗粒加速迁移效应的质量平衡方程为

$$\frac{\partial \theta_c C(t, x, y, z)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\theta_c D_x \frac{\partial C(t, x, y, z)}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\theta_c D_y \frac{\partial C(t, x, y, z)}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta_c D_z \frac{\partial C(t, x, y, z)}{\partial z} \right) - q_c \frac{\partial C(t, x, y, z)}{\partial x} - \rho_b \frac{\partial \sigma}{\partial t} \quad (1)$$

式中 x 为颗粒沿渗流方向的迁移距离, 量纲 L; y 和 z 为颗粒沿垂直于渗流方向的迁移距离, 量纲 L; C 为渗流中的颗粒浓度, 量纲 ML^{-3} ; D_x , D_y , D_z 分别为 x , y , z 方向的弥散系数, 量纲 L^2T^{-1} ; t 为时间, 量纲 T; σ 为沉积在多孔介质表面上的颗粒体积占多孔介质固体体积的比值, 无量纲; ρ_b 为多孔介质表观密度, 量纲 ML^{-3} 。

另一方面, 影响多孔介质中颗粒沉积的微观机理主要有: 尺寸排除、扩散、沉积、拦截、惯性、吸附和水动力等, 相应的颗粒沉积动力方程可写成^[13]

$$\rho_b \frac{\partial \sigma}{\partial t} = \rho_b \frac{\partial \sigma_{eq}}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \sigma_{att}}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \sigma_{sr}}{\partial t} \quad (2)$$

式中 σ_{eq} 为平衡吸附产生的沉积颗粒体积占多孔介质固体体积的比值, 量纲为 1; σ_{att} 为附着产生的沉积颗粒体积占多孔介质固体体积的比值, 量纲为 1; σ_{sr} 为尺寸排除产生的沉积颗粒体积占多孔介质固体体积的比值, 量纲为 1。

通常情况下, 平衡吸附作用只会延迟颗粒的迁移, 并不能永久性地使颗粒沉积在固体表面, 所以在本文中暂不考虑平衡吸附对颗粒沉积的影响。附着是颗粒沉积的主要因素, 可表示如下形式^[13]

$$\rho_b \frac{\partial \sigma_{\text{att}}}{\partial t} = \theta_c \psi_{\text{att}} k_{\text{att}} C_1 \quad (3)$$

式中, $k_{\text{att}} = 3(1 - \theta_c) \eta \alpha V_c / 2d_{50}$ 为吸附系数, 其中 α 为颗粒吸附效率, d_{50} 为多孔介质的平均粒径, $\eta = 4A_s^{1/3} N_{\text{pe}}^{-2/3} + A_s N_{\text{LO}}^{1/8} N_R^{15/8} + 0.00338 A_s N_G^{1/2} N_R^{-0.4}$ 为收集体效率, 其参数的物理意义见文献[13]; ψ_{att} 为量纲为 1 的颗粒吸附函数, 对于洁净的多孔介质来说, $\psi_{\text{att}} = 1$ 。 C_1 为考虑弥散作用的颗粒浓度, $C_1 = C - \frac{\theta_c D_x}{q_c} \frac{\partial C}{\partial x}$ 。

尺寸排除效应使得颗粒不能通过尺寸小于其粒径的孔隙, 从而在孔隙喉道处产生颗粒沉积, 尺寸排除效应对颗粒沉积的影响可写成如下形式^[13]

$$\rho_b \frac{\partial \sigma_{\text{str}}}{\partial t} = \theta_c \psi_{\text{str}} k_{\text{str}} C_1 \quad (4)$$

式中 $k_{\text{str}} = 269.7(d_p / d_{50})^{1.42}$ 为尺寸排除效应系数, 其中 d_p 为颗粒粒径; $\psi_{\text{str}} = (d_{50} + x / d_{50})^{-\beta}$ 为量纲为 1 的颗粒尺寸排除效应函数, 其中 d_{50} 为孔隙长度的代替参数, β 为与颗粒空间分布形态有关的常数。

因此, 考虑颗粒弥散作用和加速迁移效应的沉积动力方程为

$$\rho_b \frac{\partial \sigma}{\partial t} = (\theta_c \psi_{\text{att}} k_{\text{att}} + \theta_c \psi_{\text{str}} k_{\text{str}}) \cdot \left[C(t, x, y, z) - \frac{\theta_c D_x}{q_c} \frac{\partial C(t, x, y, z)}{\partial x} \right] \quad (5)$$

1.2 问题的描述

假定初始时刻多孔介质中存在一定浓度分布的迁移颗粒, 在 $x=0$ 处施加随时间变化的颗粒注入源。颗粒加速迁移问题的研究域: x 方向为半无限域, y 和 z 方向为无限域, 相应的初始和边界条件为^[3, 7, 13]

$$C(0, x, y, z) = f(x, y, z) \quad (6)$$

$$C(t, 0, y, z) = g(t, y, z) \quad (7)$$

$$\frac{\partial C(t, +\infty, y, z)}{\partial x} = 0 \quad (8)$$

$$\frac{\partial C(t, x, \pm\infty, z)}{\partial y} = 0 \quad (9)$$

$$\frac{\partial C(t, x, y, \pm\infty)}{\partial z} = 0 \quad (10)$$

初始条件(6)表示, 在初始时刻, 多孔介质中迁移颗粒的分布情况为 $f(x, y, z)$ 。边界条件(7)代表颗粒注入形式。边界条件式(8)~(10)虽然是理想化的情况, 但是其是解方程的必要条件。

1.3 控制方程积分变换求解

利用 Laplace 变换和 Fourier 变换来求解上述的微分方程, 其中对 t 和 x 进行 Laplace 变换, 对应的变量

为 s 和 r ; 对 y 和 z 进行 Fourier 变换, 对应的变量为 ω 和 ϕ 。为了方程简洁, 在所有方程中定义沉积系数 $k_d = \psi_{\text{att}} k_{\text{att}} + \psi_{\text{str}} k_{\text{str}}$ 。

将式(5)代入式(1), 然后分别对 t 进行 Laplace 变换, 对 x 进行 Laplace 变换, 对 y 进行 Fourier 变换, 对 z 进行 Fourier 变换^[15-18], 并利用式(6)和式(7), 可以得到

$$\bar{C}^{yz} = \left[-\bar{f}^{yz} / D_x + \left(\frac{\theta_c k_d}{q_c} - \frac{q_c}{\theta_c D_x} \right) \bar{g}^{yz} + \bar{g}^{yz} \cdot r + \frac{d\bar{C}^{yz}(s, 0, w, \phi)}{dx} \right] \left[(r + A)^2 - B^2 \right] \quad (11)$$

式中, $A = \frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}$, $B = [A^2 + (D_y w^2 + D_z \phi^2 + s + k_d) / D_x]^{1/2}$ 。

下面对式(11)两边的 r 求 Laplace 逆变换, 利用 Abramowitz 等^[16]中式 29.3.12 和 29.3.13 以及卷积定理, 可以得到

$$\bar{C}^{yz} = \frac{1}{B} \left[\left(\frac{\theta_c k_d}{q_c} - \frac{q_c}{\theta_c D_x} \right) \bar{g}^{yz} + \frac{d\bar{C}^{yz}(s, 0, w, \phi)}{dx} \right] \cdot \exp(-Ax) \cdot \sinh(Bx) + \bar{g}^{yz} \cdot \frac{\exp(-Ax)}{B} \cdot [B \cdot \cosh(Bx) - A \cdot \sinh(Bx)] - \frac{1}{D_x B} \int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp[-A(x - \xi)] \cdot \sinh[B(x - \xi)] d\xi \quad (12)$$

接下来求 $d\bar{C}^{yz}(s, 0, w, \phi) / dx$ 的表达式, 首先在式(12)两边对 x 求导, 然后在方程两边同乘以 $2B \cdot \exp[(A - B)x]$, 接着令 $x \rightarrow +\infty$, 可以得到

$$\frac{d\bar{C}^{yz}(s, 0, w, \phi)}{dx} = \frac{1}{D_x} \int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp[(A - B)\xi] d\xi + (A - B) \bar{g}^{yz} + \left(\frac{q_c}{\theta_c D_x} - \frac{\theta_c k_d}{q_c} \right) \bar{g}^{yz} \quad (13)$$

将式(13)代入式(12)可得

$$\bar{C}^{yz} = -\frac{\exp[-x(A + B)]}{2BD_x} \int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp[(A - B)\xi] d\xi + \bar{g}^{yz} \cdot \exp[-x(A + B)] + \frac{\exp[-x(A + B)]}{2BD_x} \int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp[(A + B)\xi] d\xi \quad (14)$$

假设 $C' = D_x \left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x} \right)^2 + (D_y w^2 + D_z \phi^2 + k_d)$,

$B = \frac{1}{\sqrt{D_x}} (C' + s)^{1/2}$, 那么

$$\bar{C}^{yz} = -\frac{\exp(-xA)}{2\sqrt{D_x}} \int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp(A\xi) \cdot$$

$$\frac{\exp\left[-\frac{x+\xi}{\sqrt{D_x}}(C'+s)^{1/2}\right]}{(C'+s)^{1/2}}d\xi + \frac{\exp(-xA)}{2\sqrt{D_x}}\int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \frac{\exp\left[-\frac{x-\xi}{\sqrt{D_x}}(C'+s)^{1/2}\right]}{\exp(A\xi) \cdot (C'+s)^{1/2}}d\xi + \bar{g}^{yz} \cdot \exp(-xA) \exp\left[-\frac{x}{\sqrt{D_x}}(C'+s)^{1/2}\right] \quad (15)$$

利用 Abramowitz 等^[16]中公式 29.2.12, 29.3.82 和 29.3.84 对式 (15) 两边求 t 的 Laplace 逆变换, 可以得到

$$C^{yz} = -\int_0^x \psi_1(\xi) \cdot f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp(-C't) d\xi + \int_0^t \psi_2(t-\tau) \cdot g^{yz}(\tau, w, \phi) \cdot \exp[-C'(t-\tau)] d\tau + \int_0^x \psi_3(\xi) f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp(-C't) d\xi \quad (16)$$

$$\text{其中, } \psi_1(\xi) = \frac{\exp(-xA)}{2\sqrt{\pi t D_x}} \cdot \exp\left[A\xi - \frac{(x+\xi)^2}{4D_x t}\right],$$

$$\psi_2(t-\tau) = \frac{x}{2(t-\tau)\sqrt{\pi D_x(t-\tau)}} \cdot \exp\left[-xA - \frac{x^2}{4D_x(t-\tau)}\right],$$

$$\psi_3(\xi) = \frac{\exp(-xA)}{2\sqrt{\pi t D_x}} \cdot \exp\left[A\xi - \frac{(x-\xi)^2}{4D_x t}\right].$$

假设 $D = D_x A^2 + (D_z \phi^2 + k_d)$, $C' = D_y w^2 + D$, $a = D_y t$, $b = 0$, $c = Dt$, $p = 0$, $q = y/2$, $r = 0$, 根据 Gradshteyn 等^[19]中式 3.923 可得

$$F_y^{-1}\left\{\int_0^x f^{yz}(\xi, w, \phi) \cdot \exp(-C't) d\xi\right\} = \sqrt{\frac{1}{4\pi D_y t}} \cdot \int_0^x \int_{-\infty}^{\infty} f^z(\xi, p, \phi) \cdot \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y t} - Dt\right] dp d\xi \quad (17)$$

可求得

$$C^z = -\sqrt{\frac{1}{4\pi D_y t}} \cdot \int_0^x \psi_1(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} f^z(\xi, p, \phi) \cdot \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y t} - Dt\right] dp d\xi + \int_0^t \psi_2(t-\tau) \sqrt{\frac{1}{4\pi D_y(t-\tau)}} \int_{-\infty}^{\infty} g^z(\tau, p, \phi) \cdot \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y(t-\tau)} - D(t-\tau)\right] dp d\tau + \sqrt{\frac{1}{4\pi D_y t}} \cdot \int_0^x \psi_3(\xi) \int_{-\infty}^{\infty} f^z(\xi, p, \phi) \cdot \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y t} - Dt\right] dp d\xi \quad (18)$$

同理假设 $E = D_x A^2 + k_d$, 可求得

$$F_z^{-1}\left\{\int_{-\infty}^{\infty} f^z(\xi, p, \phi) \cdot \exp(-D_z t \phi^2 - Et) d\phi\right\} = \sqrt{\frac{1}{4\pi D_z t}} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, p, q) \cdot \exp\left[-\frac{(z-q)^2}{4D_z t} - Et\right] dq dp \quad (19)$$

最后, 求得饱和多孔介质中颗粒三维加速迁移问题的解析解的通解形式为

$$C = \frac{1}{8\pi\sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{(t-\tau)^{5/2}} \cdot g(\tau, p, q) \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-\tau)} - \frac{(y-p)^2}{4D_y(t-\tau)} - \frac{(z-q)^2}{4D_z(t-\tau)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)(t-\tau)\right] dq dp d\tau + \frac{1}{8\pi t \sqrt{\pi t D_x D_y D_z}} \cdot \int_0^x \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi, p, q) \cdot \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D_x t}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D_x t}\right] \right\} \cdot \exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y t} - \frac{(z-q)^2}{4D_z t} + (\xi-x)\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)t\right] dq dp d\xi \quad (20)$$

2 点源注入形式的颗粒三维加速迁移问题求解

点源注入问题中假设饱和多孔介质中迁移颗粒的初始浓度为零, 即 $f(x, y, z) = 0$ 。颗粒的点源注入形式可以表示为如下函数:

$$g(t, y, z) = G(t)W(y, z) \quad (21)$$

$$W(y, z) = \delta(y - y_0)\delta(z - z_0) \quad (22)$$

式中 $G(t)$ 为颗粒的注入函数; $W(y, z)$ 点代表点源的物理形态; y_0 和 z_0 为点源中心坐标; $\delta(x)$ 为 Dirac delta 函数。

(1) 当点源颗粒按瞬时方式注入时, 颗粒的注入函数可以表达为如下形式:

$$G(t) = M / Q \cdot \delta(t - t_0) \quad (23)$$

式中, M 为颗粒的注入量, Q 为渗流速度, t_0 为颗粒的释放时间。

将式 (22)、(23) 代入式 (20), 可得

$$C = \frac{M}{8\pi Q \sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \frac{x}{(t-t_0)^{5/2}} \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-t_0)} - \frac{(y-y_0)^2}{4D_y(t-t_0)} - \frac{(z-z_0)^2}{4D_z(t-t_0)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)(t-t_0)\right] \quad (24)$$

(2) 当点源颗粒按连续或周期方式注入时, 颗粒的注入函数可以表达为如下形式^[20]:

$$G(t) = \bar{\Omega} + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n \exp\left[\frac{i2n\pi t}{t_p}\right] \quad (25)$$

式中 $\bar{\Omega}$ 为颗粒的平均注入速率; Ω_n 为系数; n 为波动数量; t_p 为当前的波动周期。

将式 (22) 和 (25) 代入式 (20), 可得

$$C = \frac{1}{8\pi\sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \int_0^t \frac{x}{(t-\tau)^{5/2}} \cdot \left\{ \bar{\Omega} + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n \exp\left[\frac{i2n\pi\tau}{t_p}\right] \right\} \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-\tau)} - \frac{(y-y_0)^2}{4D_y(t-\tau)} - \frac{(z-z_0)^2}{4D_z(t-\tau)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)(t-\tau)\right] d\tau \quad (26)$$

特别地, 当 $t_p \rightarrow \infty$ 时, 式 (25) 可以简化为 $G(t) = \bar{\Omega}$, 那么, 对应的点源连续注入问题的解析解为

$$C = \frac{\bar{\Omega}}{8\pi\sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \int_0^t \frac{x}{(t-\tau)^{5/2}} \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-\tau)} - \frac{(y-y_0)^2}{4D_y(t-\tau)} - \frac{(z-z_0)^2}{4D_z(t-\tau)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)(t-\tau)\right] d\tau \quad (27)$$

3 面源注入形式的颗粒三维加速迁移问题求解

面源注入问题中假设饱和和多孔介质中颗粒的初始浓度为零, 即 $f(x, y, z) = 0$ 。颗粒的面源注入形式可以表示为如下的函数:

$$g(t, y, z) = G(t)W(y, z) \quad (28)$$

$$W(y, z) = [u(y-b) - u(y-a)] \cdot [u(z-d) - u(z-c)] \quad (29)$$

式中 $G(t)$ 为颗粒的注入函数; $W(y, z)$ 为面源的物理形态; 面源的范围为 $b < y < a$, $c < z < d$; $u(y)$ 和 $u(z)$ 为 Heaviside 函数。

(1) 当面源颗粒按瞬时方式注入时, 颗粒的注入函数和式 (23) 相同。将式 (23) 和式 (29) 代入式 (20), 可得

$$C = \frac{M}{8\pi Q \sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{u}{2D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-t_0)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right) \cdot (t-t_0)\right] \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{(t-t_0)^{5/2}} \cdot [u(p-b) - u(p-a)] \cdot [u(q-d) - u(q-c)] \cdot$$

$$\exp\left[-\frac{(y-p)^2}{4D_y(t-t_0)} - \frac{(z-q)^2}{4D_z(t-t_0)}\right] dq dp \quad (30)$$

(2) 当面源颗粒按连续或周期方式注入时, 颗粒的注入函数和式 (25) 相同。将式 (25) 和式 (29) 代入式 (20), 可得

$$C = \frac{1}{8\pi\sqrt{\pi D_x D_y D_z}} \cdot \int_0^t \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x}{(t-\tau)^{5/2}} \cdot [u(y-b) - u(y-a)] \cdot [u(z-d) - u(z-c)] \cdot \left\{ \bar{\Omega} + \sum_{n=1}^{\infty} \Omega_n \exp\left[\frac{i2n\pi\tau}{t_p}\right] \right\} \cdot \exp\left[-x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right) - \frac{x^2}{4D_x(t-\tau)} - \frac{(y-p)^2}{4D_y(t-\tau)} - \frac{(z-q)^2}{4D_z(t-\tau)} - \left(D_x\left(\frac{\theta_c k_d}{2q_c} - \frac{q_c}{2\theta_c D_x}\right)^2 + k_d\right)(t-\tau)\right] dq dp d\tau \quad (31)$$

4 点源瞬时注入情况的颗粒三维加速迁移问题分析

下面以点源瞬时注入方式的颗粒三维加速迁移的解析解 (式 (24)) 为例来说明本文所建立的解析解的有效性。参考以往的研究选定多孔介质中颗粒迁移的基本参数为^[1,7-8]: $t_0 = 0$ s, $z = 0$ cm, $D_y = D_z = 0.1$ cm²/s, $q_c / \theta_c = 0.17$ cm/s, $M/Q = 1$ mg·s/cm, $y_0 = 0$ cm, $z_0 = 0$ cm。由式 (24), 通过计算, 可求得时间、沉积系数以及弥散系数等对颗粒加速迁移机理的影响。

4.1 不同时间对应的颗粒加速迁移问题

图 1 为 4 种不同时刻对应的颗粒浓度沿 x 方向的变化曲线, 图中对应的 $D_x = 1$ cm²/s, $y = 1$ cm, $k_{dep} = 0.02$ s⁻¹。图 2 为 4 种不同时刻对应的颗粒浓度沿 y 方向的变化曲线, 图中对应的 $D_x = 1$ cm²/s, $x = 10$ cm, $k_{dep} = 0.02$ s⁻¹。图 3 为不同时刻对应的 $x-y$ 平面上的浓度等值线图, 图中对应的 $D_x = 1$ cm²/s, $k_{dep} = 0.02$ s⁻¹。由图 1 可见, 随着 x 方向距离增大, 迁移颗粒浓度出现先增大而后减小的规律。其原因分析如下: 在颗粒注入口附近, 前期由于颗粒的大量注入, 多孔介质中出现大量颗粒, 相应的浓度也急剧增大, 后期受颗粒沉积和加速迁移等综合影响, 颗粒浓度逐渐下降至零。关于这一点可由图 2 给出的迁移颗粒在 $y = 0$ cm 处达到浓度峰值, 而后迁移颗粒浓度随 y 方向的距离增大而逐渐减小的规律得到进一步说明。

事实上, 随着时间增大, 迁移颗粒浓度峰值逐渐减小, 并且浓度峰值所对应的 x 坐标值逐渐增大。分析可知, 随着时间增大, 一方面颗粒随渗流在三维空间加速迁移; 另一方面, 沉积作用使得颗粒数量减少,

最后表现为穿透曲线上迁移颗粒的浓度峰值逐渐减小。关于这一点可由图 2 中颗粒浓度峰值随时间减小的规律得到进一步说明。图 2 中穿透曲线以 $y=0$ cm 为中心对称分布, 这主要是由于弥散运动使得颗粒在 y 方向上以相等幅度向两侧迁移造成的。

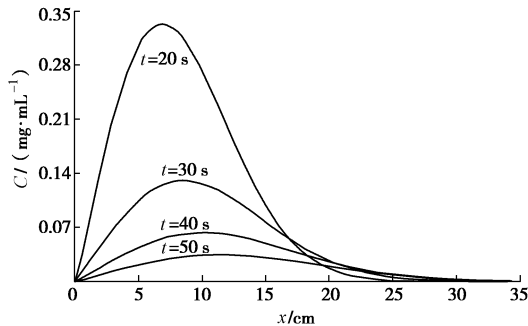


图 1 迁移颗粒浓度随 x 方向距离的变化规律

Fig. 1 Relationship between particle concentration and x -coordinate value

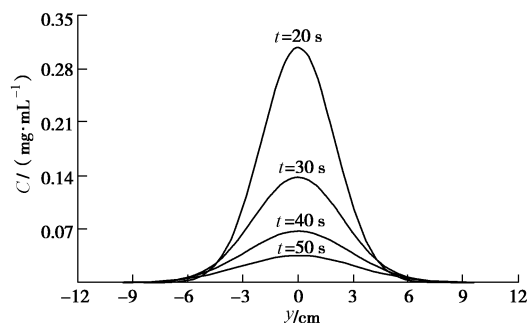


图 2 迁移颗粒浓度随 y 方向距离的变化规律

Fig. 2 Relationship between particle concentration and y -coordinate value

从图 3 可知, 浓度等值线在 $x-y$ 平面上呈椭圆形状, 在 x 方向靠近颗粒注入口 ($x=0$ cm) 一侧的等值线排列较密。但是, 由于颗粒加速迁移效应的影响, 使得远离注入口一侧的相邻等值线排列较疏。其次, 浓度较小的等值线的范围要大于浓度较大的等值线的范围, 这和图 1 和 2 中迁移颗粒浓度随 x 或 y 坐标的变化特性是对应的。最后, 比较图 3 (a) ~ (c) 可以看出, 随着时间的增大, 浓度为 0.001 mg/mL 的等值线的范围逐渐扩大, 浓度为 0.035 mg/mL 的等值线的范围逐渐缩小, 浓度在 0.001~0.035 mg/mL 之间的等值线为两种规律的过渡类型。分析可知, 随着时间的增大, 颗粒由于加速迁移效应逐渐向四周运动, 相应的颗粒浓度峰值逐渐减小, 表现为低浓度等值线的范围逐渐向四周扩大, 高浓度等值线的范围逐渐缩小。

4.2 不同沉积系数对应的颗粒加速迁移问题

图 4 为 3 种不同沉积系数对应的 $x-y$ 平面上的浓度等值线图, 图中对应的 $D_x=0.8$ cm²/s, $t=35$ s。由沉积系数的定义可知, 颗粒沉积主要包括颗粒附着和尺

寸排除效应。随着沉积系数增大, 所有浓度等值线的范围都逐渐减小, 这与浓度等值线随时间的变化规律不同。分析可知, 沉积系数越大, 颗粒的沉积作用越明显, 表现为颗粒浓度等值线的范围逐渐缩小, 相应的颗粒浓度峰值也逐渐减小。其次, 对比浓度为 0.05 mg/mL 的等值线和浓度为 0.25 mg/mL 的等值线随沉积系数的变化特性可知, 0.05 mg/mL 的等值线范围的变化幅度要大于 0.25 mg/mL 等值线。可见, 等值线的浓度越大, 沉积系数对其影响越明显。

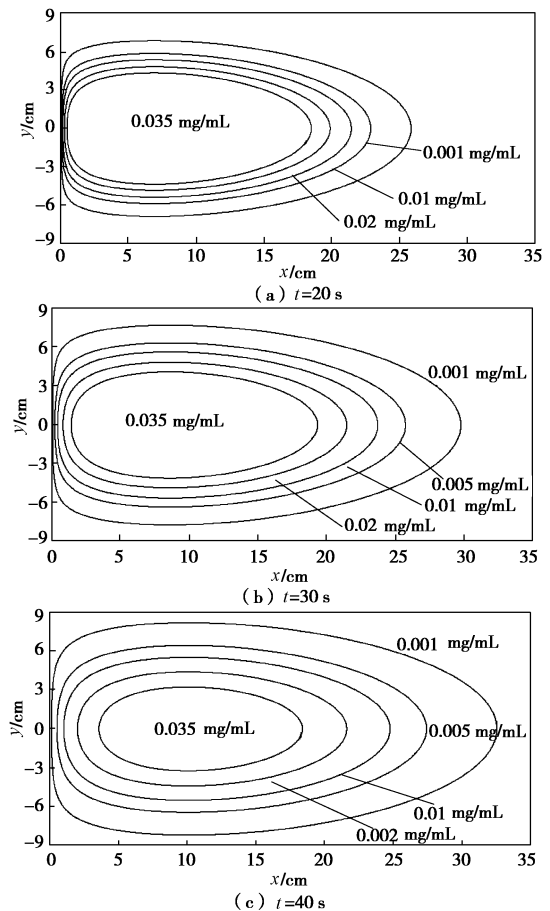
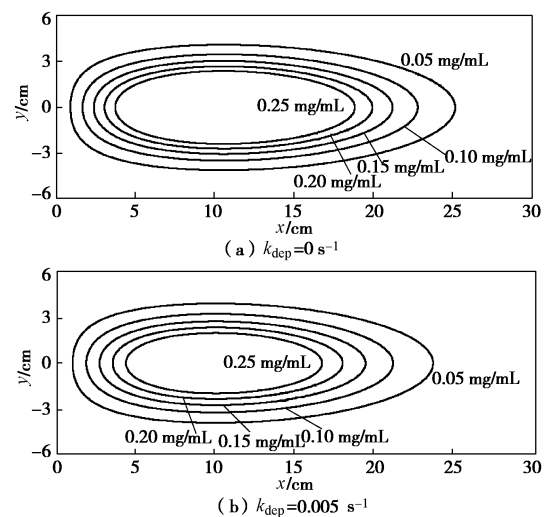


图 3 不同时刻的 $x-y$ 平面上的浓度等值线图

Fig. 3 Concentration contours in $x-y$ plane



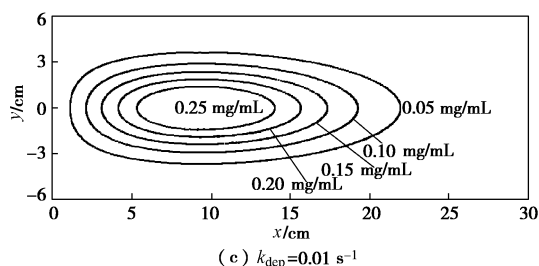


图4 不同沉积系数对应的 $x-y$ 平面的浓度等值线图

Fig. 4 Concentration contours in $x-y$ plane

4.3 x 方向不同弥散系数对应的颗粒加速迁移问题

图5为3种弥散系数对应的 $x-y$ 平面上的浓度等值线图, 图中对应的 $k_{\text{dep}} = 0.01 \text{ s}^{-1}$, $t = 150 \text{ s}$ 。从图中可以看出, 随着 x 方向弥散系数增大, 等值线在 x 方向逐渐向两侧拉长, 而等值线在 y 方向逐渐缩小。分析可知, x 方向的弥散系数越大, 则颗粒沿 x 方向的加速迁移效应越强, 相应的颗粒迁移范围越大。其次, 当 D_y 不变, D_x 和 D_y 的比值逐渐增大, 则颗粒在 y 方向的等值线范围逐渐变小。当然, 浓度等值线在 x 方向的变化幅度要远大于 y 方向的变化幅度, 这一特征是由于颗粒在 x 方向的加速迁移中同时考虑了对流和弥散作用, 而 y 方向的迁移仅考虑颗粒弥散作用。

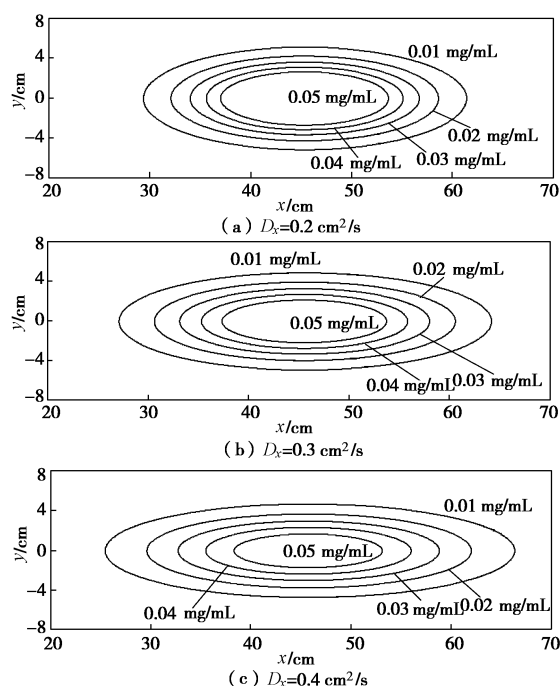


图5 不同的 D_x 对应的 $x-y$ 平面的浓度等值图

Fig. 5 Concentration contours in $x-y$ plane

5 结 论

(1) 基于已有的颗粒一维迁移模型, 建立考虑加速迁移效应和弥散效应的颗粒三维迁移模型, 应用 Laplace 变换和 Fourier 变换求出点源和面源情况下颗

粒加速迁移问题的通解。对点源瞬时注入情况的时间、距离、沉积系数以及弥散系数等的影响机理的分析计算表明了本文所建立的解析解的有效性。

(2) 点源瞬时注入情况下, 随着 x 方向迁移距离增大, 迁移颗粒浓度出现先增大而后减小的规律。但是, 迁移颗粒浓度在 y 方向随距离增大逐渐减小, 迁移颗粒在 $y=0 \text{ cm}$ 处达到浓度峰值。此外, 随着时间增大, 迁移颗粒浓度峰值逐渐减小, 并且浓度峰值所对应的 x 坐标逐渐增大。

(3) 点源瞬时注入情况下, 浓度等值线在 $x-y$ 平面上呈椭圆形状, 在 x 方向上靠近颗粒注入口的等值线排列较密, 远离注入口一侧的等值线排列较疏。其次, 随着时间增大, 低浓度等值线的范围逐渐向四周扩大, 高浓度的等值线的范围逐渐缩小。

(4) 点源瞬时注入情况下, 随着沉积系数增大, 所有浓度等值线的范围都逐渐减小。等值线的浓度越大, 沉积系数对其影响越大。其次, 随着 x 方向的弥散系数增大, 等值线在 x 方向上逐渐向两侧拉长, 而等值线在 y 方向上逐渐缩小。

参考文献:

- [1] NIEHREN S, KINZELBACH W. Artificial colloid tracer tests: development of a compact on-line microsphere counter and application to soil column experiments[J]. Journal of Contaminant Hydrology, 1998, **35**(1/2/3): 249 - 259.
- [2] PRONK M, GOLDSCHIEDER N, ZOPFI J. Dynamics and interaction of organic carbon, turbidity and bacteria in a karst aquifer system[J]. Hydrogeology Journal, 2006, **14**(4): 473 - 484.
- [3] CREBER S A, PINTELON T R R, JOHNS M L. Quantification of the velocity acceleration factor for colloidal transport in porous media using NMR[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2009, **339**(1): 168 - 174.
- [4] PANFILOV M, PANFILOVA I, STEPANYANTS Y. Mechanisms of particle transport acceleration in porous media[J]. Transport in Porous Media, 2008, **74**(1): 49 - 71.
- [5] SUBRAMANIAN S K, LI Y, CATHLES L M. Assessing preferential flow by simultaneously injecting nanoparticle and chemical tracers[J]. Water Resources Research, 2013, **49**(1): 29 - 42.
- [6] GÖPPERT N, GOLDSCHIEDER N. Solute and colloid transport in karst conduits under low- and high-flow conditions[J]. Ground Water, 2008, **46**(1): 61 - 68.
- [7] MASSEI N, LACROIX M, WANG H Q, et al. Transport of particulate material and dissolved tracer in a highly

- permeable porous medium: comparison of the transfer parameters[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2002, **57**(1/2): 21 - 39.
- [8] 陈星欣, 白 冰. 重力对饱和多孔介质中颗粒输运特性的影响[J]. *岩土工程学报*, 2012, **34**(9): 1661 - 1667. (CHEN Xing-xin, BAI Bing. Effect of gravity on transport of particles in saturated porous media[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2012, **34**(9): 1661 - 1667.(in Chinese))
- [9] WEISBROD N, MERON H, WALKER S, et al. Virus transport in a discrete fracture[J]. *Water Research*, 2013, **47**(5): 1888 - 1898.
- [10] SCHEIBE T D, WOOD B D. A particle-based model of size or anion exclusion with application to microbial transport in porous media[J]. *Water Resources Research*, 2003, **39**(4): 1080 - 1089.
- [11] SANTOS A, BEDRIKOVETSKY P G. Population balance model for deep bed filtration with pore size exclusion[J]. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2005, **23**(2/3): 1 - 26.
- [12] JAMES S C, CHRYSIKOPOULOS C V. Effective velocity and effective dispersion coefficient for finite-sized particles flowing in a uniform fracture[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2003, **263**(1): 288 - 295.
- [13] BRADFORD S A, MORALES V L, ZHANG W, et al. Transport and fate of microbial pathogens in agricultural settings[J]. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 2013, **43**(8): 775 - 893.
- [14] 刘泉声, 赵 军, 张程远. 考虑尺寸排除效应颗粒迁移模型的建立[J]. *岩土力学*, 2012, **33**(8): 2265 - 2268, 2276. (LIU Quan-sheng, ZHAO Jun, ZHANG Cheng-yuan. Establishment of particulate transport: size exclusion effect[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2012, **33**(8): 2265 - 2268, 2276. (in Chinese))
- [15] CARSLAW H S, JAEGER J D. *Conduction of heat in solids*[M]. 2nd ed. London: Oxford University Press, 1959.
- [16] ABRAMOWITZ M, STEGUN I A. *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical tables*. National bureau of standards applied mathematics series 55[M]. 10th ed. New York: John Wiley and Sons, 1972.
- [17] SPIEGEL M R. *Theory and problems of Laplace transforms*[M]. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [18] VAN GENUCHTEN M T, ALVES W. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation[M]. U.S. Department of Agriculture Technical Bulletin No. 1661, 1982.
- [19] GRADSHTEYN I S, RYZHIK I M. *Table of integral, series, and products*[M]. New York: Elsevier, 1980.
- [20] SIM Y, CHRYSIKOPOULOS C V. Three dimensional analytical models for virus transport in saturated porous media[J]. *Transport in Porous Media*, 1998, **30**(1): 87 - 112.