

分析一维砂柱弥散试验数据的相关系数极值法

郭建青¹, 马 健², 王洪胜¹

(1. 长安大学水环系, 陕西 西安 710054; 2. 中国科学院新疆生态与地理研究所, 新疆 乌鲁木齐 830011)

摘要: 针对现有分析室内一维砂柱弥散试验数据, 确定多孔介质纵向弥散度的方法, 在考虑介质对示踪剂的吸附作用的情况下不能应用的问题, 对描述一维、稳定渗流与连续定浓度注入示踪剂的砂柱弥散试验的近似解析解进行反函数变换, 利用相关系数极值法的原理, 建立了在多孔介质与示踪剂间为均衡吸附条件下, 可计算多孔介质纵向弥散度与阻滞系数的方法。而且, 这种方法在多孔介质的有效孔隙率为已知的情况下, 还可计算出多孔介质对示踪剂的吸附系数。

关键词: 弥散试验; 均衡吸附; 参数计算

中图分类号: O 357.3 **文献标识码:** A

目前, 分析室内一维、稳定流场和连续注入示踪剂浓度的砂柱弥散试验数据, 确定多孔介质的纵向弥散系数 D_L 的方法主要有正态分布函数法^[1]与反函数法^[2]。这两种方法在实际应用中均具有各自的优点。但是, 它们在考虑示踪剂与介质之间的吸附与解吸作用时, 均不能够应用。为此, 笔者在文中借用反函数变换思路与相关系数极值法的原理^[3], 提出一种新的分析室内一维砂柱弥散试验数据的方法, 其在多孔介质与示踪剂间为均衡吸附与解吸的条件下仍可以应用。在应用时, 不仅可以求出多孔介质的纵向弥散度 a_L , 而且还可计算出多孔介质的阻滞系数 R , 在多孔介质的有效孔隙度 n_e 为已知的情况下, 还能够计算出均衡吸附系数 η 。

1 基本原理

在一维、稳定渗流和连续注入浓度为 c_0 示踪剂的砂柱弥散试验过程中, 取注入点为坐标原点, 水流方向为 x 轴方向, 则在 Peclet 数 $P_e > 10$ (其中 $P_e = x/a_L$) 的情况下, 砂柱内示踪剂浓度在时空上的变化规律可利用以下近似解析表达式表示^[4]:

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \exp\left(\frac{x}{2a_L}(1 - \gamma)\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x - ut\gamma/R}{2\sqrt{a_L ut/R}}\right) \quad (1)$$

式中 $c(x, t)$ 为在空间坐标为 x 、时间坐标为 t 的示踪剂浓度, mL^{-3} ; c_0 为连续注入示踪剂浓度, mL^{-3} ; x 为空间坐标, L; t 为时间坐标, T; u 为渗流速度, LT^{-1} ; a_L 为多孔介质的

收稿日期: 2000-02-21; 修订日期: 2000-04-14

基金项目: 中国科学院阜康荒漠生态系统观测试验站开放基金项目 (200003)。

作者简介: 郭建青 (1958 -), 男, 陕西宜君人, 长安大学水资源与环境工程系副教授, 硕士, 主要从事环境水力学与地下水动力学研究。

纵向弥散度, L_0 。

$$\gamma = \sqrt{1 + 4\lambda a_L R/u} \quad (2)$$

式中 λ 为示踪剂的一级反应速率常数, T^{-1} ; R 为多孔介质的阻滞系数, 无量纲。在弥散过程为均衡吸附条件下, 为

$$R = 1 + \frac{1 - n_e}{n_e} \eta \quad (3)$$

式中 n_e 为多孔介质的有效孔隙度, 无量纲; n 为吸附系数, 无量纲。

$\text{erfc}(x)$ 为余误差函数, 其定义式为 $\text{erfc}(x) = \int_x^\infty e^{-z^2} dz$ 。

在示踪剂为惰性的情况下, $\lambda = 0$, 则 $\gamma = 1.0$ 。所以式(1)可以写为

$$c(x, t) = \frac{c_0}{2} \text{erfc}\left(\frac{x - ut/R}{2\sqrt{a_L ut/R}}\right) \quad (4)$$

为了得到弥散参数的计算公式, 引用反函数变换思路, 即在式(4)两端同除以 $c_0/2$, 然后再取反函数, 可得

$$\text{arcerfc}(2c(x, t)/c_0) = (x - ut/R)/2\sqrt{a_L ut/R} \quad (5)$$

应用相关系数极值原理^[3], 为了推导简单, 令

$$Y = \text{arcerfc}^2(2c(x, t)/c_0) \quad (6)$$

$$T = (x - ut/R)^2/t \quad (7)$$

$$A = R/4ua_L \quad (8)$$

则可得到

$$Y = AT \quad (9)$$

可见, 在进行试验数据分析时, 如果得到在砂柱某固定位置(x 为常数)处的 $c(x, t)/c_0 - t$ 的数据, 则式(9)表示了在以 Y 为纵坐标轴、 T 为横坐标轴的直角坐标系中的纵截距为零的直线。从式(7)可知, 自变量 T 中含有待求参数 u/R , 故不能直接利用线性回归法或直线图解法计算回归系数 A 。根据相关系数极值法的原理可知, 待求参数 u/R 的取值应使变量 Y 与 T 之间的相关系数 ρ 取极值, 当两者之间为正相关时, 应使 ρ 取极大值; 反之, 应取极小值。据此, 应有

$$\frac{\partial \rho}{\partial (u/R)} = 0 \quad (10)$$

其中
$$\rho = \frac{\sum (Y_i - \bar{Y})(T_i - \bar{T})}{\sqrt{\sum (Y_i - \bar{Y})^2 \sum (T_i - \bar{T})^2}} \quad (11)$$

将式(6)、式(7)代入式(11), 并对 ρ 关于 u/R 求导, 且令: $\frac{\partial \rho}{\partial \frac{u}{R}} = 0$ 。经过推导与整理, 得到以下计算 u/R 的公式:

$$u/R = x \cdot (f_1 f_2 - f_3 f_4 / f_2 f_4 - f_1 f_5)^{\frac{1}{2}} \quad (12)$$

其中

$$f_1 = \frac{(1/t - 1/\bar{t})(Y - \bar{Y})}{(t - \bar{t})(1/t - 1/\bar{t})} \quad (13)$$

$$f_2 = \frac{(t - \bar{t})(1/t - 1/\bar{t})}{(t - \bar{t})(1/t - 1/\bar{t})} \quad (14)$$

$$f_3 = \overline{(1/t - 1/\bar{t})^2} \quad (15)$$

$$f_4 = \overline{(t - \bar{t})(Y - \bar{Y})} \quad (16)$$

$$f_5 = \overline{(t - \bar{t})^2} \quad (17)$$

式中的上顶横线表示均值。

在利用式(12)计算出 u/R 值之后,就可用式(7)计算相应不同观测时间 t_i 的 T_i 值。由于 Y 与 T 之间为直线关系,故可用一元线性回归法或直线图解法计算回归系数 A 。在计算出 A 与 u/R 值之后,就可用由式(8)推导出的下式计算多孔介质的纵向弥散度 a_L :

$$a_L = R/4Au \quad (18)$$

与在渗流速度 u 为已知的情况下,利用下式计算多孔介质的阻滞系数 R :

$$R = u / \frac{u}{R} \quad (19)$$

若测定出多孔介质的有效孔隙度 n_e ,则可利用由式(3)推导出的下式计算均衡吸附系数 η :

$$\eta = (R - 1) / \left(\frac{1 - n_e}{n_e} \right) \quad (20)$$

2 参数计算方法与步骤

根据以上介绍的参数计算原理,可将计算步骤归纳为:

(1) 利用式(6)将在距投放点距离为 x 处的相应不同观测时间 t_i 的示踪剂浓度 c_i 值,转化为 Y_i 值。在计算时,需要计算反余误差函数值。可用两种方法计算。一是利用相应不同观测时间 t_i 的 $2c(x, t)/c_0$ 值,反查余误差函数表,另一是利用数值积分的方法,编制专门的计算反余误差函数值的程序,由计算机完成反查工作。

(2) 利用式(13)~(17)计算 f_1 、 f_2 、 f_3 、 f_4 与 f_5 ;利用式(12)计算 u/R 。

(3) 利用式(7)计算相应不同时间 t_i 的 T_i 值。

(4) 利用一元线性回归法或直线图解法计算式(9)中的回归系数 A 值。一元线性回归的计算公式为^[5]:

$$A = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})(T_i - \bar{T})}{\sum_{i=1}^N (T_i - \bar{T})^2} \quad (21)$$

式中 N 为数据 $Y-T$ 的组数; $\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i$; $\bar{T} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N T_i$

在实际计算时,即可用以上公式直接计算,也可用现有的线性回归程序计算。

直线图解法的具体作法为:在大比例的直角坐标纸上,以 Y 为纵坐标轴、 T 为横坐标轴,点绘 $Y-T$ 直线,量取该直线的斜率,便得到回归系数 A 值。

(5) 利用如下的达西定律^[6]计算砂柱内的渗流速度:

$$u = k \frac{\Delta h}{L} \quad (22)$$

式中 k 为多孔介质的渗透系数, LT^{-1} ; Δh 为砂柱两端的水头差, L ; L 为砂柱长度, L 。

(6) 用式(18)计算多孔介质的纵向弥散度 a_L 值, 然后用式(19)计算多孔介质的阻滞系数 R 。在多孔介质的有效孔隙率 n_e 为已知的情况下, 可以用式(20)计算均衡吸附系数 η 。

3 算例

为了检验文中提出的考虑介质均衡吸附情况下的分析室内一维砂柱弥散数据方法的可靠性, 故采用数字算例。表1中的原始数据系由参数真值为: $u = 5.0 \text{ m/d}$ 、 $n_e = 0.15$ 、 $\eta = 0.1$ 、 $R = 1.567$ 与 $a_L = 0.1 \text{ m}$ 计算得在 $x = 0.8 \text{ m}$ 处相应不同时间 t_i 的相对浓度 c_i/c_0 值。现采用文中提出的数据分析方法确定该多孔介质的纵向弥散度 a_L 与阻滞系数 R , 且假设在多孔介质的有效孔隙率 n_e 为已知的情况下, 计算吸附系数 η 。

表1 原始数据与中间计算数据
Table 1. Initial and intermediate computing data

t_i/d	c_i/c_0	$\text{erfc}^{-1}\left(\frac{2c_i}{c_0}\right)$	Y_i	T_i
0.05	0.000168	2.5353	6.4277	8.2035
0.10	0.0284	1.3462	1.8122	2.3126
0.15	0.1495	0.7345	0.5395	0.6884
0.20	0.3253	0.3203	0.1026	0.1309
0.25	0.4977	0.0041	0.0002	0.0000
0.30	0.6403	-0.2541	0.0646	0.0825
0.35	0.7487	-0.4740	0.2247	0.2868
0.40	0.8271	-0.6666	0.4444	0.5674
0.45	0.8823	-0.8390	0.7039	0.8987
0.50	0.9205	-0.9957	0.9914	1.2656
0.55	0.9465	-1.1398	1.2991	1.6584
0.60	0.9641	-1.2736	1.6221	2.0706

计算相应不同测定时间 t_i 的 $2c_i/c_0$ 值, 利用该值反查余误差函数表。在本算例计算中采用了自己编制的 QBASIC 语言专门程序, 在计算机上完成了反查余误差函数表的计算, 结果见表1。

用式(6)计算相应不同时间 t_i 的 Y_i 值, 计算结果见表1。

分别用式(13)~(17)计算 f_1 、 f_2 、 f_3 、 f_4 与 f_5 , 计算结果为: $f_1 = 7.3132$ 、 $f_2 = 0.6809$ 、 $f_3 = 25.4161$ 、 $f_4 = -0.1038$ 与 $f_5 = 0.0298$ 。

用式(12)计算 u/R 。计算结果为: $u/R = 3.191$ 。

用式(7)计算相应不同时间 t_i 的 T_i , 计算结果见表1。

用文献[7]中的 QBASIC 语言的一元线性回归程序, 在计算机上对表1中的 $Y \sim T$ 数据进行回归计算, 计算得: $A = 0.7837$ 。

用式(18)计算的多孔介质的纵向弥散度 $a_L = 0.09997 \text{ m}$; 用式(19)计算的多孔介质的阻滞系数 $R = 1.5669$; 用式(20)计算的均衡吸附系数 $\eta = 0.1000$ 。为了说明利用直线图解法计算回归系数 A , 利用表1中的 $Y \sim T$ 数据, 绘制了 $Y \sim T$ 直线(图略)。从该直线上量得 $A = 0.785$, 由此计算得多孔介质的纵向弥散度 $a_L = 0.0998 \text{ m}$ 。

将以上的参数计算结果与其真值相比较, 可以看出利用线性回归法计算的结果的精度是非常高的, 三个计算参数与其真值间的相对误差均小于1.0%。因此, 进行弥散试验时, 只要得到准确的示踪剂浓度观测值, 就可以得到非常满意的参数值。另外, 由以上的计算结果可以看出, 利用直线图解法得到的参数值的精度略差。因此, 建议在应用文中的方法分析一维砂柱弥散试验数据时, 尽可能采用一元线性回归法计算回归系数 A , 以保证参数计算结果具有较高的

准确性。

4 结 语

与现有的分析一维砂柱弥散试验数据的方法相比较,文中提出的方法具有如下特点:(1)在考虑与不考虑多孔介质均衡吸附的条件下均可应用;(2)利用弥散试验数据不仅能够计算出多孔介质的纵向弥散度,而且能够计算出阻滞系数。当通过其它方法得到多孔介质的有效孔隙度时,还可以计算出均衡吸附系数;(3)全部计算过程可以程序化,由计算机完成参数计算工作,而且当试验数据准确时,就可得到具有较高精度的参数值。

参考文献:

- [1] 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,1996.55-58.
- [2] 郭建青,钱 会.分析一维砂柱弥散试验数据的反函数法[J].水利学报,1999,(2):43-48.
- [3] Sidauruk A, H-D Cheng, D Ouazar. Groundwater contaminant and transport parameter identification by correlation coefficient optimization[J]. Groundwater, 1998, 36(2):208-214.
- [4] W.金士博,杨汝均.水环境数学模型[M].北京:中国建筑出版社,1987.346-348.
- [5] 汪荣鑫.数理统计[M].西安:西安交通大学出版社,1986.174-177.
- [6] 薛禹群.地下水动力原理[M].北京:地质出版社,1986.15-20.
- [7] 徐士良.QBASIC 常用算法程序集[M].北京:清华大学出版社,1997.381-383.

Data Analyzing Method in Indoor Dispersion Test under the Condition of Equilibrium Adsorption

GUO Jian-qing¹, MA Jian², WANG Hong-sheng¹

(1. Changan University, Xian 710054, China; 2. Xinjiang Institute of Ecology and Geography, Academia Sinica, Urumqi 830011, China)

Abstract: To overcome the shortage of current methods which may not be applied in the case of taking adsorption into consideration, a suitable transformation is conducted on the approximate analytical solution which describes one-dimension indoor sandy column dispersion test in the condition of constant injecting concentration and steady seepage, and on the base of this, an analyzing data method is established according to the extreme principle of correlation coefficient. This method may be applied to estimate the values of longitudinal dispersivity, retarding coefficient and equilibrium adsorption coefficient if the effective porosity of porous medium is known.

Key words: dispersion test; equilibrium adsorption; parameter estimation