

文章编号: 1001-6791 (2000) 02-0208-07

非饱和带水-气二相流数值模拟研究进展*

陈家军, 奚成刚, 王金生

(北京师范大学环境科学研究所环境模拟与污染控制国家重点联合实验室, 北京 100875)

摘 要: 通过对近年来水-气二相流数值模拟情况的分析, 总结了在水-气二相流模拟过程中, 各个主要参数或物理过程的数学概化方法, 以及近年来求解水-气二相流方程和污染物运移方程的各种方法, 论述了各种方法的优点和不足。并提出了需进一步研究解决的问题。

关 键 词: 非饱和带; 水-气二相流; 污染物运移; 数值模拟

中图分类号: P641.131 文献标识码: A

非饱和带中流体系统的研究在科学和工程研究的许多领域中占着重要的地位, 尤其在地下水动力学中, 非饱和带更是起着举足轻重的作用, 它是联系地表和地下水系统的纽带, 例如在研究水资源的相互转化上, 预测地表水对地下水的补给量以及进行地表污染物对地下水的影响预测时, 必须首先了解非饱和带中水的流动。气相对水运动的影响是将非饱和带作为二相流来研究的原因之一。更重要的是, 当模拟非饱和带中某些污染物如挥发性有机物的运移时, 由于污染物质不但随水迁移, 而且也随气迁移, 气相的运动就和水相的运动一样重要了。这样就使得地质介质中非饱和带水-气二相流的研究逐渐发展起来。

早期非饱和带研究的对象一般仅限于水相, 只考虑非饱和带中水的流动和污染物在水中的运移, 而忽视了气相的作用。其根据是 Richards 近似方法, 即假定 (1) 气相的压力是一个常数 (2) 忽略气相的粘度 (即气相可以不受任何阻力地被水相驱替或充满水流走后留下的空间), 从而忽略气相运动以及气相对水相运动产生的影响, 这样就可以只考虑水相的运动了。许多研究表明: 在大多数情况下, Richards 近似法是一个非常好的近似方法, 应用这一近似方法一般都可以取得比较满意的效果。Milly 曾经对这一近似方法做了详细的评述^[1]。

但近年来, 人们发现在许多情况下, 如介质不均匀, 存在水驱气的阻力时, 气相的存在能对水相的运动造成较大的影响。Green 等首先认识到非饱和带中气相的重要性, 并把它考虑进一个一维两相有限差模型中。在研究土壤中油类污染物的去除方面, 往往采用气相流动模型, 而忽略水相运动对气相流动的影响^[2]。

水气二相流数值模拟研究包括二相流流动模拟和污染物运移模拟, 其中流动模拟是污染物运移模拟的基础。

* 收稿日期: 1999-01-11; 修订日期: 1999-05-10

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目 (98002712)。

作者简介: 陈家军 (1962-), 男, 黑龙江绥滨人, 北京师范大学环境科学研究所副教授, 博士, 主要从事环境评价、环境模拟等方面研究。

1 水-气二相流流动数值模型研究现状

目前已有的二相流模型多是建立在如下的基本假定基础上: 非饱和带中只存在三相物质, 即固体骨架、水相和气相。固体骨架是不运动的和固结的, 而气相和水相是自由运动的和不相溶混的; 不考虑温度的影响, 即系统为绝热系统; 不考虑污染物的浓度对流体密度的影响, 由此可先求解二相流流动数学模型。

1.1 基本流动方程

依据质量守恒原理, 水-气二相流基本方程为

$$\frac{\partial (\rho_{\alpha} \theta_{\alpha})}{\partial t} - \nabla \cdot (\rho_{\alpha} \bar{K}_{\alpha} (\nabla h_{\alpha} + \frac{\rho_{\alpha}}{\rho_{0w}} \nabla z)) = F^{\alpha} \quad \alpha = a, w \quad (1)$$

式中 下标 α 代表水相或气相: ρ_{α} 为密度; \bar{K}_{α} 为渗透系数张量; θ_{α} 为 α 相的体积含量; h_{α} 为水相或气相的压头; z 为位头; ρ_{0w} 为标准状态下水的密度; F^{α} 为源汇项。

上面的基本方程有两个, 包含 6 个未知量, 即 h_w 、 h_a 、 θ_w 、 θ_a 、 ρ_w 、 ρ_a , 因此需增加 4 个方程, 如考虑水相的密度不变, 则需增加 3 个方程, 它们分别为

$$\theta_w + \theta_a = n \quad (2)$$

式中 n 为介质的孔隙度。

$$h_c = h_a - h_w = f(\theta_w) \quad (3)$$

式中 h_c 为毛细力, 是含水量的函数。

$$\rho_a = \rho_{0a}(1 + h_a/h_{0a}) \quad (4)$$

式中 ρ_{0a} 为标准状态下气相的密度; h_{0a} 为标准状态下气相压力的水柱高度; h_a 为以一个标准大气压为参考 0 值的水头高度。

由基本流动方程加上初边值条件则构成二相流流动数学模型。

1.2 流动模型的参数

确定流动和运移模型参数比较方便的方法是通过室内实验或野外实验直接得出参数关系, 或经过简单的解析或半解析的推导得出其表达式。也可利用野外实验得到的数据, 对其进行数值处理, 并用优化方法来估计模型参数^[3]。

在对流动模型进行求解时, 必须事先给出毛细压力与含水量的关系、相对渗透率与含水量的关系以及各相密度与压力的关系。

毛细压力与含水量之间的关系有许多不同的函数表达式。但其中绝大多数都是经验公式。最常用的一个函数表达式是 Van Genuchten 公式^[4]:

$$\theta_w = (\theta_{ws} - \theta_{wr}) / [1 + (\alpha h_c)^m]^{1 - \frac{1}{m}} + \theta_{wr} \quad (5)$$

式中 θ_{ws} 、 θ_{wr} 、 α 、 m 均为待定参数。这一函数曲线比较光滑, 易于数值处理, 得到广泛应用。其它的函数表达式则往往存在不连续, 求导时常有跳跃现象, 给数值模拟带来困难。Kool 和 Parker 的表达式则是在 Van Genuchten 的基础上, 考虑了滞后现象和气相的影响。

相对渗透率常表示为流体饱和度或流体含量的函数。其中绝大多数函数表达式也都是经验公式。Van Genuchten 将 Mualen 的理论应用于水相压力—饱和度函数表达式, 从而得到相对渗

透率—饱和度函数表达式^[4]，但没推导气相的相对渗透率的函数表达式。这一工作是 Kool 和 Parker 来做的。他们同样是将 Mualem 的理论应用于 Van Genuchten 的毛细压力—饱和度函数表达式来完成的^[3]。

至于流体密度与流体压力之间的关系。一般假定水是不可压缩的，而气相的密度是气相压力的函数。在研究中，常常忽略热和污染物浓度对气相密度的影响，同时忽略了气相密度变化对污染物浓度的影响，且假定气相密度是气相压力的线性函数。

1.3 流动方程的数值解法

求解二相流方程常用方法有：有限差法，有限元法，拉格朗日法。

拉格朗日法是将二相流的控制方程改写成对流弥散形式的方程，然后再用拉格朗日法求解^[5]。

有限差法是解多相流法用得最多的一种方法。这种方法比较简单和直观，如 Pinder 利用隐式有限差法解决了完全耦合的三相流问题，其中采用了气相压力为常数的假定，对于时间导数的离散采用的是 Newton-Raphson 非线性迭代方法^[6]。Sleep 和 Sykes 也运用有限差法解决了完全耦合的水、气二相流及污染物运移模型，这是近期可见到的模型中最完整的一个^[7]。

有限元法相比于有限差法来说，其优点在于处理边界条件和源项上的灵活性。在可见的关于非饱和带研究的文献中，采用有限元方法的要比采用有限差法求解的文献少。这也许是历史的原因，由于有限差分法历史相对长些加之有限差分法直观易懂，早期的非饱和带的研究人员对此比较偏爱。但近年来有限元方法因其灵活性越来越受到研究人员的青睐。如 Kaluarach 和 Parker、Celia 等都是采用这种方法来求解模型的^[8,9]。Schrefler et al. 在他们的研究中也采用有限元方法来求解。且在他们的模型中，考虑了由于受压而引起的固体骨架变形^[10]。

二相流方程求解过程中存在两个主要的困难：①通过什么样的方法将两相流动的方程进行耦合。因为二相流系统是两相流体同时流动的系统，将两个方程分开来求解肯定是有问题的。②待解非线性方程的线性化问题。

对于两相方程的耦合问题，早期常用的一种方法是 IMPES (implicit pressure explicit saturation) 方法。这种方法是指将一相方程用压力作为因变量且采用隐式形式，另一相饱和度作为因变量且采用显式格式。从而来消除两相之间的影响。但对于两相之间的影响较大的问题。IMPES 方法就不再适用了。Celia 在他的模型中则是采用的全隐式的耦合方法^[8]。Sleep 和 Sykes 模拟了污染物在气相中的运移，但他们并没有将两相的方程耦合起来求解，而是先求解 Richards 方程，然后再推导气相的运动情况的^[11]。而 Mendoza 则是在假定含水量为常量的情况下来模拟气相的运动的^[11]。目前两相流流动方程的耦合，都采用单相方程求解代入另一相方程中的迭代解法，而非真正意义的两相联合求解。

关于非饱和流方程的线性化，常用的方法有两种：Picard 迭代法和 Newton-Raphson 迭代法。两种迭代法的效果依赖于数值方法的选择。在上游加权有限元(差)方法中，采用 Picard 迭代法要比 Newton-Raphson 迭代法效果好，但反之则不然^[9]。而且对于同样的情况，Newton-Raphson 方法要比 Picard 方法收敛得快；但是 Newton-Raphson 方法在给定的初始值与实际值不同时，常常出现不收敛的情况，而 Picard 方法则不会出现这种情况。

另外时间导数的处理是二相流数值解法成败的关键。Neuman 提出时间导数的质量集中处理方法。如果应用有限元方法进行方程的离散时，不对时间导数项进行质量集中处理，那么数

值解不遵守最大化原则且计算结果往往出现振荡现象。而且对于压力锋面突变的情况尤为明显。而此时运用质量集中的方法则往往能收到良好的效果。

数值解是否质量守恒是一种数值解法成败的标准。研究发现: Richards 方程数值结果是否保持质量守恒, 取决于控制方程形式的选择。一般认为, 以含水量为因变量的 Richards 方程具有良好的质量守恒性质, 但它不适于饱和带的流动; 而以压头为因变量的方程虽然适合饱和带的流动, 但它却不能保持良好的质量守恒。Celia 通过研究发现: 基于混合形式方程的数值近似能兼有两者之长。在混合形式中, 时间导数以含水量作为因变量, 空间导数以压头为因变量。以此方程为基础得到的数值解, 即能保持质量守恒, 又能保证其在饱和带的合理性。^[8]

2 水-气二相流污染物运移数值模型研究现状

2.1 基本运移方程

根据各相中污染物组分的守恒原理, 各相流体中污染物运移的基本方程为

$$\frac{\partial (\rho_\alpha \theta_\alpha \omega_\alpha)}{\partial t} + \nabla (\rho_\alpha q_\alpha \omega_\alpha) - \nabla (\theta_\alpha \rho_\alpha \bar{D}_\alpha \nabla \omega_\alpha) + \lambda_\alpha \theta_\alpha \rho_\alpha \omega_\alpha = F^\alpha \quad \alpha = a, w \quad (6)$$

式中 ω_α 为 α 相流体中污染物的质量含量; λ_α 为 α 相反应速率, \bar{D}_α 为动力弥散系数。式 (6) 可进一步写成

$$\frac{\partial (\theta_\alpha c_\alpha)}{\partial t} + \nabla (q_\alpha c_\alpha) - \nabla (\theta_\alpha \bar{D}_\alpha \nabla c_\alpha) + \lambda_\alpha \theta_\alpha c_\alpha = F^\alpha \quad (7)$$

式中 c_α 为 α 相流体中污染物的浓度, $c_\alpha = \rho_\alpha \omega_\alpha$

在式 (7) 导出中, 做了下面的假定

$$\rho_\alpha \nabla \omega_\alpha > \omega_\alpha \nabla \rho_\alpha$$

笔者认为对于水相其密度的变化可忽略, 上面的假定合理, 而对于气相其密度的变化对浓度的影响则不容忽略, 二相流基本运移方程加上初边值条件则构成了二相流污染物运移数学模型。

2.2 运移模型的参数

在运移方程中动力弥散系数由下式给出:

$$D_{\alpha_j} = \alpha \tau \alpha |v_\alpha| \delta_{ij} + (\alpha_\alpha - \alpha \tau \alpha) \frac{v_\alpha v_\alpha}{|v_\alpha|} + D_{m_\alpha}^{eff} \delta_{ij} \quad (8)$$

式中 D_{α_j} 为弥散系数张量的第 ij 分量; α , α_α 分别为横向和纵向弥散度; δ_{ij} 为 Kroneker 函数; v_α 为流体的速度 (等于单位流量除以含水量); $D_{m_\alpha}^{eff}$ 为有效分子扩散系数。

对于长期的运移问题, 恰当地选择气相的有效分子扩散系数是非常重要的。将 Fick 第二定律进行修正后给出一维扩散的有效分子扩散系数:

$$D_{m_\alpha}^{eff} D_{m_a} \theta_a \tau \quad (9)$$

式中 τ 是弯曲率; θ 是含气量; D_{m_a} 是自由气体分子扩散系数。但 Lai et al. (1976) 和 Fluther (1973) 在实验中发现, 当含水量增加到接近饱和时, 有效分子扩散系数却减小了。这表明: 有效分子扩散系数并不是含水量的线性函数。两者之间应是非线性的关系^[12]。

在研究污染物运移时, 水相作为湿润相, 由此假定气相与固相不直接进行物质交换。而物质交换只是在水相与固相、水相与气相之间发生。

液相、固相之间的物质交换(即固相的吸附和解吸过程)在模拟过程中通常作如下处理:假定污染物的固相浓度与液相浓度成正比(即 $F = K_d C_w$ 。其中 F 为污染物的固相浓度; K_d 为分配系数; C_w 为水中污染物的浓度)。利用这一假定,吸附解吸过程可以通过给水相的运移方程添加吸附项进行修正。

因为有些污染物如某些放射性核素和挥发性有机物不仅在水相中运移,而且也通过气相运移,所以在模拟水、气相中污染物运移的时候必须讨论污染物在相间的物质交换过程。通常采用模式有质量转移平衡模式和非平衡模式两种。平衡模式是假定两相中污染物的浓度成正比,通过这一假定可将两个方程统一成一个方程来求解。非平衡模式是假定每相中污染物的浓度变化率与两相中污染物的浓度差成比例。从文献上来看,绝大多数模型采用的是平衡模式。

2.3 运移方程的数值解法

80年代以来,非饱和带污染物运移的研究迅速发展。模型的解法也日益改进。主要的方法有:有限差法、有限元法、质点跟踪法及EL(Eulerian-Lagrangian)法等。其中有限差方法和有限元方法是求解运移方程采用最多的两种方法。

有限差方法仍然是求解运移方程用得最多的方法。最早用数值方法来研究非饱和带污染物运移的Weeks就采用有限差法^[13]。Sleep和Sykes对有限差法中时间导数项的不同离散方式作了比较完整的讨论。他们认为:隐式方法要比显式方法麻烦得多,但隐式方法是无条件稳定的,所以对时间步长没有太严格的限制。然而,步长的加大会使截断误差加大,使解的精确性降低,且隐式方法与显式方法相比较易出现数值弥散^[11]。

有限元法求解运移方程存在一些不足。用这一方法求得的结果往往出现振荡且有明显的数值弥散现象。采用了上游加权的有限元法可以有效地减少解的振荡,而且不会明显地增加数值弥散。但是对于污染浓度锋面比较陡(变化率大)的情况,上游加权也是无能为力的。

近年来,又有许多新的方法被用于求解运移方程。这包括McCarthy和Johnson的随机游动法。它能准确地描述气相中的弥散过程^[14]。而有限元和有限差方法却往往会扩大这一过程。主要是这两种方法出现数值弥散的原因。

EL方法是采用一个特征方程来处理运移方程的对流项。这种方法常用于求解单相流体中污染物运移方程,它能很好地克服求解运移方程时出现的数值弥散现象。Yeh运用改进的特征线法求解了污染物在非饱和带水相中的运移方程^[15]。Binning利用了ELLAM(Eulerian-Lagrangian localized adjoint method)求解运移方程。他首先采用水相和气相之间的污染物的分配满足平衡模式(Henry法则)的假定,将两相中的污染物运移方程进行合成,使之成为一个关于水相中污染物浓度的方程,然后再用上述方法求解的。这种方法克服了有限元和有限差方法的缺点,但计算上却过于繁琐^[6]。由于这种方法在精确性上的优点。所以近年来许多研究人员都试图用这种方法来求解污染物运移方程,并对其作了许多改进。

3 结论与建议

非饱和带水气流动是一个二相流系统,在某些情况下是不能近似处理成单相流问题的,而必须作为二相流系统进行研究。近些年来,非饱和带水-气二相流动与污染物运移的研究开展比较迅速,数值模拟也得到不断的改进。通过对研究文献的分析,就非饱和带水-气二相流的研究

仍存在的一些问题进行了总结并提出了建议。

(1) 二相流的文献研究中, 有些模型虽然是两相的流动模型, 但在求解时并没有将两相的方程相耦合来求解, 而是采用其它的办法来近似, 忽略两相之间的影响, 从而去对两相的方程来分别求解。因此必须加强对两相方程耦合方法和二相流非线性方程组解法的研究, 尤其是直接解法的研究, 以更准确地描述二相流动的相互影响。

(2) 目前在研究二相流中污染运移时, 虽然在流动模型中考虑了气相密度随压力的变化, 但忽略了气相密度的变化对污染物浓度的影响以及进而对弥散移项的影响。因此需增加此项并进行数值处理, 分析该项对污染物运移的影响。

(3) 污染物运移方程中, 许多研究中没有考虑两相间的污染物的交换, 也没有考虑固相吸附的影响, 这显然是不合理的。而有些模型, 虽然考虑到了上述情况, 但在模拟水、气两相之间的物质交换以及固相的吸附时, 基本上采用的都是平衡模式。这样在许多情况下是不合理的。应根据不同的情况, 采用恰当的模式来模拟固相吸附和水、气相之间的物质交换过程。

总之, 非饱和带水-气二相流的研究对进行水资源转化分析和污染物运移的预测可提供强有力的工具。近年来我国在土壤水力学领域和地下水动力学领域对非饱和带水流和污染物运移的研究较多, 而对于非饱和带水-气二相流的研究则较少, 因此应加强这一方面的研究。

参考文献:

- [1] Milly C D. Advances in modeling of of water in the unsaturated zone[J]. Transport in Porous Media, 1988, 3: 491 ~ 514.
- [2] Massmann J W. Applying groundwater flow models in vapor extraction system design [J]. Journal of Environmental Engineering, 1989, 115(1): 129 ~ 149.
- [3] Kool J B, J C Parker. Analysis of the inverse problem for transient unsaturated flow [J]. Water Resource Research, 1988, 24: 817 ~ 830.
- [4] Van Genuchten M Th. A closed form equation for predicting the hydraulic conductivity in soils[J]. Soil Sci. Soc Am J, 1980, 44: 892 ~ 898.
- [5] Binning Philip. A finite volume Eulerian-Lagrangian localized adjoint method for solution of the contaminant transport equations in two-dimensional multiphase flow systems [J]. Water Resource Research, 1996, 32(1) 103 ~ 114.
- [6] Pinder George F, Linda M Abriola. On the simulation of nonaqueous phase organic compounds in the subsurface[J]. Water Resource Research, 1986, 22(9): 109S ~ 119S.
- [7] Sleep B E, J F Sykes. Compositional simulation of groundwater contaminant by organic compounds: 1. Modeling development and verification[J]. Water Resource Research, 1993, 29(6): 1697 ~ 1708.
- [8] Celia Michael A, Philip Binning. A mass conservative numerical solution for two-phase flow in porous media with application to unsaturated flow[J]. Water Resource Research, 1992, 28(10): 2819 ~ 2828.
- [9] Kaluarachchi J J, Parker J C. An efficient finite element method for modeling multiphase flow [J]. Water Resource Research, 1989, 25(1): 43 ~ 54.
- [10] Schrefler B A, Zhan Xiao Yong. A fully coupled model for water flow and air flow in deformable porous media[J]. Water Resource Research. 1993, 29(1): 155 ~ 167.
- [11] Sleep B E, Sykes J F. Modeling the transport of volatile organics in variably saturated media[J]. Water Resource Research, 1989, 25(1): 81 ~ 92.

- [12] Lai S H, J T edje, M Ericson A E. In situ measurement of gas diffusion coefficient in soils[J]. Journal of Soil Sci Society of America, 1976, 40: 3 ~ 6.
- [13] Weeks Edwin P, Douglas E Earp, Glenn M. Thompson. Use of atmospheric fluoro-carbons F-11 and F-12 to determine the diffusion parameters of the unsaturated zone in the southern high plains of Texas[J]. Water Resource Research, 1982, 18(5): 1365 ~ 1378.
- [14] McCarthy, Kathleen A, Richard L Johnson. Transport of volatile organic compounds across the capillary fringe[J]. Water Resource Research, 1993, 29(6): 1675 ~ 1683.
- [15] Yeh T C Jim, Rajesh Sriva, Amando Guz, et al. A numerical model for water flow and chemical transport in variably saturated porous media[J]. Groundwater, 1993, 31(4): 634 ~ 644.

Advances in Numerical Simulation of Two-Phase (Water and Air) Flow in Unsaturated Zone^{*}

CHEN Jia-jun, XI Cheng-gang, WANG Jin-sheng

(*Institute of Environmental Sciences, Beijing Normal University, State Key Joint Laboratory of
Environmental Simulation and Pollution Control, Beijing 100875, China*)

Abstract: This paper reviews recent advances in numerical simulation of two-phase flow and contaminant transport. Many methods on deriving the primary parameters and the generalization of some physical processes are summarized in two-phase flow simulation. Meanwhile various solving algorithms to the two-phase flow equations and contaminant transport equations are reviewed, and their merits and shortcomings are summarized. Hence further issues to be solved are put forward.

Key words: unsaturated zone; two-phase flow; contaminant transport; numerical simulation

* The project is supported by Doctor Fund of China (No. 98002712).