

模拟多孔介质中生物化学运输的有限颗粒法的一个修正算法

曹圣山^{1,2}, 孙讷正³

(1. 山东大学数学与系统科学学院, 山东济南 250100; 2. 中国海洋大学数学系, 山东青岛 266071; 3. Civil and Environmental Engineering Department, University of California, Los Angeles)

摘要: 给出了有限颗粒法(FCM)的一个修正算法, 用来模拟二维多孔介质中复杂的物理、生物化学运输现象. 该算法不仅具有与早先的 FCM 一样的优点, 而且可以在更微观的水平上保证质量守恒, 获得更为准确的颗粒位置, 从而有利于质量交换的高精度计算. 计算结果与精确解和早先的 FCM 的结果做了比较.

关键词: 地下水污染; 反应运输; 生物降解; 有限颗粒法.

中图分类号: P641.2 **文献标识码:** A

文章编号: 1000-2383(2003)05-0492-05

作者简介: 曹圣山, 男(1961—), 副教授, 山东大学在读博士, 中国海洋大学数学系工作, 主要从事数学建模、地下水流和水质的数学模型和数值模拟研究. E-mail: sscsao@sina.com

被污染含水层的生物治理, 是涉及到各类生物、化学反应, 以及微生物增长、放射性衰减等液相与固相间的各种质量交换的生物降解过程, 其中, 模拟微生物、氧和其他化合物浓度分布的数值方法是一个重要的、基本的研究课题, 已越来越受到人们的重视.

一般地, 用于描述此类现象的数学模型是一组耦合的微分方程组, 即所谓对流—弥散—反应微分方程组^[1,2]. 通常求解这类偏微分方程组有几类数值方法: 有限差分法(FDM)、有限元法(FEM)、特征线法(MOC)和随机游动法(RWM). 大量研究证明, 有限差分法和有限元法会产生过量、欠量和数值弥散^[3], 为此, 有限差分法和有限元法通常都要求局部 Peclet 数小于 1^[4,5]. 虽然 MOC 及其修正形式可以避免数值弥散, 但是却不能保证很好地符合质量守恒. RWM 也是一种常用的模拟多孔介质中质量运输的数值方法^[6~9], 它不要求解对流—弥散偏微分方程组, 而是跟踪全部颗粒, 并模拟它们的物理、生物和化学过程. RWM 可以有效的消除数值弥散, 但是为保证解的光滑性, 需要将颗粒数目取得尽可能地大, 而这将带来计算量的显著增加, 况且, 它难以较好地刻画峰值和尾值浓度^[3,10]. Delay 等^[9]提出—

种 RWM 的修正形式, 它不必单个跟踪每个颗粒, 而是将若干颗粒分别置于有限差分网格中集中、统一模拟, 这样既可以处理颗粒数量较大的情况又可以处理结合一阶反应动力学的情况, 然而, 修正的 RWM 只限于处理各向同性介质及均衡假设下的质量交换和反应. 另外, 此方法强烈依赖网格步长的选择, 易产生人工弥散现象^[9].

Sun^[3,10]提出了一种新数值方法, 有限颗粒法(finite cell method, FCM), 它特别适合模拟多孔介质中复杂的生物化学运输过程. 与 RWM 相比, FCM 既继承了 RWM 的优点: 不需要解对流弥散方程, 即使是大 Peclet 数的问题, 也不会有数值弥散; 又在几方面不同于 RWM: (1) FCM 中的颗粒有一定的体积, 而不是数学上的点; (2) FCM 中的颗粒所携带的质量是可变的, 而不是固定的; (3) 在 FCM 中, 对不同相定义了不同的颗粒集; (4) 在 FCM 中, 每个颗粒可以包含不只一种生物或化学成分, 它们之间的反应和交换可以是非均衡和持续的; (5) 不仅在不同的颗粒之间存在质量交换, 就是在一个颗粒的内部, 质量也可以变化. 此外, 从数值例子显示, FCM 算法能较好地模拟峰值和尾值浓度^[3,10].

在 FCM 中, 对饱和含水层中的不可压缩流体, 由于每个单元能容纳的动颗粒个数是一定值, 经过

一个时间步长,根据对流、弥散及随机移动计算出所有动颗粒的新位置,然而,由于颗粒速度及其随机移动的计算误差,有些单元中的动颗粒数过多,有些单元中的动颗粒数不足,为保证局部质量守恒,这些单元中的某些动颗粒的位置就应该被重新调整,我们称之为“颗粒重置”,其结果是使所有单元中的动颗粒数均衡。然而,实际计算可知,早先的 FCM 其质量守恒实际上仅仅是在不同的网格之间实现的,在网格内部更微观的意义上,动颗粒数并不均衡。而且,由于颗粒的位置直接影响到其所含各种成分的质量变化,这将在一定程度上影响计算精度,同时也易引起浓度值的振荡和人工弥散现象。

本文给出了 FCM 的一个修正算法,基本思想是:每个时间步长后,颗粒重置是在不改变各动颗粒之间的相对位置的前提下,使得每个单元内部的动颗粒分布均匀化,我们称之为“摊饼法”。

1 多孔介质生物化学运输的数学模型

考虑含有生物化学反应的质量运输问题的数学模型^[2](公式(1)~(5)),它们刻画了无需均衡假设下的多孔介质中需氧微生物降解过程。

对有机污染物的反应运输,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C_f^h) = \text{div}(\theta D \text{grad} C_f^h) - \text{div}(\theta V C_f^h) - f_h(C_f^h, C_s^h) - k[\theta C_f^m + (1-\theta)C_s^m] \frac{C_f^h}{K_c + C_f^h} \frac{C_f^o}{K_o + C_f^o}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[(1-\theta)C_s^h] = f_h(C_f^h, C_s^h) - k[\theta C_f^m + (1-\theta)C_s^m] \frac{C_s^h}{K_c + C_s^h} \frac{C_f^o}{K_o + C_f^o}. \quad (2)$$

对微生物的反应运输,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C_f^m) = \text{div}(\theta D \text{grad} C_f^m) - \text{div}(\theta V C_f^m) - f_m(C_f^m, C_s^m) - b\theta(C_f^m - C_{mm}) + kY\theta C_f^m \left[\frac{C_f^h}{K_c + C_f^h} + \frac{C_s^h}{K_c + C_s^h} \right] \frac{C_f^o}{K_o + C_f^o}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}[(1-\theta)C_s^m] = f_m(C_f^m, C_s^m) - b(1-\theta)(C_s^m - C_{mm}) + kY(1-\theta)C_s^m \left[\frac{C_f^h}{K_c + C_f^h} + \frac{C_s^h}{K_c + C_s^h} \right] \frac{C_f^o}{K_o + C_f^o}. \quad (4)$$

对氧的反应运输,

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C_f^o) = \text{div}(\theta D \text{grad} C_f^o) - \text{div}(\theta V C_f^o) - kF[\theta C_f^m +$$

$$(1-\theta)C_s^m] \left[\frac{C_f^h}{K_c + C_f^h} + \frac{C_s^h}{K_c + C_s^h} \right] \frac{C_f^o}{K_o + C_f^o}. \quad (5)$$

其中, C_f^h . 液相中有机污染物浓度,表示为每单位体积液相中有机污染物的质量(M/L^3); C_s^h . 固相中有机污染物浓度,表示为每单位体积固相中有机污染物的质量(M/L^3); C_f^m . 液相中微生物的浓度(M/L^3); C_s^m . 固相中微生物的浓度(M/L^3); C_f^o . 液相中氧的浓度(M/L^3); θ . 液相的体积因数(无量纲),对饱和流即为孔隙度; D . 水动力弥散系数(L^2/T); V . 流体流速(L/T); k . 每单位质量微生物与其最大有机污染物利用率的比例系数($1/T$); K_c . 有机污染物的半饱和常数(M/L^3); K_o . 氧的半饱和常数(M/L^3); $f_h(C_f^h, C_s^h)$. 每单位液相和固相间有机污染物的质量交换速率($M/L^3 T$); $f_m(C_f^m, C_s^m)$. 每单位液相和固相间微生物的质量交换速率($M/L^3 T$); b . 微生物的衰减速率($1/T$); C_{mm} . 天然有机污染物所能支持的微生物的最小浓度(M/L^3); Y . 微生物的产生系数(无量纲); F . 有机污染物的耗氧比率(无量纲). Rashid 和 Kaluarachchi^[4]、Murphy 和 Ginn^[11]尝试了多种形式的质量交换函数 $f_h(C_f, C_s)$ 和 $f_m(C_f, C_s)$ 。

2 修正的 FCM 算法

笔者给出一种修正的 FCM 算法,其前 2 个步骤与早先的 FCM 一样,具体步骤如下:

(1) 定义颗粒集. 通常有两类颗粒集,即可动颗粒集和固定颗粒集。

(2) 跟踪模拟所有动颗粒的位置. 经过一个时间步长,计算出每个颗粒由于对流、弥散和随机移动到的新位置,非均匀流场的一般公式为^[3,8]

$$x_p(t + \Delta t) - x_p(t) = V'_x \Delta t + Z_1 \sqrt{2\alpha_1 V \Delta t} \frac{V_x}{V} - Z_2 \sqrt{2\alpha_1 V \Delta t} \frac{V_y}{V}, \quad (6)$$

$$y_p(t + \Delta t) - y_p(t) = V'_y \Delta t + Z_1 \sqrt{2\alpha_1 V \Delta t} \frac{V_y}{V} + Z_2 \sqrt{2\alpha_1 V \Delta t} \frac{V_x}{V}. \quad (7)$$

其中, $V'_x = V_x + (\partial D_{xx} / \partial x) + (\partial D_{xy} / \partial x)$, $V'_y = V_y + (\partial D_{xy} / \partial y) + (\partial D_{yy} / \partial y)$. $(x_p(t), y_p(t))$, $(x_p(t + \Delta t), y_p(t + \Delta t))$ 分别表示颗粒 p 在 t 和 $t + \Delta t$ 时刻的位置. Z_1, Z_2 是 2 个具有独立标准正态分布的随机向量, α_1 分别是纵向弥散度和横向弥散度。

(3) 用“摊饼法”实现颗粒重置(此处所提颗粒均

指动颗粒). 颗粒重置的基本依据有 3 个, 即局部质量守恒, 含水层饱和与流体的不可压缩. 具体做法是: 从顺序上说, 是从上游向下游遍历所有单元, 从上游开始每个单元依次优先饱和. 如果上游单元都已经满了, 将多余的颗粒移到下游单元中去. 确定了要移动的颗粒, 再用“摊饼法”实现颗粒重置, 具体有 2 个步骤, 首先, 在初步颗粒重置时采用一种挤压方法, 保证经颗粒重置步骤后, 相邻 2 个单元中的全部颗粒的相对位置不变; 其次, 在上一步的基础上, 再用摊饼法, 重新安排颗粒位置使之在每个单元内部的颗粒分布均匀化.

所谓挤压法, 如图 1 所示, 将线 1 与线 2 之间的所有颗粒, 在不改变它们的相对位置的前提下, 挤压到线 3 与线 2 之间. 记, 待移动颗粒到要跨越的网格线 1 (grid line 1) 的距离从小到大存于数组 $DIST(I)$, $I=1, \dots, N$; N 为移出单元中需移出的颗粒数. 下游单元中到网格线 1 距离不超过 DUP 范围内的颗粒数为 M . 各颗粒移动前的坐标为 $(XOLD(I), YOLD(I))$, $I=1, \dots, N+M$, 初步颗粒重置后的坐标为 $(XNEWI(I), YNEWI(I))$, $I=1, \dots, N+M$, 完成颗粒重置后的新坐标为 $(XNEWF(I), YNEWF(I))$, $I=1, \dots, N+M$. 挤压法的计算公式为

$$SCAL = (DUP - DLOW) / (DIST(N) + DUP), \quad (8)$$

$$YNEWI(I) = (1 - SCAL) \cdot (DUP + GRLNY) + SCAL \cdot YOLD(I), \quad I=1, \dots, N+M. \quad (9)$$

其中, $GRLNY$ 为网格线 1 的纵坐标值, 而 DUP 和 $DLOW$ 分别表示线 2 和线 3 到网格线 1 的距离. 注意, 此时的移动无需改变颗粒的横坐标值.

以图 1 中所示下游单元为例, 考虑用摊饼法将其中所含颗粒均匀化. 记, $GRLNX$ 为网格线 2 的横坐标, 设单元内的颗粒均匀分布后 X, Y 方向的颗粒

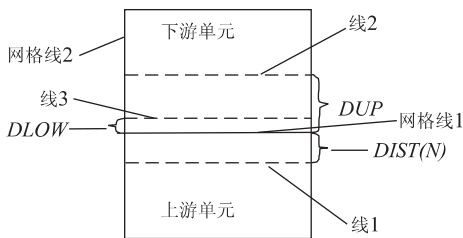


图 1 实线所示的 2 个单元, 上面是移入单元, 即下游单元, 下面是移出单元, 即上游单元

Fig. 1 Two blocks shown by solid line, the upper is downstream block which maybe accept cells, the lower is the upstream block which maybe send out cells

数分别为 $NUMBX$ 和 $NUMBY$. 该单元 X, Y 方向的网格步长分别为 $\Delta x, \Delta y$, 将单元内颗粒的 X, Y 坐标分别排序. 摊饼法的计算程序为

```
DO K=1, NUMBY
  DO L=1, NUMBX
    I=(K-1)NUMBX+L
    XNEMF(I)=GRLNX+(L-0.5)*Δx/NUMBX
    YNEWF(I)=GRLNY+(K-0.5)*Δy/NUMBY
  END DO
END DO
```

经上述处理, 可将单元内任意分布的颗粒在与颗粒尺度相当的尺度上均匀化, 从而实现微观意义上的局部质量守恒. 数值例子说明, 颗粒重置的方法将直接影响到各种成分的浓度分布.

(4) 与早先的 FCM 一样^[3], 选择较小步长求解方程(2)和(4), 分别模拟一个上述时间步长 Δt 中每个颗粒所产生的物理、生物、化学反应, 及由此产生的各种质量交换、衰减和增长, 计算出每个颗粒中各种成分的质量变化情况.

最后, 以有限差分网格单元为窗口计算各单元中心点处的各种浓度值.

3 数值算例

为便于比较, 此处选取 2 个与 Sun^[3] 完全相同的数值例子和有限差分网格.

问题 1. 考虑二维无界区域中的均匀介质不变流场. 在其上某点 (X_0, Y_0) 处初始时刻瞬间注射质量为 M_0 的示踪剂, 流场流速 $V=V_x=$ 常数, α_1, α_t 分别是纵向弥散度和横向弥散度, 精确解为^[2]

$$C(x, y, t) = \frac{M_0/\theta}{4\pi Vt\sqrt{\alpha_1\alpha_t}} \cdot \exp\left[-\frac{(x-X_0-Vt)^2}{4\alpha_1 Vt} - \frac{(y-Y_0)^2}{4\alpha_t Vt}\right]. \quad (10)$$

其中, $V_x=1, V_y=0, \alpha_1=0.01, \alpha_t=0.005, \theta=0.25, M_0=1.5625, X_0=0.375, Y_0=2.375$, 数值计算结果见图 2. 可以看出, 修正的 FCM 算法与原 FCM 算法相比, 无论是峰值的模拟还是弥散程度, 都有了一定程度的改善. 精确解的图形显示中采用了子区域平均的方式^[3], 是为了与数值解有可比性. 另外, 从图 2d 可以看出, 结果有振荡, 待进一步改善.

问题 2. 含水层几何尺寸为 $40 \text{ m} \times 10 \text{ m}$ 的矩形, 如图 3 所示的平面区域. 其中, AB 和 CD 是不透

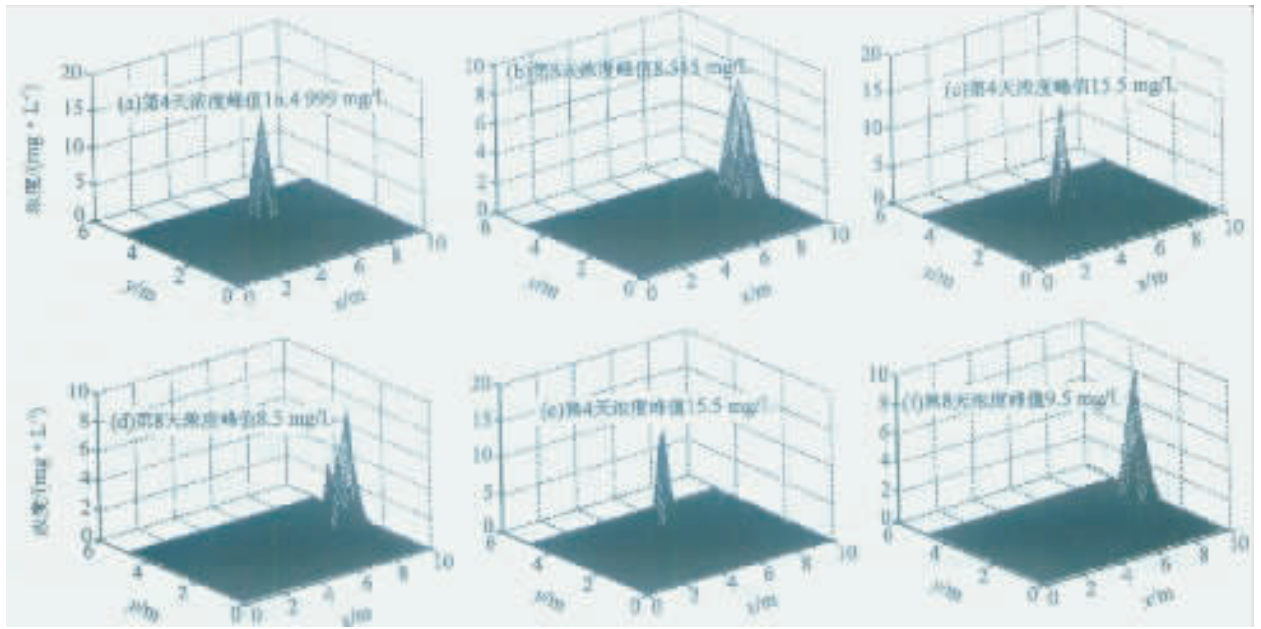


图 2 问题 1 的精确解和数值解结果比较

Fig. 2 Comparison between analytical solution and FCM solutions of problem 1 on the fourth day and eighth day respectively
a, b. 分别是精确解在第 4 天、第 8 天的子区域平均结果; c, d. 分别是修正的 FCM 算法在第 4 天、第 8 天模拟结果; e, f. 分别是原 FCM 算法在第 4 天、第 8 天的模拟结果

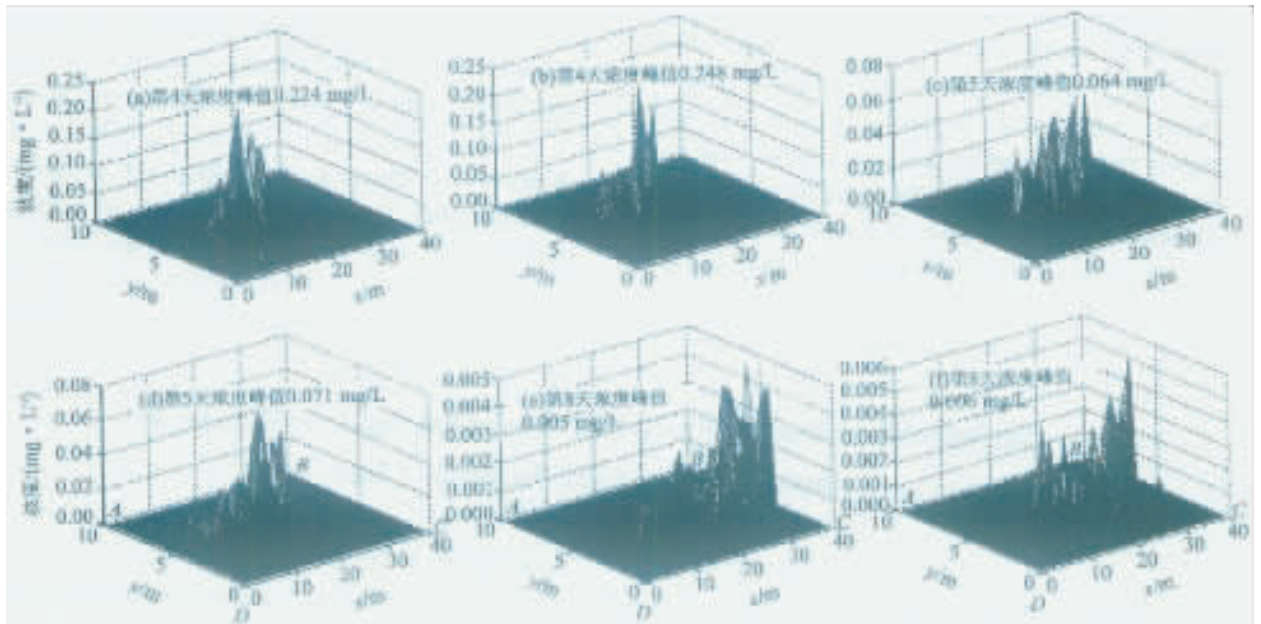


图 3 第 4, 5, 8 天的有机污染物浓度模拟结果

Fig. 3 Concentrations of hydrocarbon simulated by the two FCMs on the fourth day, fifth day and eighth day respectively
a, c, e. 原 FCM 算法的计算结果; b, d, f. 修正的 FCM 算法的模拟结果

水边界, DA 和 CB 是给定水头边界, DA 处水头比 CB 处水头高 1 m, 对数水力传导率场由纽带法生成, 其均值为 3.0, 标准差为 1.2, 相关长度为 4 m. 有限差分网格为均匀矩形网格, 其中 $\Delta x = 1$ m,

$\Delta y = 0.5$ m, 共 40×20 个单元. 除在 (2, 10) 单元有机污染物浓度为 100 mg/L 其他各处初始浓度值均为 0, 入水边界 DA 处入水浓度为 0. 其他参数见表 1. 有机污染物浓度模拟结果如图 3.

表 1 数值模拟问题 2 时所用的各种参数值

Table 1 Values of parameters in problem 2

θ	α_1/m	α_2/m	k/d^{-1}	$K_c/(mg \cdot L^{-1})$	$K_o/(mg \cdot L^{-1})$	Y	F	b/d^{-1}	k_a^h/d^{-1}	k_d^h/d^{-1}	k_a^m/d^{-1}	k_d^m/d^{-1}
0.25	0.01	0.005	20	2.0	0.2	0.1	3.0	0.02	0.2	0.05	0.1	0.1

k_a^h 和 k_d^h 分别表示有机污染物的吸附与解吸附速率系数; k_a^m 和 k_d^m 分别表示微生物的吸附与解吸附速率系数.

数值模拟结果显示,FCM 修正算法在一定程度上改进了原 FCM 算法的计算精度.然而,模拟结果的振荡现象依然存在,说明“摊饼法”实现颗粒重置尚有不足,还需改进.而两种算法模拟结果的差异也说明颗粒重置方法是颗粒跟踪方法的一个关键环节,有待进一步研究.

参考文献:

- [1] Bear J. 多孔介质流体动力学[M]. 李竟生,陈崇希,译. 北京:中国建筑工业出版社,1983.
Bear J. Dynamics of fluids in porous media [M]. Translated by LI J S, CHEN C X. Beijing: China Architecture & Building Press, 1983.
- [2] Sun N Z. Mathematical modeling of groundwater pollution [M]. New York: Springer-Verlag, 1996.
- [3] Sun N Z. Modeling biodegradation processes in porous media by the finite cell method [J]. Water Resour Res, 2002, 38(3): 1—11.
- [4] Rashid M, Kaluarachchi J J. A simplified numerical algorithm for oxygen- and nitrate-based biodegradation of hydrocarbons using Monod expressions [J]. J Contam Hydrol, 1999, 40(1): 53—77.
- [5] Cirpka O A, Frind E O, Helmig R. Numerical simulation of biodegradation controlled by transverse mixing [J]. J Contam Hydrol, 1999, 40(2): 159—182.
- [6] Tompson A F B. Numerical simulation of chemical migration in physically and chemically heterogeneous porous media [J]. Water Resour Res, 1993, 29(11): 3709—3726.
- [7] Bosma W J P, van de Zee S E A T M, van Duijn C J. Plume development of a nonlinearly adsorbing solute in heterogeneous porous formations [J]. Water Resour Res, 1996, 32(6): 1569—1584.
- [8] Labolle E M, Fogg G E, Tompson A F B. Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media: Local mass-conservation problem and implementation methods [J]. Water Resour Res, 1996, 32(3): 583—594.
- [9] Delay F, Housset H, Porel G, et al. Transport in a 2-D saturated porous medium: A new method for particle tracking [J]. Math Geol, 1996, 28(1): 45—71.
- [10] Sun N Z. A finite cell method for simulating the mass transport process in porous media [J]. Water Resour Res, 1999, 35(12): 3649—3662.
- [11] Murphy E M, Ginn T R. Modeling microbial processes in porous media [J]. Hydrol J, 2000, 8(1): 142—158.

A Modified Algorithm of FCM for Simulating Biological and Chemical Transport Process

CAO Sheng-shan^{1,2}, SUN Ne-zheng³

(1. School of Mathematics and System Sciences, Shandong University, Jinan 250100, China; 2. Mathematical Department, Ocean University of China, Qingdao 266071, China; 3. Civil and Environmental Engineering Department, University of California, Los Angeles, USA)

Abstract: A modified algorithm of finite cell method (FCM) is presented for simulating complex physical, biological and chemical transport in porous media. It not only has the same advantages as the original finite cell method, but also can keep local mass conservation in more finer meshes, so we may get the locations of cells as well as the final results with high accuracy. Two numerical examples show the comparison between the solutions of modified FCM and original FCM and analytical solutions.

Key words: groundwater pollution; reactive transport; biodegradation; finite cell method.