

文章编号:1000-582X(2013)01-145-06

地下水同位素浓度场-流场耦合的平板模型

童海滨¹, 付旭东¹, 陈建生²

(1. 河南大学 环境与规划学院, 开封 475004;

2. 河海大学 水文水资源与水利工程科学国家重点实验室, 南京 210098)

摘要:首先介绍了前人提出的地下水系统中关于放射性同位素浓度场的几个集总参数模型, 如EM、PM和EPM模型, 指出它们的响应函数物理意义不明确。针对这种情况, 依据放射性衰变原理和质量守恒原理, 假定:1)水流系统处于稳态, 2)下渗速率为常量, 3)水流的水平运移速率为常数的条件下, 推导了地下水系统中放射性同位素浓度场-流场耦合的一个集总参数模型, 即平板模型。与上述模型相比, 该模型建立在明确的物理基础之上, 各个参数的物理意义明确, 便于对相关水流系统中的放射性同位素数据作出精确的解释, 以期为该系统中放射性同位素浓度的定量分析与模拟提供更为确切的数学基础。

关键词:地下水系统;放射性同位素;浓度场-流场;集总参数模型;放射性衰变原理

中图分类号:P641.3

文献标志码:A

A panel model of isotope concentration-flow coupled field in groundwater systems

TONG Haibin¹, FU Xudong¹, CHEN Jiansheng²

(1. College of Environment and Planning, Henan University, Kaifeng 475004, China;

2. State Key Laboratory of Hydrology-Water Resources and Hydraulic Engineering, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: Several previous general lumped parameter model of radioisotope concentration field in groundwater systems, such as EM, PM and EPM model, are introduced, and the ambiguous physical meaning of response functions within these models are pointed out. And then, based on the radioactive decay principles and mass conservation principle, assuming that 1) the fluid system is in steady state, 2) infiltration rate is constant, and 3) the horizontal transport of water flow rate is constant, a general lumped parameter model of radioisotope concentration-fluid coupled field in groundwater systems is deduced under these conditions, that is, Panel model. Compared with the above mentioned models, this new model is built on a clear physical basis with a definite physical meaning of each parameter, so that it could make accurate interpretations on radioisotope data of the relevant water flow system, and provide more precise mathematical foundation on quantitative analysis and simulation of radioisotope concentration.

Key words: groundwater system; radioisotope; concentration-flow field; lumped parameter model; radioactive decay theory

收稿日期:2012-08-10

基金项目:国家自然科学基金青年基金(50809024);河南大学高层次人才科研启动基金(081124);河南大学教学改革研究项目(083123)

作者简介:童海滨(1978-),博士,河南大学副教授,硕士生导师,主要从事同位素水文研究,(E-mail)lbthb@tom.com。

传输时间(transit time)是同位素水文学中的重要概念之一,它被定义为水分子离开某水流系统时所经历的时间^[1-2];传输时间分布(transit time distribution, TTD)描述了流域是怎样保留和释放水和溶质的^[3-4],二者对流域中水和溶质的运移和分布有重要的控制作用。目前有较多的例子应用于该领域,如 Brian^[5]等将多种同位素和化学示踪剂用于地球化学和集总参数模型,评估了 Woodville 喀斯特平原地下水和泉水中 N 污染的来源、范围以及地下水的平均传输时间。McGuire^[6]等利用山坡示踪实验和数学模型评估了一个流域的径流过程和水的传输时间,结果表明示踪数据能提高参数的可辨识性。Florian^[7]等通过地下水中³H、¹⁸O、²H 和硫酸盐的同位素分析,确定了一个高山喀斯特流域中硫酸盐的来源和地下水的平均传输时间。在传输时间的概率密度函数的选型方面,Andrew^[8]等利用 Madison 岩溶地区含水层中所采集水样的 CFC 浓度,评估了不同类型的传输时间概率密度函数对该含水层的适应性。Hrachowitz^[9]等对比研究了 Scotland 两个小流域集总参数型 TTD 的模拟性能和平均传输时间对资料的敏感性。

传输时间及其分布的估计有许多途径,如粒子追踪法^[10]、直接模拟^[11]、分室模型^[12-13]、概念性水文模型^[14]和随机-机械性方法^[15-16]。然而,它们一般需要流域水文特征方面的资料,但由于流域系统的复杂性和水文资料的缺乏,目前还主要采用集总参数的传输时间模型来研究,这类模型一般以统计方法为主,其特点是结构简单、所需资料较少,缺点是统计方法多来自化学工程领域^[17-21],并不适用于流域中复杂和重要的控制过程,且其假设和约束过于“概化”,模型参数和水流系统中的各要素没有明确的对应关系,虽然最近有众多的研究利用示踪剂估计传输时间,但在理论和方法上的进展相对不大,仍然有一些亟待解决的问题。

针对这种状况,笔者假定地下水系统中流场处于稳态,利用数学物理方法,直接推导了该系统中放射性同位素浓度场-流场耦合的一个集总参数式的白箱模型-平板模型。与其他模型相比,它的物

理意义更明确,可对该系统放射性同位素数据作出确切的解释,并且该模型有广泛的适应性,如对参数稍加改动即可用于该系统中稳定同位素浓度的模拟。

1 耦合模型的建立背景、假定与推导过程

1.1 现有的集总参数模型及其建模思想

在集总参数模型中,地下水系统常被看作是一个流动模式为稳态的整体。通常,假定系统中水的流速是恒定的^[22-23]。在很多研究中都有对集总参数模型的详细描述^[19,24-26]。图 1 是地下水系统中常用的集总参数模型示意图^[27],其中输入浓度(C_{in})和输出浓度(C_{out})的关系是:

$$C_{out}(t) = \int_{-\infty}^t C_{in}(t')g(t-t')\exp[-\lambda(t-t')]dt' \quad (1)$$

其等价形式为:

$$C_{out}(t) = \int_0^{\infty} C_{in}(t-t')g(t')\exp(-\lambda t')dt' \quad (2)$$

式(1)中 t' 为输入时间; $t-t'$ 为经过时间; $g(t-t')$ 为入口处瞬时注入的示踪剂在出口处的分布响应函数;积分限趋向于无穷表示必须将整个输入曲线 $C_{in}(t)$ 都包含在内才能得到正确的输出浓度曲线(图 1 中的 $C_{out}(t)$)。

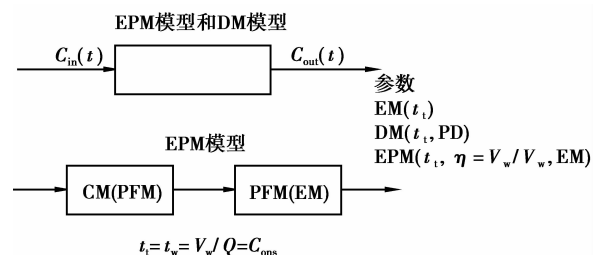


图 1 集总参数模型中地下水系统示意图^[27]

目前,现有的地下水系统集总参数模型常采用下述两个步骤来确定:1)采用其他科学领域的已知函数确定模型的结构;2)通过校正过程来确定模型的参数,即对一个已知或估计的输入函数,使由式(1)或(2)计算出的浓度值更好地符合实验值。例如,大多数模型借用化学工程中的响应函数 $E(t)$,

该函数能描述所研究流体的脱离时间分布(滞留时间分布)^[19,24-26]。

活塞模型(PFM)^[25]假设流线具有相同的运移时间,但是忽略了水动力学弥散和扩散作用。响应函数为 Dirac delta 函数,即 $g(t') = \delta(t' - t_i)$; 指数近似模型(EM)^[25]假设流线是关于运移时间的指数分布,且流线之间没有示踪剂交换^[28],满足该假设的响应函数为 $g(t') = t_i^{-1} \exp(-t'/t_i)$,其响应函数表明模型不适用于不存在无穷小流线的系统。指数-活塞近似流动模型(EPM)^[26]假设含水层是由平行的两部分组成,一个为运移时间的指数分布,另一个为近似活塞式分布,满足该假定的响应函数:当 $t' \geq t_i(1 - \eta - 1)$ 时, $g(t') = (\eta/t_i) \exp(-\eta \cdot t'/t_i + \eta - 1)$; 当 $t' < t_i(1 - \eta - 1)$ 时, $g(t') = 0$ 。EPM 包含 2 个调整参数 t_i 和 η , (η 是总体积与时间指数分布部分的体积比率),调整 η 可使模型接近于 EM 模型或扩散模型,然而 η 的确定具有较大的任意性。扩散模型(DM)借用半无限介质扩散方程的线性解作为响应函数^[29]: $g(t') = (4\pi P_D t' / t_i)^{-1/2} t'^{-1} \exp[-(1 - t'/t_i)^2 / (4P_D t' / t_i)]$, 其中, P_D 是表层扩散系数(Peclet 数的倒数)。但是,该解不宜应用于无限介质。

1.2 耦合模型的假设与推导过程

上述模型的响应函数都是建立在借用其他领域的现有函数基础之上的,而这种借用是否合理,在理论上没有得到证明;另外,基于实测数据的校正过程而建立的模型,即便得到新的数据进一步验证,但这种有限的枚举仍然不能证明其理论上的合理性。有鉴于此,笔者依据质量守恒原理和放射性衰变原理,采用微元分析方法,试图建立有明确物理意义的地下水系统中放射性同位素浓度场-流场耦合的一个集总参数模型,即平板模型。

该模型假定:1)水流系统处于稳态,2)下渗速率 I 为常量,3)水流的水平运移速率 v 为常数。

设流路的总长度为 L ,取 $[x, x + dx]$ 区间上的水体作为微元,见图 2。在流场处于稳态,下渗速率 I 为常量的条件下,则所取的微元中的放射性同位素经历时间 $(L-x)/v$ 可达到出口处。即在 t 时刻, L 处的放射性同位素有来自 x 处的微元内的放射性同位素的补充,而该补给是经过时间 $(L-x)/v$ 到

达的,即该同位素是在 $t - (L-x)/v$ 时刻进入了含水层。依据质量守恒定律,在 $[t, t + \Delta t]$ 时段内,流出水流系统出口处的溶质微元的物质的量 $Q_{out}(t) \cdot C_{out}(t) \cdot \Delta t$ ($Q_{out}(t)$ 是 t 时刻水流系统出口处的流量, $C_{out}(t)$ 是 t 时刻水流系统出口处的放射性同位素浓度)等于 $\int_0^L C_{in}[t - (L-x)/v] \cdot e^{-\lambda(L-x)/v} \cdot I \cdot \Delta t \cdot dx$ 。

即对于 $x \in [0, L]$ 上的任意值,有下述微分式:

$$Q_{out}(t) \cdot C_{out}(t) \cdot \Delta t = \int_0^L C_{in}[t - (L-x)/v] \cdot e^{-\lambda(L-x)/v} \cdot I \cdot \Delta t \cdot dx \quad (3)$$

式中, $C_{in}(t)$ 是 t 时刻地下水系统所受的下渗补给的放射性同位素浓度, x 为水体微元在流路上的位置, λ 为水流系统中所研究的放射性同位素的衰变常数。

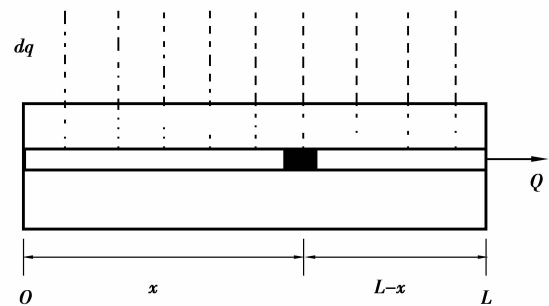


图 2 地下水系统及其用于推导集总参数模型的微元

式(3)两边同除以 Δt ,得:

$$Q_{out}(t) \cdot C_{out}(t) = \int_0^L C_{in}[t - (L-x)/v] \cdot e^{-\lambda(L-x)/v} \cdot I \cdot dx \quad (4)$$

假定,水流系统处于稳态,则有:

$$dW = I \cdot L \cdot dt, \quad (5)$$

$$Q_{out} = \frac{dW}{dt} = I \cdot L. \quad (6)$$

式(5)、(6)中, dW 为所研究微元时段内,水流系统所接受下渗补给体积。

将式(6)代入式(4),得:

$$I \cdot L \cdot C_{out}(t) = \int_0^L C_{in}[t - (L-x)/v] \cdot e^{-\lambda(L-x)/v} \cdot I \cdot dx \quad (7)$$

整理(7)式,得:

$$C_{\text{out}}(t) = \frac{\int_0^L C_{\text{in}}[t - (L-x)/v] \cdot e^{-\lambda(L-x)/v} \cdot dx}{L} \quad (8)$$

令 $(L-x)/v = t'$ 代入式(8), 得:

$$C_{\text{out}}(t) = \int_0^{L/v} C_{\text{in}}(t-t') \cdot e^{-\lambda t'} \cdot \frac{v}{L} dt' \quad (9)$$

令 $\frac{L}{v} = k$, 得:

$$C_{\text{out}}(t) = \frac{1}{k} \int_0^k C_{\text{in}}(t-t') \cdot e^{-\lambda t'} \cdot dt' \quad (10)$$

由于 C_{in} 随着不同的水流系统, 不同的研究时段以及不同的地理位置而不同。因此, 式(10)只有这 3 个条件确定时, 才能确定 C_{in} 的具体表达式, 从而才能给出显式解析解。有鉴于此, 下面仅给出 C_{in} 为常数时的本模型的解析解。

当 C_{in} 为常数时, 式(10)可化为:

$$C_{\text{out}}(t) = \frac{1}{k} \int_0^k C_{\text{in}} \cdot e^{-\lambda t'} \cdot dt' = C_{\text{in}} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda k}}{\lambda \cdot k} \quad (11)$$

式(11)也就是在假定地下水系统所受的下渗补给的放射性同位素浓度为常数前提下, 本模型所计算出的水流系统出口处的放射性同位素浓度。

在本模型中, 参数 k 具有明确物理意义, 即 k 是水流系统的质点从进入地下水系统到流出该系统所用的最长时间。

2 讨论与结论

与活塞模型、指数模型、指数-活塞复合流动模型和扩散模型相比, 本模型的建立过程说明, 直接依据物理学原理, 采用数学物理方法, 进行理论推导, 是建立响应函数的一种可行途径, 所建模型的物理意义明确, 其表达式能给予建模者足够的包容性和灵活性。如式(10)可以针对不同的 C_{in} , 给出不同的展开式, 它扩展了该模型应用的时间和空间范围, 举例如下。

由于自然界中放射性同位素 (^3H 、 ^{14}C 等) 浓度的输入常受季节性因素的影响, 一般会表现出周期性的变化。现假定水流系统同位素浓度的季节性输

入可用周期函数 $(a\sin(bt+c)+d)$ 来逼近, 则式(10)的表达式为:

$$C_{\text{out}}(t) = \frac{1}{k} \int_0^k \{a\sin[b(t-t') + c] + d\} \cdot e^{-\lambda t'} \cdot dt' \quad (12)$$

式中, a, b, c, d 为确定浓度 $C_{\text{in}}(t)$ 的函数表达式, 利用数据拟合方法得到的待定系数。

展开(12)式右端, 得:

$$C_{\text{out}}(t) = \frac{1}{\lambda k (\lambda^2 + b^2)} \left\{ \begin{aligned} & + \lambda a e^{-\lambda k} [b \cos(bk - m) + \\ & \lambda \sin(bk - m)] - \\ & a \lambda [b \cos(m) - \lambda \sin(m)] + \\ & d(\lambda^2 + b^2)(1 - e^{-\lambda k}) \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

式中, $m = bt + c$ 。

由式(13)可知, 水流系统出口处放射性同位素浓度变化由 3 部分组成: 1) $\lambda a e^{-\lambda k} [b \cos(bk - m) + \lambda \sin(bk - m)] / \lambda k (\lambda^2 + b^2)$ 为衰减性周期项, 代表由水流系统输入的周期性浓度变化和考虑放射性同位素浓度在流路上的衰变因素所引起的出口处浓度的周期性变化; 2) $-a \lambda [b \cos(m) - \lambda \sin(m)] / \lambda k (\lambda^2 + b^2)$ 为线性周期项, 代表由水流系统输入的周期性浓度变化所引起的出口处的周期性浓度变化; 3) $d(\lambda^2 + b^2)(1 - e^{-\lambda k}) / \lambda k (\lambda^2 + b^2)$ 为线性项, 包含了放射性同位素浓度在流路上的衰变作用对水流系统出口处浓度的影响。

更一般地, 由于稳定性同位素可以视为衰变常数 $\lambda = 0$ (半衰期 $T \rightarrow \infty$) 的放射性同位素。因此, 对本模型中式(3)~(12), 将其中的衰变常数 λ 用 0 替换, 即可用于计算和模拟相应水流系统的稳定同位素浓度。例如, 式(3)中, 将衰变常数 λ 用 0 替代后, 得到 $Q_{\text{out}}(t) \cdot C_{\text{out}}(t) \cdot \Delta t = \int_0^t C_{\text{in}}[t - (L-x)/v] \cdot I \cdot \Delta t \cdot dx$, 其余公式依次类推, 不再赘述。

参考文献:

- [1] Sivapalan M. Process complexity at hillslope scale, process simplicity at the watershed scale: is there a connection? [J]. Hydrological Processes, 2003, 17(5): 1037-1041.
- [2] Stewart M K, McDonnell J J. Modeling base flow soil water residence times from deuterium concentrations [J]. Water Resources Research, 1991, 27(10):

- 2681-2693.
- [3] Burns D A, Plummer L N, McDonnell J J, et al. The geochemical evolution of riparian ground water in a forested piedmont catchments [J]. *Ground Water*, 2003, 41(7):913-925.
- [4] Scanlon T M, Raffensperger J P, Hornberger G M. Modeling transport of dissolved silica in a forested headwater catchment: implications for defining the hydrochemical response of observed flow pathways[J]. *Water Resources Research*, 2001, 37 (4): 1071-1082.
- [5] Katz B G, Chelette A R, Pratt T R. Use of chemical and isotopic tracers to assess nitrate contamination and ground-water age, Woodville Karst Plain, USA[J]. *Journal of Hydrology*, 2004, 289 (1/2/3/4): 36-61.
- [6] McGuire K J, Weiler M, McDonnell J J. Integrating tracer experiments with modeling to assess runoff processes and water transit times [J]. *Advances in Water Resources*, 2007, 30(4):824-837.
- [7] Einsiedl F, Maloszewski P, Stichler W. Multiple isotope approach to the determination of the natural attenuation potential of a high-alpine karst system[J]. *Journal of Hydrology*, 2009, 365(1/2):113-121.
- [8] Long A J, Putnam L D. Translating CFC-based piston ages into probability density functions of ground-water age in karst [J]. *Journal of Hydrology*, 2006, 330(3/4):735-747.
- [9] Hrachowitz M, Soulsby C, Tetzlaff D, et al. Using long-term data sets to understand transit times in contrasting headwater catchments [J]. *Journal of Hydrology*, 2009, 367(3/4):237-248.
- [10] Molénat J, Gascuel-Oudou C. Modelling flow and nitrate transport in groundwater for the prediction of water travel times and of consequences of land use evolution on water quality[J]. *Hydrological Processes*, 2002, 16 (2):479-492.
- [11] Goode D J. Direct simulation of groundwater age[J]. *Water Resources Research*, 1996, 32 (2):289-296.
- [12] Campana M E, Simpson E S. Groundwater residence times and recharge rates using a discrete-state compartment model ^{14}C data [J]. *Journal of Hydrology*, 1984, 72(1/2):171-185.
- [13] Yurtsever Y, Payne R B. Mathematical models based on compartmental simulation approach for quantitative interpretation of tracer data in hydrological systems[C] // Morfís A, Paraskevopoulou P. 5th International Symposium on Underground Water Tracers. Netherlands:Balkema A A. 1986:341-353.
- [14] Lindström G, Rodhe A. Modelling water exchange and transit times in till basins using oxygen-18[J]. *Nordic Hydrology*, 1986, 17(4/5):325-334.
- [15] Destouni G, Graham W. Solute transport through an integrated heterogeneous soil-groundwater system[J]. *Water Resources Research*, 1995, 31(8):1935-1944.
- [16] Simic E, Destouni G. Water and solute residence times in a catchment: stochastic-mechanistic model interpretation of ^{18}O transport [J]. *Water Resources Research*, 1999, 35(7):2109-2119.
- [17] Danckwerts P V. Continuous flow systems; distribution of residence times[J]. *Chemical Engineering Science*, 1953, 2(1):1-13.
- [18] Eriksson E. The possible use of tritium for estimating groundwater storage [J]. *Tellus*, 1958, 10 (4): 472-478.
- [19] Maloszewski P, Zuber A. Determining the turnover time of groundwater systems with the aid of environmental tracers; 1. models and their applicability[J]. *Journal of Hydrology*, 1982, 57(3/4):207-231.
- [20] Haas C N, Joffe J, Heath M S, et al. Continuous flow residence time distribution function characterization[J]. *Journal of Environmental Engineering*, 1997, 123 (2): 107-114.
- [21] Levespiel O. *Chemical reaction engineering*[M]. 3rd ed. New York:John Wiley & Sons, 1999.
- [22] Zuber A, Maloszewski P, Stichler W, et al. Tracer relations in variable flow[C] // Proceedings of the 5th International Symposium on Underground Water Tracing, 1986, Athens, Greece. [S. l.]: Institute of Geology and Mineral Exploration, 1986:355-360.
- [23] Zuber A, Grabczak J, Garlicki A. Catastrophic and dangerous inflows to salt mines in Poland as related to the origin of water determined by isotope methods[J]. *Environment, Geology*, 2000, 39(3/4):299-311.
- [24] Zuber A. Mathematical models for the interpretation of environmental radioisotopes in groundwater systems[J]. *Handbook of Environmental Isotope Geochemistry: The terrestrial environment*, B.

- Amsterdam:Elsevier, 1986, 2:1-59.
- [25] Amin I E, Campana M E. A general lumped parameter model for the interpretation of tracer data and transit time calculation in hydrologic systems[J]. *Journal of Hydrology*, 1996, 179(1/2/3/4):1-21.
- [26] Maloszewski P, Zuber A. Lumped parameter models for interpretation of environmental tracer data [C] // *Manual on Mathematical Models in Isotope Hydrogeology*, TECDOC-910. International Atomic Energy Agency, Vienna, Austria, 1996:9-58.
- [27] Zuber A, Maloszewski P, Campana M E, et al. Environmental isotopes in the hydrological cycle principles and applications[M/OL]. Paris: UNESCO, 2001[2012-05-23]. http://www.iup.uni-heidelberg.de/institut/aktuelles/studium/lehre/AquaPhys/docPAS/IEHC_Vol3.pdf.
- [28] Eriksson E. The possible use of tritium for estimating groundwater storage[J]. *Tellus*, 1958, 10(4):472-478.
- [29] Kreft A, Zuber A. On the physical meaning of the dispersion equation and its solutions for different initial and boundary conditions [J]. *Chemical Engineering Science*, 1978, 33(11):1471-1480.

(编辑 郑洁)