

基于同伦方法反演非饱和土中镉离子传输参数¹⁾

崔凯 杨国伟

李兴斯 李宝元

(中国科学院力学研究所高温气体动力学重点实验室, 北京 100080) (大连理工大学工程力学系, 大连 116023)

摘要 依据实验室土柱实验结果, 引入同伦方法对镉离子在不同非饱和土样中的传输参数进行了反演计算, 得到了相应的反演结果。

关键词 参数反演, 正则化, 镉, 同伦方法, 非饱和土

1 前言

非饱和土中污染物传输模型可以表达为耦合不同效应的对流扩散方程形式, 该模型中的某些相关参数一般很难直接获得, 而需借助于数值反演方法来确定其值^[1]。非线性最小二乘方法较多地应用于求解该类问题^[2], 但该方法一般为局部收敛, 其反演结果在一定程度上依赖于初始值的选取。同伦方法^[3]具有全局收敛性, 十分适合于求解初值难以估计的非线性问题。本文依据土柱实验结果, 采用同伦方法对非饱和土中镉离子的传输模型参数进行了反演计算, 得到了对于实际问题有参考价值的参数结果。

2 数学模型

非饱和土中镉离子传输的无量纲化方程及相应的初边条件可表达为^[4]

$$K_{Cd}\rho \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \rho K_A \gamma (1 - S_2)C - \rho K_B \gamma S_2 = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta \alpha \nu \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial(qC)}{\partial z}, \quad (0 \leq z \leq L) \quad (1)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = K_A(1 - S_2)C - K_B S_2, \quad (0 \leq z \leq L) \quad (2)$$

$$C(0, t) = \begin{cases} 1, & 0 \leq t \leq t_1 \\ 0, & t_1 < t \leq t_1 + t_2 \end{cases} \quad (z = 0) \quad (3)$$

$$\frac{\partial C(L, t)}{\partial z} = 0, \quad z = L \quad (4)$$

$$C(z, 0) = 0, \quad 0 \leq z \leq L \quad (5)$$

其中: C 为无量纲的污染物浓度; S_2 为无量纲的固相中最大吸附浓度; K_{Cd} 为吸附系数; ρ 为干土样密度 (cm/g^3); θ 为平均体积含水率; α 为纵向弥散度; ν 为液相流速 (cm/h); q 为达西流速 (cm/h); K_A 为沉淀速度; K_B 为裂解速度; γ 为相对最大沉淀量, 均为无量纲参数; t_1 为加入溶液的时间 (h); t_2 为加水清洗时间 (h)。

3 实验数据的获得

实验装置主要包括 3 部分, 即真空控制系统、土柱渗流系统和供水系统。真空控制系统用于使土柱下方保持恒定的

真空度, 以产生土柱中的强制流动。渗流系统用以盛放土样并收集土样下方的流出液。供水系统用于从土样上方为土样提供入流溶液。实验溶液为给定浓度和 pH 值的 $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ 溶液。

实验过程如下:

1) 将装填好的土柱用蒸馏水 (其浓度与实验所用溶液 pH 值相同) 饱和浸泡 24 h。调节土柱两侧的压差恒定, 入流溶液首先采用蒸馏水, 供液时间持续 10 h 以上, 以预先造成土柱的定常渗流及定常饱和度。

2) 实验开始时, 保持土柱上方供液流量及土柱两侧的压差不变, 以 $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2$ 溶液代替蒸馏水做为入流溶液, 进行污染阶段的实验。经一定实验时间后, 入流溶液用一定 pH 值的蒸馏水取代镉溶液, 进行清洗阶段的实验, 经相同的实验时间后, 停止实验。整个实验过程中, 在相同的时间间隔下收集流出液, 之后化验流出液浓度从而得到实验的穿透曲线。

3) 将实验土柱取出并切成几块, 称量此时每块的重量。然后将土样放入烘箱中烘干, 取出土样并称量其重量, 由烘干前后的土样重量差可算得每块土样的体积含水率, 进而可得土样的平均体积含水率。

实验土样为 4 种, 均为取自葡萄牙的原样土, 相关参数如表 1 所示。其中: pH 为溶液的 pH 值, ΔP 为土柱两端的压力差 (atm), C_0 为污染物镉溶液的原始浓度 (ppm), 其余参数意义对应于式 (1)~(5) 中的相应参数。

表 1 实验土样条件参数

| No. | L | pH | ΔP | C_0 | t_1 |
|-----|-------|--------|------------|---------|-------|
| 1 | 7.9 | 2.6 | 0.2 | 1217.53 | 6.5 |
| 2 | 8.0 | 6.0 | 0.2 | 1175.45 | 8.0 |
| 3 | 10.0 | 6.0 | 0.05 | 657.50 | 3.0 |
| 4 | 10.08 | 6.0 | 0.05 | 657.50 | 3.0 |
| No. | t_2 | ρ | θ | q | |
| 1 | 5.5 | 1.7476 | 0.2649 | 1.3557 | |
| 2 | 8.0 | 1.7924 | 0.2319 | 0.9796 | |
| 3 | 3.0 | 1.8190 | 0.2411 | 2.9426 | |
| 4 | 3.0 | 1.6554 | 0.2422 | 2.9500 | |

4 反演方法及反演结果

式 (1)~(5) 中, α , K_{Cd} , K_A , K_B 和 γ 为待反演参数, 以矢量 \hat{p} 表示, 即 $\hat{p} = \{\alpha, K_{Cd}, K_A, K_B, \gamma\}$ 。将实验结果记为 $\tilde{C}_E(t)$ 。参数反演的目标为求得一组合适的参数 \hat{p} 的数

2003-09-19 收到第 1 稿, 2004-04-28 收到修改稿。

1) 国家重点基础研究发展规划项目 (G1999032805) 资助。

值, 使得根据此组参数值计算得到的相应计算结果 $\tilde{C}(\tilde{p}, t)$ 与实验结果 $\tilde{C}_E(t)$ 吻合, 即求解如下算子方程的零点

$$F(\tilde{p}) = \|\tilde{C}(\tilde{p}, t) - \tilde{C}_E(t)\|^2 = 0 \quad (6)$$

式 (6) 为一非线性算子方程的零点求解问题. 引入同伦方法求解, 通过构造线性同伦, 将问题 (6) 转化为如下的同伦方程的零点求解问题

$$F_\lambda(\tilde{p}) = \lambda \|\tilde{C}(\tilde{p}, t) - \tilde{C}_E(t)\|^2 + (1 - \lambda) \|\tilde{p} - \tilde{p}^0\|^2 = 0 \quad (7)$$

其中, λ 为同伦参数. \tilde{p}^0 为求解初值. 采用预估 - 校正^[3]方法求解方程 (7), 当 λ 减小到一个足够小的值时, 可得到原问题 (6) 的解.

以初值 $\{\alpha, K_{Cd}, K_A, K_B, \gamma\} = \{0.5, 0.5, 0.5, 0.5, 0.5\}$ 开始进行反演计算, 反演结果见表 2. 其中 IT 为迭代次数, ϵ 为反演穿透曲线与实验穿透曲线间的有效相对误差. 反演所得穿透曲线与实验穿透曲线的拟合情况如图 1 所示.

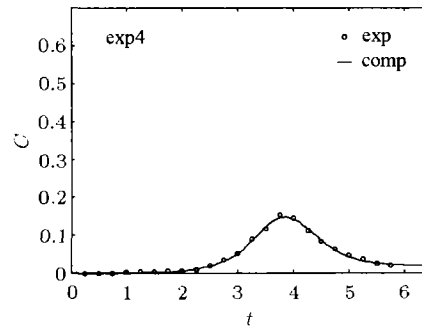


图 1 反演所得穿透曲线与实验结果的拟合

此外, 作者还以 $\{0.1, 0.1, 0.1, 0.1, 0.1\}$ 为初值开始计算, 并同表 2 的结果相比较, 除迭代次数有差别外, 反演结果完全相同, 这说明同伦方法具有大范围收敛的性质. 从表 2 的结果及图 1 可以看出, 计算所得反演结果与实验结果可以很好的吻合, 综合考虑实验误差等的影响, 说明本文所得的反演结果是可信的.

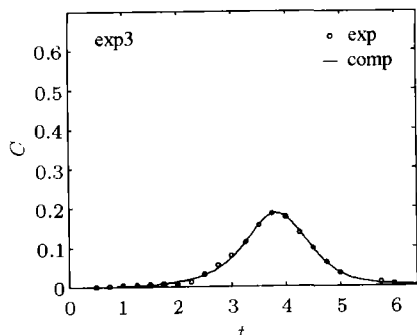
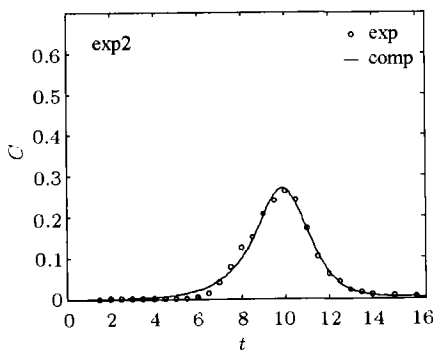
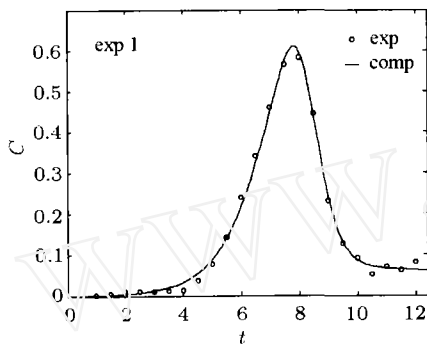


表 2 实验 1~4 的参数反演结果

| No. | 1 | 2 | 3 | 4 |
|----------------|--------|--------|--------|--------|
| α | 0.2311 | 0.4592 | 0.6223 | 0.7153 |
| K_{Cd} | 0.0678 | 0.0849 | 0.1000 | 0.1063 |
| K_A | 1.5660 | 1.5589 | 3.6664 | 4.7473 |
| K_B | 0.0203 | 0.0010 | 0.0025 | 0.0143 |
| γ | 0.4528 | 0.4955 | 0.4743 | 0.5408 |
| IT | 7 | 8 | 15 | 11 |
| $\epsilon(\%)$ | 4.78 | 8.27 | 3.64 | 4.83 |

参 考 文 献

- 1 Nielsen DR, van Genuchten M Th, Biggar JW. Water flow and solute transport process in the unsaturated zone. *WRR*, 1986, 22(9): 895~1085
- 2 Parker JC, van Genuchten M Th. Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. In: *Vir Agric Ex Stat Bull 84-3*. Vir Poly Inst and State Univ, Blacksburg, 1984
- 3 王宇. 计算机优化同伦算法. 大连: 大连海事大学出版社, 1996 (Wang Yu. Homotopy Optimization Algorithm via Computer. Dalian: Dalian Marine University Press, 1996 (in Chinese))
- 4 Li Baoyuan, Zhu Zhaohui, Zhang Aixiang, et al. The experimental study on the transport of Na^+ and C^{++} in unsaturated soil. In: *Proceeding of Second International Conference on Unsaturated Soils*, International Academic Publishers, Beijing, 1998, I: 575~580

PARAMETER DETERMINATION OF Cd^{++} TRANSPORT THROUGH UNSATURATED SOILS BASED ON HOMOTOPY METHODS

CUI Kai YANG Guowei

(Key Laboratory of High-temperature Gas Dynamics,
Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences,
Beijing 100080, China)

LI Xingsi LI Baoyuan

(Department of Engineering Mechanics, Dalian University of
Technology, Dalian 116023, China)

Abstract Homotopy methods were used for computing model parameters of Cd^{++} ion transport through unsaturated soils. Numerical results demonstrate the feature of stability and global convergence of the homotopy methods. Calculated BTCs agree well with experimental BTCs.

Key words parameter inversion, regularization, cadmium, homotopy methods, unsaturated soils

多元混合燃料一次引爆实验研究

王德润[†]* 周昕清* 周凯元* 沈兆武* 叶剑飞*

[†](安徽理工大学, 淮南 232001) * (中国科学技术大学力学和机械工程系, 合肥 230027)

摘要 为了提高多元混合燃料的爆炸威力, 采用光测和电测方法, 进行了小药量无约束空间三组元固态混合燃料的野外一次引爆实验, 得到了该装置条件下较优的燃料配比。实验结果表明, 该多元固态混合燃料的云雾分散效果明显优于相同质量的 TNT, 其爆炸场超压呈衰减-增长-再衰减的变化规律, 且具有非常相似的压力场分布。适当增加弹体密度可增强这种固态燃料混合物的爆炸威力。

关键词 多元固态混合燃料, 燃料空气炸药, 一次引爆, 离散爆轰

1 引言

自燃料空气炸药 (fuel air explosive, 简称 FAE) 武器问世以来, 无论是在燃料、战斗部结构, 还是在起爆方式等方面, 都取得了长足的进步。提高威力性能是 FAE 设计的主要目标^[1], 提高 FAE 爆炸威力的途径主要有两方面^[2], 一是 FAE 的燃料组成, 其二是云爆技术。为了提高起爆的可靠性, FAE 的发展已由二次引爆系统向一次引爆系统转变, 一次引爆技术是当前 FAE 武器研究的热点^[3~5]。目前, 研究 FAE 常用的燃料为液态燃料或液、固混合燃料, 液态燃料大多采用如环氧乙烷、环氧丙烷等碳氢化合物, 其蒸汽压力高, 平时存储运输易泄漏, 有可能造成安全事故的发生。本文基于离散爆轰思想, 采用三组元固态混合燃料, 通过起爆系统的协调设计, 在离散和爆轰的自协调控制下, 完成小药量无约束空间多元固态混合燃料的野外一次引爆实验。

2 实验条件

2.1 燃料选择

基于离散爆轰思想选择三种主要组分构成多元固态混合燃料, 即高能固态燃料 WX, 高能金属粉 TY, 固态有机化合物 SZ。实验时对中心装药的配方进行设计, 选择含有敏化剂的固态粉状中心装药。

2.2 实验装置

弹体形状为圆柱形, 尺寸 $\phi 59\text{mm} \times 70\text{mm}$, 不加外壳; 中心 PVC 管直径 20 mm, 中心管中段为中心装药、两端为阻燃泡沫。配制了两组不同密度的弹体, 一组弹体的固态混合燃料总质量为 0.2 kg, 密度为 1200kg/m^3 , 比药量为 12.5%; 另一组弹体的固态混合燃料总质量为 0.25 kg, 密度为 1500kg/m^3 , 比药量为 10%。实验时弹体静止悬挂在距离地面上方 1.3 m 处, 利用 8# 电雷管先引爆中心装药, 然后由中心装药引爆抛撒主装药并进一步使得离散抛撒形成的云雾实现爆炸。

实验中所用传感器型号为 CY-YD-203, 压力范围为 $0 \sim 300 \times 10^5\text{Pa}$, 压力-电荷灵敏度为 $12.00\text{PC}/10^5\text{Pa}$; 数字记录仪型号为 8862 型 MEMORY HICOREDER; 采用扬州科动电子技术研究所生产的 16 通道 KD5003 型电荷放大器, 量程为 30mV/unit ; 高速摄影机为日本生产的 PHOTRON FASTCAM-Super 10KC。

3 实验结果及分析

基于室内爆炸容器里所进行的几百次小药量的摸索实验结果, 在野外实验时混合燃料中的组元 TY 含量保持 30% 不变, 调整组元 WX 与 SZ 的比例, 每一种密度的弹体均做了三组质量配比实验: (1) WX/TY/SZ=50/30/20; (2) WX/TY/SZ=40/30/30; (3) WX/TY/SZ=30/30/40。为了比较, 还进行了 100% TNT 炸药实验: 为圆柱形散装装药, 总质量为 0.25 kg, 密度为 1000kg/m^3 。分析实验结果如下。

3.1 云雾分散规律

配比为 WX/TY/SZ=40/30/30 的 0.2 kg (低密度) 弹体一次引爆过程的高速摄影典型分幅照片如图 1 所示, 0.25 kg 纯 TNT 炸药爆炸过程的高速摄影典型分幅照片如图 2 所

2003-10-20 收到第 1 稿, 2004-01-08 收到修改稿。