

TCE 运移的计算机模拟

——某碳酸盐岩含水层中地下水有机污染及其去除研究之二

宋汉周¹, Allan D. Woodbury²

(1. 河海大学土木工程学院, 江苏南京 210098; 2. 曼尼托巴大学工程学院, 加拿大 R3T 2N2)

摘要 建立了描述场址区碳酸盐岩含水层中 TCE 污染运移的数学模型, 并且假定水流呈稳定态而溶质运移则呈非稳定态. 数值模拟结果基本满意. 参数的敏感性分析表明, 溶解相及吸附相溶质一阶反应速率常数值的改变对于溶质运移有着敏感的影响. 由此可见, 场址地质环境下含水层中 TCE 污染物的生物降解作用是存在的.

关键词 碳酸盐岩含水层; TCE 运移; 数值模拟

中图分类号 P46; X131.2 **文献标识码** A **文章编号** 1000-198X(2000)03-0014-06

近年来, 应用计算机模拟方法求解含水层中的溶质运移问题已经取得了很大的进展^[1~4]. 其最明显的优点就是通过建模、模型的拟合以及参数的敏感性分析等技术手段, 相对容易地确定了有关参数的值. 而这些参数的值即使投入很大的人力物力在野外往往也是难以确定的. 显然, 经过拟合的模型可用于模拟和预报含水层中污染羽状体的运移.

本文根据场址区具体的地质环境条件^[5], 在作必要概化的基础上, 建立了描述碳酸盐岩含水层中三氯乙烯(简称 TCE)污染物运移的数学模型, 并应用 GMS 软件包进行求解, 取得了比较满意的结果.

1 概念模型

上部 Fort Garry 碳酸盐岩层是场址区受到 TCE 污染的主要含水层. 由于上覆弱透水层的存在, 该含水层具有承压性. 区域地下水流自西向东, 梯度平缓, 场址区尤其如此, 约 7×10^{-5} . 此外, 在采取抽出处理措施之前, 场址区各观测孔之间所测的上述含水层的测压水头差一般在 0.1 ~ 0.5 m 之间. 可见, 该碳酸盐岩含水层的水力传导性良好, 此由钻孔资料(即裂隙出现的高频度、低 RQD 值以及测井的异常反映等)及场址抽水试验资料得以证实.

考虑到现有观测资料的不足和局限性, 在建模时作如下假设: (a) 场址区 TCE 污染含水层的水力传导性具有均质、各向异性; (b) 地下水流呈稳定态; (c) 含水层中的溶质运移呈非稳定态, 但对流场的性态并不产生影响(即稀浓度溶液).

在确定模拟区范围的时候, 考虑了如下因素: (a) 抽水试验及随后采取的抽出处理措施可能产生的对于边界条件的影响; (b) 现有地下水动态观测网的分布; (c) TCE 污染羽状体的分布. 因此, 将模拟区定为 36.72 km², 而明显大于场址区(14 km²), 如图 1 所示.

2 数学模型

描述含水层中 TCE 运移的数学模型由两部分构成.

a. 地下水流模型

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j}) - W = 0 \quad (i, j = 1, 2, 3)$$

(1)

研究区的边界条件：

$$\left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{x=x_1} = h_1 \quad \left. \frac{\partial h}{\partial x} \right|_{x=x_2} = h_2 \quad \frac{\partial h}{\partial n} = 0$$

(2)

式中： K_{ij} ——渗透系数[LT^{-1}]； h ——测压水头[L]； W ——源、汇点处单位体积中的水流量[T^{-1}]； n ——正交于第二类边界的外法线方向。

b. 溶质运移模型

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i C) + \frac{W}{\theta} C_s - \lambda \left(C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \right)$$

(3)

边界及初始条件为

$$\left. \begin{aligned} \alpha(x, y, z, t) &= C^0(x, y, z) && \text{在 } \Omega \text{ 上, } t \geq 0 \\ \alpha(x, y, z, t) &= C^0(x, y, z) && \text{在 } \Gamma_1 \text{ 上, } t = 0 \end{aligned} \right\}$$

(4)

式中： R ——阻滞因子； C ——地下水中呈溶解相的污染物浓度[ML^{-3}]； t ——时间[T]； x_i ——坐标系中距原点的距离[L]； D_{ij} ——水动力弥散系数[L^2T^{-1}]； V_i ——地下水渗透速度[LT^{-1}]； C_s ——源、汇点处溶液的浓度[ML^{-3}]； θ ——含水介质的空隙度； λ ——衰减常数，数值上有 $\lambda = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$ ； ρ_b ——含水介质的密度[ML^{-3}]； $\bar{C}$ ——吸附于固相介质的污染物浓度[T^{-1}]； Ω ——模拟区； Γ_1 ——浓度边界。

各向同性介质的水动力弥散系数可定义为^[5]

$$D_{ij} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{V_i V_j}{|V|} + \alpha_T |V| \delta_{ij} + D^* \delta_{ij} \quad (ij = 1, 2, 3)$$

(5)

式中： α_L ——纵向弥散度[L]； α_T ——横向弥散度[L]； V_i, V_j ——流速矢量的分量[LT^{-1}]； D^* ——有效扩散系数[L^2T^{-1}]； $|V| = (V_{11}^2 + V_{22}^2 + V_{33}^2)^{1/2}$ ——流速矢量大小[LT^{-1}]； δ_{ij} ——Kronecker delta，在数值上有

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

必须指出，由式(5)定义的水动力弥散张量只适合于各向同性介质，而不适合于各向异性介质。然而，在野外条件下是不可能获得 5 个独立的弥散系数值。因此，一般假定，适合于各向同性介质的弥散系数也适合于各向异性介质^[6]。

Zheng^[7]用 2 个横向弥散度即水平向横向弥散度(α_{TH})及垂向横向弥散度(α_{TV})来代替式(5)中的 α_T ，其表达式

$$\left. \begin{aligned} D_{xx} &= \alpha_L \frac{V_x^2}{|V|} + \alpha_{TH} \frac{V_y^2}{|V|} + \alpha_{TV} \frac{V_z^2}{|V|} + D^* & D_{yy} &= \alpha_L \frac{V_y^2}{|V|} + \alpha_{TH} \frac{V_x^2}{|V|} + \alpha_{TV} \frac{V_z^2}{|V|} + D^* \\ D_{zz} &= \alpha_L \frac{V_z^2}{|V|} + \alpha_{TV} \frac{V_x^2}{|V|} + \alpha_{TV} \frac{V_y^2}{|V|} + D^* & D_{xy} &= D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{V_x V_y}{|V|} \\ D_{xz} &= D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{V_x V_z}{|V|} & D_{yz} &= D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{V_y V_z}{|V|} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

若 α_{TH} 与 α_{TV} 相等，则式(6)与式(5)相同。

式(1)~(4)就构成了描述场址区碳酸盐岩含水层中 TCE 污染物运移的数学模型。

3 模型的有效性检验

这里选用美国 GMS^[8] (Groundwater Modeling System) 软件包求解上述数学模型。该软件包由一系列源程序

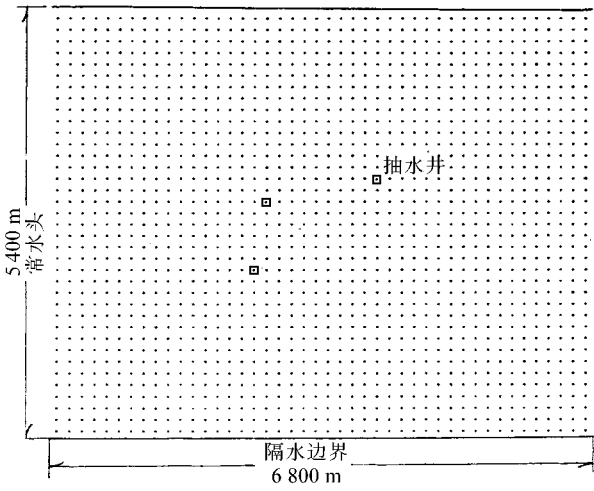


图 1 模拟区及其边界条件

Fig.1 The domain under study and its boundary condition

构成,如 MODFLOW、MT3D 等。MODFLOW 软件用于求解三维饱和水流问题,而 MT3D 软件则用于模拟溶质运移问题。在水流计算中采用强隐式差分法(SIP)求解流场中水头的分布,而在溶质运移模拟中,根据各个结点的流速值采用修正特征法(MMOC)求解控制方程。

溶质的吸附作用在模型中用阻滞因子 R 表示,并以两个吸附平衡常数(λ_1, λ_2)来模拟。此外,以参数(λ_3, λ_4)来模拟含水层中 TCE 污染物可能的生物降解作用, λ_3 为溶解相溶质的一阶不可逆反应速率常数, λ_4 则为吸附相溶质的一阶不可逆反应速率常数。

采用均匀网格法将研究区进行剖分。此剖分法的优点就是便于将取样点处的污染物浓度加以内插,并使二维网格与三维网格相匹配。并且假定,网格的排列方向与含水层介质的主渗透方向相一致。这样,得到网格单元为 1628 个,结点数 3420 个,如图 1 所示。

考虑到对场址区污染含水层已经采取了抽出处理措施,因此对模型的有效性检验主要结合对实际流场的模拟来进行。模拟时段为 1 年,即从 1994 年 11 月至 1995 年 10 月,其间位于污染源位置(图 1)的 3 口抽水井(E1~E3)在工作(表 1)。

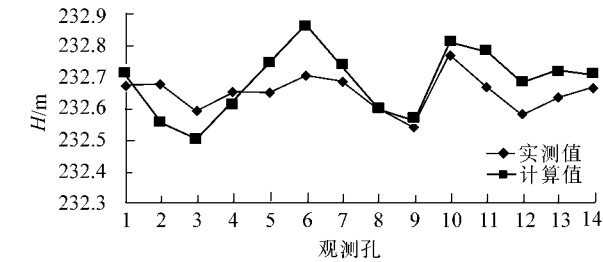


图 2 场址水头拟合曲线
Fig.2 Head simulation curve

采用试错法(trial-and-error)对所建模型进行调试,有关参数及其取值范围见表 2。调试过程表明,含水层的导水性变化对流场有着敏感的影响。通过对计算水头值与实测值之间的平均误差(ME)以及平均绝对误差(MAE)的判定,确定场址区碳酸盐岩含水层的导水系数拟合值为 $3\,240\text{ m}^2/\text{d}$,此大于区域地质报告的建议值^[9],但低于场地的抽水试验值。此可归之于含水层介质的具有趋势性的非均质变化^[10]。有关水头拟合曲线见图 2,而 TCE 拟合曲线见图 3。

此外,在每一个溶质运移模拟时段进行了有关质量平衡的计算,用百分比误差(ERR)表示:

$$ERR = \frac{(\Delta M_{in} - \Delta M_{out})}{\Delta M_{in} + \Delta M_{out} \times 0.5} \times 100\% \quad (7)$$

式中: ΔM_{in} ——流入地下水流系统的、以及源于储存释放的总的质量; ΔM_{out} ——流出地下水流系统的、以及源于储存累积的总的质量。一般来说,质量平衡误差大小是模型有效性的一个重要标志,即若模型是有效的,其质量平衡误差值应该比较小。表 3 反映出本文所建

表 1 抽水量统计			
Table 1 Groundwater extraction rates at wells			
抽水井	位置/m		抽水量 ($\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1}$)
	x	y	
E1	4060	3315	2341.44
E2	2545	2160	1918.08
E3	2680	3045	889.92

表 2 模型拟合过程中有关参数及其取值范围
Table 2 Ranges of parameter values used in transport model calibration

参 数	数 值
导水系数($\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$)	2500~15116
各向异性因子	0.1~1.0
有效孔隙度	0.1~0.25
含水介质密度($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	2500
有效扩散系数($\text{m}^2 \cdot \text{d}^{-1}$)	7.29×10^{-5}
TCE 背景浓度($\mu\text{g} \cdot \text{L}^{-1}$)	0
纵向弥散度 $\alpha_{L,m}$	10~30
垂向横向弥散度与纵向弥散度之比	0.5~1.0
水平向横向弥散度与纵向弥散度之比	0.5~1.0
第一类吸附常数 λ_1	0.1~0.15
第二类吸附常数 λ_2	0.01~0.015
溶解相溶质一阶反应速率常数 λ_3	0.001~0.015
吸附相溶质一阶反应速率常数 λ_4	0.01~0.003

表 3 不同时段的质量平衡检查
Table 3 Mass balance at different steps

时段/d	ΔM_{in} ($\times 10^{12}$)	ΔM_{out} ($\times 10^{12}$)	$\Delta M_{in} - \Delta M_{out}$ ($\times 10^9$)	误差/%
30	0.548588	-0.544390	4.198236	0.768
182.5	2.711978	-2.703809	8.168931	0.302
365	4.390998	-4.382677	8.320975	0.170
730	6.082276	-6.074596	7.680295	0.126
1460	6.987888	-6.979818	8.070365	0.116

的 TCE 运移模型是有效的 ,所采用的数值法是可行的.

4 参数的敏感性分析

为检验所建模型对于输入不同参数值的反应程度 ,进行了若干水流参数及溶质运移参数的敏感性分析.这里主要对有关描述 TCE 生物降解作用的 4 个参数 $\lambda_1 - \lambda_4$ 作分析.结果(图 4 及表 4)表明 (a)溶质吸附常数 λ_1, λ_2 值的变化对于溶质运移性状的影响比较敏感 (b)溶解相溶质一阶反应速率常数 λ_3 及吸附相溶质一阶反应速率常数 λ_4 值的变化对于溶质运移性状的影响最为敏感.可见 ,场址区含水层中 TCE 污染物的生物降解作用确是存在的 ,水样中某些过渡型化合物 (如二氯乙烯 ,DCE)的被检出即是佐证.

5 模型的应用

应用本文所建模型模拟 TCE 污染物运移的时段始于 1994 年 11 月 ,此与开始实施抽出处理措施的时间相对应.并且假定 ,在模拟时段内 TCE 污染源不再存在 ,即场址区含水层不再受到进一步的污染 ,此与实际的情形一致.

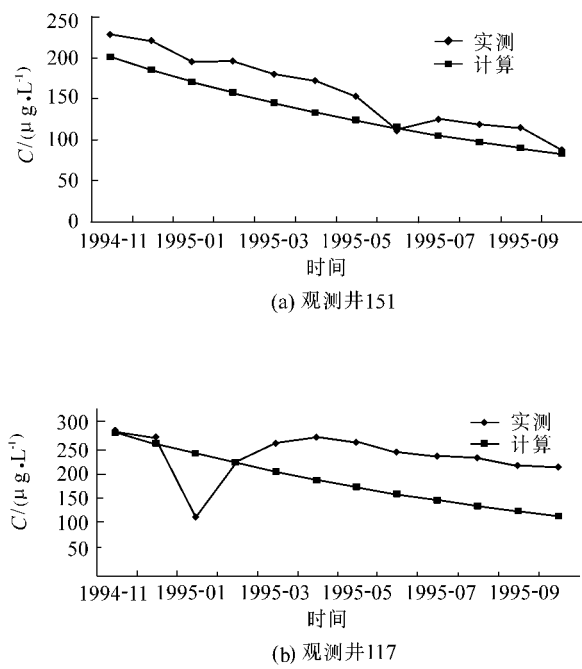


图 3 TCE 污染的浓度拟合曲线
Fig.3 TCE simulation curve

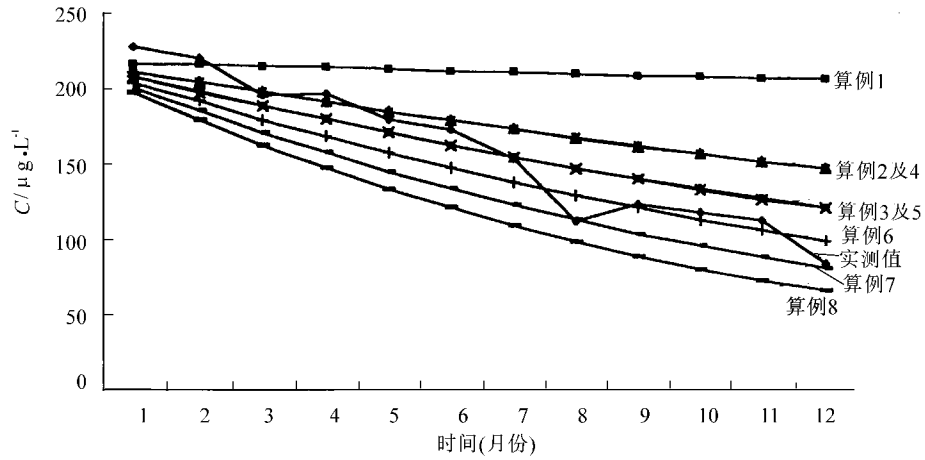


图 4 TCE 生物降解作用参数的敏感性分析
Fig.4 Sensitivity analysis of TCE biodegradation parameters

表 4 敏感性分析的若干算例及参数值
Table 4 Several cases for sensitivity analysis

算例	1	2	3	4	5	6	7	8
λ_1	0.10	0.10	0.10	0.15	0.10	0.10	0.10	0.10
λ_2	0.010	0.010	0.010	0.015	0.015	0.015	0.015	0.015
λ_3	0.001	0.010	0.015	0.010	0.010	0.010	0.010	0.010
λ_4	0.0001	0.0010	0.0015	0.0010	0.0015	0.0020	0.0025	0.0030

在求解溶质运移模型时 ,需要输入相关的参数如表 2 所示 ,但模拟区常水头边界及诸如导水系数一类的水流参数保持不变.此外 ,TCE 的初始浓度亦由各实测点浓度经过线性插值得到的浓度分布图 (图 5)替代其背景浓度.

应用经过有效性检验的模型可以模拟含水层中 TCE 污染物浓度的依时性变化,部分成果见图 6. 该图反映出,在实施去污措施的条件下,含水层中 TCE 污染物羽状体的侧向分布范围以及羽状体内污染物的浓度均呈减小的趋势. 由此表明,在场址区对污染含水层采取抽出处理措施是有效的. 有关对该去污措施的进一步评价将另文发表.

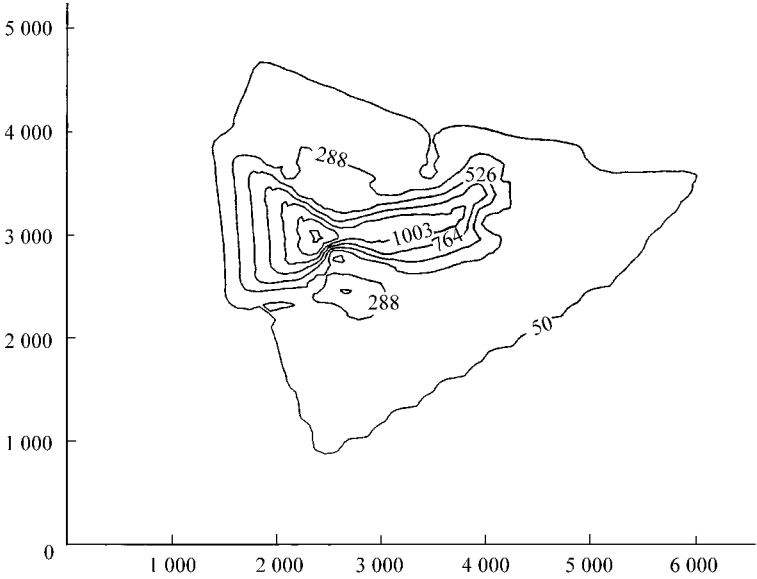


图 5 TCE 初始浓度分布

Fig.5 Distribution of TCE concentration at the beginning of simulation

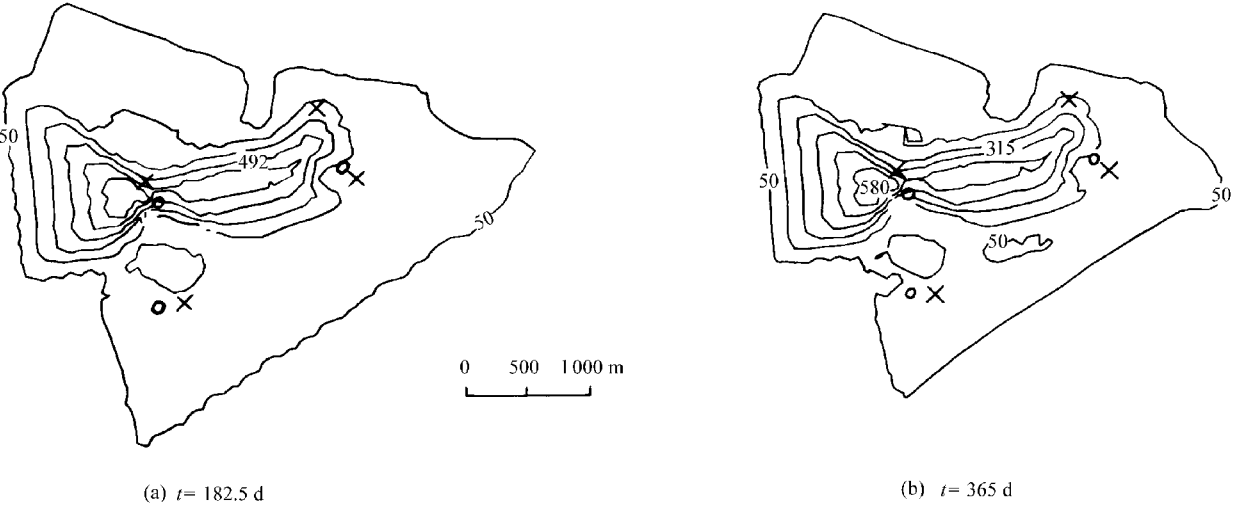


图 6 不同时段 TCE 污染羽状体的变化

Fig.6 Plume of TCE contaminant at different time

6 结 语

a. 本文提出了基于概念模型之上的描述碳酸盐岩含水层中 TCE 运移的数学模型,并用有限差分法求解,结果基本满意.

b. 采用试错法进行模型调试,并输入不同的 λ_d (溶解相溶质一阶反应速率常数)及 λ_a (吸附相溶质一阶反应速率常数)参数以模拟 TCE 的生物降解作用. 参数的敏感性分析表明,这两个参数值的改变对于溶质运移性状有着相当敏感的影响,此标志着场址区含水层中 TCE 污染物的生物降解作用是存在的.

c. 总的来看,数值模拟结果是满意的,但模拟值与实测值之间的误差还是存在的. 究其原因有三:一是

在于数值法本身 ,如观测井的实际位置大多不是位于有限差分网格单元的中心 ,而模型只能计算位于网格单元中心的结点处的浓度值 ;二是模拟时段(一年)内 ,3 口抽水井并非每天都在进行工作 ,而有 6 个星期的时间停止抽水(因严寒的气候) ,此使流场有所变化 ;三是 TCE 的生物降解作用是复杂的 ,不一定遵循模型假定的一阶反应速率而进行 .因此 ,一定地质环境下 TCE 生物降解作用的机理研究仍是一个值得探讨的课题 .

参考文献 :

[1] Pinder G F ,Abriola L M. On the simulation of nonaqueous phase organic compounds in the subsurface[J]. Water Resources Research , 1986 22(9) :109 ~ 119 .

[2] Freeberg K M ,Bedient P B ,Connor J A. Modeling of TCE contamination and recovery in a shallow sand aquifer[J]. Groundwater ,1987 25 (1) :70 ~ 80 .

[3] MacQuarrie T B ,Sudicky E A. Simulation of biodegradable organic contaminants in groundwater ,1. Numerical formulation in principle directions 2. Plume behavior in uniform and random flow field[J]. Water Resources Research ,1990 26(2) 207 ~ 239 .

[4] Imhoff D M. Dissolution fingering during the solubilization of nonaqueous phase liquids in saturated porous media ,1. Model predictions[J]. Water Resources Research ,1996 32(2) 630 ~ 636 .

[5] 宋汉周 ,Woodbury A D. TCE 的物理化学特性及其生物降解作用——某碳酸盐岩含水层中地下水有机污染及其去除研究之一[J]. 河海大学学报 ,2000 28(1) 52 ~ 56 .

[6] Bear J. Groundwater hydraulics[M]. New York :McGraw ,1979. 122 ~ 124 .

[7] Zheng C. MT3D—A modular 3D transport model for simulation of advection ,dispersion and chemical reaction of contaminants in groundwater system[M]. Papadopoulos & Associates ,Inc ,1990. 6 ~ 7 .

[8] Engineering Computer Graphical Lab. Groundwater modeling system(v2.0) [M]. Brigham Young University ,1996. 152 ~ 202 .

[9] Baracos A ,Shield D H. Geological engineering report for urban development of Winnipeg[M]. Winnipeg :University of Manitoba ,1993. 12 ~ 15 .

[10] Freeze R A ,Cherry T A. Groundwater[M]. Englewood Cliffs :N J Prentice Hall ,1979. 32 ~ 35 .

Study of Groundwater Contamination in a Carbonate Aquifer and Remediation

2. Computer Simulation for TCE Transport

SONG Han-zhou¹ , Allan D. Woodbury²

(1. College of Civil Engineering ,Hohai Univ . ,Nanjing 210098 ,China ;

2. Faculty of Engineering ,Univ . of Manitoba ,Canada R3T 2N2)

Abstract :A mathematical model for TCE transport in a carbonate aquifer at the site is presented in this paper. It is assumed that the groundwater flow is in a steady state ,while the solute transport is in an unsteady state. The model has produced good results. A sensitivity analysis indicates that the dissolved phase(λ_3) and sorbed phase(λ_4) of the first-order rate constants have a great impact on the solute transport ,implying that the biodegradation of TCE contaminant exists at the site .

Key words :carbonate aquifer ;TCE transport ;numerical simulation