

# 北方某城市浅层地下水中 有机污染物迁移转化的数值模拟研究

刘明柱<sup>1,2</sup> 陈鸿汉<sup>2</sup> 胡丽琴<sup>2,3</sup>

(1.中国科学院地理科学与资源研究所,北京 100101;  
2.中国地质大学水资源与环境工程实验室,北京 100083;3.北京城市学院,北京 100083)

**摘要:**在 3 次野外取水样分析的基础上,分析了研究区域有机污染特征,并根据室内实验和国内外文献资料所获取的参数,利用地下水模拟系统软件(GMS)对研究区三氯乙烯(TCE)和四氯乙烯(PCE)在地下水中的运移转化进行数值模拟研究,模拟结果表明:研究区地下水中 TCE 和 PCE 存在生物降解作用,但是反应速率很小,这表明在相当长的时间内,其浓度仍可能保持在相当的水平上。

**关键词:**地下水;有机污染;三氯乙烯;四氯乙烯;数值模拟

**中图分类号:**P592 **文献标识码:**A **文章编号:**1000-3657(2005)03-0507-05

地下水有机污染是个全球性的问题,是当前人类所面临的最严重的环境污染问题之一<sup>[1]</sup>。量化描述有机污染物在地下水中的时空分布特征和迁移转化规律可以为有机污染的治理控制提供科学支持和理论依据,因此对地下水中有机污染物的迁移转化进行数值模拟研究具有重要的理论意义和现实意义<sup>[2-3]</sup>。

通过对北方某城市浅层地下水中有机污染的调查发现,该城市的浅层地下水中存在局部的三氯乙烯(TCE)和四氯乙烯(PCE)的污染区,笔者以其中的典型污染区域为研究对象(以下简称研究区),对 TCE 和 PCE 的运移进行数值模拟研究。

## 1 研究区有机污染分析

### 1.1 污染现状

通过对研究区(图 1)2000—2001 年浅层地下水中卤代烃的检测分析,卤代烃中除三溴甲烷很少检出外,其他组分检出率都很高。参照美国 EPA 标准(三溴甲烷 100  $\mu\text{g/L}$ ,四氯化碳 5  $\mu\text{g/L}$ ,三氯乙烯 5  $\mu\text{g/L}$ ,四氯乙烯 5  $\mu\text{g/L}$ ),很多井点已经超标,而且其检出浓度值重现性也较好<sup>[4]</sup>。

### 1.2 氯代烃污染源分析

在研究区的下游,8、9 号井三氯乙烯和四氯乙烯检出浓度很高污染较为严重。特别是 8 号井,位于某铁路段下游居民区中,且紧靠某货场,4 次测试结果都很接近,且大大超过

EPA 标准的 5  $\mu\text{g/L}$ 。可能是由于该货场和该铁路段在清洗过程中,常常要使用有机溶剂,并顺地表直接排放。通过在地下水流场方向上对该井上下游水井对比取样分析,该货场和该铁路段上游井中,三氯乙烯几乎没有检出,而在 8 号井下游井中三氯乙烯很高,但比 8 号井稍低,即沿着地下水流向,污染物浓度减小。由此基本可以确定货场和铁路段是 8 号井的主要污染源。

### 1.3 地下水中的氯代烃运移影响因素

地下水中有有机污染物的迁移转化同时受生物和非生物过程的影响。地下水的流场方向和流速控制着污染物迁移的流向和流速;弥散使有机污染物在流场的横向和纵向方向上扩散;吸附和解吸附阻碍着污染物的迁移;生物降解决定了地下水中有机的存在,或许可以影响降解后最终产物的形态。这些作用都和地下水化学性质,含水层介质性质相关。如果不把这些作用综合到数学模型中,就很难描述污染物在地下水中的迁移转化规律。

### 1.4 研究区地下水水化学特征

从研究区各指标值与标准值(表 1)的对比可以判断,研究区地下水环境是一个好氧与硝酸盐还原的兼性环境。另外,在地下水取样的微生物分析测试中已证实研究区地下水有降解有机物的微生物存在,这表明研究区中可能存在有机污染物的生物降解作用。

收稿日期:2003-12-12;改回日期:2005-03-15

基金项目:科技部“973”项目(G1999045706)资助。

作者简介:刘明柱,男,1971 年生,博士,讲师,主要从事水环境数值模拟与 3S 应用研究;E-mail:liumz@cugb.edu.cn。

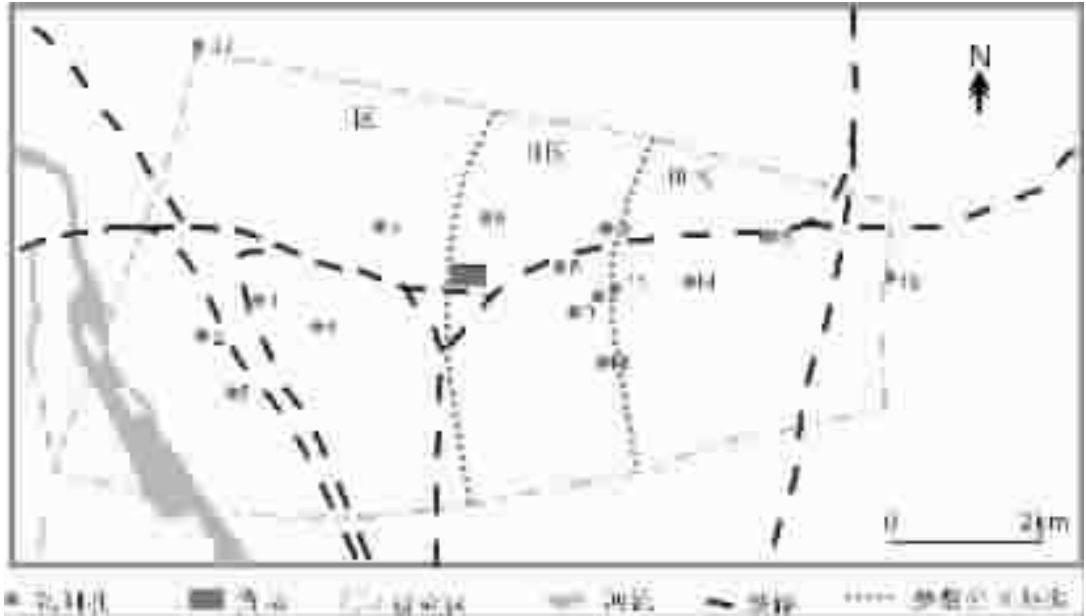


图 1 研究区位置示意图

Fig.1 Location map of the study area

表 1 研究区水化学条件与标准条件对比

Table 1 Comparison of the hydrochemical conditions of the area and the normal conditions

参 数	好 氧		硝 酸 盐 还 原	
	标 准	研究区中的值	标 准	研究区中的值
氧 气	>1.0	0.0~1.26	<1.0	0.0~1.26
硝酸盐	—	31.69~186.97	—	31.69~186.97
亚硝酸盐	<0.1	—	—	—
氨	<1.0	<0.05	—	<0.05

## 2 氯代烃迁移转化的数值模拟

本次数值模拟计算使用的是以 MODFLOW 为基础的 GMS(Groundwater Modeling System)软件。它是美国国防部支持开发的、功能先进的地下水模拟软件包。该软件包具有图形人机对话、地理信息系统数据接口、自动产生空间各种有限单元网、空间参数区域化及快速精确的数值算法和先进的图形视觉化技术等特点,其中的 RT3D(Reactive Transport in 3-Dimensions)模块可以模拟三维地下水中移动/非移动的多种微生物共存的有机污染物生物降解过程,它的设计非常灵活,用户既可以定义自己的反应动力学方程,又可以在模块提供的 8 种反应模型选择合适的模型<sup>[5-6]</sup>。

### 2.1 研究区水文地质条件概化

水文地质条件概化是在地下水系统概念模型基础上,通

过一定的综合和归纳,把一个复杂的水文地质体概化为现有数学方法能够模拟的程度。概化后的模型应能反映水文地质原型的主要功能,且在数学处理上是可行的、经济的。地下水水流数学模型的主要目的是模拟研究区地下水流动动态,为下一步有机污染物运移的数值模拟作基础准备。本区水文地质条件比较清晰,地层岩性比较单一。为此,对边界条件、含水层系统的结构和地下水流状态做了如下概化:

①根据研究区的地下水流动分析,西部和东部均有地下水径流存在,西部为侧向补给边界,东部为排泄边界,北部和南部地下水的等水位线基本上与研究区边界垂直,即地下水流线平行于研究区边界,故概化为零流量边界。下部基岩作为隔水底板;上部接受大气降雨的补给。

②研究区地质条件简单,含水层岩性单一,因此将之概化为均质各向同性的含水介质。

③考虑到研究区的水平尺度远远大于垂直尺度,把地下水概化为二维非稳定流。

表 2 各参数区水流模型参数  
Table 2 Parameters of the water flow model for various areas

参数区	I	II	III
渗透系数 K(m/d)	120	110	160
降雨入渗补给	0.002	0.0018	0.0018
给 水 度	0.31	0.28	0.28

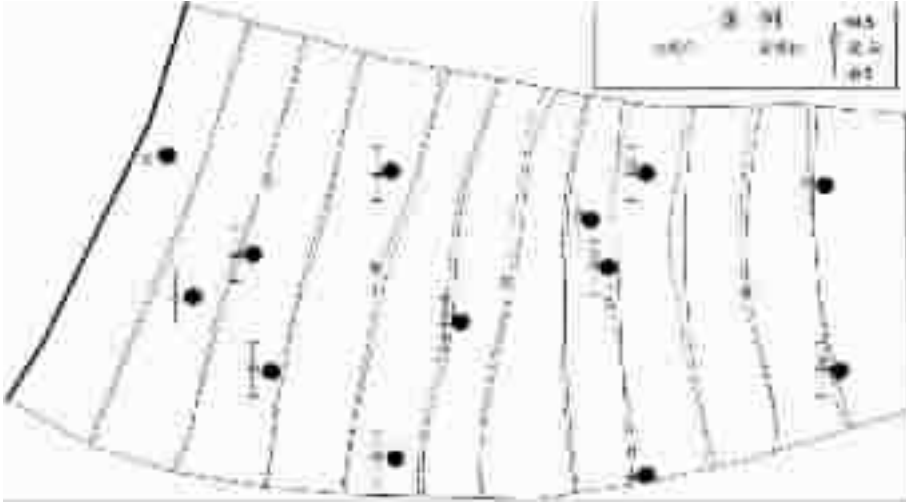


图 2 1999 年 12 月 30 日的计算值与实测值的拟合图  
Fig.2 Fiting graph of calculated values and measuring values on December 30, 1999

由于研究区面积较小,岩性条件相对单一,因此笔者主要根据流场特征和该区以往资料,将研究区划分为 3 个参数区(图 1)。

描述上述边界条件下均质各向同性潜水含水层非稳定流的数学模型为:

$$\begin{cases} \mu \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ (H-B)K \frac{\partial H}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ (H-B)K \frac{\partial H}{\partial y} \right] + W - \sum_{i=1}^m (x-x_i)(y-y_i)q_i & (1) \\ H(x_0, y_0, t) |_{t=0} = H_0(x_0, y_0, t) & (2) \\ (H-B)K \frac{\partial H}{\partial n} |_{\Gamma} = -Q(x_0, y_0, t) & (3) \end{cases}$$

式中: $H_0(x_0, y_0, t)$ —潜水含水层水位(m); $B(x, y)$ —含水层底板标高(m); $H_0(x_0, y_0, t_0)$ —初始流场(m); $Q(x_0, y_0, t)$ —边界流量( $m^3/d$ ); $W$ —含水层系统垂向补给强度( $m/d$ ); $x_i, y_i$ —第  $i$  口开采井的坐标(m); $Q_i$ —第  $i$  口开采井的开采量( $m^3/d$ )。

2.2 研究区地下水流场模拟

考虑到 8#、9# 和 2# 处为模拟重点区,这些井点附近每

个单元格的边长为 100m,而在外围边长为 500m。计算区可利用的地下水水位观测孔有 13 个(图 1),这些观测可以控制模拟区的水位状况。

计算区现有的地下水统测水位是 1999 年全年的观测值,水位年变幅为 3~4m。将其划分为 3 个时段,1~6 月为第 1 时段,7~9 月为第 2 时段,10~12 月为第 3 时段。对上述模型进行了识别。模型调参的初始值是根据研究区以往的资料,其中渗透系数的取值范围为 100~300 m/d;给水度范围为 0.15~0.35。降雨入渗系数为 0.003,模型校正后的参数见表 2。

地下水是溶质运移的载体,因此流场的模拟结果的好坏将直接影响溶质模拟的可靠程度。在调整了水文地质参数、边界侧向补给量和降雨入渗量后,模型计算出的地下水流场和实测流场拟合(图 2)的很好,13 个观测孔计算水位与观测值的拟合差小于 0.5m 的达到 92.3%。

2.3 氯代烃迁移转化数值模拟

地下水流场模型确定后,就可以在此基础上进行氯代烃

表 3 模型主要生物降解参数初始值

Table 3 Initial values of main biodegradation parameters of the model

参 数		初始值	模型校正值	备 注
四氯 乙烯	阻滞因子	2.8~6.2	8.12	实测值
	降解速率 (L/d)	0~0.034	0.0019	平均值 0.0029, 样本数 16 据文献[7]
三氯 乙烯	阻滞因子	2.8~6.8	8.04	实测值
	厌氧降解 速率(L/d)	0~0.0061	0.00063	平均值 0.0025, 样本数 47 据文献[7]
	好氧降解 速率(L/d)	0~0.82	0.028	平均值 0.047, 样本数 53 据文献[7]
氧气	降解速率(L/d)	—	0.028	模型调适
细菌最小浓度( $\mu g/L$ )		0.01	0.01	模型推荐值
$Y_{max}$		0.792	0.792	按化学计量学关系换算
$K_m$		—	—	模型自动计算

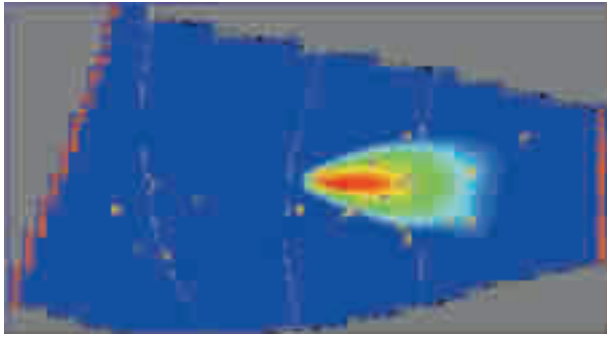


图 3 四氯乙烯污染羽状体模拟图  
Fig.3 Plume-shaped model for PCE

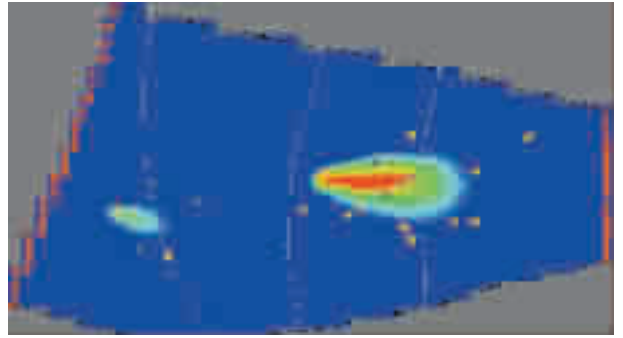


图 4 三氯乙烯污染羽状体模拟图  
Fig.4 Plume-shaped model for TCE

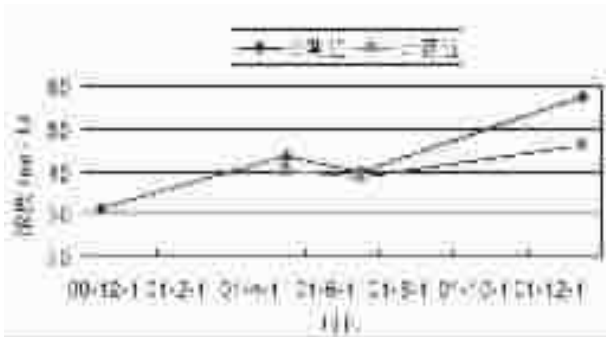


图 5 8# 井三氯乙烯拟合曲线  
Fig. 5 Fitting curve for TCE at site 8#

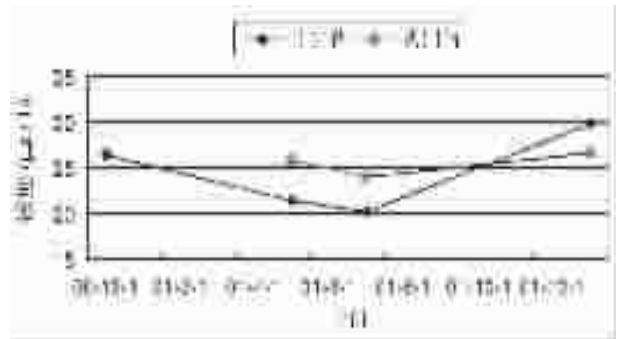


图 6 9# 井三氯乙烯拟合曲线  
Fig.6 Fitting curve for TCE at site 9#

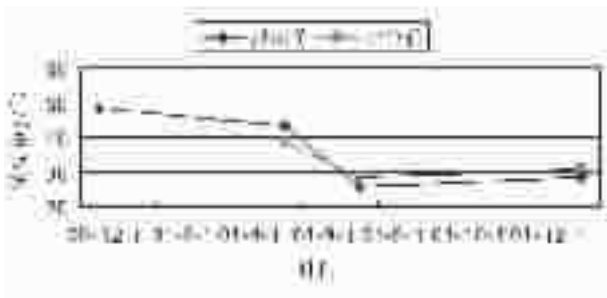


图 7 8# 井四氯乙烯拟合曲线  
Fig.7 Fitting curve for PCE at site 8#

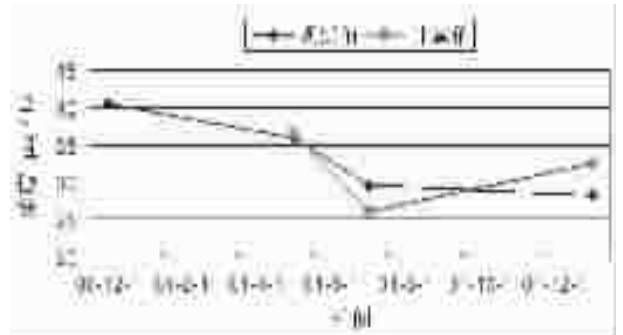


图 8 9# 井四氯乙烯拟合曲线  
Fig.8 Fitting curve for PCE at site 9#

迁移转化的数值模拟计算。根据地下水化学特征(表 1)分析,氯代烃迁移转化的模型为:四氯乙烯在厌氧条件下,通过微生物的作用,以硝酸根为电子受体,产生一系列的生物降解反应;而三氯乙烯在条件适宜时,既可以产生好氧生物降解,又可以产生厌氧生物降解。天然状态下氯代烃反应顺序为四氯乙烯→三氯乙烯→二氯乙烯→氯乙烯。但因为研究区地下水中,几乎没有二氯乙烯和氯乙烯检出,因此笔者在数值模拟研究只模拟四氯乙烯和三氯乙烯的运移转化过程。

笔者以 2000 年的实测值为初始浓度来进行数值模拟计算,获得的模型参数见表 3。2001 年 12 月分别模拟计算出的四氯乙烯污染羽状体(图 3)和三氯乙烯的污染羽状体(图

4)。从图中可以看出,四氯乙烯的污染羽状体短而圆,而三氯乙烯则细而长,并且中心处三氯乙烯污染羽状体的浓度比四氯乙烯高。这是因为,污染羽状体中心的反应过程是厌氧反应,而边缘带是好氧和厌氧两种反应。好氧生物降解过程中,氯代烃的氯原子越少,降解的越快;而厌氧生物降解过程中,氯原子越多,反应的越快,并且好氧降解反应速率比厌氧快。另外四氯乙烯在好氧条件下只有与某些有机物共代谢作用才能降解,但在研究区这有机物没有检出,因此在研究区影响四氯乙烯浓度变化的主要是厌氧条件下的降解;而三氯乙烯在好氧和厌氧条件下都可以降解。这两种作用的结果造成了两种污染物的污染羽状体在形状和浓度上的差异。另外从

图 4 还可以看出,三氯乙烯的污染羽状体的中心向下游漂移,这是因为一方面,来自于污染源的三氯乙烯不断进入该区,而三氯乙烯在厌氧条件下又降解得比较缓慢;另一方面四氯乙烯在向下运移过程中发生生物降解反应,产生一部分三氯乙烯,两种作用的结果,使三氯乙烯的污染羽状体的中心比四氯乙烯漂移的远。

图 5 和图 6 分别是 8# 井和 9# 井的三氯乙烯的拟合曲线,图 7 和图 8 为四氯乙烯的拟合曲线。从拟合曲线可以看出三氯乙烯和四氯乙烯数值模拟的结果与实测值基本一致,表明笔者所选择的三氯乙烯和四氯乙烯生物降解模型是正确的,模拟污染源的位置分析也是基本正确的。由于本次模拟数据资料序列短,一些模型参数非野外实测值,使计算值与实测值的拟合误差略有偏高,但基本上可以模拟出 TCE、PCE 的迁移转化规律,为下一步工作的开展提供参考。

### 3 结 论

通过三氯乙烯和四氯乙烯迁移转化的数值模拟研究表明,研究区地下水中三氯乙烯和四氯乙烯滞后系数相差不大,分别为 8.04 和 8.12;三氯乙烯和四氯乙烯污染物的生物降解作用是存在的,但是降解速率很小,这表明在相当长的时间内,其污染物浓度仍可能保持在相当的水平上。另外当污染羽状体中三氯乙烯和四氯乙烯共同存在时,由于四氯乙烯的生物脱氯作用生成三氯乙烯,会使得三氯乙烯的污染羽状体的中心沿着地下水流向向下游漂移。

#### 参考文献 (References):

[1] 郭华明,王焰新. 地下水有机污染治理技术现状及发展前景[J].地

质科技情报,1999,18(2):69~72.

Guo Huaming, Wang Yanxin. Remediation of organic contaminants in ground-water: state of threat and perspectives[J].Geology Technology Information,1999,18(2):69~72(in Chinese with English abstract).

[2] 郭永海,沈照理,钟佐桑,等. 河北平原地下水有机氯污染及其防治性能的关系[J].水文地质工程地质,1996,23(1):40~42.

Guo Yonghai, Shen Zhaoli, Zhong zuoshen, et al. The Internal relations between groundwater organic chlorine pollution and groundwater vulnerability in Hebei plain[J]. Hydrogeology and Engineering,1996,23(1):40~42 (in Chinese with English abstract).

[3] 刘季昂,王怡中,汤鸿霄. 有机污染物在白洋淀地区水陆交错带土壤颗粒物上的吸附[J]. 环境科学,1998,17(3):19~22.

Liu Ji'ang, Wang Yizhong, Tang Hongxiao. The adsorption of organic pollutants in soil of land/inland ecotone in Bai Yangdian Area[J]. Environment Science,1998,17(3):19~22 (in Chinese with English abstract).

[4] 张达政,陈鸿汉,李海明,等. 浅层地下水卤代烃污染初步研究[J]. 中国地质,2002,(29)1:326~329.

Zhang Dazheng, Chen Honghan, Li Haiming, et al. Halogenated hydrocarbon contaminants in shallow groundwater [J]. Geology in China,2002,29(1):326~329(in Chinese with English abstract).

[5] Zheng C. MT3D, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems[R]. U.S.E.P.A Report, 1990.

[6] Zysset A, Stauffer F, Dracos T. Modeling of reactive groundwater transport governed by biodegradation[J].Water Resources Research, 1994,30(8),2423~2434.

[7] Dallas A, Philips H H. Anaerobic Biodegradation of Organic Chemicals in Groundwater:A Summary of Field and Laboratory Studies, American Petroleum Institute. 1997,125~152.

## Numerical modeling of transport of organic pollutants in shallow groundwater in a certain city of northern China

LIU Ming-zhu<sup>1,2</sup>, CHEN Hong-han<sup>2</sup>, HU Li-qin<sup>2,3</sup>

(1. Institute of Geographical Sciences and Natural Resources Research, Chinese Academy of Sciences. Beijing 100101, China;

2. Lab of Water Resources and Environment Engineer, China University of Geosciences, Beijing 100083, China;

3. Beijing City College, Beijing 100083, China)

**Abstract:** The characteristics of regional organic pollutants are analyzed on the basis of three field analyses of water samples, and numerical modeling of transport of TCE and PCE in groundwater of the study area using GMS and the parameters obtained from indoor experiments and domestic and foreign references. The results of modeling indicate that biodegradation exists in groundwater of the area, but the rate of reaction is very low. This suggests that the concentrations of TCE and PCE are probably maintained at a fairly high level for a very long period of time.

**Key words:** groundwater; organic pollution; TCE; PCE; numerical modeling

**About the first author:** LIU Ming-zhu, male, born in 1971, Ph.D, lecturer, mainly engages in water environment modeling and 3S application; E-mail: liumz@cugb.edu.cn.