

问题探讨

# 污染场地地下水数值模拟的关键问题探讨

郑李军

(煤科集团杭州环保研究院有限公司,浙江 杭州 311201)

**摘要:**针对地下水数值模拟中重模型软件技术、轻水文地质条件分析的问题,结合我国污染场地地下水数值模拟工作日渐增多的实际,通过收集资料和总结经验,对污染场地地下水数值模拟中模型维数、边界条件、源汇项及不确定分析等关键问题进行了探讨。研究认为:① 污染场地地下水数值模拟应尽可能建立三维或准三维流模型;② 通用水头边界在污染场地地下水模拟中应用较广,尤其是处理源汇项变化问题时效果较好;③ 参数敏感性与模型不确定分析及后续检查验收在相关工作中不可忽视。正确认识和处理污染场地地下水数值模拟中的关键问题,可为污染场地地下水调查评估、修复与治理工作的有效开展提供科学保障。

**关键词:**污染场地;地下水;数值模拟;模型

**中图分类号:**X703

**文献标识码:**A

**文章编号:**1006-8759(2015)01-0043-04

## DISCUSSION ON THE KEY PROBLEMS OF NUMERICAL SIMULATION OF GROUNDWATER AT CONTAMINATED SITES

ZHENG LI-jun

(CCTEG Hangzhou Environmental Research Institute, Hangzhou 311201, China)

**Abstract:**The problem of paying attention to model software technology and looking down on hydro-geological condition analysis in the numerical simulation of groundwater is very common. Based on the reality of increasing numerical simulation work about China's contaminated sites, through the collection of information and experience, the key issue model dimension, boundary conditions, sources and sinks and uncertainty analysis in the numerical simulation of groundwater at contaminated sites are discussed. The results show that: ① Possible to establish a three-dimensional or quasi-three-dimensional numerical simulation model of groundwater at contaminated sites. ② Universal head boundary has a wide application in the groundwater simulation of contaminated sites, especially when dealing with sources and sinks change is better. ③ Parameter sensitivity analysis, model uncertainty, subsequent inspection and acceptance in the relevant work can not be ignored. Correctly understanding and dealing with the key issues of the numerical simulation of groundwater at contaminated sites, can provide a scientific guarantee for groundwater investigation and assessment, pollution remediation and treatment of contaminated sites.

**Key words:**Contaminated sites;Groundwater;Numerical simulation;Model

地下水资源与环境评价、规划、管理的核心是地下水动态预测，而当前地下水动态预测的最有效手段，甚至可以说唯一手段是数值模拟。自上世纪 80 年代，美国地质调查局(USGS)开发出用于孔隙介质中三维有限差分地下水水流数值模拟软件 MODFLOW 以来，地下水数值模拟技术得到快速发展与广泛应用。Visual MODFLOW、GMS、FE-FLOW 等模块丰富、功能强大、界面友好的数值模拟软件在区域与场地地下水水流和溶质运移模拟中有普遍应用，并与 EVS&MVS 等地质三维可视化建模软件相对接，形成了强大的交互分析与结果输出能力<sup>[1]</sup>。与美国 Cape Cod 基地、Columbus 基地及加拿大 Borden 基地等开展大型野外试验场研究，积累大量研究数据，不断检验、丰富和发展了地下水水流与溶质运移理论和方法相比，我国地下水数值模拟对基础理论的实验研究和水文地质问题的具体分析重视不够，有过多依赖模型软件技术的倾向，因而重复性、跟踪性工作多，创新性成果少<sup>[2]</sup>。

我国场地地下水因开展环境调查极少，积累数据量小，场地地下水建模与数值分析与区域相比非常少。随着《环境影响评价技术导则 地下水环境(HJ610-2011)》和《全国地下水污染防治规划(2011-2020 年)》的发布及全国地下水基础环境状况调查评估项目的实施，污染场地地下水数值模拟工作日渐增多，有必要对其中关键理论问题与注意事项进行针对性地分析探讨，从而保证相关工作的有效开展。

### 1 总体要求与工作步骤

污染场地地下水数值模拟首先应在现场踏勘和收集资料的基础上，明确模拟评估目标，根据具体的目标，合理规划和设定工作范畴。其次，客观概化研究场地，建立符合实际的场地地下水系统概念模型，构建与之对应的数学模型。再次，结合污染物特性和水文地质条件分析，选择合适的数值模拟工具，并进行模拟、识别与验证。最后，明确了解与模拟结果相关的不确定性和局限性，并在评估结果中予以阐述。污染场地地下水系统数值模拟的工作程序与具体步骤如图 1 所示。需要强调的是，水文地质条件合理概化是整个模拟工作的重点。

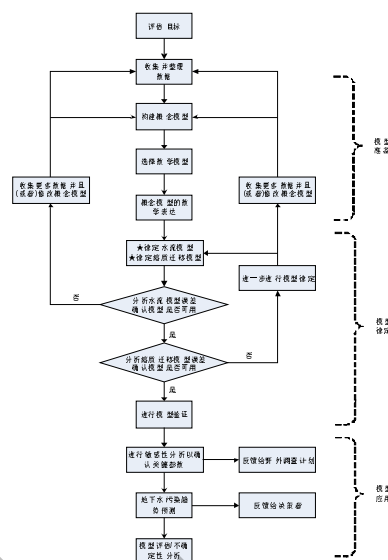


图 1 场地地下水数值模拟工作流程

## 2 水文地质条件概化

### 2.1 模型维数

一个地区建立数值模型，首先需要弄清楚的一个问题是建立几维的模型。自上世纪 70 年代以来，直到 2003~2005 年我国新一轮地下水资源及其环境问题调查建立地下水模型之前，我国所做的地下水数值模型估计有数百个，大部分是二维模型，部分是准三维流模型，很少量是三维流模型。由于补给(降雨、河渠、灌溉等入渗)、排泄(蒸发蒸腾、泉及非完整河等)都发生在潜水面或其下浅部，而含水系统的厚度大多为百米级，这是区域地下水形成三维流的基本原因。特别是“重点目标区”往往在冲洪积扇的前缘和冲积平原区，其地下水流速的垂直分量更是不可忽略。如黑河中游和下游地区，疏勒河流域，渭干河流域，渭北岩溶水地区，晋陕蒙天桥泉域等。另外，地下水开采、矿坑排水及水库、渠系等水利工程的运作，大多起到加强三维流的作用<sup>[3]</sup>。在这些条件下，二维流模型难以满足研究目标的需要。

Neuman 等研究认为，当含水层和弱透水层的渗透系数相差两个数量级或更大时，此时忽略弱透水层内水平流速分量而导致目的层内水头误差小于 5%，即三维流问题可以近似采用准三维模型刻画。对于实际问题，含水层与弱透水层的渗透系数之比往往达三个数量级以上，另外，准三维流模型对水文地质资料要求、数据整理和模型运行工作量等诸方面都比三维流模型简单、省时得多，

基于这两个原因,许多国内外地下水模拟专家主张采用准三维流模型,不用维度模型。应用主要原则见表 1。

表 1 不同维度模型的应用主要原则

| 二维                                     | 三维                 |
|--|--------------------|
| 1) 包括一个或多个地下水源汇项的问题(如抽水或注水井, 水渠, 河流等); | 1) 水文地质条件明确;       |
| 2) 场址的地下水水流方向明显为二维流;                   | 2) 多层含水层;          |
| 3) 场址的含水层在水力特性上有显著空间变化;                | 3) 地下水或污染物的垂向运动较重要 |
| 4) 污染物迁移的横向弥散影响问题较重要, 敏感受体位于污染羽的侧向     |                    |

## 2.2 边界条件

地下水流问题中的边界条件可分为三类: 给定水头的边界条件(第一类边界条件, 又称 Dirichlet 条件)、给定流量的边界条件(第二类边界条件, 又称 Neumann 条件)和混合边界条件(第三类边界条件)。第一、二类边界分别指边界处水头、水量呈规律性变化的边界。其中, 前者最简单的情形是定水头边界, 通常将与含水层有密切水力联系的河流或湖泊定义为此类边界; 后者最特殊的情况是隔水边界, 包括沿地下分水岭和流线的边界也可作隔水边界处理。通常情况下, 应首先选择河流、分水岭等自然边界作为研究区的边界。

在场址地下水数值模拟中, 模拟区范围通常难以达到自然边界, 需要人为划定边界并赋予其意义。此种情形下, 可作以下考虑: 根据实际监测到地下水位值, 做出现状条件下地下水流场图。然后, 根据等水位线的形状, 充分考虑模拟的区域和方便程度, 分别在平行于地下水水位线和垂直地下水水位线方向上选择划出模拟的范围。平行于地下水位等水位线方向, 可以将该边界概化为给定水头边界、定流量边界及通用水头边界(General Head Boundary, GHB); 垂直于地下水等水位线方向的边界, 在理论上, 模拟区内的地下水与模拟区外的地下水没有或者有很微弱的水量交换, 这个边界可以作为隔水边界或者极小流量边界来处理<sup>[4,5]</sup>。

需要指出的是, 在源汇项变化的情况下, 在 Visual MODFLOW、GMS 等模型中通常将平行于地下水位等水位线方向边界定义为通用水头边界。通用水头边界在一定条件下可用式(1)表示, 赋值过程中的  $\Delta H$  及  $C$  的计算, 是最为重要的过程之一。实际操作中, 可以将现状等水位线图扩大一定的范围, 在较远的区域选取插值所取得的虚拟等水位线, 假定当源汇项变化后, 不会影响该处

的水头边界值或者影响很小, 可将该边界认为是定水头边界,  $\Delta H$  就等于该点的水位值与我们所选边界处的水位高程之差; 因为该处的边界条件为线性边界,  $C$  值可以根据式(2)计算求得<sup>[6]</sup>。

$$q(x, y, z) \Big|_r = C \cdot \Delta H \quad (1)$$

$$C = \frac{k/t \cdot l \cdot w}{L} = k/t \cdot w \quad (2)$$

式中:  $q(x, y, z)$  为边界处的流量 ( $\text{m}^3/\text{d}$ );  $\Delta H$  为水头损失 ( $\text{m}$ );  $k$  为含水层的渗透系数 ( $\text{m}^3/\text{d}$ );  $L$  为水流路径长度 ( $\text{m}$ );  $t$  为水流方向上的介质厚度, ( $\text{m}$ )。

## 2.3 源汇项

降水入渗补给量是地下水(特别是平原区浅层地下水或潜水)的主要补给来源。降雨入渗补给量或入渗补给系数的计算方法主要有动态分析法、区域水量均衡法、数值分析法等。确定污染场地的降水入渗补给量, 首先应尽可能搜集当地的降水数据, 无当地气象站数据时可从中国逐日格点降水量实时分析系统(1.0 版)数据集(中国气象科学数据共享服务网提供)中提取相关数据。而降雨入渗补给系数在没有实测数据的情况下, 尽可能查阅文献资料获取, 如查阅不到相关数据则可采用数值模拟法反求参数, 必要时根据研究区的包气带岩性、厚度等特征等对分区后的参数进行律定。

潜水蒸发是地下水排泄主要方式之一, 与地下水位埋深有密切关系。潜水蒸发量最常见的计算公式是潜水蒸发系数与标准 E-601 型蒸发器观测的水面蒸发量 ( $\text{mm}$ ) 的乘积, 由于水面蒸发量可由气象观测站提供, 因而确定潜水蒸发系数显得尤为关键。国内外学者对不同土质、不同地下水位埋深下裸地潜水蒸发进行了大量研究, 建立了考虑不同因素、适应不同环境的一系列潜水蒸发经验公式, 如阿维里扬诺夫公式、幂函数公式、叶水庭公式、清华公式等, 在确定污染场地潜水蒸发极限埋深值(受地表覆被和包气带岩性及其结构影响通常在 2.0~5.0m)和计算潜水蒸发量时可适当参考借鉴。在无实测数据和相关资料参考的情况下, 场地潜水蒸发量可同样利用数值模拟法反演求得。

## 3 参数敏感性与模型不确定性分析

### 3.1 参数敏感性分析

地下水数值模型中参数的可靠性是决定模型



可靠性的重要因素,进而也影响到利用地下水数值模型开展模拟和预报结果的可靠性,因而开展地下水数值模拟中参数的敏感性分析十分重要。敏感性分析是在合理的范围内(模型参数值的不确定范围)改变模型输入参数,并观察水头,流速或污染物等响应变化,确定参数、边界条件和源汇项等的不确定性对模型计算结果的影响程度,从而检查模型正确性。在调参前进行敏感性分析可帮助建模者确定调参方向;在调参后进行敏感性分析可以确定模型的正确性。在调参过程中如果发现某个参数的微小变化引起计算结果的较大改变,表明该参数的不确定性会对模型计算结果产生较大影响,因此在获取该参数值和模型校正时就需要特别慎重对待。现有的敏感性分析基本都是在其他参数不变的情况下,将目标参数适当作上下浮动,从而得到敏感系数。由于不同参数的量纲不同,为便于比较不同参数的敏感系数,推荐使用无量纲形式的公式(3)进行参数的敏感性分析。

$$\beta_{i,k} = \frac{\delta H_i / H_i}{\delta a_k / a_k} \quad (3)$$

式中: $\beta_{i,k}$  为水头; $H$  对第  $k$  个参数在第  $i$  个观测点上的敏感系数; $H$  为第  $i$  点水头值; $a_k$  为第  $k$  个参数值。

### 3.2 模型不确定性分析

由于模型建立在一定的假设基础上,即使经过良好律定的模型由于数据的不充足和对模拟过程的过度简化或过度复杂化,地下水水流与溶质运移模型的运算结果仍然会存在一定的误差或者不确定性,因此,科学地定量分析地下水模拟的不确定性十分必要。如果地下水预测模拟的预报结果对规划和设计有重要意义,必须对模型的不确定性予以分析,从而评估模型预测结果的可靠性。根据地下水模拟不确定性的来源,将其分为参数

不确定性、模型不确定性和资料不确定性三类。常用的评价不确定性的方法有:敏感分析, Monte Carlo 方法、一阶误差分析等。通过对参数不确定性的分析,模拟结果可以表达为可能结果的区间,从而反映模拟参数的不确定性<sup>[7,8]</sup>。

## 4 结论与建议

(1)污染场地地下水水流和溶质运移模型的维数应结合场地的水文地质条件具体分析,科学合理概化,并尽可能建立三维或准三维流模型。

(2)污染场地通常难以利用自然边界,可沿流线或等水头线方向确定研究区边界。通用水头边界在处理含水层渗透系数不大、源汇项变化大的场地地下水数值模型问题非常有效。

(3)污染场地地下水数值模拟过程中应重视参数敏感性和模型不确定性分析及后续检查验收工作,不断丰富和发展相关分析方法,建立统一的验收操作规范。

## 参考文献

[1] Zheng C M, Gorelick S M. Analysis of the effect of decimeter scale preferential flow paths on solute transport [J]. Ground Water, 2003,41(2):142-155.

[2] 薛禹群. 中国地下水数值模拟的现状与展望[J]. 高校地质学报, 2010,16(1):1-6.

[3] 钱会, 王毅颖, 宋秀玲. 地下水流数值模拟中不应忽视的几个工作程序[J]. 勘察科学与技术, 2004,22(1):40-43.

[4] 张宗文. 某污染场地地下水流及污染物运移数值模拟[J]. 北京: 中国地质大学(北京), 2011.

[5] 卢文喜. 地下水运动数值模拟过程中边界条件问题探讨[J]. 水利学报, 2003,32(3):33-35.

[6] 沈媛媛, 蒋云钟, 雷晓辉, 等. 地下水数值模拟中人为边界条件的处理方法研究[J]. 水文地质工程地质, 2008,35(6):12-15.

[7] 陈崇希. "防止模拟失真, 提高仿真性"是数值模拟的核心[J]. 水文地质工程地质, 2003,30(2):1-4.

[8] 吴吉春, 陆乐. 地下水模拟不确定性分析[J]. 南京大学学报(自然科学版), 2011,47(3):227-234.

[9] 质边坡的应用研究[J]. 2008, 28(3): 330-334.

[7] 刘晶晶, 赵其华, 彭社琴, 等. 预应力锚索格构梁作用下边坡土中应力分布的室内模型试验研究[J]. 水文地质工程地质, 2006, (4): 9-12.

[8] 朱大鹏, 晏鄂川, 宋琨. 格构梁与边坡岩体相互作用机制及现场试验研究[J]. 岩石力学与工程学报, 2009, 28(S1): 2947-2953.

[9] 张雷, 叶勇, 陈时栩. 格构梁预应力锚索加固岩堆体边坡数值模拟[J]. 工程勘察, 2008, (5): 5-8.

[10] 向安田. 高边坡预应力锚索格构梁的承载机理及设计分析研究[D]. 上海: 同济大学, 2007.

(上接第 39 页)

[2] 肖世国, 周德培. 岩石高边坡预应力锚索地梁的一种内力计算方法[J]. 岩石力学与工程学报, 2003, 23(2): 250-253.

[3] 许英姿, 璩继立, 葛修润, 等. 格构锚固结构与地基相互作用分析[J]. 上海交通大学学报, 2005, 39(5): 742-745.

[4] 唐辉明, 许英姿, 程新生. 滑坡治理工程中钢筋混凝土格构梁设计理论研究[J]. 岩土力学, 2004, 25(11): 1683-1687.

[5] 殷跃平. 滑坡钢筋砼格构防治"倒梁法"内力计算研究[J]. 水文地质工程地质, 2005, (6): 52-56.

[6] 江学良, 草平, 杨慧, 等. 格构梁与锚管注浆复合结构加固裂隙岩