

于家沟地下水反应溶质运移规律数值仿真

梁冰, 王岩

(辽宁工程技术大学 力学与工程科学系, 辽宁 阜新 123000)

[摘要] 针对矸石淋滤液对于家沟地区地下水污染的实际情况, 分析其在含水层中运移的规律, 充分考虑了地下水变密度对浓度分布的影响, 建立了多组分溶质在地下水中运移的耦合动力学数学模型, 采用 Galerkin 有限元方法和 Picard 迭代法相结合对耦合模型进行了离散, 通过室内土柱实验求得基本参数并对地下水污染动态过程进行了仿真模拟, 预测了污染浓度的时空分布特征。结果表明: 污染面积随时间推移不断向两轴方向扩大, 且纵向显著; 不同组分由于各自特征的巨大差异, 受到地下水密度影响的程度也有很大差别; 渗滤液浓度拟合误差小于 6%, 从而验证了模型的可靠性和实用性。

[关键词] 煤矸石; 地下水; 数值模型; 有限元法

[中图分类号] P641.2 [文献标志码] A [文章编号] 1672-6561(2006)04-0058-06

Simulation for Coal Gangue Leachate Transport in Groundwater in Yujiagou

LIANG Bing, WANG Yan

(Department of Mechanics and Engineering Sciences, Liaoning Technical University, Fuxin 123000, Liaoning, China)

Abstract: The coal gangue eluviation of Yujiagou of Fuxin coal mining area is studied for the pollution evaluation of groundwater. The mechanism of coal gangue eluviation in the aquifer is analyzed. By considering the effect of variable density groundwater flow on concentration contribution, a coupled numerical model is developed for simulating the multi component solute transport in groundwater. The model is discretized by using Galerkin finite element method and a Picard iteration scheme, the basic parameters are obtained by indoor soil pillar test and the process of coal gangue leaching is simulated with which the temporal and spatial distribution features of solute concentration are predicted. The result indicates that the contaminated plume is continually extended toward two axis as time increases and the vertical diffusion is more obvious. The concentration distribution of contaminant is subtle to variation of fluid transport, and fluid density can have various effect on different solutes because their character are different from each other. The average error of eluviation concentration is less than 6% which verifies the reliability and practicality of the model.

Key words: coal gangue; groundwater; numerical model; finite element method

0 引言

煤矸石受降水淋溶作用对地表水、土壤和地下水的污染是矿区环境污染的主要问题之一。矸石

山的存在不仅压占大量土地,而且通过长期的风化、降雨淋溶等作用,发生一系列的物理、化学变化,使矸石中大量的可溶性无机盐随淋溶水以溢流的形式溢出地表,形成高矿化度泉水。许多有害物质进入了地表水体和农田,给附近居民生活造成

[收稿日期] 2006 03 08

[基金项目] 国家自然科学基金项目(50574048)

[作者简介] 梁冰(1962-),女,辽宁盘锦人,教授,博士生导师,从事环境流体力学研究。

了严重影响。因此, 研究地下水及其溶质运移规律, 准确地模拟地下水系统的运动状态, 制定出合理开发、保护和利用地下水资源的管理措施已势在必行。

笔者以阜新新邱露天煤矿南部煤矸石为例, 通过室内土柱实验求得基本参数, 建立了多组分溶质在地下水中运移的耦合动力学模型, 与文献模型相比^[1-9], 充分考虑地下水变密度对浓度的影响, 并模拟了不同组分溶质在变水密度情况下的浓度特征, 预测了污染物浓度变化规律和污染程度, 为地下水资源开发过程中污染控制与治理措施提供理论依据。

1 研究区水文地质条件

研究区处于中生代盆地之中, 在其流域范围内经过漫长年代, 境内堆积了第四系松散沉积物, 主要以潜水为主。总体地貌属于山丘和冲积平原的过渡部位, 整个区域东南高、西北低, 东南、南为低的丘陵, 西北、北为细河流域的河谷、河漫滩地貌。隔水底板倾角较小为 $8^{\circ} \sim 12^{\circ}$, 且无规模较大断层通过该区。本区属于北温带大陆季风性气候, 年降水量 539.3 mm, 年平均蒸发量 1 809.5 mm, 含水层的岩性多以粗砂、砂砾层和基岩石风化层为主, 岩层的单位涌水量为 $15 \sim 20 \text{ L}/(\text{s} \cdot \text{m})$, 水位标高 165 ~ 185 m, 渗透系数为 200 ~ 300 m/d, 水力坡度 $(2 \sim 5) \times 10^{-3}$, 径流速度较快, 区内包气带岩性为黄土状亚砂土, 易于渗透。该区水体源于大气降水及地表水体, 除了部分民用、灌溉及工业企业用外, 以向下含水层渗透为主。区内地下水水化学类型主要是重碳酸钙镁型水、重碳酸钙钠型水、重碳酸钙镁钠型水、重碳酸氯化物钙型水。

2 数值模型的建立

2.1 潜水含水层中地下水流控制方程

本区岩层倾角平缓, 可以把地下水运动当作平面二维问题, 采用控制方程为^[7]

$$\frac{\partial}{\partial x_i} [K_{ij} (\frac{\partial H}{\partial x_j} + \rho_i \epsilon)] = S \frac{\partial H}{\partial t} \quad (1)$$

其中 $\rho_i = \frac{\rho}{\rho_0} - 1$ (2)

$$S = \rho_0 g (\alpha + \phi \beta) \quad (3)$$

$$K_{ij} = \rho_0 g k_{ij} / \mu \quad (4)$$

以上式中: ρ_i 为相对密度; ρ_0 为参考密度; ρ 为浓度的函数^[8], $\rho = \rho(C)$; H 为孔隙水水头; ϵ 表示水流方向, $\epsilon = 0$ 代表水平方向, 当 $\epsilon = 1$ 代表垂直方向; S 为多孔介质的储水率; α 是多孔介质的压缩系数; β 为液体体积的压缩系数; k_{ij} 为渗透系数张量; μ 为水流运动粘滞系数。

地下水流速符合 Darcy 定律, 表示为

$$q_i = -K_{ij} (\frac{\partial H}{\partial x_j} + \rho_i \epsilon) \quad (5)$$

2.2 溶质运移方程

假设在含水层中任取一无限小均衡单元体, 各边长为 Δx_i , 在 Δt 时间内引起单元体内地下水反应溶质质量变化因素有: 对流作用; 扩散作用; 溶质之间和溶质与介质之间的物理化学作用。

在综合考虑地下水溶质在土壤-水环境体系中对流扩散, 吸附解吸, 生物降解条件下, 建立溶质在地下水中的运移方程为^[9]

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi \rho D_{ij} \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \rho c_{\alpha} u_i) + \rho' c'_{\alpha} q - \lambda_1 \varphi c_{\alpha} - \lambda_2 \rho_i c_{\alpha} - R'_s \rho c_{\alpha} - R_n^{bio} = R \varphi \rho \frac{\partial c_{\alpha}}{\partial t} \quad (6)$$

式中: $c'_{\alpha} = \rho'_{\alpha} / \rho'$; $c_{\alpha i} = \rho_{\alpha i} / \rho_i$; $R = 1 + \frac{\rho_i}{\rho} \cdot \frac{\partial c_{\alpha i}}{\partial c_{\alpha}}$ 为阻滞因子; R'_s 是含水率; c'_{α} 是抽出(或注水)溶液中溶质 α 的浓度; ρ'_{α} 是抽出(或注水)溶液中溶质 α 的密度; ρ' 是抽水井中溶液的密度; $c_{\alpha i}$ 是含水介质颗粒表面吸附的交换离子 α 浓度; $\rho_{\alpha i}$ 是含水介质颗粒表面吸附的交换离子 α 的密度; ρ_i 是含水介质的密度; $\sum_{n=1}^N R_n$ 是化学反应项; N 是组分 α 发生的不同反应类型; q 是含水层单位时间的抽(注)水强度(抽为负, 注为正)。当 $q > 0$ 时, $c'_{\alpha} = c_{\alpha 0}$ 为注入水中溶质 α 的浓度; 当 $q < 0$ 时, $c'_{\alpha} = c_{\alpha}$ 为抽水中组分 α 的浓度。这时, $\rho'_{\alpha} = \rho_{\alpha}$, $\rho' = \rho$ 。 λ_1 是溶解相一阶反应速率; λ_2 是固相吸附解吸的一阶反应速率。

对于每一种溶质, 其浓度为

$$C = c_u + \sum_{\alpha=1}^n \gamma_{\alpha} c_{\alpha} \quad (7)$$

式中: c_u 为非混合的组分 α 浓度; n 为水相中溶解的组分数; γ_{α} 是组分 α 的理想化学参数。

$$\phi D_{mij} = \alpha \tau |q| \frac{\partial}{\partial x_j} + (\alpha - \alpha \tau) \frac{q_i q_j}{|q|} + \phi \tau D^* \frac{\partial}{\partial x_j} \quad (8)$$

式中: α 、 $\alpha \tau$ 分别为纵向和横向弥散系数; τ 为骨架

曲度; D^* 为分子弥散系数; δ_{ij} 为 Kronecker 符号,

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i=j \\ 0 & i \neq j \end{cases} \quad |q| \text{ 为流速模的量。}$$

2.3 一阶可逆动力学控制方程

在地下水环境中, 吸附过程是一个动态可逆的非平衡过程, 多组分溶质吸附解吸行为可用如下控制方程

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^n k_{ij} \cdot c_j (1 - k_d \beta) \quad (9)$$

式中: β 为组分溶解的饱和指数; k_d 是液相-固相的分配系数; k 是一阶吸附解吸速率常数。

2.4 定解条件

2.4.1 水分运移的定解条件

(1) 初始条件

$$H(x_i, t)|_{t=0} = H_0 \quad (10)$$

(2) 边界条件

$$H(x_i, t)|_{\Gamma_1} = H_1 K_{ij} \left(\frac{\partial H}{\partial x_j} + \rho_r \epsilon \right) n_i \Big|_{\Gamma_2} = W \quad (11)$$

2.4.2 溶质运移的定解条件

(1) 初始条件

$$c_i|_{t=0} = c_{i0}; \quad c_{oi}|_{t=0} = c_{oi0} \quad (12)$$

(2) 边界条件

$$c_i(x_i, t)|_{\Gamma_1} = c_{oi} \quad (\vec{t} > 0) \quad (13)$$

$$\rho D_{ij} \frac{\partial c_i}{\partial x_j} n_i = J(x_i, t) n_j \Big|_{\Gamma_{2-1}} \quad (\vec{t} > 0) \quad (14)$$

3 模型的数值解

由控制方程式(1)、式(5)、式(6)、式(9)及定解条件式(10)~式(14)构成了耦合动力学数学模型, 需要联立求解。对于上述所建立的数学模型是一二阶强非线性方程组, 无法求出解析解, 只能通过数值解进行计算。

根据 Galerkin 有限元原理和变分原理, 推导出淋滤液在地下水中运移的耦合数学模型表达式

$$[A] \frac{dH}{dt} + [B] \frac{dH}{dt} = [C] \quad (15)$$

$$[D] c_i + [E] \frac{dc_i}{dt} + [F] c_{oi} = [G] \quad (16)$$

$$\frac{dc_{oi}}{dt} + [k \cdot (k_d \beta - 1)] c_{oi} = 0 \quad (17)$$

式中: $[A] = \int_{\Omega} K_{ij} \frac{\partial K_i}{\partial x_i} \frac{\partial K_j}{\partial x_j} d\Omega$ 传导矩阵; $[B]$

$= \int_{\Omega} s K_i K_j d\Omega$ 水容量矩阵; $[C] = \int_{\Gamma} W K_i dx dy -$

$\int_{\Omega} K_{ij} \rho_r \epsilon \frac{\partial K_i}{\partial x_i} d\Omega$ 边界矩阵; $[D] = - \int_{\Omega} \rho D_{ij} \frac{\partial K_i}{\partial x_i}$

$\frac{\partial K_j}{\partial x_j} d\Omega + \int_{\Omega} \lambda_i K_i K_j d\Omega$ 弥散系数矩阵和对流传输矩

阵; $[E] = \int_{\Omega} R \rho K_i K_j d\Omega$ 储量矩阵; $[F] = \int_{\Omega} \frac{\lambda_2 \rho_i}{\phi}$

$K_i d\Omega$ 系数矩阵; $[G] = \int_{\Gamma} J(x_i, t) K_i dx dy - \int_{\Omega} \frac{R_n^{bio}}{\phi}$

$K_i d\Omega$ 边界矩阵。

结合 Picard 迭代格式^[10]对方程式 15~式 17 进行求解, 为了使迭代结果有较好地收敛效果, 在时间层上采用完全隐式向后差分

$$\left(\frac{[A]^{n+1,m} + [B]^{n+1,m}}{2} + \frac{[B]^{n+1,m}}{\Delta t_n} \right) H^{n+1,m+1} + \left(\frac{[A]^{n+1,m}}{2} - \frac{[B]^{n+1,m}}{\Delta t_n} \right) H^{n+1,m} = [C]^{n+1,m} \quad (18)$$

$$\left[\frac{k(k_d \beta - 1)}{2} + \frac{1}{\Delta t_n} \right] c_i^{n+1,m+1} + \left[\frac{k(k_d \beta - 1)}{2} - \frac{1}{\Delta t_n} \right] c_i^{n+1,m} = 0 \quad (19)$$

$$\left(\frac{[D]^{n+1,m} + [E]^{n+1,m}}{2} + \frac{[E]^{n+1,m}}{\Delta t} \right) c^{n+1,m+1} + \left(\frac{[D]^{n+1,m}}{2} - \frac{[E]^{n+1,m}}{\Delta t} \right) c^{n+1,m} + \frac{[F]^{n+1,m}}{2} (c_i^{n+1,m+1} + c_i^{n+1,m}) = [G]^{n+1,m} \quad (20)$$

式中: n 和 m 分别代表时间层和迭代次数; Δt_n 为第 n 时间层上的增量, $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ 。以 t_{n-1} 和 t_n 时刻的水头值线性外推得到的 $H^{n+1,m}$ 为基础, 可得到计算区域内各单元的未知量 $\rho(c)$ 。再将 $\rho(c)$ 反代入 $[C]$, 确定 $\{H\}^{n+1}$ 。若迭代结果 $H^{n+1,m}$ 和 $H^{n+1,m+1}$ 满足精度要求, 则进入下一个时间段。否则重复迭代过程直到满足收敛条件为止。将计算结果(水头分布)代入流速方程进而求出流速, 然后将其代入污染物迁移控制方程, 通过 2 次时间步长的变换即可求得污染物在地下水含水层中的浓度值。从 $t=0$ 时刻开始, 通过反复迭代即可求出污染物随时空变化的浓度值。

4 实例分析

研究区(新邱南部露天煤矿矸石山)位于阜新县东南约 1.5~1.7 km 处, 东临七家子水库, 南以矿务局十二厂为界, 西近城南住宅, 北接新邱区。矸石山矸石堆积量 $1.74 \times 10^6 \text{ m}^3$, 占地 5.80 km^2 ,

堆积厚度 20~40 m。本次研究对矸石山附近于家沟一带地下水质的 11 个采样点(表 1)进行了水质分析^[11]。

表 1 研究区各监测点地下水质监测数据
Tab. 1 Data of Groundwater Quality of Supervised Points in Investigated Section

序号	监测点号	坐标值		$\rho_B/(mg \cdot L^{-1})$		
		X	Y	硫酸根	总硬度	氯离子
1	9 #	560.4	295.8	298.4	814.3	110.0
2	15 #	771.7	673.2	284.3	780.1	37.6
3	10 #	656.0	358.7	260.7	756.4	46.5
4	6 #	635.9	263.1	250.2	785.5	132.1
5	16 #	902.6	834.3	211.7	538.3	132.0
6	17 #	942.8	753.7	173.2	330.2	13.8
7	8 #	940.3	466.9	138.3	298.2	216.7
8	3 #	1 151.7	1 055.7	86.1	222.3	21.6
9	4 #	1 096.3	580.1	82.5	208.1	48.6
10	5 #	917.7	250.6	73.4	192.0	68.5
11	2 #	1 239.7	741.2	59.6	154.3	10.9

结果表明,该区地下水受淋溶液影响,水质已严重超标。为此,笔者以矸石山附近 10 km×10 km 的非限制矩形区域作为模拟对象,将此区域划分为 1 500 个网格(图 1)。考虑到检测到有机物及元素的不稳定性,选取 SO_4^{2-} 作为模拟离子。

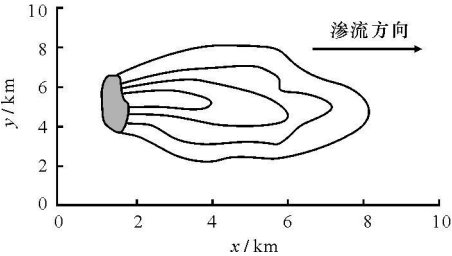


图 1 研究区域示意图
Fig. 1 Sketch of Research Area

通过室内土柱实验模拟了不同溶质在土壤中的运移情况,并测定土壤的渗透系数以及水力弥散系数、吸附分配系数和迟滞因子,为模拟多组分溶质在地下水中迁移提供参数。实验装置如图 2。

土柱有效长度为 900 mm,横截面的半径为 66 mm,横截面积为 13 677.84 mm²。实验所用的土壤取自研究区域距矸石山 1000 m 左右未受污染的洁净土,土壤为细砂土,其干密度为 1.57 g/cm³、12 h 饱和密度为 1.91 g/cm³、2 h 湿密度为 1.86 g/cm³、总孔隙度 34.2%,土壤在实验室里过 40 目的筛子

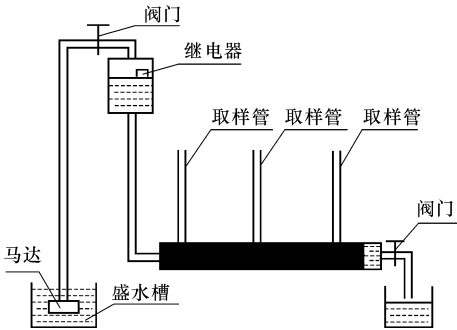


图 2 实验装置示意图
Fig. 2 Sketch Map Experiment Device

后,经分层捣实装入土柱中,使其尽量接近原状土。实验所用的溶液质量浓度为总硬度 $\rho(Ca^{2+} + Mg^{2+})$ 1 500 mg/L、硫酸根 400 mg/L、氯离子 2 000 mg/L, pH 为 6.3。在实验开始之前,用恒流泵在土柱中注入蒸馏水,进行长时间淋洗,使水相与土壤达到平衡,当土柱中水流通畅时,再加入含溶质的溶液。每隔 30 min 分别从 4~6 取样管中取出水样,经化学实验分析得出含各溶质的质量浓度,当溶质浓度达到平衡即原始浓度值后停止取水样。

(1)当土柱达到饱和状态时,4~6 取样管中的水位保持不变,出水口处水流稳定。此时,观察取样管 4 中水位上升到距土柱 725 mm 处,6 中水位上升到 638 mm 处,4、6 取样管之间的距离 $L=480$ mm,出水口处每隔 $t_i=10$ m,流出水量 $Q_i=6.0$ mL。渗透系数可以通过计算得出

$$K_i = \frac{Q_i \cdot 10}{S \cdot t_i} \times \frac{L}{\Delta H} = 0.0035 \quad (21)$$

(2)土壤弥散系数要根据具有吸附性小、穿透能力强的氯离子的穿透曲线来确定。

将流出氯离子浓度分析结果在坐标中做出 C/C_0 曲线即氯离子的浓度穿透曲线,其中 C 为取样管 4 中取出的浓度; C_0 为加入土柱中的实验用水所含氯离子的浓度,其穿透曲线如图 3。

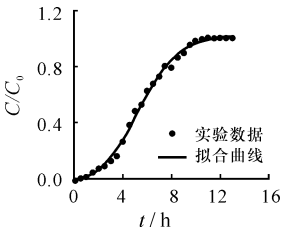


图 3 氯离子的质量浓度穿透曲线
Fig. 3 Cut Thought Curve of Cl^- Concentration

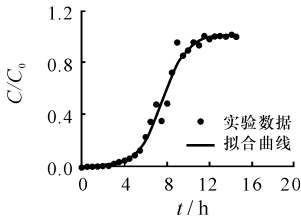


图 4 硫酸根的质量浓度穿透曲线
Fig. 4 Penetration Curve of SO_4^{2-} Concentration

这样纵向弥散系数可以通过下式计算

$$D_L = \frac{v^2}{8t_{0.5}}(t_{0.84} - t_{0.16})^2 = 2.18 \times 10^{-2} \quad (22)$$

式中： $t_{0.16}$ 为流出溶液含 Cl^- 质量浓度达到注入溶液浓度 0.16 倍的时间； $t_{0.5}$ 为流出溶液含 Cl^- 浓度达到注入溶液浓度的 0.5 倍时间； $t_{0.84}$ 为流出溶液浓度含 Cl^- 达到注入溶液浓度的 0.84 倍时间； v 为土柱中水的实际流速，可由式 $v = L' / t_{0.5}$ 确定，其中为取样管 4 到土柱左端的距离， $L' = 230 \text{ mm}$ 。

$$a_L = \frac{D_L}{v} = 2.15 \quad a_T = \frac{a_L}{5} = 0.43$$

(3) SO_4^{2-} 的质量浓度穿透曲线如图 4。

SO_4^{2-} 吸附分配系数 K_d 可通过下式确定，当 $C/C_0 = 0.5$ ， $t_{0.5}^{\text{SO}_4^{2-}} = 7.33 \text{ h}$ 时

$$K_d^{\text{SO}_4^{2-}} = \frac{\eta_e}{\rho_b} \left[\frac{v t_{0.5}}{L} - 1 \right] = 1.36 \times 10^{-4}$$

式中： ρ_b 为土的干密度； η_e 可由所测的达西流速 q 和水的实际运移速度来确定。迟滞因子 R_d 为

$$R_d = 1 + (\rho_b / \eta_e) K_d = 1.0 \quad (23)$$

实验所得参数见表 2。

表 2 基本参数

Tab. 2 Basic Paramters

参数名称	数 值
含水介质密度 $\rho_b / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	1 570
$R_d^{\text{SO}_4^{2-}}$	1.34
ϕ	0.342
$K_d^{\text{SO}_4^{2-}} / (10^{-4} \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3})$	1.36
$Q / (\text{m}^3 \cdot \text{d}^{-1})$	147.9
$\lambda_1 / (1 \cdot \text{d}^{-1})$	0.076
$\lambda_2 / (1 \cdot \text{d}^{-1})$	0.038
k / m	0.003 5
$u_i / (\text{m} \cdot \text{d}^{-1})$	1.01
a_L / cm	2.15
a_T / cm	0.43

图 5~8 分别为 SO_4^{2-} 在 3、5、10 年和 20 年时的浓度场变化，从图中可以看出，污染溶质脱离地表，随着渗流场逐渐下渗，污染面积不断扩大，污染团逐渐呈现出近似椭圆状，浓度值向纵向逐次递减。这主要是由于溶质随地下水流迁移过程中对流-弥散作用的结果，但反应溶质主要集中在地表，说明其大部分已被土壤所吸附，而随水流迁移的较少。随着时间的推移，同一位置污染物的浓度值随时间的延续呈逐渐增大的趋势，且污染物浓度范围

逐渐增大，但渗滤液对地下水体污染程度与矸石山的距离成反比，距离矸石山越远，污染物的浓度越低。浓度分布比较连续，没有出现数值上弥散或震荡现象，随着反应溶质的迁移，地下水中 SO_4^{2-} 质量浓度值逐渐增加到 374.874 mg/L，这时达到稳定并且稳定的区域逐渐扩大。由于溶质物理化学反应等作用不断恢复，造成其浓度未达到初始值。

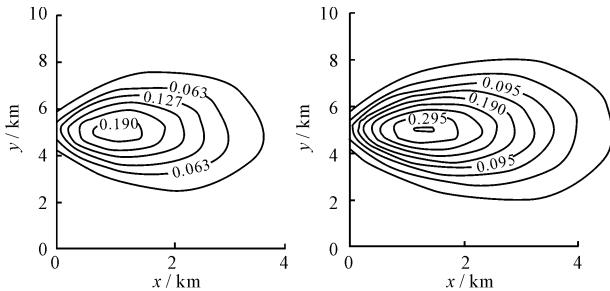


图 5 3 年后 SO_4^{2-} 质量浓度等值线分布
Fig. 5 Contours Map of SO_4^{2-} Concentration Distribution after 3 a

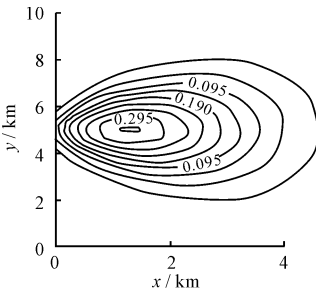


图 6 5 年后 SO_4^{2-} 质量浓度等值线分布
Fig. 6 Contours Map of SO_4^{2-} Concentration Distribution after 5 a

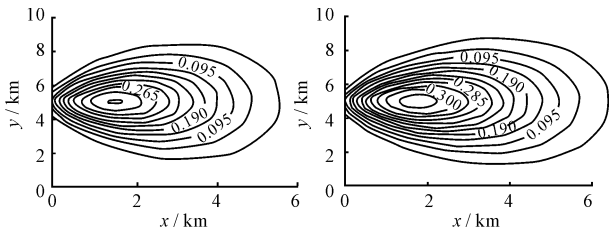


图 7 10 年后 SO_4^{2-} 质量浓度等值线分布
Fig. 7 Contours Map of SO_4^{2-} Concentration Distribution after 10 a

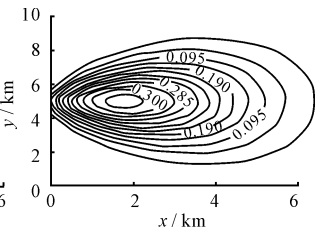


图 8 20 年后 SO_4^{2-} 质量浓度等值线分布
Fig. 8 Contours Map of SO_4^{2-} Concentration Distribution after 20 a

为了进一步验证水流密度对溶质浓度分布的影响，假定水流相对密度为常数，分别取值 1.0 和 1.2。对 $\text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+}$ 、 SO_4^{2-} 、 Cl^- 的质量浓度变化进行了模拟，结果如图 9。在大约 12~30 年中，溶质质量浓度都处于上升期，且虚线的变化率要比实线低，即当相对密度增大后，水体受到的驱动作用也增大，传播速度相对加快，前者的浓度值相对滞后，3 种溶质的数值仿真结果相同；水流相对密度变化前后 SO_4^{2-} 和 Cl^- 的峰值不一致； $\text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+}$ 比较稳定，衰变期长，自身损失较少，因此，密度变化前后峰值基本相同。

图 10 表明，硫酸根监测值与计算值最大相差 72.4 mg/L，最小相差 9.6 mg/L，平均相差 31.4

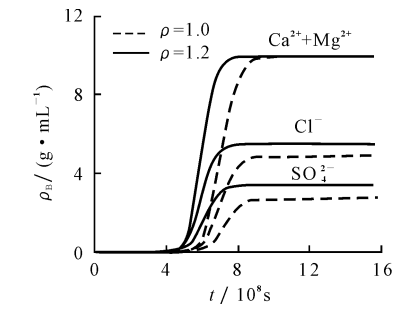


图 9 不同溶质在密度为 1.0 和 1.2 情况下的质量浓度曲线

Fig.9 Concentration of Curve for Different Solutes in the Situation of Density is 1.0 and 1.2

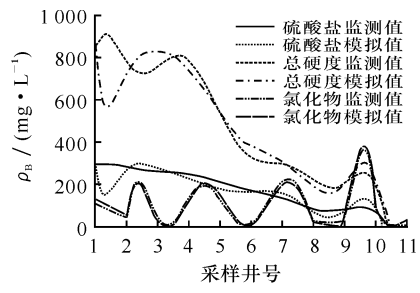


图 10 各组分的质量浓度观测值与计算值对比

Fig.10 Comparison of Computed Different Components Concentrations and Observed Ones

mg/L, 达到初始质量浓度的 5.8%, 计算值与检测值一般吻合良好, 但总硬度的少数点相对误差超过 20%, 结果不是十分理想。引起计算失真的原因主要有两点: 一是计算区地下水中 $\text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+}$ 质量浓度变化较大, 其最大值达 1 124.7 mg/L, 而最小值仅为 154.3 mg/L; 二是该区潜水含水层上覆土层很薄, 加之其岩性多为砂岩, 潜水自保性能差, 污染物极易由地表渗入含水层中致使其离子含量增大。对于密布全区的污染源, 实际计算过程中只能选择影响较大的, 取其污染强度作为参数在模拟计算过程中参与计算。显然, 这种处理方法势必会在较大程度上影响计算精度。

5 结论

(1) 结合阜新于家沟地区水文地质条件, 在综合考虑对流-扩散、吸附解吸、生物降解等作用的基础上, 建立了渗滤液在地下水系统中运移的仿真模型, 采用 Galerkin 有限元方法并结合 Picard 迭代法给出了非线性模型的数值格式。

(2) 数值仿真结果表明, 随着时间的延长, 污染

的范围越来越大, 逐渐向两轴延伸, 污染中心以及外围地区物质的质量浓度越来越小, 浓度逐渐呈现累加的趋势, 这与区域内地下水流向和潜水含水层的分布有直接关系, 并且在后污染区浓度积聚增加, 从而导致达到平衡稳定的时间相对滞后。

(3) 不同组分由于各自特征的巨大差异, 受到水密度影响的程度也有很大差别。因此, 在对多孔介质中溶质迁移过程中, 不能忽略地下水的密度变化对其造成的影响。

(4) 通过对淋溶液中 ($\text{Ca}^{2+} + \text{Mg}^{2+}$ 、 SO_4^{2-} 、 Cl^-) 质量浓度变化数值模拟结果与监测点数据对比分析, 其浓度值与监测值基本吻合, 从而验证了所采用数值模型的可靠性。

[参 考 文 献]

[1] 张德生 沈 冰. 土壤中溶质运移的数学模型及其解析解[J]. 西安工程学院学报, 2001, 23(3): 44 - 47.

[2] Cederberg. A groundwater Mass Transport and Equilibrium Chemistry Model for Multicomponent System[J]. Water Resour Res. 1985, 21(9): 1 095 - 1 104.

[3] Rubin J. Solutes Transport with Multisegment, Equilibrium Controlled Reactions: Afeed Forward Simulation Method[J]. Water Resour Res. 1990, 26(9): 2 029 - 2 056.

[4] Yeh G T, Tripath V S. A Model for Simulation Transport of Reactive Multi species Components: Model Development and Demonstration[J]. Water Resour Res. 1991, 27(12): 3 075 - 3 094.

[5] 钱天伟, 李书绅, 武贵宾. 地下水多组分反应溶质迁移模型的研究进展[J]. 水科学进展, 2002, 7(2): 42 - 53.

[6] 张永祥, 陈鸿汉. 多孔介质溶质运移动力学[M]. 北京: 地质出版社, 2000.

[7] Zhu Xueyu, Liu Jianli. Characteristics of Distribution and Transport of Petroleum Contaminants in Fracture Karst in Zibo Area Shandong Province, China[J]. Science China: Series D, 2000, 43(2): 141 - 151.

[8] Xue Qiang, Liang Bing, Liu xiaoli. Fluid solid Coupling Mathematics Model of Contaminant Transport in Unsaturated Zones and its Asymptotical Solution[J]. Applied Mathematics and Mechanics: English Edition, 2003, 24(12): 1 475 - 1 485.

[9] Frind E O. Seawater Intrusion in Continuous Coastal Aquifer Aquitard Systems[J]. Advances in Water Resources, 1982, 5(2): 89 - 97.

[10] Huvakorn P S, Thomas S D. Techniques for Making Finite Elements Competitive in Modeling Flow in Variably Saturated Porous Media[J]. Water Resour Res. 1984, 20(8): 1 099 - 1 115.

[11] 王而力. 于家沟地区地下水污染成因分析[M]. 辽宁阜新: 辽宁省阜新市环境监测站, 1998.