

山东省济宁市地下水水质模拟及其 污染趋势预测试验研究之一^{*}

许人冰

山东省地质矿产局

近年来,由于人为因素而造成各种废弃物质的迅速增加,特别是由于废污水的大量排放,并通过不同途径进入地下而污染了地下水,使部分地区饮用地下水水质不断恶化,这已成为当前的或潜在的公害问题。事实证明,一旦地下水遭受污染以后,再采取改善与恢复措施,即使花费巨大的人力、财力,其效果亦往往很不理想。为此,采用地下水水质模拟的方法来预测地下水污染发展趋势具有重要实际意义。

所谓地下水水质模拟,乃是在查明环境水文地质条件的基础上,应用数学模拟方法研究地下水中可溶物质弥散、运移时,其浓度在时间上和空间上的变化规律,以预测污染地下水的瞬时动态与扩展范围。从而为制定合理而有效的地下水污染防治措施,选择最佳治理方案提供科学依据。

一、水文地质条件简述

济宁市位于山东省西南部的南阳、独山、昭阳、微山诸湖北岸,地处来自东部山区之汶河和泗河冲、洪积扇的前缘。而西部之黄河泛滥、改道亦在本区留下痕迹,加之各种人为因素的影响,故具有较独特的水文地质特征。

(一) 地层和岩性

根据工作区31平方公里范围内的37个水文地质钻孔及121个民用机井的地层岩性资料确定,其上部30米左右深度内以亚砂土占明显优势,而亚粘土通常为薄层或透镜体状。同时还分布有单层厚度小于5米之粉细砂一至二层。通过分析对比其物质成分、颗粒级配和磨圆程度等特性,认为它们主要属近代黄河泛滥之冲积物,在其中嵌夹着厚度不大之汶河和泗河的冲、洪积层。深度30米以下则以粉土质亚粘土居多,但厚度变化较大,质地亦不均匀,常含钙质或石灰质结核,局部具细小裂隙。亚砂土中不仅亦含有一

^{*}本篇为介绍试验研究区的环境水文地质概况及主要水质参数—弥散系数的室内、外测定。有关地下水水质模型的建立及解法、地下水污染趋势预测及结论,以后将在本刊陆续介绍。

度平均为20.97米, 单层最大厚度5米左右。砂层多集中在上部45米, 含水段厚度平均为45.74米。

2. II区: 分布于工作区之西南部。地下水流动的特点为: 来自东部老运河与西部京杭运河的补给水流在该区乔庄、玛钢厂一带汇集, 并均改变其原来流向而向西北方向(地下水集中开采区)流动, 故地下水水力坡度变化也相对较大。该区取水深度为60米左右, 含水层岩性以中砂为主, 在上部和下部一般都有厚层分布, 累积厚度平均为33米, 单层最大厚度12米, 含水段厚度平均为41米。京杭运河近岸地带带有小面积潜水区。

3. III区: 分布于工作区北部, 邻近或包括地下水集中开采区, 故其水力坡度较大。该区取水深度为65米左右, 含水层岩性主要为中、粗砂, 且多集中在50米以下, 累积厚度平均为26.91米, 单层最大厚度8.2米, 含水段厚度平均为34.19米。

二、地下水污染状况及模拟污染物质的选择

(一) 地下水污染起始值的计算及地下水污染状况

地下水污染起始值系指未受人为因素影响或影响较小地区的地下水中某些化学元素或化合物含量的平均值。地下水污染起始值不同于自然本底值, 它是地下水环境背景值的最大值, 是地下水环境受某种有害物质污染的起点。因此, 采用地下水污染起始值就能更确切、更合理地判断工作区的地下水污染程度和衡量水质模型预测地下水污染发展趋势研究的实际意义。

为获得地下水污染起始值, 取样点选在工作区向外围扩展的多个方向上, 为距离工作区约7~10公里的无工厂分布、人烟稀少地带, 人为因素影响甚小。并采用下述公式计算:

$$X_0 = \bar{X} + 2S$$

$$S = \pm \sqrt{\frac{\sum(\bar{X} - X_i)^2}{n-1}}$$

式中: X_0 —地下水某种污染物质的污染起始值; S —标准差; \bar{X} —区域地下水环境背景值(ppm), 即地下水中某种污染物质的平均含量; X_i —地下水环境背景值调查中某种污染物质的实际含量(ppm); n —地下水环境背景值调查中的样品个数。

工作区地下水中某些常量组分及有害物质污染起始值计算结果如下表1所示:

表1 工作区地下水中某些常量组分及有害物质污染起始值

污染物质种类	SO ₄ '	Cl'	NO ₃ '	矿化度	总硬度	酚	氰化物	汞	总铬	砷
污染起始值 (ppm)	16.00	22.00	1.00	350.00	140.00	0.001	0.002	0.0005	0.0016	0.001
饮用水标准 (ppm)	250.00	200.00	45.00	500.00	250.00	0.002	0.005	0.001	0.05	0.04

济宁市地下水上游的外围区域,由于受人为因素影响甚小,加之地下水径流条件较好,故地下水中常量组分含量一般均较低。 Cl^- 和 SO_4^{2-} 含量大多小于50毫克/升, NO_3^- 含量低于5毫克/升,矿化度在0.5克/升以下,总硬度不超过10德国度。地下水化学类型为 HCO_3^- - Na^+ - Ca^{2+} 或 HCO_3^- - Na^+ - Ca^{2+} - Mg^{2+} 型。进入市区后,由于人为因素影响,水文地球化学环境不断发生变化,不但常量组分及某些重金属元素含量增多、矿化度升高,总硬度增大,天然水化学类型被破坏,而且地下水中还出现了天然环境下不应存在的某些物质,导致地下水不同程度的污染。工作区内, Cl^- 含量一般为180~220毫克/升,最高达349.39毫克/升; SO_4^{2-} 含量一般为110~140毫克/升,最高为268.43毫克/升;而 NO_3^- 含量则多为6—10毫克/升,局部高达370.0毫克/升;矿化度通常在0.6—0.8克/升之间,最大为1.73克/升;总硬度大部分超过国家规定的饮用水标准,最高为48.73德国度,水化学类型为 HCO_3^- - SO_4^{2-} - Na^+ - Ca^{2+} 型、 HCO_3^- - Cl^- - Na^+ - Ca^{2+} - Mg^{2+} 型和 Cl^- - HCO_3^- - Na^+ - Ca^{2+} - Mg^{2+} 型等,地下水有害物质污染亦较普遍,其中氰化物和酚的含量一般分别为0.005毫克/升和0.002毫克/升;汞含量多小于0.002毫克/升,局部可达0.008毫克/升;砷含量普遍低于0.01毫克/升;总铬含量一般为0.015—0.020毫克/升,但在污染河流近岸地带可达0.039毫克/升,超过该区总铬污染起始值24.4倍,而在铬污染水渗坑周围,总铬含量最高竟达0.148毫克/升,超过国家规定的饮用水标准2.96倍。

(二) 模拟污染物质的选择及污染源、污染途径概况

由于地下水污染研究是建立在污染物质溶混运移理论基础之上的,故要求模拟污染物质在地下水中是可溶的或者至少具有示踪剂的性质,并且要求在随地下水运移和弥散过程中基本保持不变,不产生化学反应。当然还要求所模拟的污染物质的来源及污染途径清楚,它们对人体健康已经构成威胁或具有潜在的威胁。

根据上述要求,对照济宁市的地下水污染状况,认为酚、氰化物含量较高,已对人体健康构成威胁,但它们不稳定,在随地下水弥散、运移过程中容易发生变化;汞仅呈小片状不连续分布;砷的污染虽较普遍,但不仅含量较低,且在该市范围内砷的原生污染与次生污染不易区别,特别是在土壤中无明显污染源的情况下,其含量变化很大;镉的痕量分析化验有一定困难,近期难以解决;故它们均未被选作模拟污染物质。总铬的含量虽然亦较低,但在局部地区仍是严重的,甚至出现含量超过国家规定的饮用水标准2.96倍,以致对人体的肺、肾、肝等产生危害;另外,铬是重金属元素,一般常以六价或三价形式与地下水溶混在一起,呈铬阴离子形态迁移,比较稳定,尤其是在该市之微碱性的地下水中,迁移能力比较强(见图2)。

经过反复调查和分析认为,造成工作区地下水铬污染的污染源主要为来自17家工厂总计每日排放约5万吨的含铬废水,且排放浓度大部分超过国家规定标准,最高超标88.76倍(标准件厂)。然后含铬废水通过暗渠或明渠进入老运河或渗坑,污染附近之地下水,并不断向其下游扩展、蔓延。根据下式初步计算每年铬的排放量为2910.58公斤。

$$Q = \sum_{i=1}^n g_i y_i$$

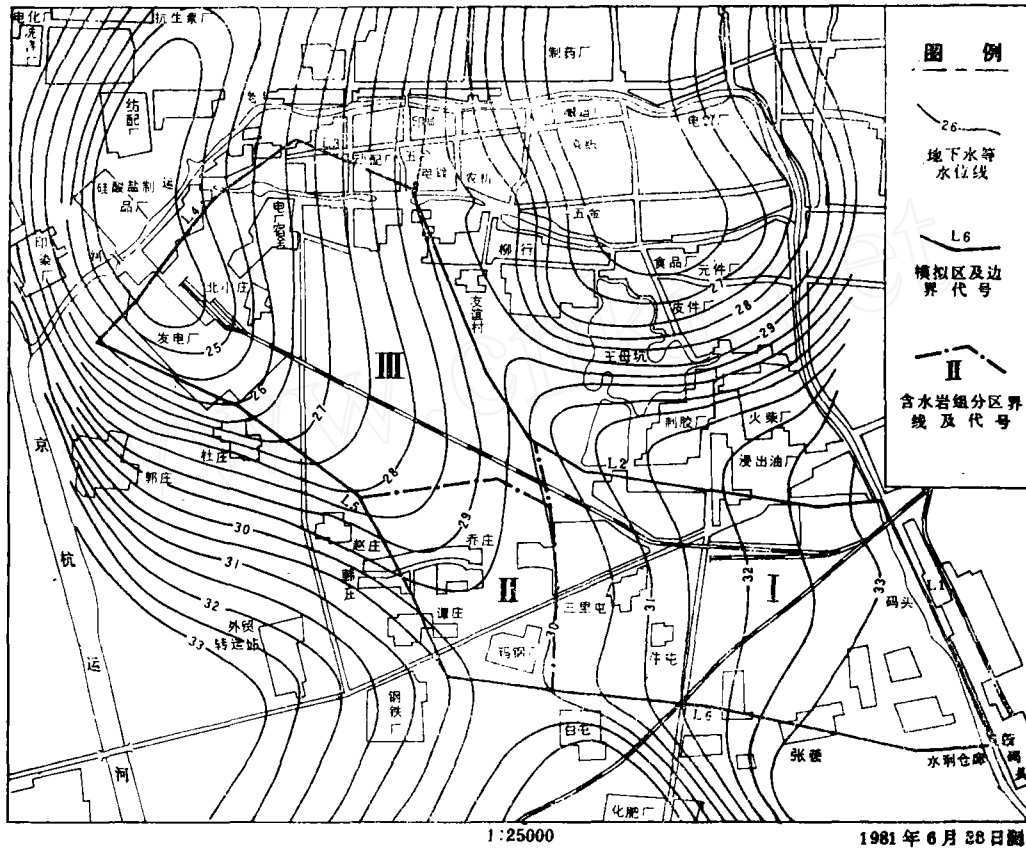


图1 地下水等水位线图

式中： Q —造成工作区地下水污染的总铬排放量； g_i —某工厂总铬废水排放量； y —某工厂总铬废水排放浓度。

综上所述，选择总铬为模拟的主要污染物质是适宜的，可以达到利用地下水污染模型预测总铬污染发展趋势的目的。

三、模拟区及其边界的确定

(一) 模拟区的确定

本次试验研究的模拟区确定为工作区主要的地下水降落漏斗(发电厂—抗生素厂漏斗)的东南翼，其依据为：

1. 该地段具有较详细的地质及水文地质资料和比较系统的水质分析化验资料¹⁾；
2. 经过多次调查证实，地下水仅在老运河局部河段之近岸地带和红旗五金电镀厂

1) 许人冰，1980，山东省济宁市水源污染状况及其环境质量评价。

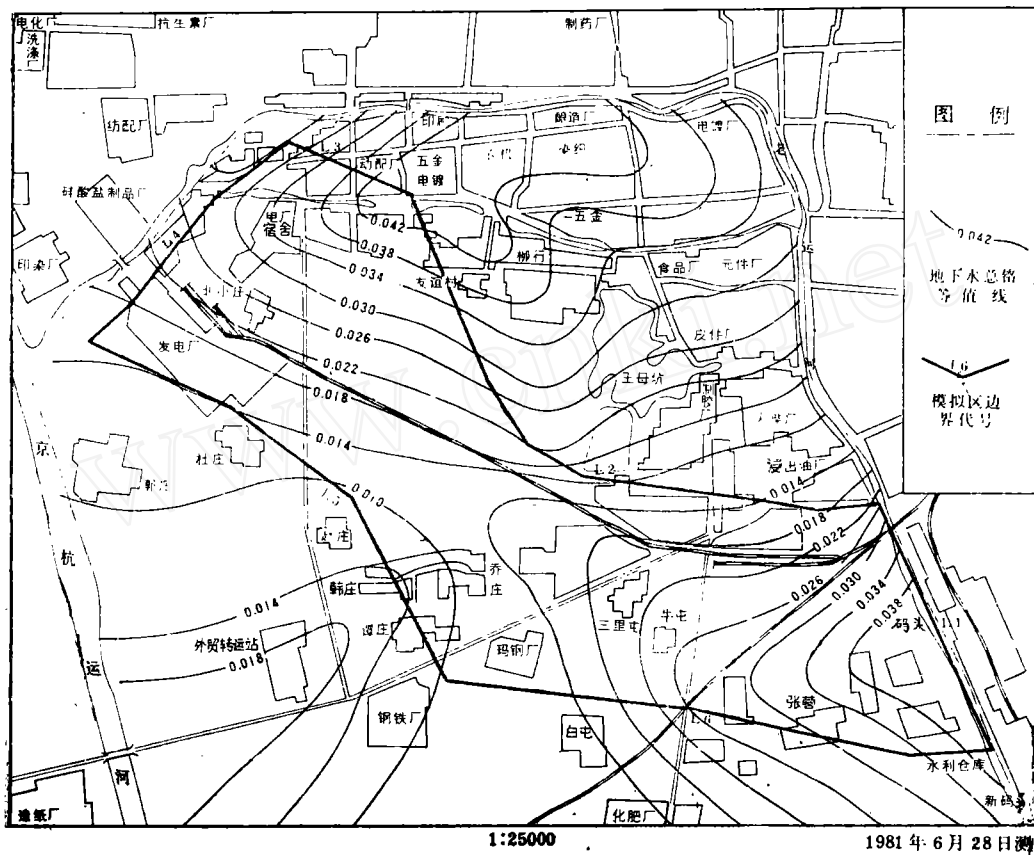


图2 地下水总铬等值线图

之废水渗坑周围受到铬的较严重污染，并向其下游不断扩展、蔓延，污染源呈线状和点状分布；

3. 主要含水层的埋藏、分布条件不太复杂，流向较单一，补给、径流、排泄条件较清楚，均为承压水，各含水层间连通性较好，可视作一个含水岩组；

4. 模拟区为该市蔬菜种植区，现有机井密度较大，井孔深度等情况差别较小，不仅有利于开展各种野外试验，同时又可大大缩减经费开支；

5. 地方有关部门对试验要求迫切，并在工作中能积极给予合作和支持。

(二) 模拟区的边界

根据其水文地质条件，模拟区边界可划分为第一类边界(定水头、定浓度补给边界)和第二类边界(弱透水边界及透水边界)(见图1)。

1. 第一类边界——定水头、定浓度补给边界(L_1) 模拟区的东南部是以老运河为界。北起浸出油厂南至新码头，全长1250米。如上所述，由于老运河在该段切割下部第一

承压含水层, 而成为补给模拟区地下水的主要通道之一, 加之沿岸各工厂每天向该河流注入约 5 万吨含铬工业废水, 故近岸地带之地下水位和总铬浓度明显地受老运河补给的控制; 而经过枯水期(无降水过程)的多次测量结果表明, 老运河之水位及总铬浓度变化较小。故定为第一类边界, 即定水头、定浓度补给边界。在计算中, 水位与浓度采用枯水期多次测量结果之算术平均值。

2. 第二类边界 模拟区被确定在本市最大的地下水降落漏斗(发电厂—抗生素厂漏斗)的东南翼, 其东部和南部分别与酿造厂—食品厂漏斗及化肥厂漏斗相邻。如上所述, 由于各漏斗区地下水开采量相对较稳定, 其间的地下水分水岭摆动范围甚小, 故以分水岭地带向本漏斗之一侧为边界(L_2 、 L_6)。因距分水岭较近, 仅有少量地下水来自分水岭的补给进入模拟区, 而定为弱透水边界。从地下水等水位线图可以看出, 东北部之 L_3 边界, 是与地下水流方向成大角度相交, 所以亦仅能接受区外少量地下水的侧向补给, 故亦定为弱透水边界。

透水边界分别为模拟区西北端(L_4)和西部。前者为邻近地下水降落漏斗中心, 位于含水砂层富集地带内, 漏斗区每日集中开采之地下水将有一定数量通过这一边界。另外根据漏斗向模拟区内扩展较远的事实, 亦说明该边界具有较强的透水能力, 是模拟区排泄地下水及污染质的边界。后者主要是通过和接受来自西部京杭运河对模拟区的侧向补给, 地下水水头差较大, 等水位线密集, 使得地下水快速地流向漏斗中心, 从而也表明这一边界有较好的透水能力。故定为透水边界。

边界 L_i ($i=2, 3, 4, 5, 6$)都不同程度地接受地下水的侧向补给或排泄地下水。根据多次水位统测和水质监测证明, 在上述边界均有地下水流及其污染质(总铬)通过, 进入区内或排泄于区外, 故对水位和浓度而言, 可统定为第二类边界。预测时, 根据四年来多次对边界两侧之水位观测和水质(总铬)监测数据, 并布设垂直边界方向的六条长期观测孔、线, 以进一步弄清边界的性质与变化; 再结合已有的历史资料和计划的预测方案, 寻取发展趋势, 最后给出具体的比例系数, 进行地下水水质(总铬)预测。

四、弥散系数的室内测定

通过实验来确定水文地质参数一直受到人们重视。但如何把实验室小范围内的实验结果, 推广应用到现场的大范围, 却成为长期以来难以解决的问题。近十多年来, 已利用数字模型作为桥梁, 把两者联系起来。为此, 实验室要为数字模型提供必要的基础, 即搞清物理现象, 以避免出现数字模型不符合物理现象的情况。另外, 实验室实验所提供的一些参数, 虽然不能立即用于野外场现, 但可用数字模型对实验室现象进行模拟, 以证明数字模型的可靠性、合理性和有效性, 然后再回到实际中应用, 这样可避免参数调试中的差错。

(一)要求与条件

实验室测定弥散系数(一维弥散)的方法, 是利用现场的不同岩性介质在室内进行示踪剂注入试验, 使之具有解析解所要求的条件。它包括下述假设:

1. 流动距离为一半无限长的直线 $0 \leq x < \infty$, 流动和弥散都是一维的;
2. 流动是均匀的、稳定的, 流速不变;
3. 孔隙介质是均质的, 渗透系数、孔隙度和弥散系数都是常数;
4. 流体是不可压缩的均质流体, 粘度和密度为常数, 并保持温度不变;
5. 示踪剂的初始浓度为零, 即 $t=0$ 时, 在砂柱或土柱中不含示踪剂;
6. 从 $t=0$ 开始, 在砂(或土)柱的顶端($x=0$)注入定浓度示踪剂溶液;

为此, 在模拟区的试验井孔内选取十二种不同岩性的土(或砂)样, 进行室内弥散系数的测定, 得到在垂直渗流条件下, 不同示踪剂和污染液流经不同岩性的土(砂)柱时, 其浓度随时间的变化, 并选择适当的计算公式求得不同岩性的室内弥散系数测定值。

(二) 实验装置

根据上述要求与条件, 选用内径为7.5厘米, 长62厘米的硬质塑料管若干个, 管底部用塑料板焊接, 并留有出水口, 通过软胶管引入量筒内, 软胶管用止水夹控制流出量; 其上部放置示踪剂溶液容器, 并以软胶管接至硬质塑料管的顶端, 用止水夹控制流入量。

(三) 实验方法步骤

在硬质塑料实验管内分别装入经过处理之各种不同岩性土(或砂)样, 底部设置过滤层, 顶部留有缓冲层; 再根据各个土柱的渗透速度来确定实验时的取样间隔时间和控制注入量。在实验中采用连续和脉冲两种注入形式。示踪剂溶液的配制浓度主要是考虑能在末端流出的溶液中看出浓度的明显变化为准。

连续注入时, 先测定清水中示踪剂的本底含量, 再配制一定数量的定浓度示踪剂溶液, 通过软胶管注入土柱(或砂)内, 用止水夹控制输液管流入量, 并保持实验管内有固定水头高度, 直至实验管末端流出溶液浓度与注入浓度相同为止。

脉冲注入时, 是将高浓度的示踪剂溶液, 用滴定管一次瞬时注入实验管内, 随后用注入清水推进, 并保持实验管内有固定水头高度, 观测实验管末端流出溶液浓度的最高峰值出现时间, 直至示踪剂完全消失为止。

(四) 测得曲线

如图3、图4所示。

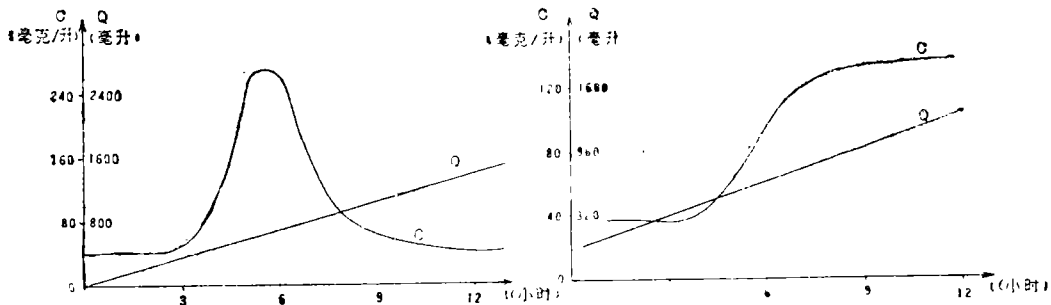


图3 脉冲注入弥散曲线

图4 连续注入弥散曲线

(五) 计算公式与计算结果

如上所述, 本次所进行的室内弥散系数测定, 是人为地造成一种存在解析解的流动和弥散条件。实验是选用萤光染料 ($C_{20}H_4O_5Br_4Cl_2K_2$) 和食盐 ($NaCl$) 溶液为示踪剂。被测定土样的岩性及编号如下表:

表 2 土样岩性名称与编号对照表

编 号	1	2	3	4	5	6
岩性名称	粉土质 重亚粘土	粉土质 中亚粘土	粉土质 重亚砂土	细砂	中粗砂 含粉土	粗砂夹 小砾石

(1) 连续注入 其水质模型为:

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V \frac{\partial c}{\partial x}; & (\text{弥散方程}) \\ C(x, 0) = 0; \quad 0 \leq x < \infty & (\text{初始条件}) \\ C(0, t) = C_0; \\ C(\infty, t) = 0; \quad 0 < t < \infty & (\text{边界条件}) \end{cases}$$

借助于拉普拉斯变换, 可求得解为:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Vt}{2(D_L t)^{1/2}} \right] + \frac{C_0}{2} \exp \left(\frac{Vx}{D_L} \right) \operatorname{erfc} \left[\frac{x+Vt}{2(D_L t)^{1/2}} \right]$$

上式中, 右端第二项和第一项相比, 当 x 较大时可忽略不计。因此,

$$\begin{aligned} \frac{C(x, t)}{C_0} &= \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Vt}{2(D_L t)^{1/2}} \right] = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-Vt}{2\sqrt{D_L t}}}^{\infty} \exp(-\eta^2) d\eta \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\frac{x-Vt}{\sqrt{2D_L t}}}^{\infty} \exp(-\eta^2) d\eta \end{aligned}$$

对于任一给定的时刻 t , 把 x 看作变数, 解就是一个正态分布函数 $1 - N\left[\frac{x-m}{\sigma}\right]$, 其数学期望 m 和标准偏差 σ 分别为:

$$m = Vt, \quad \sigma = \sqrt{2D_L t}$$

正态分布函数 $N\left(\frac{x-m}{\sigma}\right)$ 的一个经典性质是:

$$N[1] = 0.8413 \approx 0.84$$

$$N[-1] = 0.1587 \approx 0.16$$

利用这一性质, 对于固定的时刻 t , 若定义相对浓度 $\frac{C}{C_0} = 0.84$ 处的 $x_{0.84}$ 与相对浓度 $\frac{C}{C_0} = 0.16$ 处的 $x_{0.16}$ 之间的距离为过渡带的宽度 e , 则 $e = 2\sigma$ 。根据实验资料可以绘出某一时刻 t 相对浓度随 x 变化的图 (如图 5), 从图上找到 $x_{0.84}$ 和 $x_{0.16}$, 它们之间的距离即为过渡带宽度 e 。于是得到纵向弥散系数为:

$$\sigma = \frac{e}{2} = \frac{1}{2} [x_{0.16} - x_{0.84}]$$

$$D_L = \frac{1}{8t} (x_{0.16} - x_{0.84})^2$$

但本次实验是在土柱的末端进行取样分析, 并有该点浓度随时间的变化记录, 因此, 这一公式可转换成在一个固定点 x 处 (土柱末端) 计算的公式。

令 $t_{0.16}$ 和 $t_{0.84}$ 分别表示 x 处 (土柱末端) 的相对浓度达到 0.16 和 0.84 的时间则有:

$$D_L = \frac{1}{8} \left(\frac{x - Vt_{0.16}}{\sqrt{t_{0.16}}} - \frac{x - Vt_{0.84}}{\sqrt{t_{0.84}}} \right)^2$$

如果与从土柱的顶端到测量点 (即末端) 的距离 (本实验土柱长为 50 厘米) 相比, 过渡带很小时, $t_{0.16}$ 和 $t_{0.84}$ 可以粗略地稳定为 $t_{0.5}$ (即 $\frac{C}{C_0} = 50\%$ 的点 $x_{0.5}$ 以平均速度 V 移动), 所以, $x_{0.5} = Vt_{0.5}$, 则上式成为:

$$D_L = \frac{V^2}{8t_{0.5}} (t_{0.84} - t_{0.16})^2$$

另外, 本次试验还同时测量土柱末端的流出水量。由于土柱末端单位横截面被驱替出来的流体体积 $U = Vt$, 故又可用被驱替出来的流体体积代替对时间的测量, 所以上式又可以改写为:

$$D_L = \frac{V}{8U_{0.5}} (U_{0.84} - U_{0.16})^2$$

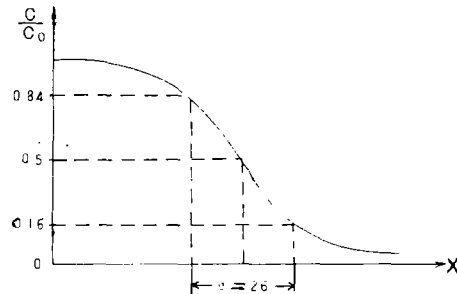


图 5 相对浓度 (C/C_0)—距离 (x) 之关系曲线

以上各式中的 $t_{0.16}$ 、 $t_{0.5}$ 和 $t_{0.84}$ 分别为当土柱末端相对浓度达到0.16、0.5和0.84时的时间； $U_{0.16}$ 、 $U_{0.5}$ 和 $U_{0.84}$ 分别为当土柱末端相对浓度达到0.16、0.5和0.84时被驱替出来的流体体积； X 为渗透距离； V 为渗透速度； D_L 为纵向弥散系数。

D_L 的计算结果如表3和4所示：

表3 D_L 按流出浓度计算成果表

岩性编号	1	2	3	4	5	6
萤光素溶液	0.493	2.926	0.347	0.757	1.65	0.09
氯化钠溶液	0.924	4.52	/	0.669	1.41	0.15

表4 D_L 按流出体积计算成果表

岩性编号	1	2	3	4	5	6
萤光素溶液	0.493	3.018	0.34	0.757	1.672	0.260
氯化钠溶液	0.874	4.398	/	0.67	1.411	0.136

2. 脉冲注入 其水质模型为：

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V \frac{\partial c}{\partial x}; \quad (\text{弥散方程}) \\ C(X, 0) = 0; \quad 0 \leq X < \infty \quad (\text{初始条件}) \\ C(0, t) = C_0; \quad 0 \leq t < t_0 \\ C(0, t) = 0; \quad t_0 \leq t < \infty \quad (\text{边界条件}) \\ C(\infty, t) = 0; \quad 0 \leq t < \infty \end{array} \right.$$

它的解为：

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x-Vt}{2\sqrt{D_L t}} - \frac{x-V(t-t_0)}{2\sqrt{D_L(t-t_0)}}}^{\frac{x-V(t-t_0)}{2\sqrt{D_L(t-t_0)}}} \exp(-\eta)^2 d\eta$$

其结果满足渐近状态假定，而且由弥散引起的过渡带变化很小时，可导出弥散系数 D_L 为示踪剂流动速度的函数。

$$D_L = \frac{X^2 - V^2 t_m (t_m - t_0)}{2 (t_m - t_0)}$$

式中： X 为测量点的横坐标； t_m 为最大值出现的时间。由于实验中可直接测量出最大浓度，故可得出 D_L 和 V 之间的另一个关系式：

$$C_m = \frac{1}{2\pi} \int_{\frac{x-Vt_m}{\sqrt{2D_L t_m}}}^{\frac{x-V(t_m-t_0)}{\sqrt{2D_L(t_m-t_0)}}} \exp\left(-\frac{n^2}{2}\right) dn$$

D_L 的计算结果如表5所示:

表5 脉冲注入 D_L 计算成果表

岩性编号	1	2	3	4	5	6
萤光紫溶液	2.416	1.089	/	0.50	0.202	0.171
氯化钠溶液	0.873	0.747	0.195	0.69	0.106	0.171

五、弥散系数的野外测定

水文地质试验是对地下水进行定量研究的重要手段,在地下水的水质模拟试验研究中建立数学模型并求解,以模拟地下水中污染物质的弥散和运移,是地下水污染趋势预测的核心内容。而数学模型的建立与求解,又是依据其水文地质条件及有关试验参数等资料。可以说,进行地下水水质模拟不仅要有一个可靠的数学模型,而且更需要有可靠的参数数据。当初步建立的数学模型未达到十分可靠时,还可以根据抽水试验、示踪剂注入试验等所获取的较准确参数数值,对该模型进行调整、校正,以求逐步达到建立起可靠的数学模型。所以,在水文地质条件基本查清的前题下,通过野外试验工作确定参数的初值及定解条件,是地下水水质模拟试验研究的关键性工作之一。

(一) 弥散理论概述

可溶解物质进入地下水流系统后,随即逐渐分散开来,并占据超出根据平均地下水流速预料会占据的区域范围的越来越大的流域部分,而且不仅有沿着流动方向的纵向扩展,还有垂直于流动方向的横向扩展和地下水流系统内的上、下扩展。在流速甚小的情况下,甚至可能出现与流动方向相反的逆向扩展。可溶解物质浓度从其最大值向外渐变到零,不存在突变的界面。即在可混溶流体的相互混合过程中,假若开始时它们之间有一个突变界面,则在以后的时间里并不能按照达西定律所描述的平均流速来确定任何一个突变界面的位置,代替它的是产生了一个越来越宽的过渡带。这种不同组分的液相间的扩展作用称之为弥散作用。并且这是在这个过渡带内发生和演变的,它是一个非稳定的、不可逆转的过程,是一个随时间不断变化的过程,不可能按逆转流动得到其初始分布。

地下水中这种不同方向的弥散,通常被称为水动力弥散。一般情况下,它是由于质点的热动能和因流体对流而造成的机械混合产生的,即分子扩散和对流弥散共同作用的结果。

1. 分子扩散 主要是物理化学作用的结果, 故亦称作物理化学弥散。它是由于化学势所引起的, 而化学势则与浓度有关, 即由于液相中所含污染物质的浓度不均一, 浓度梯度使得高浓度处的物质向低浓度处运移, 以求浓度趋于均一。所以, 分子扩散作用是一种使系统各部分的浓度均匀化的过程, 它取决于时间, 并且可在静止的流体中单独存在。故在低流速的情况下, 分子扩散作用成为水动力弥散中的重要组成部分。

2. 对流弥散 主要是纯力学作用的结果, 故亦称作机械弥散。当流体在孔隙介质中流动时, 通过不同孔隙的物质粒子在某时间间隔后到达的位置不同。这是由于:

- (1) 流体的粘滞性, 使得通道轴处的流速大, 靠近通道壁处的流速小;
- (2) 通道口径的大小不均匀, 引起沿通道轴的最大流速间的差异;
- (3) 固体颗粒的阻挡, 流线相对于平均流动方向产生起伏, 即沿流动方向流线产生起伏, 流体质点的实际运动是迂回曲折的。

对流弥散就是由于上述三种情况同时存在而造成的。在流体流动的过程中, 污染物不断地被细分, 进入更细的通道分支, 从而使得污染物质逐步散布开, 并占据孔隙介质的越来越多的体积。因此, 造成对流弥散的两个基本要素是地下水的流动和水流所通过的孔隙系统的存在。除这种微观尺度的不均匀性外, 流动区域不同部分的渗透性差异, 即宏观尺度的不均匀性, 亦是造成对流弥散的一个十分重要的因素。

描述进入地下水系统中污染物质稀释的时间、空间变化的参数称为弥散系数。它的方向性取决于水流的水动力作用方向, 而不是与孔隙介质的方向性及几何特性有关。即使那些几何形态上是均质的、并具有均匀导水率的粒状沉积物, 就弥散作用而言也仍然是有方向性的。因此, 弥散系数是指在水流方向及其两个横向等三个正交方向上的值。所谓测定弥散系数, 在实际工作中, 通常是测定各向同性孔隙介质的纵向弥散度 α_L 和横向弥散度 α_T 。由于 α_L 和 α_T 是孔隙介质的内在参数, 不取决于流场, 所以只要通过野外试验求得这两个参数, 便可用于其它的水动力条件。但在含水层的不同部位上, 它们可能有不同的数值。在试验中测得的 α_L 一般比 α_T 大5~10倍。

在地下水水质模拟研究中需要求解弥散方程, 而解弥散方程时首先必须确定方程中的水动力弥散系数, 即对流弥散系数和分子扩散系数。在含水层内的污染物质运移中, 当流速较大时, 对流弥散在总的弥散中是主要的; 而当流速较小时, 分子扩散在总的弥散中才是主要的。但是, 在大多数实际问题中, 地下水流速均非太小, 且上、下运动亦不十分显著, 故分子扩散与垂向弥散可忽略不计。仅在较细颗粒的沉积层(如粘土、含粘土粉砂等)中地下水流速通常很小, 或在主要开采含水层中接受一定量的垂向越流补给时, 其分子扩散或垂向弥散作用才会比较明显。然而, 分子扩散系数值在流体力学中很难求出, 也不易在实际测定中获得, 故常用零速度的对流弥散系数值或采用公式来推断分子扩散系数值。

(二) 试验井、孔的布设

在地下水水质模拟试验研究中, 弥散试验井、孔的布置主要是根据不同的地下水水动力特征、含水层的位置及岩性、水文地球化学特征、距污染源的距离等而定, 选择一定深度(如单层含水层或混合较好的多层含水层)的典型地段, 并要求在地下水流下游

能够捕捉到示踪剂来进行井、孔布设。而对具体试验的场地,则必须在某一特定的环境下(如仅受地下水集中开采区影响,并无其他干扰)准确测得地下水流向,再在这一特定环境下布置井、孔和进行弥散试验,才可能取得满意效果。

本次试验是在上述根据含水岩组所划分的三个区内各布设一组试验井、孔,其中模拟区内两处,模拟区外边缘一处。特定环境均仅仅受集中开采区影响,附近并无抽水井的干扰。试验井孔有示踪剂注入孔和观测孔两种。观测孔布设在注入孔下游的地下水主流线及其两侧之扇形面上。由于模拟区的面积不大,并且在地下水补给、径流及排泄等地段均分别布设了弥散试验场,故根据上述的水文地质条件,一般只作小范围(观测孔与注入孔距离小于7米)和中等范围(观测孔与注入孔距离7~100米,本次试验选用30米)的弥散试验,而大范围(观测孔与注入孔距离大于100米)的弥散试验是在模拟区外缘之含水砂层厚度大、埋藏浅和径流好的赵庄,利用已有机井(观测孔在注入孔下游之地下水主流线上)进行的,亦获得比较满意的效果。

(三) 示踪剂溶液的配制

主要考虑含水砂层的厚度及岩性、观测孔与注入孔的距离、地下水水力坡度、示踪剂溶液的注入量及注入形式、试验井孔内地下水示踪物质的背景含量等因素,同时结合“稀释倍数的增加与距离平方成反比”的点源扩散规律,再参考室内对含水层主要岩性的示踪溶液浸泡试验结果,对本次试验现场使用的氯化钠、荧光染料和人工放射性同位素 ^{131}I 示踪溶液进行配制。

经过几次平行测得的曲线相互一致,证明上述三种示踪溶液的配制浓度及注入量(在与地下水溶混运移过程中)基本上没有改变试验范围内地下水的粘度、密度及整个流场等的性质,因此,是与计算所要求条件吻合的。

(四) 示踪剂溶液的注入

本次试验采取多井脉冲注入法,即将浓度高而均匀的示踪剂溶液,由投放井在短时间内注入含水层。通常根据示踪剂溶液注入速度与含水层中地下水天然流速之间的相对关系,可有三种情况:

1. 以地下水天然流速为主,脉冲强加注入的示踪溶液速度可以忽略不计。示踪剂投放后,任其由含水层中天然流动的地下水冲走;
2. 天然流速和脉冲强加的注入速度在同一个数量级,两者都需加以考虑;
3. 以脉中的强加流速为主,天然流速可以忽略不计。

结合模拟区地下水天然流速相对较大的特点,本次试验选择了第一种情况,即以天然流速为主,脉冲强加的注入速度可以忽略不计。

(五) 测得曲线

关于弥散系数的野外测定,由于国内尚无先例,而国外资料又未予以专门介绍,加之试验本身难度较大,故这次在三个试验场地的四次弥散系数测定过程中,只获得11条较满意的脉冲注入弥散曲线。图6和图7为柳行试验场同时测得的两个观测孔之弥散曲线。

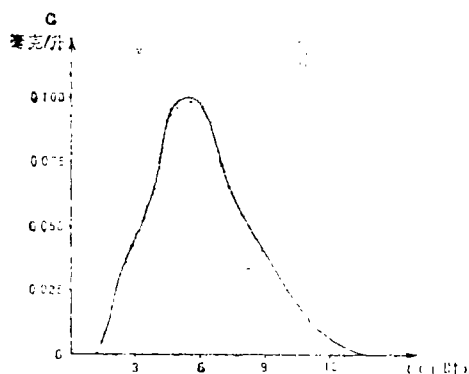


图6 SM22—1号孔弥散曲线图

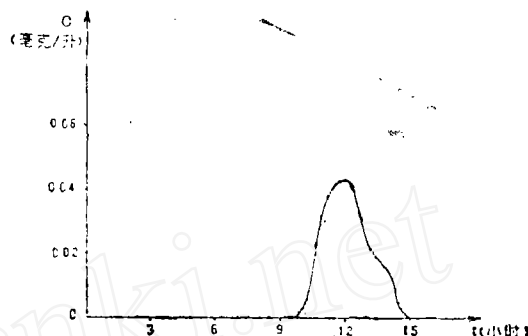


图7 SM22—4号孔弥散曲线图

(六) 计算公式与计算结果

由于各试验场地的地下水流向变化甚小，从弥散试验结果可以看出，示踪剂在地下水中的运移沿水流方向较快，同时向两侧扩散，而在同一垂线上水头和浓度变化不大，故可视地下水流动和溶质运移为二维运动。其承压含水层和弱透水层的介质为非均质，基本上亦可认为是各向同性的、水平的及不等厚的。溶质在运移过程中的化学作用可以忽略，且与含水层介质发生的吸附作用较小，亦未予以计算。

试验时，示踪剂溶液是在 $t=0$ 瞬时注入。如取注入井为坐标原点，沿水的流向为 X 轴，其数学模型为：

$$\begin{cases} \frac{\partial c}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial X^2} + D_T \frac{\partial^2 c}{\partial Y^2} - V \frac{\partial c}{\partial x} & \text{(弥散方程)} \\ C(x, y, t)|_{t=0} = 0 \\ (x, y) \neq (0, 0) \text{ 且 } \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n c dx dy = m & \text{(初始条件)} \\ \lim_{x \rightarrow \pm \infty} C(x, y, t) = 0 \\ \lim_{y \rightarrow \pm \infty} C(x, y, t) = 0 & \text{(边界条件)} \end{cases} \quad (5-1)$$

这一数学模型的解析解为：

$$C(x, y, t) = \frac{m/n}{4 \pi t \sqrt{D_L D_T}} \exp \left\{ -\frac{(x-Vt)^2}{4 D_L t} - \frac{y^2}{4 D_T t} \right\} \quad (5-2)$$

式中： D_L 、 D_T 分别为纵向，横向弥散系数； V 为稳定的一维流速； m 为注入示踪剂的质量； n 为孔隙度。

1. 用配线法计算纵向、横向弥散度：设 (x, y) 是一个观测孔的坐标； $C(t)$ 是这个观测孔中示踪剂浓度随时间的变化。引进下列无量纲变数：

$$t_R = \frac{V^2 t}{D_L} \quad (5-3)$$

$$a = \left(\frac{X^2}{D_L^2} + \frac{y^2}{D_L D_T} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot V \quad (5-4)$$

$$C_R = \frac{C}{C_{\max}} \quad (5-5)$$

将其代入上述之解析解式可得:

$$C_R(t_R) = K t_R^{-1} \exp \left(- \frac{a^2 + t_R^2}{4 t_R} \right) \quad (5-6)$$

$$K = t_{R \max} \left(\frac{a^2 + t_{R \max}^2}{4 t_{R \max}} \right) \exp \quad (5-7)$$

式中: $t_{R \max} = \sqrt{4 + a^2} - 2$, 因此(5-6)式只依据一个无量纲参数 a 。故可取 C_R 为纵坐标, t_R 为横坐标, 用对数刻度, 对不同 a 值可按(5-6)式绘出一族标准曲线如图8所示。

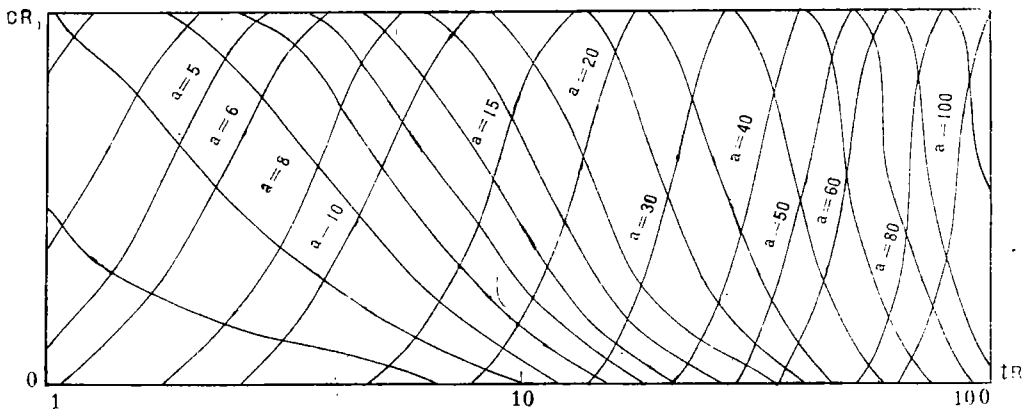


图8 具有不同 a 值时示踪剂浓度随时间变化曲线

由于坐标 x 轴方向已取为弥散的主方向, 所以 $D_L = \alpha_L V$; $D_T = \alpha_T V$, 将它们代入(5-3)、(5-4)式得:

$$t_R = \frac{V t}{\alpha_L} \quad (5-8)$$

$$a = \left(\frac{x^2}{\alpha_L^2} + \frac{y^2}{\alpha_L \alpha_T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (5-9)$$

在实际计算过程中,可先将弥散试验在地下水主流线方向上某观测孔的曲线与标准曲线做对比,把拟合较好的一组曲线所得的 a 值记为 a ,设该点的坐标为 $(x, 0)$,则由(5-9)式得:

$$\alpha_L = \frac{x}{a} \quad (5-10)$$

然后将不在地下水主流线方向上其他观测孔的曲线与标准曲线对比,亦求出相应的 a 值,记为 a_1 。该井的坐标为 (x_1, y_1) ,则由(5-9)式得:

$$\alpha_T = \frac{y_1^2}{\alpha_L (a_1^2 - \frac{x_1^2}{\alpha_L^2})} \quad (5-11)$$

例如在柳行弥散试验场,4号观测孔在地下水主流线上,以实测资料绘成 $C_R - \lg t$ 曲线,与标准曲线拟合,得到 a 值为8,而 $x=5.87$ 米,故 $\alpha_L=0.734$ 米。同样再将不在地下水主流线上之1号观测孔的 $C_R - \lg t$ 曲线与标准曲线拟合,得 a 值为10,而 $x_1=2.2$ 米, $y_1=2.2$ 米,故 $\alpha_T=0.072$ 米。

2. 利用微型计算机计算弥散度:根据弥散试验中某个观测孔的浓度变化反求弥散系数,称水质模拟的逆问题。在济宁市地下水水质模拟区内,结合具体水文地质条件建立了(5-1)式数学模型,再按照作弥散试验时对某个观测孔的实测浓度变化数值进行模拟,以求得一个合理的弥散系数。

在模拟时,利用解问题的最优化方法,根据实际情况,给出一组参数的上、下限,在约束条件下,使求得的解唯一和可靠。本次采用的是分数法,即以 E 值为目标函数,求得使 E 值达到最小时的参数值。具体作法是先给出一组初值作未知参数,然后再把参数逐渐加以修正,使 E 值不断减小,在这一过程中要不断地去解正问题。若 E 值为多元函数,其方程为:

$$E(d) = \sum W_{ij} [C_{ij}(d) - C^0_{ij}]^2 \quad (5-12)$$

式中: W_{ij} 为权因子; C_{ij} 为计算的度浓值,以(5-2)式计算; C^0_{ij} 为第 i 个观测孔在时刻 t_j 的浓度观测数值; d 为参数。

这一方法的实现在机器上是自动完成的,例如在牛屯弥散试验场,利用SM5-1号观测孔以荧光染料和 ^{131}I 为示踪剂的实测浓度与计算浓度进行拟合,较好地解得了一组弥散参数。即 $\alpha_L=0.457$ 米、 $\alpha_T=0.105$ 米(见图9)。

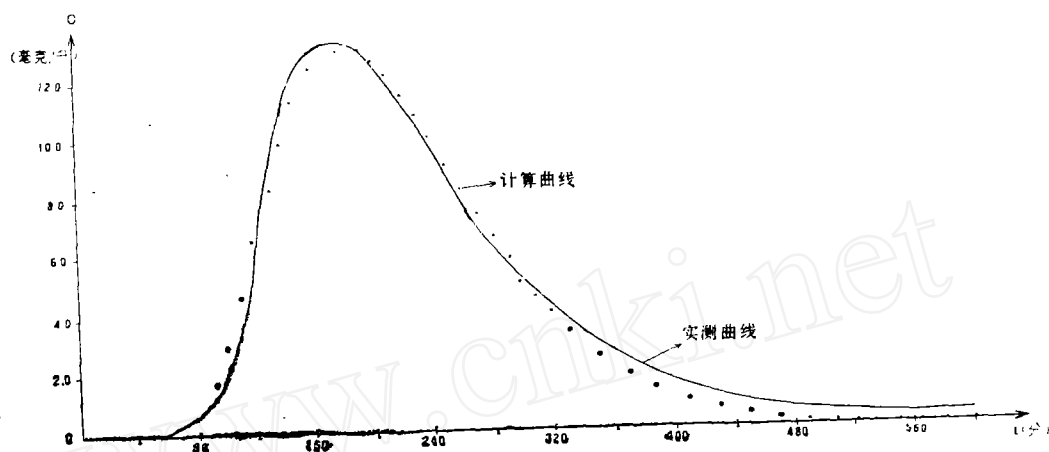


图9 示踪剂浓度随时间变化曲线

这次试验研究是由山东省地质矿产局第三水文地质队主办的，参加单位及主要人员有：长春地质学院王秉忱、杨天行、侯印伟、地质矿产部水文地质研究所尹宝瑞，山东大学孙讷正、梁文康，地质矿产部长春计算站朱政嘉、李生彩，济宁市环保局赵传利，北京市环保所郑汝宽，以及本局何玉顺、李光宏、马金环、宋长斌等同志。

参 考 文 献

- [1] 王秉忱、杨天行、侯印伟、许人冰、尹宝瑞，1981，地下水水质模拟试验研究的基本理论与计算方法。《长春地质学院学报》。第3期。
- [2] 王秉忱、杨天行、许人冰、尹宝瑞、郑汝宽，1983，弥散理论研究及弥散系数测定。《长春地质学院学报》，第3期。
- [3] Jean J. Fried, 1975, Groundwater Pollution (Theory, Methodology, Modelling and Practical Rules).
- [4] В.М.ЩЕСТАКОВ, 1979, ДИНАМИКА ПОДЗЕМНЫХ ВОД.
- [5] J.贝尔著,李竟生,陈崇希译,1983,多孔介质流体动力学。中国建筑出版社。
- [6] 地质科学研究院,1976,国外地质资料选编〔23〕,国外地下水研究。

SIMULATION OF GROUNDWATER QUALITY AND PREDICTION
OF ITS POLLUTION TREND IN JININ CITY, SHANDONG (I)

Xu Renbin

(Shandong Bureau of Geology and Mineral Resources)

Abstract

In this paper, the first part of an experimental research report, five aspects are expounded. They are: (1) geohydrologic conditions in the area for the experimental study and the division of the studied area in terms of the characteristics of the stratigraphy(aquifer beds) and of ground water movements through the aquifer beds; (2) the selection of pollutants for the simulation and the distribution of pollution sources based on a brief discussion on the initial values of groundwater pollution and the pollution state in the studied area; (3) the determination of the range and boundaries of the simulation area through the field investigation;(4) laboratory experiments for the determination of dispersion coefficients(including the description of the experimental requirements, conditions, apparatus and operations) and the calculation of the dispersion coefficients for different lithologic units based on the results obtained through the experiments of continuous and pulse injection of pollutants into groundwater; (5) the determination of dispersion coefficients in the field (the description of the layout of the experimental wells, of the selection of tracers, the preparation and the use of tracer solutions in the experiments) .

Finally the longitudinal and transversal dispersion coefficients for the different parts of the experimental area have been calculated according to the experimental curves.