

地下水流与水质联合数值模拟应用研究

崔振东^{1,2,3}, 唐益群², 严学新¹, 王寒梅¹

(1. 上海市地质调查研究院, 上海 200072; 2. 同济大学 地下建筑与工程系, 上海 200092;
3. 香港科技大学 土木学院, 香港 999077)

摘要: 随着社会的不断发展, 工业、农业和人类生活中的废弃物很多, 特别是城市工业废水的大量排放, 农药化肥的广泛应用, 致使许多地区的地下水受到不同程度的污染。基于水动力弥散的水质模型, 采用多单元均衡法 (MEB), 利用 VC++ 语言编写地下水流与水质数值模拟联合通用程序, 实现程序可视化。结合实际算例, 利用该程序对地下水流与水质的输运机理进行数值模拟研究, 发现该程序人机对话良好, 可操控性高; 为地下水资源的合理开发、保护和利用进行数值模拟提供了依据。

关键词: 地下水污染; 多单元均衡法; 数值模拟

中图分类号: TU42 **文献标志码:** A **文章编号:** 1674-4764(2009)01-0120-05

Numerical Simulation of Groundwater Flow and Quality

CUI Zhen-dong^{1,2,3}, TANG Yi-qun², YAN Xue-xin¹, WANG Han-mei¹

(1. Shanghai Institute of Geological Survey, Shanghai 200072, P. R. China; 2. Department of Geotechnical Engineering, Tongji University, Shanghai 200092, P. R. China; 3. College of Civil Engineering, Hong Kong University of Science and Technology, Hong Kong 999077, P. R. China)

Abstract: With societal development, wastes exist in industry, agriculture and human life. In particular, a large volume of urban industrial sewage is discharged and pesticides and fertilizers are widely used, leading to groundwater pollution in many areas. Based on a water quality model of hydrodynamic dispersion and the multi-element balance (MEB) method, a general program for simulating groundwater flow and quality is carried out using the program VC++ for visual presentation. Using this program in a case study, the transportation mechanism of groundwater flow and quality is simulated numerically. The result indicates that the program is visual and can be manipulated well. It offers a point of reference for the reasonable exploitation, protection and utilization of the groundwater.

Key words: groundwater pollution; multi-element balance; numerical simulation

水资源是农业和人类赖以生存的基本物质条件之一, 随着社会的不断发展, 工业、农业和人类生活中的废弃物很多, 特别是城市工业废水的大量排放^[1-4], 农药化肥的广泛应用, 致使许多地区的地下水受到不同程度的污染^[5-11]。

地下水一般是在沙土这种多孔介质物质中存在

和运动的, 人们很早就开始研究这种运移规律^[12-14], 大量的实验观测都能说明, 水在沙土这种多孔介质物质中的运动, 可以分为由于水流体的分子运动引起的分子弥散及由于孔隙中流体速度分布不均匀引起的机械弥散两部分, 构成流体动力弥散, 被污染了的地下水在含水层中的分布运移是受弥散理论控制

收稿日期: 2008-10-18

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (40372124)

作者简介: 崔振东 (1978-), 男, 香港科技大学博士后, 主要从事土木工程与地质工程方面研究, (E-mail) czdjiaozuo@163.com。

的。因此,可以利用水质模型来计算解决地下水水质问题。

水动力弥散方程是复杂的非线性方程,只有在理想条件下才能求得解析解。实际的地下水水质问题几乎都要靠数值方法求解。本文采用多单元均衡法(MEB)^[15],利用 VC++^[16]编写地下水流与水质数值模拟通用程序,对地下水流与水质的输运机理进行数值模拟研究,对于合理开发、保护和利用水资源,保护生态环境,具有重大的理论意义和实际意义。

1 水污染运移的数学模型

1.1 水动力弥散的水质模型

水动力弥散的水质模型方程中包含水动力弥散系数、平均流速、流体密度及源汇项等输入参数。假设地下孔隙介质中水流动是均质的且为稳定的流动,按照宏观统计的观点及经典的 Darcy 定律,流体动力弥散水质模型的控制方程可表示为^[17]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} - CV_x) + \frac{\partial}{\partial y}(D_{xy} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} - CV_y) + \frac{\partial}{\partial z}(D_{xz} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{yz} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} - CV_z) + M \quad (1)$$

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(k \frac{\partial h}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(k \frac{\partial h}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(k \frac{\partial h}{\partial z}) + W \quad (2)$$

$$V_i = -k \frac{\partial h}{\partial i} \quad (3)$$

式中: C, h, V 分别为污染物质的浓度、地下水流动的稳定压头和平均速度; k 为地下孔隙介质渗透系数, D_{ij} 为流体动力弥散系数。

1.2 定解条件的确定

水流运动的定解条件

初始条件:

$$h(x, y, z, t) |_{t=0} = h_0 \quad (4)$$

边界条件:

$$h(x, y, z, t) |_{r_1} = h_1, \\ -\frac{\partial h(x, y, z, t)}{\partial n} |_{r_2} = q \quad (5)$$

污染物运移的定解条件

初始条件:

$$C(x, y, z, t) |_{t=0} = C_0 \quad (6)$$

边界条件:

$$C |_{r_1} = C_1 \\ D_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} + D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} + \\ D_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} + D_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} + D_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} + D_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} +$$

$$D_{zx} \frac{\partial C}{\partial z} - C(V_x + V_y + V_z) |_{r_2} = \\ C_0(V_x + V_y + V_z) \quad (7)$$

式中, h_0, h_1 分别为初始水头与边界水头值; q 为通量边界条件; C_0 为初始浓度, C_1 为边界条件处离子浓度。

1.3 数值解

方程(1)–(3)加上相应的定解条件(4)–(7),构成完整的煤矿矿坑污水排放对地下水污染运移的数学模型,只有在理想条件下才能求得解析解,实际的地下水污染运移问题几乎都要靠数值方法求解。本文采用多单元均衡法(MEB)^[6]进行数值求解,利用 VC++^[7]编写地下水流与水质数值模拟通用程序,对煤矿矿坑水排向河道对地下水污染的输运机理进行数值模拟研究。

2 通用程序结构

2.1 基本假设

解水流问题时,含水层可以是非均质的,也可以是各向同性的,解水质问题时设含水层各向同性;设 Darcy 定律近似成立;弥散系数近似与流速的一次方成正比,分子扩散可忽略不计;设温度基本保持恒定;没有考虑吸附、离子交换和化学反应的影响,但只要对源汇项稍加修改,这些影响也可以考虑在内。

2.2 程序结构

本程序由主程序和 7 个子程序构成:

1) 主程序:用于分配内存单元和调用子程序 FORM, MAINS;

2) 子程序 FORM:输入区域的几何形状和单元剖分的信息,并根据这些信息形成几个控制计算和内存的数组;

3) 子程序 COEFF:形成水流方程或水质方程的离散方程组的系数矩阵;

4) 子程序 VD:根据水头分布算出流速场分布和流体动力弥散系数的分布;

5) 子程序 WEIT:形成对各个结点的上游权系数;

6) 子程序 SNIM:求解水流方程和水质方程的离散方程组,得到水头分布和浓度分布;

7) 子程序 MAINS:输入问题的物理信息及计算参数,并根据问题的要求和条件调用子程序形成完整的求解过程;

8) 子程序 WRTC:控制打印的格式。

主程序和各个子程序间的调用关系如图 1 所示。

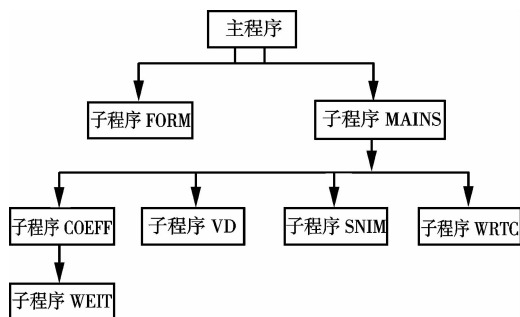


图 1 程序的总体结构

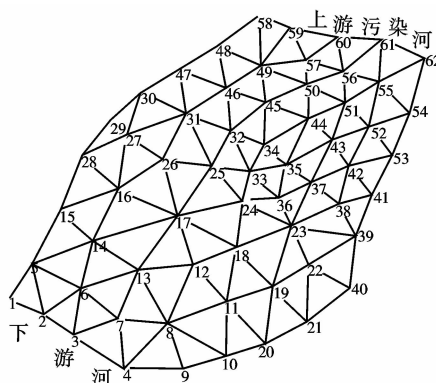


图 3 含水层的单元剖分和结点编号

2.3 可视化程序界面

本程序采用多单元均衡法(MEB),利用 VC++ 编写水流与水质数值模拟通用程序,人机对话界面友好,如图 2 所示。

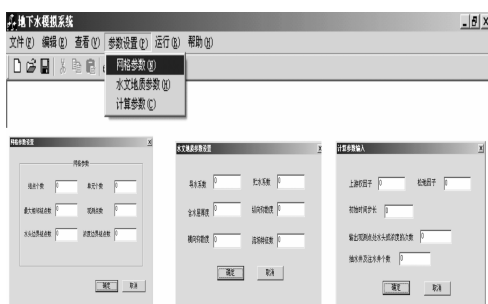


图2 地下水流与水质联合模拟通用程序对话框

3 算例

有一块河间地块,含水层的东边界和西边界是不透水边界,北边界和南边界是河流,河水位分别是 105 m 和 100 m。含水层中没有抽水井和注水井。由于南北边界的水头差,在含水层中形成了由北向南的稳定流场。

设由于某种原因,北边的河水遭到污染,其浓度为 10 g/m³。试模拟地下水被污染的过程并给出河水被污染 1 000 d 之后含水层中的污染质浓度分布图景。

所考虑的含水层及单元剖分、结点编号等见图 3,有关输入系数见表 1。

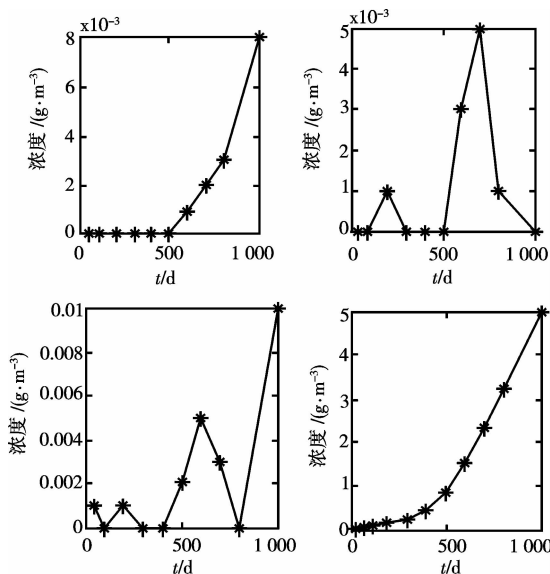
表 1 输入参数表

参 数	数 值
导水系数	1 000 m ² /d
贮水系数	0.1
含水层厚度	50 m
纵向弥散度	50 m
横向弥散度	15 m
流场特征数	1 或 0
上游权因子	0.04
松弛因子	1.1
初始时间步长	0.01
输出观测点处水头或浓度次数	10

利用联合通用程序对污染过程进行数值模拟,各结点的稳定水头分布如表 2 所示;并考察给定结点(结点 4、8、11、18、24、36、37、43、51、56 和结点 60)处污染浓度随时间的变化过程,如图 4 所示。河水被污染 1 000 d 之后含水层中的污染质浓度分布的图景如图 5 所示。

表 2 各结点稳定的水头分布

	1	2	3	4	5
1	100.000	100.000	100.000	100.000	100.557
2	100.642	100.632	101.180	101.150	101.656
3	101.887	101.855	101.327	101.258	101.387
4	101.923	102.118	102.298	102.283	101.998
5	102.344	102.621	102.801	102.703	102.779
6	102.477	102.396	101.997	102.421	102.803
7	103.001	103.226	102.958	103.335	103.270
8	102.942	103.262	103.209	102.980	102.638
9	103.442	103.606	103.780	103.875	103.780
10	103.584	103.258	103.888	104.143	104.266
11	104.239	104.094	103.922	104.358	104.458
12	104.575	104.573	105.000	105.000	105.000
13	105.000	105.000			



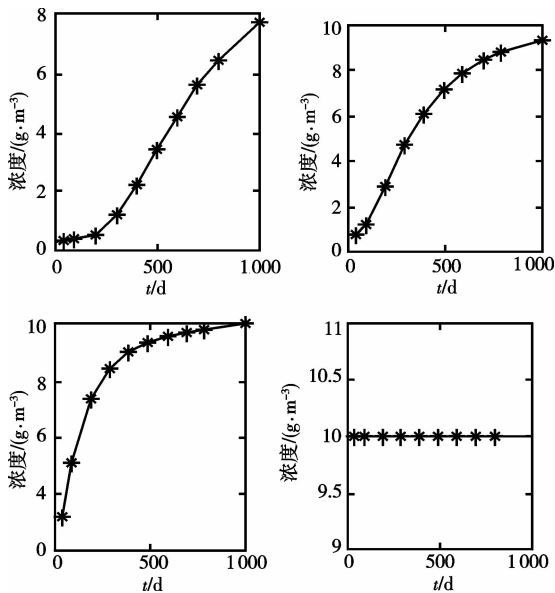


图 4 污染浓度随时间变化图

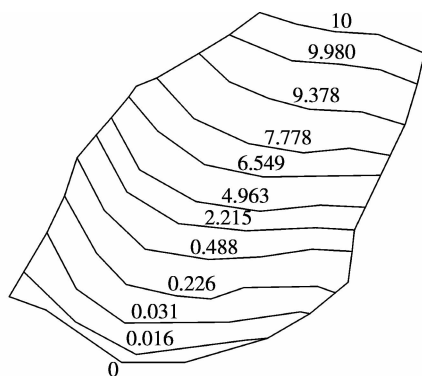


图 5 含水层污染 1 000 d 后污染质浓度分布图

4 结 论

采用多单元均衡法(MEB)编写的地下水流与水质数值模拟联合通用程序,对地下水流方程和对流—弥散方程进行离散,对于后者还包括上游加权。本程序能模拟稳定或非稳定流场中的物质输运现象。其特点是:

1) 离散方程组直接由单元均衡方法导出,能较好的保持局部和整体的质量守恒;

2) 解对流—弥散方程时能根据局部 Peclét 数的大小自适应地加上游权,既能有效地防止数值解的振动,又不过多地增加计算工作量;

3) 只存放离散方程组系数矩阵中的非零元素,最大限度地节省了计算机的内存空间;

4) 地下水流方程和水质方程采用同一子程序来解,使整个程序结构简练紧凑;

5) 便于和解逆问题的程序相配合解释各种野外试验和历史观测资料,求水文地质参数;也便于和最优管理程序相配合,解地下水资源管理问题;

6) 对离散方程组采用选点迭代解法,明显地提高了求解的速度,节省了计算工作量;

7) 采用 VC++ 语言编写,实现程序可视化,工作界面友好。

参考文献:

- [1] TARAZE E, RAJAB J, NAQA A, et al. Detecting leachate plumes and groundwater pollution at Ruseifa municipal landfill utilizing VLF-EM method[J]. Journal of Applied Geophysics, 2008, doi: 10.1016/j.jappgeo.2008.06.005.
- [2] FABIANO C, MARIO P. Waste management and problems of groundwater pollution in karst environment in the context of a post-conflict scenario[J]. Habitat International, 2008, doi: 10.1016/j.habitatint.2008.05.001.
- [3] AHMED S A, ALI M. Partnerships for solid waste management in developing countries: linking theories to realities[J]. Habitat International, 2008, 28: 467-479.
- [4] BARAN N, LEPILLER M, MOUVET C. Agricultural diffuse pollution in a chalk aquifer: influence of pesticide properties and hydrodynamic constraints[J]. Journal of Hydrology, 2008, doi: 10.1016/j.jhydrol.2008.05.031.
- [5] BRAN N, MOUVET C, NEGREL P. Hydrodynamic and geochemical constraints on pesticide concentrations in the groundwater of an agricultural catchment [J]. Environ. Pollut. 2007, 148: 729-738
- [6] BARBASH J E, THELIN G P, KOLPIN D W. Major herbicides in ground water: results from the national water quality assessment [J]. J. Environ. Qual., 2001, 30: 831-845.
- [7] CARABIAS R, RODRIGUEZ E, FERNANDEZ, et al. Evolution over time of the agricultural pollution of waters in an area of Salamanca and Zamora[J]. Water Recourse, 2003, 37: 928-938.
- [8] MORVAN X, MOUVET C, BRAN N, et al. Pesticide in the groundwater of a spring draining a sandy aquifer: temporal variability of concentrations and fluxes[J]. J. Contamin. Hydrol., 2006, 87: 176-190.
- [9] LAPWORTH D J, GOODDY D C. Source and persistence of pesticides in a semi-confined chalk aquifer of southeast England[J]. Environ. Pollut., 2006, 144: 1031-1044.
- [10] TARIQ M, AFZAL S, HUSSAIN I. Pesticide in shallow groundwater of Bahawalnagar, Muzafargarh, D. G. Khan and Rajan Pur districts of Punjab, Pakistan[J]. Environ. Int., 2004, 30: 471-479.
- [11] CHEN H, REN Z, LIU R, et al. Contamination

- characteristics and mechanism of groundwater movement in an oilfield in Northeast China[J]. *Earth Science Frontiers*, 2008, 15(4): 178-185
- [12] JACOB B. Dynamics of fluid in porous media[M]. New York: Elsevier, 1972.
- [13] 叶为民, 金麒, 等. 地下水污染试验研究进展[J]. *水利学报*, 2005, 36(2): 251-255.
YE WEI-MIN, JIN QI, et al. Review on advance in experimental study of pollution dispersion in groundwater [J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2005, 36(2): 251-255.
- [14] CHEVALIER L R, WALLACE R B. 2-D Experimental Investigation of Surfactant Mobilization of Light Nonaqueous Phase Liquid [J]. ASCE National Convention, Washington D. C., November 12-14, New York, ASCE, 1996, 357-368.
- [15] 黄军旗. 求解水动力弥散方程的多单元均衡法[J]. *水动力学研究与进展(A辑)*, 1990, 5(4): 19-26.
HUANG JUN-QI. A Method of Multi-element Balance for Solving Hydrodynamic Dispersion Equation [J]. *Journal of Hydrodynamics*, 1990, 5(4): 19-26.
- [16] 吕凤翥. C++语言基础教程[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
LV FENG-ZHU. C++ basic teaching book [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1999.
- [17] 薛禹群. 地下水动力学[M]. 北京: 地质出版社, 1997.
XUE YU-QUN. Dynamical Mechanics of Ground Water[M]. Beijing: Geology Press, 1997.
- (编辑 胡 玲)

(上接第 113 页)

- [2] 吴玉庭, 顾中焯, 马重芳, 等. U型管传热量影响因素的数值模拟研究[J]. *工程热物理学报*, 2007, 28(1): 116-118.
WU YU-TING, GU ZHONG-XUAN, MA CHONG-FANG, et al. Numerical study on the influencing factors on the heat transfer of the U-tube[J]. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2007, 28(1): 116-118.
- [3] 田慧峰. 垂直 U 形埋管换热器传热模型和设计方法[D]. 上海: 上海理工大学, 2006.
- [4] 谢汝镛. 地源热泵系统的设计[J]. *现代空调*, 2001, 3: 33-74.
XIE RU-YONG. Design method of Ground-source heat pump system[J]. *Modern Air Conditioning*, 2001, 3: 33-74.
- [5] 丁勇, 刘宪英, 胡鸣明等. 地源热泵系统实验研究综述[J]. *现代空调*, 2001, 3: 11-32.
- [6] 中华人民共和国建设部. GB50366-2005 地源热泵系统工程技术规范[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2005.
- [7] STEVE K. Design consideration for ground and water source heat pumps in southern climates[J]. *ASHRAE trans.* 1989, 95(1): 1139-1148.
- [8] 曲云霞. 地源热泵系统模型与仿真[D]. 西安: 西安建筑科技大学, 2004.
- [9] ARIF HEPBASLI. Thermodynamic analysis of a ground-source heat pump system for district heating[J]. *International Journal of Energy Research*, 2005, 29(7): 671-687.
- [10] DIAO NAI-REN, LI QIN-YUN, FANG ZHAO-HONG. Heat transfer in ground heat exchangers with groundwater advection [J]. *International Journal of Thermal Sciences*, 2004, 43(12): 1203-1211.
- [11] ONDER OZGENER, ARIF HEPBASLI. Experimental performance analysis of a solar assisted ground-source heat pump greenhouse heating system[J]. *Energy and Buildings*, 2005, 37(1): 101-110.
- [12] BURKHARD SANNER. Current status of ground source heat pumps and underground thermal energy storage in Europe[J]. *Geothermics*, 2003, 32(4): 579-288.
- [13] MUSTAFA NALL, IKMET ESEN. Experimental thermal performance evaluation of a horizontal ground-source heat pump system [J]. *Applied Thermal Engineering*, 2004, 24(14): 2219-2232.
- [14] HIKMET ESENNA, MUSTAFA INALLIB, MEHMET ESEN. Technoeconomic appraisal of a ground source heat pump system for a heating season in eastern Turkey [J]. *Energy Conversion and Management*, 2006, 47(9): 1281-1297.
- [15] ZENG HE-YI, DIAO NAI-REN, FANG ZHAO-HONG. Efficiency of vertical geothermal heat exchangers in the ground source heat pump system[J]. *Journal of Thermal Science*, 2003, 12(1): 77-81.
- (编辑 陈 蓉)