

# HYDRUS-1D 在基于过程的地下水污染评价中的应用

张博,孙法圣,王帆,涂江汉,周子庆,董菁菁

吉林大学环境与资源学院,长春 130021

**摘要** 包气带是污染质进入地下水必须经过的介质,对地下水的污染源强起到至关重要的作用。本文应用 HYDRUS-1D 模型模拟了污染物进入地下水前在包气带中的迁移转化过程,构建了基于过程的地下水污染评价方法。并以某尾矿库为例,进行了污染质在土壤-地下水系统运移模拟与污染评价的耦合研究。结果表明,使用基于过程的地下水污染评价方法与传统单一对地下水进行模拟预测评价的方法相比,能够较准确地反映地下水污染源强的时空变化过程。该理论完善了地下水污染预测评价的方法,为预防地下水污染提供了理论基础及实践指导。

**关键词** HYDRUS-1D;地下水污染;包气带;数值模拟

**中图分类号** X52

**文献标志码** A

**doi** 10.3981/j.issn.1000-7857.2013.17.006

## Application of HYDRUS-1D in the Process-based Evaluation of Groundwater Pollution

ZHANG Bo, SUN Fasheng, WANG Fan, TU Jianghan, ZHOU Ziqing, DONG Jingjing

College of Environment and Resources, Jilin University, Changchun 130021, China

**Abstract** Vadose zone is the important media that contaminant enters into the groundwater, and it plays a crucial role in the strength of pollution sources. HYDRUS-1D model is used to simulate the transportation processes of contaminant in the vadose zone before entering into the groundwater, a process-based evaluation system for groundwater pollution is built. By taking a tail pond as an example, a coupling study on the transportation simulation and pollution evaluation of the contaminant in the soil-groundwater system is conducted. The result shows that the impact assessment based on the process is able to reflect the temporal and spatial variation of the groundwater pollution sources more accurately than traditional groundwater quality impact assessment does. The theory perfects the theory of prediction and evaluation of groundwater pollution, provides a theoretical basis and practical guidance for the prevention of groundwater pollution.

**Keywords** HYDRUS-1D; groundwater pollution; vadose zone; numerical simulation

### 0 引言

地下水污染评价作为地下水合理开发、利用和保护的一项基础性工作,是制定地下水污染防治措施和地下水资源保护区划的重要手段。水文地质学者运用 FEFLOW<sup>[1]</sup>、FEMWATER<sup>[2]</sup>、GMS<sup>[3]</sup>、Visual MODFLOW<sup>[4]</sup>、MT3D<sup>[5]</sup>和 RT3D<sup>[6]</sup>等不同计算机软件和模型对污染质在地下水的迁移转化进行了模拟、预测和评价。许多学者,如谭文清、张春志、蒋任飞、王树芳<sup>[7-10]</sup>等使用 MODFLOW 对工程项目对地下水造成的污染进行了模拟预测,为减少工程项目对地下水造成的污染提供了可靠的参考依据。

地下水径流作为水循环的组成部分,和包气带、河流、湖泊等水体存在着紧密的水力联系。这些水体作为地下水的补排项或者边界条件,对地下水的水质变化起着至关重要的作用。包气带是污染质进入地下水必须经过的途径,污染质经过包气带时可能发生溶解、吸附或解析等物理化学过程,使得污染质进入地下水时,其浓度或化学成分与污水源强有较大差别。

然而,迄今为止绝大多数地下水污染预测评价中,还没有发现将土壤包气带-地下水作为一个整体进行评价,而是仅把地下水作为单独的个体进行模拟预测评价分析,忽视了

收稿日期:2013-01-19;修回日期:2013-03-06

作者简介:张博,副教授,研究方向为地下水污染模拟,电子信箱:hongmeizhangbo@163.com

污染质在包气带中的迁移转化对地下水的影 响。HJ 610-2011 地下水环境影响评价技术导则<sup>[1]</sup>也没有考虑这个问题。本文构建了基于过程的地下水污染评价方法,应用 HYDRUS-1D 模型模拟了污染物在包气带中的迁移转化,然后运用 MODFLOW 模型模拟污染质在地下水中的迁移转化,从而实现包气带和地下水污染预警与污染评价一体化。

### 1 研究区概况

该研究涉及的尾矿区地处山前冲洪积倾斜平原,地势西高东低,南、西、北三面环山,本区气候干旱,降水稀少,水文网不发育。该区有大型的有色冶金、化工联合企业,主要生产砷等稀有化工产品。目前废水总排量为 6239m<sup>3</sup>/d,排水中含砷(主要为砷酸根)等重金属离子,盐分以 SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> 为主。

根据尾矿区的钻孔资料,将包气带概化为一维非均质各向同性,包气带平均厚度约 74.7m,自上而下分别为卵石层、中粗砂层、卵石层、中粗砂层。废水经库底排入地下水,地下水类型为第四系松散岩类孔隙水,含水层岩性为单一大厚度砾卵石及砂砾石,含水层厚度 100~120m,地下水位埋深 60~90m。根据现场抽水试验,含水层渗透性较好,渗透系数约 100m/d。本区地下水的补给区位于金川河口(宁远堡)一带,补给源为大气降水和河水入渗补给,向北东方向径流,水力坡度 0.2%~0.3%,以侧向径流的方式排泄于下游的民勤盆地,人工开采也是地下水的排泄方式之一(开采量 0.8 亿~1.1 亿 m<sup>3</sup>/a<sup>[2]</sup>)。由于水库、渠道等引水工程的修建,补给带的补给量已大大减少。

尾矿库库底无回水系统和防渗系统,库区清液通过排水井、库底排水管及库外排水明渠排入库区下游取土坑中,靠自然蒸发和渗漏排泄。污染质经过包气带的过程中,由于包气带的吸附等作用,部分污染质被包气带截留,进入地下水的时 间也有所延滞。因此在本项地下水环境影响评价中,包气带的阻截作用作为重要的水文地质过程不可忽略。计算包气带的截留能力以及污染质穿透包气带的时间,以此为参考作为地下水污染的源强,比直接取污水排放强度作为地下水污染源强更为合理。

## 2 方法

### 2.1 废水在包气带中的迁移模拟

HYDRUS<sup>[3]</sup>是国际地下水模拟中心于 1999 年开发出的商业化软件,是一种用于分析水流和溶质在非饱和和多孔隙媒介中运移的环境数字模型,是用土壤物理参数模拟水、热及溶质在两维非饱和土壤中运动的有限元计算机模型。

#### 2.1.1 水动力学数学模型

水流控制方程采用修改的 Richards 方程的对流-弥散方程,采用迦辽金有限元法进行数值求解。水分运动基本方程

$$\frac{\partial \theta(h,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ K(h) \left( \frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \right] - S \quad (1)$$

$$\theta_e = \frac{\theta(h) - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} = (1 + |ah|)^{-m} \quad (2)$$

$$K(\theta) = K_s \theta_e \left[ 1 - \left( 1 - \theta_e^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (3)$$

其中,  $h$  为负压水头;  $\theta$  为包气带体积含水率,是  $h$  的函数;  $K$  为水力传导系数,在非饱和带中是体积含水率  $\theta$  或负压水头  $h$  的函数;  $S$  为根系吸水项,在本例中为 0;  $\theta_e$  为包气带有效含水率;  $\theta_r$  为包气带残余含水率;  $\theta_s$  为包气带饱和含水率;  $K_s$  为渗透系数;  $n, m$  和  $a$  均为经验参数。初始条件与边界条件为

$$\begin{cases} h(z, 0) = h_0(z) \\ -K \left[ h \left( \frac{\partial h}{\partial z} \right) - 1 \right]_{z=0} = -\varepsilon_1 \\ h(l, 0) = 0 \end{cases} \quad (4)$$

其中,  $z$  为空间坐标,原点在地面,向下为正;  $h_0$  为初始包气带剖面负压值,由含水率算得;  $\varepsilon_1$  为库底补给强度;  $l$  为地下水埋深。

#### 2.1.2 水质迁移转化的数学模型

污染质运动基本方程为

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \theta D \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial(\bar{q}c)}{\partial z} - \lambda_1 \theta_c - \lambda_2 \rho_0 s = \frac{\partial \theta_c}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_0 s)}{\partial t} \quad (5)$$

其中,  $D$  为水动力弥散系数;  $c$  为土壤溶液中污染质浓度;  $s$  为被吸附的固相浓度;  $\bar{q}$  为土体中水的流速;  $\rho_0, \rho_b$  为流体密度;  $\lambda_1, \lambda_2$  为经验常数,与包气带土壤质地和结构有关。

初始条件与边界条件为

$$\begin{cases} c(z, 0) = c_0(z) \quad z \geq 0 \quad (\text{初始条件}) \\ \left( -D \frac{\partial c}{\partial z} + \varepsilon_1 c \right)_{z=0} = 0 \quad (\text{第二类边界条件}) \\ c(z, t)_{z=l} = c_d \quad (\text{下边界条件}) \end{cases} \quad (6)$$

其中,  $c_0$  为初始土壤剖面污染质浓度分布;  $c_m$  为土壤溶液污染质饱和浓度;  $c_d$  为地下水中的污染质浓度。

## 2.2 污染组分在地下水中的迁移模拟

### 2.2.1 水动力学模型

满足于该尾矿区水文地质概念模型的数学模型为

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial h^*}{\partial y} \right) - W = \mu \frac{\partial h^*}{\partial t} \\ h^*(x, y, t) |_{\Sigma_1} = h_1^*(x, y) \quad x, y \in \Sigma_1 \\ \frac{\partial h^*}{\partial n} |_{\Sigma_2} = q(x, y) \quad x, y \in \Sigma_2 \\ h^*(x, y, 0) = h_0^*(x, y) \quad x, y \in \Omega \end{cases} \quad (7)$$

其中,  $h^*$  为地下水水头;  $K_x, K_y$  为  $x, y$  方向渗透系数;  $h_1^*$  为含水层第一类边界水头;  $h_0^*$  为初始水头;  $q$  为含水层第二类边界流量;  $W$  为源汇项强度(包括开采强度等);  $\Sigma_1, \Sigma_2$  为含水层第一类、二类边界;  $\Omega$  为研究区。

#### 2.2.2 水质模型

地下水中溶质运移的二维对流-弥散模型为

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} \\ C(x, y, 0) = C_0 \\ C(x, y, t) = C_1(x, y, t) \quad x, y \in \Gamma_1 \end{cases} \quad (8)$$

其中,  $D_L, D_T$  分别为地下水纵、横向往弥散系数;  $u$  为地下水渗透

流速;  $C_0$  为地下水某一组分的初始浓度;  $C_1$  为第一类边界上某一组分的浓度。

联合求解方程可得到污染质的运移结果。

### 2.3 模型参数的确定

为了对污染质在包气带及地下水中的迁移进行模拟,需要对各参数进行赋值。主要参数经实际测量及参考文献[14]、[15]中获得。本文就具有代表性的总 As(主要为砷酸根)、 $SO_4^{2-}$  进行了研究。根据分析室内实验结果,As 的吸附符合 Langmuir 等温曲线。结合野外观测数据,参考关于多孔介质竞争吸附多种重金属离子能力的文献[16]和[17],确定等温吸附常数  $K_d$ 。模型主要参数如表 1 所示。

表 1 土壤水分运动参数和溶质运移参数

Table 1 Soil water movement parameters and solute transport parameters

介质	$\theta_r$	$\theta_s$	$a/cm^{-1}$	$n$	$K_d/(cm \cdot d^{-1})$	$D/cm$	$K_d/(mg \cdot kg^{-1})$
卵石层	0.045	0.43	14.5	2.68	250	7.5	3
中粗砂	0.057	0.41	12.4	2.28	10	7.5	3

### 3 结果与讨论

根据中试实验中重金属浸出试验数据实验数据,尾矿粉浸出总砷(主要为砷酸根)浓度为 0.275mg/L,因此模拟中总砷的源强为 0.275mg/L,此浓度达不到 GB/T 14848—93 地下水环境质量标准<sup>[8]</sup>中 As 的 III 类水标准(0.05mg/L)。日渗入量为 0.001m/d,As 在还原环境中易迁移,将对包气带和地下水造成一定的影响。当尾矿库运行 21 年后,As 可以穿透包气带层,在第 30 年的时候,进入地下水中的总 As 浓度为 0.1mg/L,超出地下水环境质量的 5~6 倍,对地下水水质造成一定影响。模拟结果如图 1 所示。

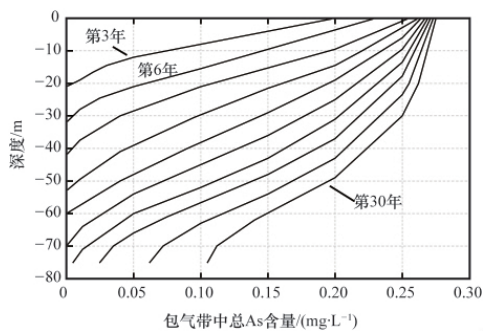


图 1 包气带中 As 离子在未来 30 年的垂向浓度分布  
Fig. 1 Vertical concentration distribution of As ions in vadose zone for coming 30 years

根据尾矿浸出实验数据,尾矿库排出废水中硫酸根浓度达 2271mg/L,入渗率为 0.001m/d。砂和卵石对硫酸根的吸附作用很小,等温吸附常数取偏大值,如 1.0L/kg,在此源强下,包气带将在 3 年内被硫酸根穿透,在 10 年内对硫酸根的吸附能力达到饱和。尾矿浆中的硫酸根将几乎全部进入地下水,对地下水造成影响。模拟结果如图 2 所示。

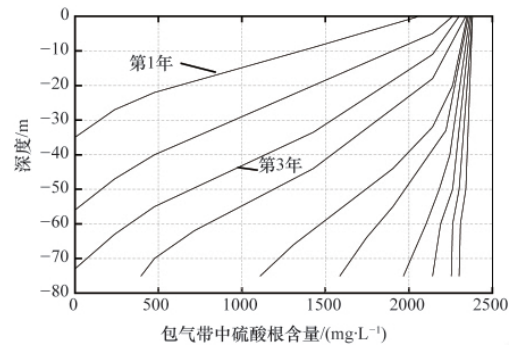


图 2 包气带中  $SO_4^{2-}$  在未来 10 年的垂向浓度分布  
Fig. 2 Vertical concentration distribution of  $SO_4^{2-}$  in vadose zone for coming 10 years

根据包气带模拟结果,(1) As 经过 21 年穿透包气带,进入到地下含水层中迁移扩散;(2)  $SO_4^{2-}$  经过 3 年穿透包气带,进入到地下含水层中迁移扩散。以此为源强,建立污染质在地下水中的运移扩散模型。

图 3 和图 4 分别为模拟预测计算出的 As 和  $SO_4^{2-}$  在地下水中的污染组分等值线。利用所建立的模型计算出:As 在进入含水层 5 年后,扩散面积为 6.44km<sup>2</sup>,污染范围内最大浓度为 0.031mg/L,但由于地下水的稀释作用,地下水中的 As 浓度一直低于地下水质量 III 级标准(0.05mg/L); $SO_4^{2-}$  在进入含水层 5 年后污染范围为 6.16km<sup>2</sup>,导致 13.19km<sup>2</sup> 的地下水超标(浓度大于 350mg/L),纵向最大污染距离 2.8km。

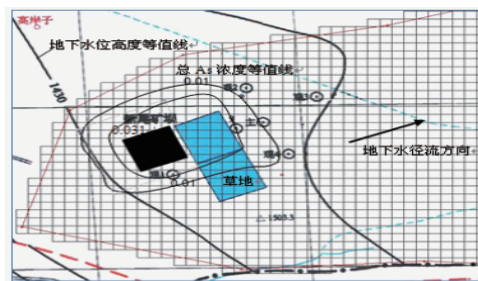


图 3 As 进入含水层 5 年后的模型计算结果示意(单位:mg/L)  
Fig. 3 Model computing result of As entering the aquifer after five years (unit: mg/L)

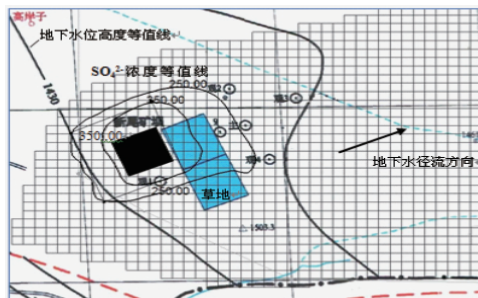


图 4  $SO_4^{2-}$  进入含水层 5 年后的模型计算结果示意(单位:mg/L)  
Fig. 4 Model computing results of  $SO_4^{2-}$  entering the aquifer after five years (unit: mg/L)

#### 4 结论

本研究从土壤包气带-地下水系统出发,运用HYDRUS-1D分别模拟了As、SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>在包气带中的迁移过程。通过模拟和计算,可见本区包气带对污染物虽然具有一定的吸附阻截能力,但不能无限制地对污染质进行阻截;运用MODFLOW对污染质在地下水中迁移进行模拟,可知该区污染晕扩展速度较慢,这主要是由于本区地下水交替条件好,废水进入地下含水层后会产生稀释扩散作用,不会造成大范围地下水污染物含量的升高。建议在尾矿库底部修建防渗层,增大污水蒸发量,以防止污染质对地下水的污染。这种基于过程的地下水污染预测方法与传统单一对地下水进行模拟预测评价的结果相比,能够较准确地反映地下水污染发生时的源强和污染发生的时间。

#### 参考文献 (References)

- [1] 徐艳杰, 常利武, 黄会平. FEFLOW在地下水数值模拟中的应用[J]. 华北水利水电学院学报, 2009, 30(2): 86-88.  
Xu Yanjie, Chang Liwu, Huang Huiping. North China Water Conservancy and Hydropower College, 2009, 30(2): 86-88.
- [2] 施小清, 姜蓓蕾. FEMWATER在地下水流数值模拟中运用[J]. 工程勘察, 2008(4): 27-29.  
Shi Xiaoqing, Jiang Beilei. Engineering Survey, 2008(4): 27-29.
- [3] Zheng C M, Hill M C, Hsieh P A. MODFLOW-2000, The U.S. geological survey modular ground-water model—user guide to the LMT6 package, the linkage with MT3DMS for multi-species mass transport modeling[R/OL]. [2012-10-31]. <http://water.usgs.gov/nrp/gwsoftware/modflow2005/ofr01-82.pdf>.
- [4] Haitjema H, Kelson V, de Lange W. Selecting MODFLOW cell sizes for accurate flow field[J]. Ground Water, 2001, 39(6): 931-938.
- [5] Zheng C M, Wang P P. MT3DMS: A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems [R/OL]. [2012-10-31]. <http://extras.springer.com/2005/978-3-540-27590-9/Document/mt3dms/mt3dms.pdf>.
- [6] Clement T P, Jones N J. RT3D Tutorials for GMS Users[EB/OL]. [2012-10-31]. <ftp://ftp.stru.polimi.it/incoming/castellanza/research/contaminant/zheng/visualizer/DOCS/RT3DTUT.PDF>.
- [7] 谭文清, 孙春. GMS在地下水污染质运移数值模拟预测中的应用[J]. 东北水利水电, 2008, 26(286): 54-57.  
Tan Wenqing, Sun Chun. Water Resources and Hydropower of Northeast, 2008, 26(286): 54-57.
- [8] 张春志. MODFLOW在地下水水源水质预测中的应用[J]. 地下水, 2007, 29(1): 61-64.  
Zhang Chunzhi. Groundwater, 2007, 29(1): 61-64.
- [9] 蒋任飞. 石嘴山市地下水水质模型的研究及应用[D]. 西安: 西安理工大学, 2004: 1-7.  
Jiang Renfei. The research and application of groundwater quality model in Shizuishan city[D]. Xi'an: Xi'an University of Technology, 2004: 1-7.
- [10] 王树芳, 王丽亚. 溶质迁移模型在地下水有机污染源识别中的应用[J]. 环境科学, 2012, 33(3): 761-768.  
Wang Shufang, Wang Liya. Environmental Science, 2012, 33(3): 761-768.
- [11] 环境保护部 HJ 610—2011 环境影响评价技术导则 地下水环境[S]. 北京: 中国环境科学出版社, 2011.  
The Environmental Protection Department of the People's Republic of China. HJ 610—2011 Environmental impact assessment guide: Groundwater environment [S]. Beijing: China Environmental Science Press, 2011.
- [12] 郭玉虎. 甘肃省金昌市区域水文地质调查报告[R]. 兰州: 甘肃省地质调查院, 2011.  
Guo Yuhu. Regional hydrogeological investigation report of Jinchang city, Gansu province [R]. Lanzhou: Geological Survey Institute of Gansu Provincial, 2011.
- [13] Simunek J M, Sejna T, van Genuchten M T. HYDRUS-2D simulating water flow, heat, and solute transport in two-dimensional variably saturated media[M]. Calif: International Ground Water Modeling Center, Riverside, 1999.
- [14] 李国敏, 陈崇希. 空隙介质水力弥散尺度效应的分形特征及弥散度初步估计[J]. 中国地质大学学报, 1995, 20(4): 406-409.  
Li Guomin, Chen Chongxi. China University of Geosciences, 1995, 20(4): 406-409.
- [15] 王大纯, 张人权, 史毅虹, 等. 水文地质学基础[M]. 北京: 地质出版社, 2006.  
Wang Dachun, Zhang Renquan, Shi Yihong, et al. The Basis of the Hydrogeological[M]. Beijing: Geological Press, 2006.
- [16] 纪书华. 多孔介质中重金属反应性运移的数值模拟研究[D]. 青岛: 青岛大学, 2009: 36-40.  
Ji Shuhua. Numerical simulation of reactive transport of heavy metals in porous media[D]. Qingdao: Qingdao University, 2009: 36-40.
- [17] 孟昭福. Cu/Zn复合条件下Cd在陕西5种土壤中的吸附[J]. 农业环境科学学报, 2011, 30(1): 71-77.  
Meng Zhaofu. Agro-Environment Science, 2011, 30(1): 71-77.
- [18] 国家技术监督局. GB/T 14848—93 地下水质量标准[S]. 北京: 中国标准出版社, 1993.  
State Bureau of Technical Supervision. GB/T 14848—93 Quality standard for ground water [S]. Beijing: China Standards Press, 1993.

(责任编辑 刘志远)

#### 《科技导报》征集“封面文章”

为快速反映我国最新科技研究成果,《科技导报》拟利用刊物最显著位置——封面将最新科研成果第一时间予以突出报道。来稿要求:研究成果具创新性或新颖性;反映该领域我国乃至世界前沿研究水平;可以图片形式予以反映,图片美观、清晰、分辨率超过300dpi;文章篇幅不限,要说明研究的背景、方法、取得的结果,以及结论。在线投稿:www.kjdb.org。