

MT3D—通用的三维地下水污染物运移数值模型

朱玉水¹, 段存俊²

(1. 福建莆田市涵江区环境保护局, 福建 莆田 351111; 2. 南京勘察工程公司, 江苏 南京 210000)

摘要:定量研究污染物在地下水中的运移过程通常采用数值模拟方法。MT3D是一套基于有限差分方法的污染物运移模拟软件,近年来在国外水文地质和水环境模拟等领域的研究中已经得到较为广泛的认可。MT3D比较全面地考虑了污染物在地下水中的对流、弥散和化学反应等过程,可以灵活处理各种复杂的源汇项和边界条件,能够准确模拟承压、无压和越流含水层中的污染物运移过程。MT3D具有模块化的程序结构、灵活的求解方法以及全面的模拟功能,非常适合实际问题的研究,值得在国内推广使用。

关键词:地下水;数值模拟;运移模型;MT3D

中图分类号:P641.2 **文献标识码:**B **文章编号:**1000-2251(2005)01-026-04

水作为一种极其重要的资源,在经济和社会发展中具有重要的战略价值。由于地表水资源分布很不均衡而且容易受到污染,地下水资源的开发、利用和保护研究被提到了日益重要的地位。近几十年来,由于工农业生产的发展、环境污染的预测和防治、新能源的开发利用、核废料的贮存等方面的需要,对地下水运动的研究已经越来越深入。除了地下水资源的定量评价外,越来越多的研究涉及到地下水中污染物的运移以及污染含水层的治理等问题。同时,由于计算方法的长足进步和高性能计算机的广泛采用,在解决实际生产问题时,越来越多地采用了数值模拟方法(朱学愚等,1990)。近年来,Zheng(1990)开发了一套用于模拟污染物在地下水中运移的三维有限差分计算程序——MT3D,逐渐引起国外水文地质工作者的重视,目前已经成为污染物运移模拟领域事实上的标准。MT3D能灵活有效地处理各种源汇项和边界条件,适用于承压、无压以及承压—无压含水层中的污染物运移问题。MT3D中包括多种求解算法可供选择,因此特别适合实际问题的研究。

1 MT3D的基本方程和主要功能

MT3D是英文Modular 3-Dimensional Transport model(模块化的三维运移模型)的简称。MT3D采

用了对流—弥散方程来描述污染物在三维地下水流中的运移,即

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial C}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (v_i C) + \frac{q_i}{\theta} C_s - \lambda (C + \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C}) \quad (1)$$

式中, C 是溶解于水中的污染物的浓度, ML^{-3} ; R 是阻滞因子,无量纲; t 是时间, T ; x_i 是空间坐标, L ; D_{ij} 是水动力弥散系数张量, $L^2 T^{-1}$; v_i 是地下水渗透流速, LT^{-1} ; q_i 是源(正值)或汇(负值)的单位流量, T^{-1} ; C_s 是源或汇的浓度, ML^{-3} ; θ 是孔隙度,无量纲; λ 是一阶反应速率常数, T^{-1} ; ρ_b 是多孔介质的比重, ML^{-3} ; $\bar{C}$ 是吸附在介质上的污染物浓度, MM^{-1} 。式(1)的等号右端从左至右依次为弥散项、对流项、源汇项和化学反应项。

求解式(1)中的对流—弥散方程需要首先确定地下水渗透流速。根据Darcy定律,有

$$V_i = - \frac{K_{ii}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (2)$$

式中, K_{ii} 是渗透系数的主轴分量, LT^{-1} ; h 是地下水位, L 。地下水位可以通过求解三维地下水流动方程来得到,即

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_{ii} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (3)$$

式中, S_s 是多孔介质的贮水率, L^{-1} 。MT3D中实际上并没有包括求解地下水流动方程的子程序,而是利用另外一种常用的地下水流动计算软件—MODFLOW (McDonnld et al., 1988)的输出结果来获得地下水

收稿日期:2004-02-06

作者简介:朱玉水(1970—),男,助理工程师,主要研究方向为地表水与地下水污染防治。

位资料。

MT3D 可以用来模拟可溶性污染物在地下水中的对流、弥散、扩散作用和一些基本的化学反应过程,能够有效处理各种边界条件和外部源汇项。模型中的化学反应主要是一些比较简单的单组分反应,包括平衡或非平衡状态的线性或非线性吸附作用、一阶不可逆反应(如生物降解等)和可逆的动态反应等。MT3D 能够适用于各种水文地质条件,包括:(1)承压、无压或承压—无压含水层;(2)倾斜或厚度变化的含水层;(3)指定浓度或通量边界条件;降水、蒸发、抽水井、河流等多种外部源汇项。

2 MT3D 的模块结构

MT3D 是用 FORTRAN77 语言编写的,采用了模块化的结构。程序中对流项、弥散项、源汇项和

反应项以及其它的一些功能分别用不同的子程序包(package)来实现。这样做的好处在于,可以独立地模拟上述几种不同的过程,而不必为没有用到的功能分配内存,从而提高程序运行的效率。同时,模块化的程序结构也便于在不改动已有代码的基础上进行程序的维护和新功能的添加。MT3D 中包含的子程序包及其功能见表 1。其中,基本运移子程序包和水流模型子程序包是每次模拟时都需要的,而对流、弥散、源汇项和化学反应子程序包则视具体的问题而定。实际上,近几年来人们已经在最初版本的 MT3D 基础上进行了很大的改进,如 Zheng 等(1999)添加了新的 TVD 求解子程序包和多组分化学反应模拟功能;Clement(1997)根据 MT3D 编写了模拟地下水中复杂化学反应的 RT3D 软件。

表 1 MT3D 软件中的子程序包及其功能描述

Tab. 1 Packages included in MT3D and description of its function

子程序包名称	英文名称及其缩写	主要功能
基本运移子程序包	Basic Transport package (BTN)	处理整个模拟中需要的基本数据
水流模型接口包	Flow Model Interface (FMI)	读取水流模型计算得到的地下水位资料
对流子程序包	Advection package (ADV)	模拟对流作用引起的污染物浓度变化
弥散子程序包	Dispersion package (DSP)	模拟弥散作用引起的污染物浓度变化
源汇项子程序包	Source & Sink Mixing (SSM)	模拟源汇项(如抽水井等)引起的污染物浓度变化
化学反应子程序包	Reaction package (RCT)	模拟化学反应(如生物降解等)引起的浓度变化
实用工具子程序包	Utility package (UTL)	处理数组的输入和输出等

3 对流—弥散方程的求解方法

MT3D 采用块中心的有限差分网格来对研究区进行离散,其节点位于每个网格的中心。在计算时,首先采用某种地下水流数值模型(如 MODFLOW)确定研究区各节点上的水头,然后将水头作为 MT3D 的输入数据,通过求解对流—弥散方程即可得到污染物浓度在这些节点上随时间的变化规律。

对流—弥散方程的求解关系到结果的精度和可靠性,是数值模拟中最为关键的步骤。用来求解对流—弥散方程的数值方法通常可以分为三类,即 Euler 方法、Lagrange 方法和混合 Euler-Lagrange 方法。Euler 方法采用固定的网格来求解污染物运移方程,常用的有限差分法和有限单元法都属于 Euler 方法。这种方法对于弥散作用占优势的运移问

题求解效率很高,但是在常见的对流作用占优势问题的研究中,会产生数值弥散或数值振荡,必须通过加密的网格和很小的时间步长来消除其影响。Lagrange 方法则采用变形的网格或变形的坐标系来研究污染物的运移过程,即使是对流占绝对优势的运移问题也可以得到精确的解。不过,由于没有固定的网格,对具有多个源汇项和复杂边界条件的非均质问题,Lagrange 方法可能会导致求解不稳定和其它数值困难。混合 Euler-Lagrange 方法则综合了上述两种方法的长处,即采用 Lagrange 方法求解对流项的贡献,而采用 Euler 方法求解弥散项和反应项的贡献,有效地消除了单独采用上述方法时遇到的数值困难(Zheng,1990)。

MT3D 中采用了混合 Euler-Lagrange 方法来求解对流弥散方程。弥散项的求解采用常规的有限差分方法,而对流项的求解则采用所谓的特征线方

法(method of characteristics)。MT3D 中共有三种特征线方法可供选择,即质点向前追踪特征线方法(MOC)、向后追踪特征线方法(MMOC)以及二者的结合——混合特征线方法(HMOC)。MOC 方法适合于浓度锋面问题的求解,但是对于一个实际的问题往往需要追踪大量的质点,这会导致内存占用很大,求解效率很低。MMOC 方法不需要追踪大量的质点,计算效率远远高于 MOC 方法,但是在求解浓度锋面问题时会引入数值弥散,影响求解的精度。HMOC 方法则结合了二者的优点,即在浓度锋面位置附近使用 MOC 方法,而在其它位置使用 MMOC 方法求解,这既提高了计算的效率,又保证了求解的精度。在程序中包含了多种对流—弥散方程的求解方法使得 MT3D 程序能够适用于不同的地下水流动场条件,这是 MT3D 的一个最主要的特色,同时也是它被广泛认可的一个很重要的原因。

图 1 中是对一个均匀流场中连续点源问题的模拟结果(Zheng, 1990),其中地下水渗透流速为 0.33 m/d,纵向弥散度为 10 m,横向弥散度为 3 m,孔隙度为 0.3,连续点源的注入流量为 $1 \text{ m}^3/\text{d}$,注入浓度为 1000×10^{-6} 。对流弥散方程的求解采用 HMOC 方法。图 1 是模拟时间为 365 d 时地下水中污染物浓度的等值线与解析解的对比。可以看出,MT3D 的模拟结果与解析解十分吻合。

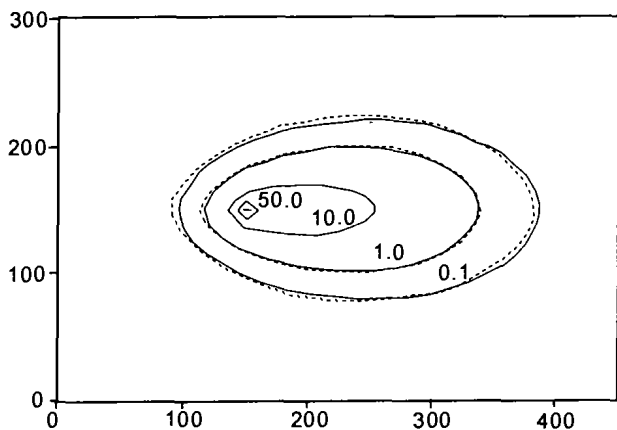


图 1 均匀流场中连续点源问题的模拟结果(虚线)与解析解(实线)的对比(Zheng, 1990)

Fig. 1 Comparison of analytic (solid line) and numerical (dashed line) solutions for two-dimensional transport from a continuous point source within a uniform flow field (Zheng, 1990)

4 MT3D 的输入和输出

MT3D 需要的输入数据是通过不同的数据文件

来读取的。这些文件的数据输入格式有严格的要求。在研究一个实际问题时,需要特别注意输入数据的格式是否符合 MT3D 的要求。这是一个十分烦琐的过程。MT3D 输出计算浓度的格式和频率由用户给定。为了节省存储空间,不同时刻污染物的浓度作为一个二进制文件保存在磁盘上。因此,无法用字处理软件直接读取和处理。MT3D 程序包中有一个实用程序(PM)可以用来读取指定时刻的浓度并保存为文本文件,便于制图和输出。近些年来,已经出现许多商业软件专门用于 MT3D 的数据输入和模拟结果的处理,比较著名的有加拿大 Waterloo 水文地质公司的 Visual Modflow、美国 BOSS 公司的 Groundwater Modeling System 以及 Processing MODFLOW 软件等。这些软件都具有可视化的操作环境,有些还具有地理信息系统的接口,使用这些软件可以完成从数据输入、模型运算到结果图形输出的全过程,极大地提高了污染物运移模拟工作的效率。

5 结语

作为一套通用的污染物运移模拟程序,MT3D 已经得到大量实际应用的验证和包括司法机关在内的许多国外机构的认可,成为该领域研究中事实上的标准,因此值得在国内水文地质领域内推广使用。在利用 MT3D 解决实际问题的过程中,广大水文地质工作者也可以不断总结经验,对 MT3D 作进一步的改进和提高。这必将大大增强我国水文地质工作者的模型应用能力和解决实际生产问题的能力,为地下水环境的保护和管理提供科学的保障。

参考文献

- 朱学愚, 谢春红. 1990. 地下水运移模型[M]. 中国建筑工业出版社.
- Clement T P. 1997. RT3D, A modular computer code for simulating reactive multi-species transport in 3-dimensional groundwater aquifers, Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington.
- McDonald M D, Harbaugh A W. 1988. A modular three-dimensional finite-difference flow model. Techniques of Water Resources Investigations of the U. S. Geological Survey, Book 6.
- Zheng C. 1990. MT3D, A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. Report to the U. S. Environmental Protection Agency, Robert S. Kerr Environmental Research

Laboratory, Ada, OK.

Zheng C, Wang P P. 1999. MT3DMS: A modular three-dimensional multi-species transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater sys-

tems: documentation and user's guide. Contract Report SERDP-99-1, U. S. Army Engineer Research and Development Center, Vicksburg, MS.

MT3D, A3D Transport Model for Simulating Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Ground Water

ZHU Yu-shui¹, DUAN Cun-jun²

(1. Environmental Protection Bureau of Hanjiang District, Putian, FJ 351111, China; 2. Nanjing Exploration Engineering Company, Nanjing, JS 210000, China)

Abstract: In recent years, numerical methods are routinely used to simulate various processes of contaminant transport in ground water systems. MT3D is a modular three-dimensional finite-difference FORTRAN program developed for field-scale transport problems, which has gained extensive recognition by hydrogeologists and environmental experts abroad. MT3D takes into account major transport processes such as contaminant advection, dispersion and chemical reactions, and it deals with complex source/sink terms and various boundary conditions. Transport within confined, unconfined and leaky (semi-confined) aquifer systems are also accommodated by the simulation code. The modular program structure, flexible solution schemes, and general simulation capacity makes MT3D an ideal tool for simulating contaminant transport in ground water at field scale.

Key Words: ground water; numerical methods; Transport model; MT3D