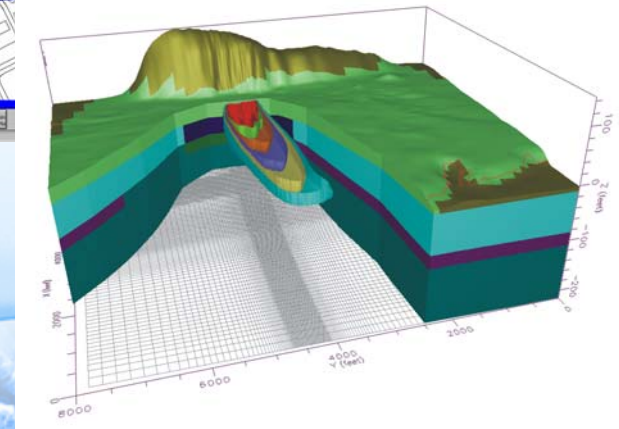
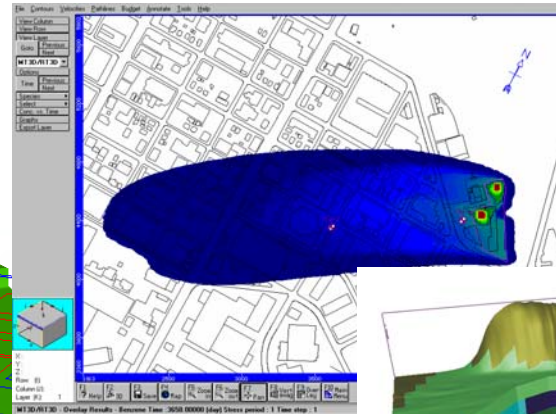
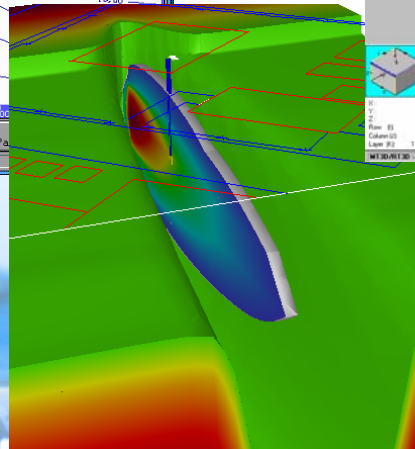
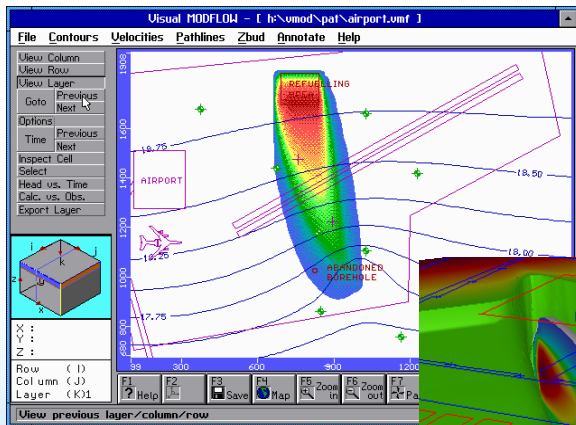


污染运移模拟(MT3D)的原理及应用

王旭升 博士



目 录

1. 可溶污染物的迁移机理
2. 污染运移的数学模型及参数
3. 对流-弥散-反应模型**MT3D**
4. **MT3D**的应用

1. 可溶污染物的迁移机理

****基本点:**

可溶污染物以水为载体在地下迁移，并和其它可溶物质、岩土发生化学反应。

污染物有自然衰减、降解的趋势 —— 随着迁移距离和迁移时间的增加，浓度逐渐降低。

迁移路径强烈的受到含水层介质非均匀性的影响。

一般不适合使用稳定态概念，但可存在平衡态。

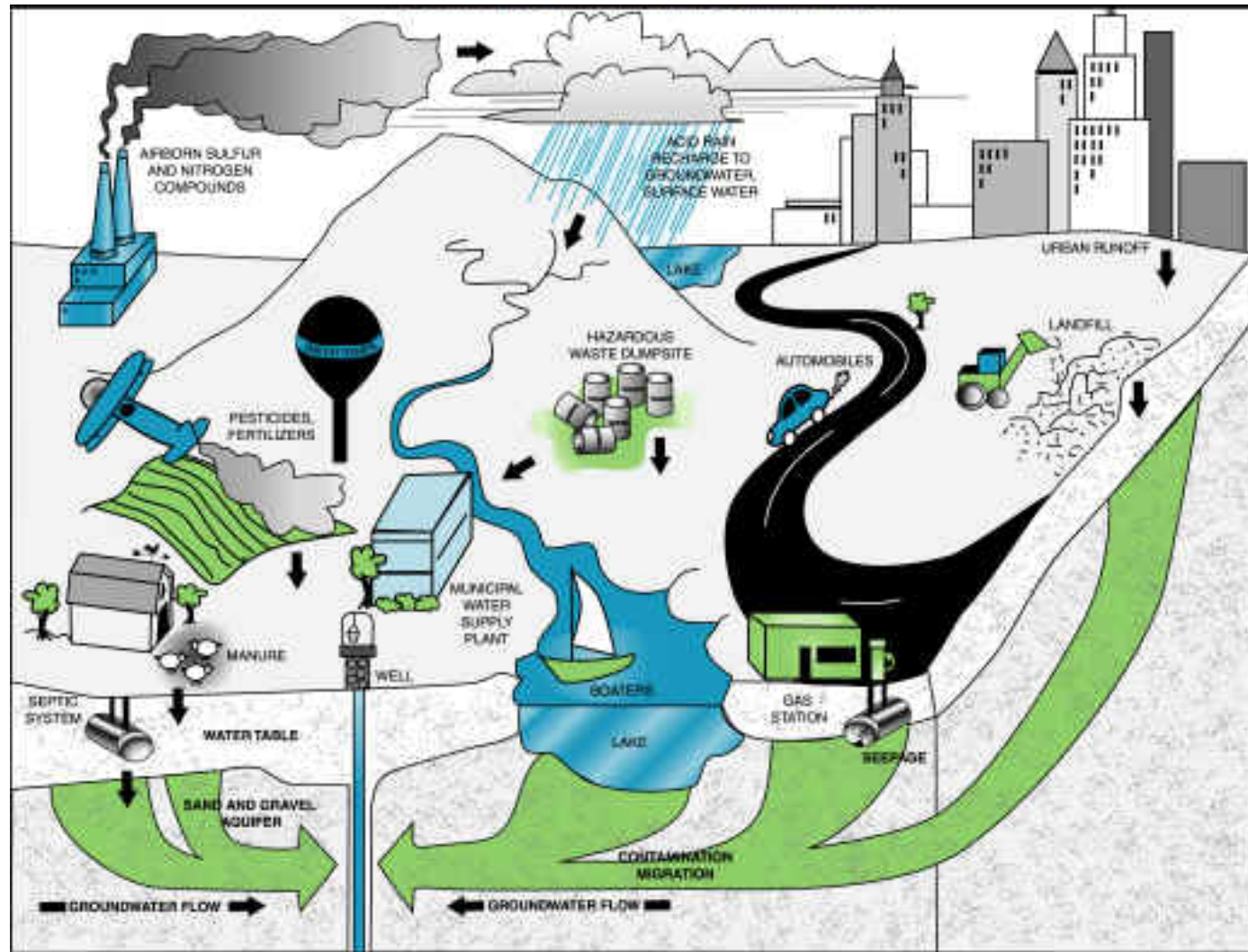
1. 可溶污染物的迁移机理

●污染源

- (1) **点源**: 污染源的面积相对研究尺度很小, 垃圾填埋场、加油站、核废料等;
- (2) **线源**: 条带状的污染源, 排污河沟等;
- (3) **面源**: 污染源面积很大, 耕地农田。

1. 可溶污染物的迁移机理

●污染源



1. 可溶污染物的迁移机理

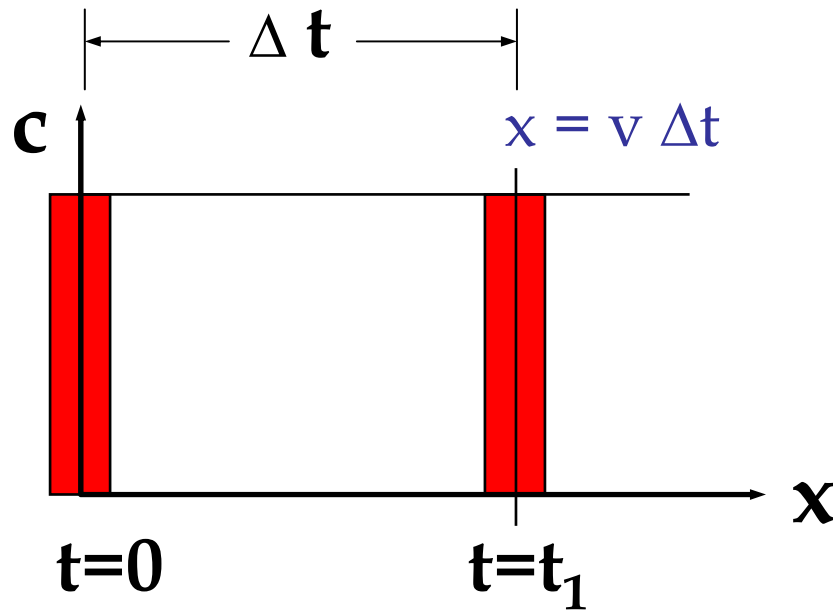
● 3种迁移转化方式

- (1) 对流：被水携带，以水流速度迁移
- (2) 弥散：机械弥散和分子扩散
- (3) 反应：吸附、放射性衰变、组分反应、生物降解

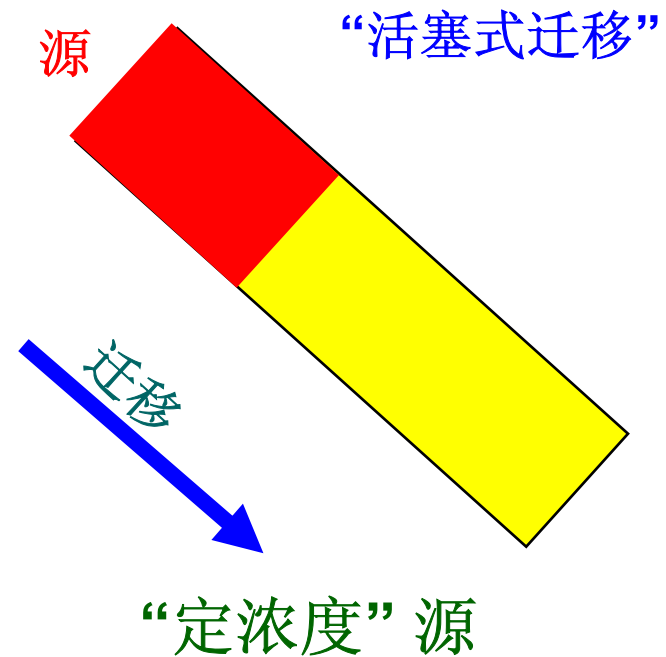
1. 可溶污染物的迁移机理

- **对流：** 对流迁移速率=平均实际流速
=Darcy 流速/有效孔隙度

$$V = KJ/\theta$$



“脉冲”源

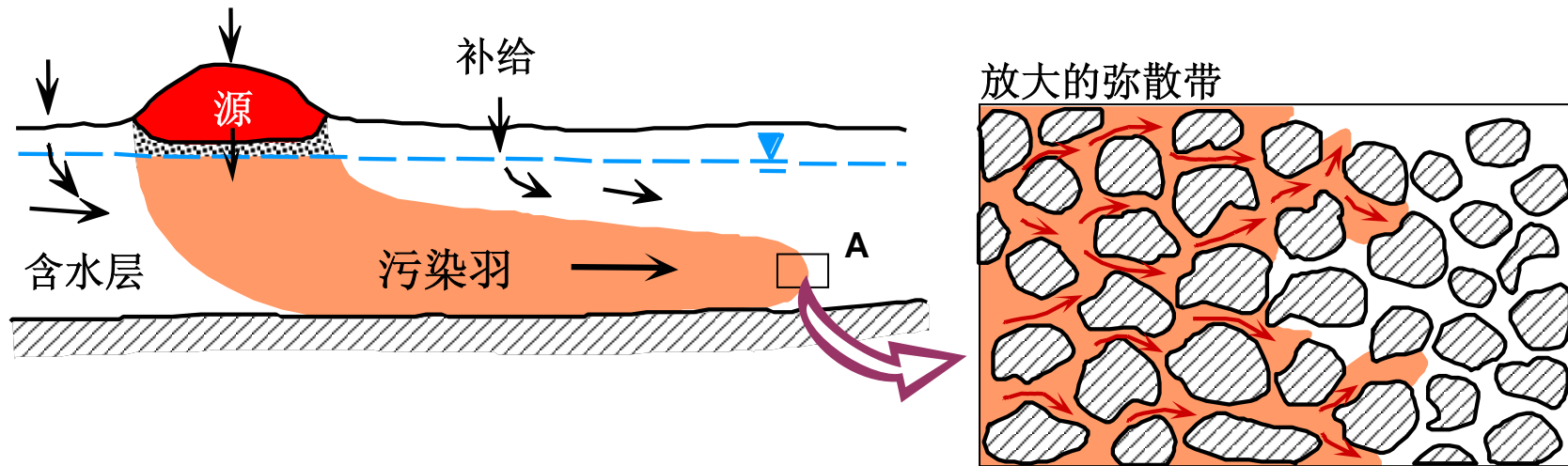


1. 可溶污染物的迁移机理

● 弥散：锋面迁移速率 \gt 对流迁移速率

机械弥散和分子扩散

纵向弥散和横向弥散



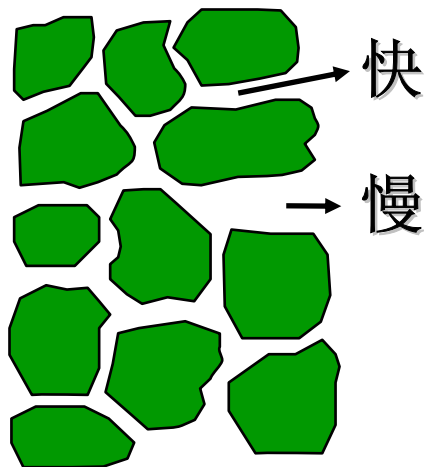
1. 可溶污染物的迁移机理

● 弥散：机械弥散，弥散系数为 D_m (cm^2/d)

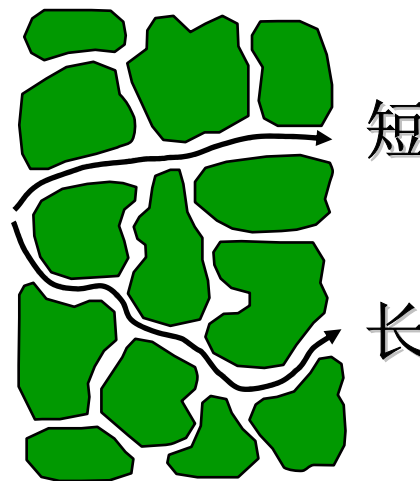
机械弥散是流速反向和大小不均匀导致的

主要的弥散方式。 $D_m = \alpha V$, α 为弥散度 (cm)

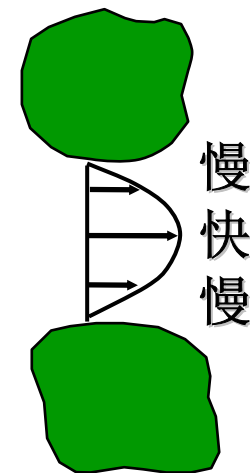
孔隙大小



路径长度



摩擦



1. 可溶污染物的迁移机理

● 弥散：机械弥散，弥散系数为 D_m (cm^2/d)

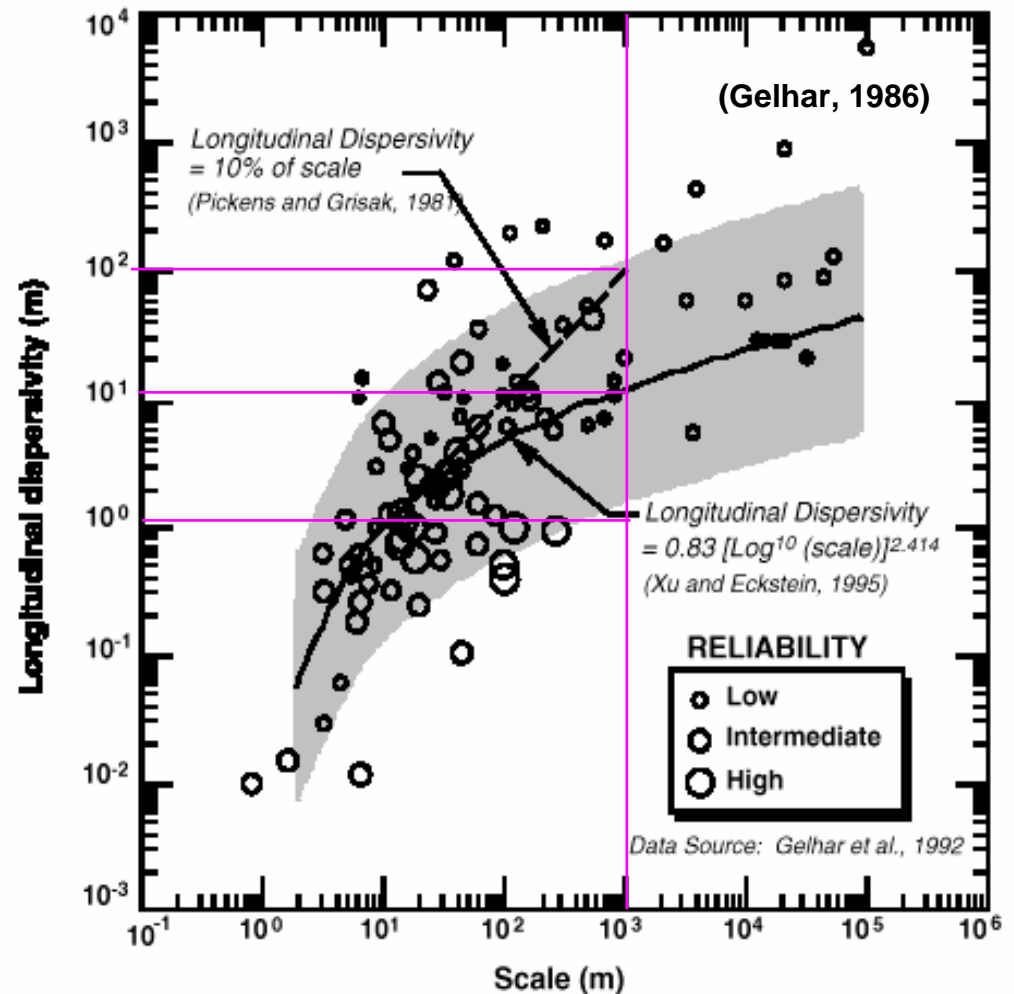
$$D_m = \alpha V, \alpha \text{ 为弥散度 (cm)}$$

α_L , 纵向弥散度

α_T , 横向弥散度

一般 $\alpha_T / \alpha_L = 0.1$

具有尺度效应



1. 可溶污染物的迁移机理

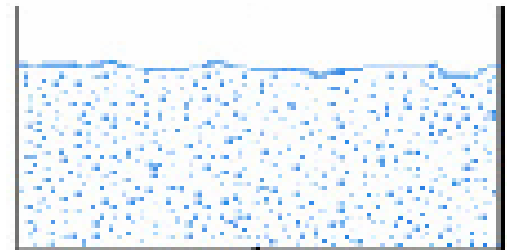
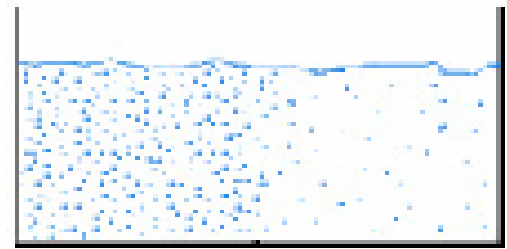
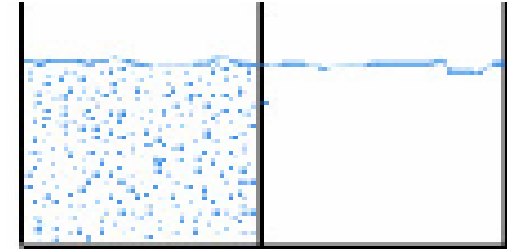
● 弥散:

分子扩散，弥散系数为 D^* (cm^2/d)

分子的不规则运动（布朗运动）；

分子扩散相对十分缓慢，常常被忽略不计；

长时间问题需要考虑：如核废料的千年尺度问题；



1. 可溶污染物的迁移机理

● 化学反应:

吸附作用

衰变作用（生物降解）

简单多组分反应

复杂的水岩相互作用

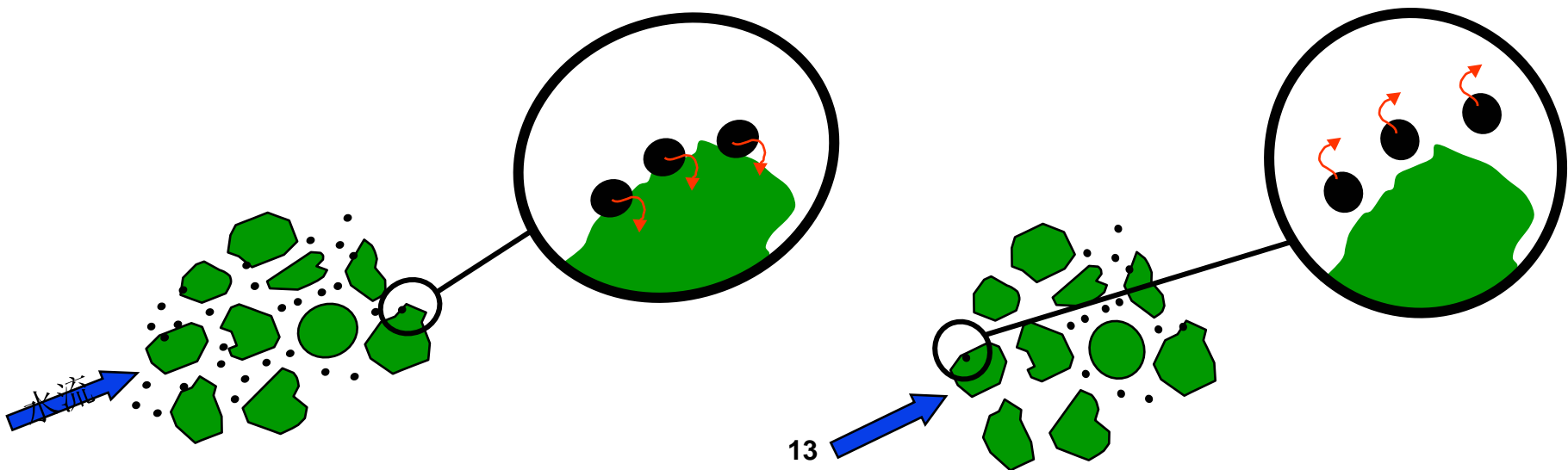
1. 可溶污染物的迁移机理

● 化学反应：吸附作用

污染物可以被含水层颗粒表面吸附

吸附作用阻碍污染羽的迁移

吸附作用是可逆的：可从颗粒表面释放出来(解吸)



1. 可溶污染物的迁移机理

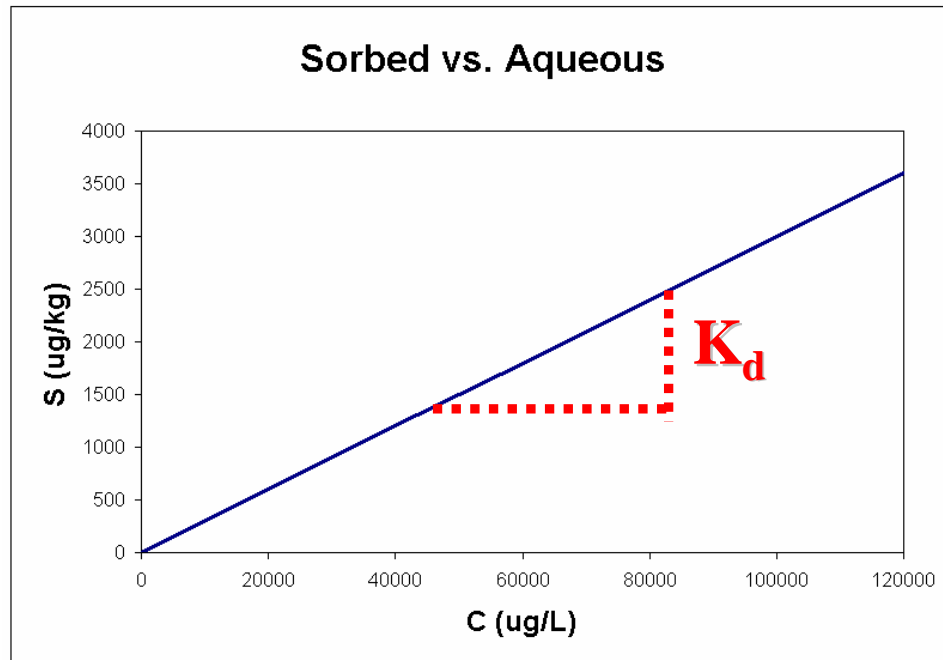
● 化学反应：吸附作用，线性平衡吸附

吸附浓度：kg/kg

$$S = K_d C$$

溶解浓度：kg/m³

分配系数：m³ / kg



S = 吸附相 [M/M], C = 溶解相 [M/V]

1. 可溶污染物的迁移机理

● 化学反应： 吸附作用， 非线性平衡吸附

(1) Freundlich等温吸附

$$S = K_F C^{1/n}; \text{ 例如: } K_F = 3.5 \text{ cm}^3/\text{g}, 1/n = 0.56$$

(2) Langmuir等温吸附

$$S = \frac{S_{\max} KC}{1 + KC} \quad \text{例如: } K = 1.5, S_{\max} = 30 \text{ mg/g}$$

1. 可溶污染物的迁移机理

● 化学反应：衰变，一阶动力学衰变

化学物质不可逆的减少：放射性；降解

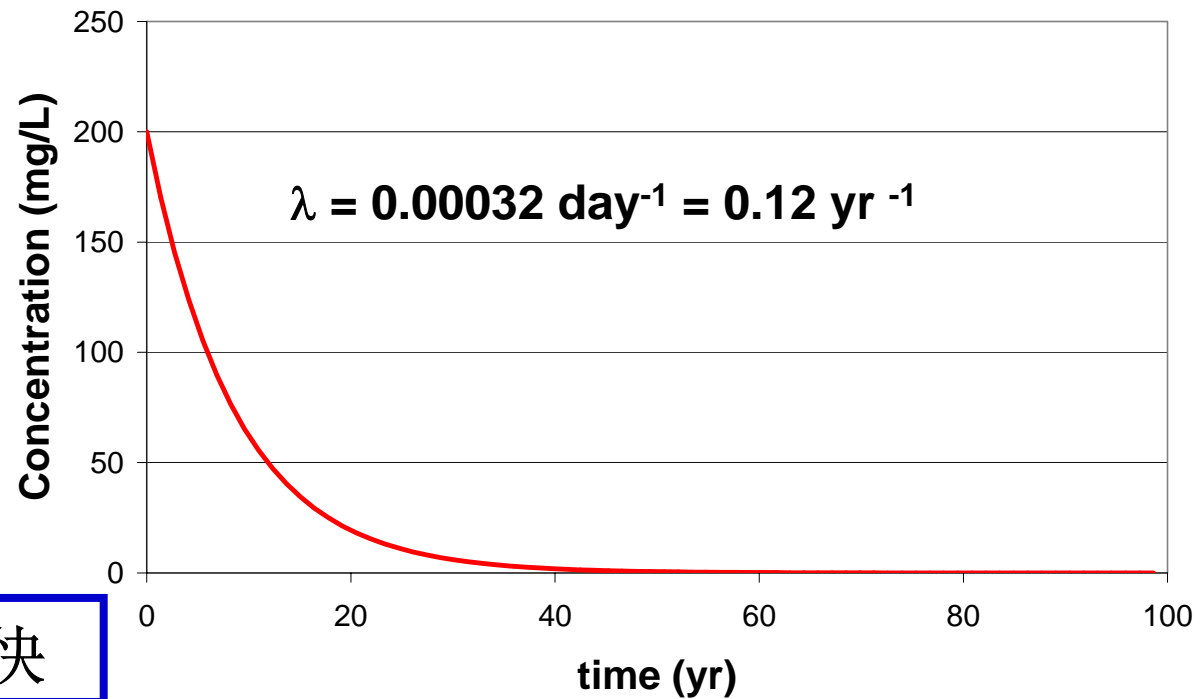
$$\frac{dC}{dt} = -\lambda C$$

$$C = C_0 \exp(-\lambda t)$$

半衰期

$$t_{1/2} = 0.693 / \lambda$$

浓度越高衰变越快



1. 可溶污染物的迁移机理

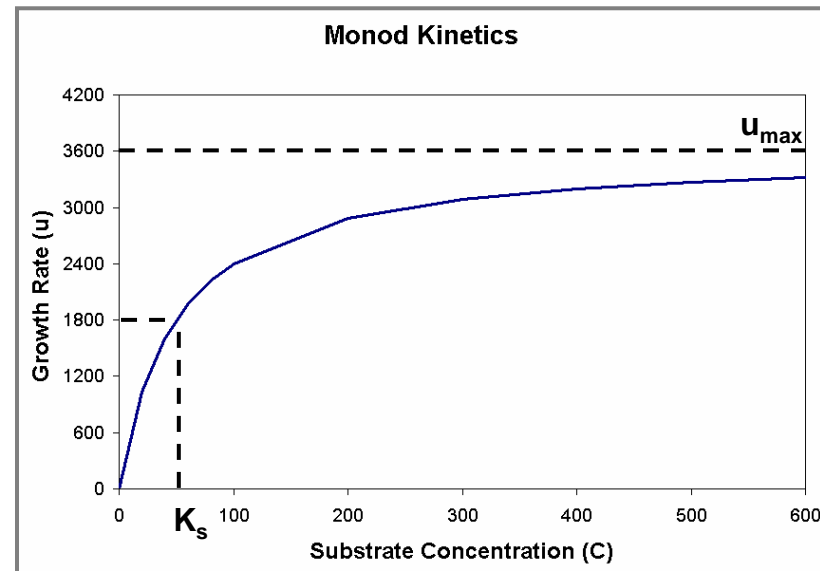
● 化学反应：衰变，Monod动力学衰变

一般用于生物降解，微生物的种群生长存在极限

$$u = u_{max} \frac{C}{K_s + C}$$

$$\frac{dC}{dt} = -M_t u_{max} \frac{C}{K_s + C}$$

需要两个参数



1. 可溶污染物的迁移机理

● 化学反应：多组分反应，一阶不可逆反应

假设化学反应是瞬时达到平衡态，以**A**为降解目标的反应：



反应速率为： $V = \lambda[A][B]^r$

模拟 A, B 的
浓度变化

数学描述为：

$$\frac{dC_A}{dt} = -\lambda[C_A][C_B]^r$$

一阶反应速率常数

$1/d$

B/A 配比系数

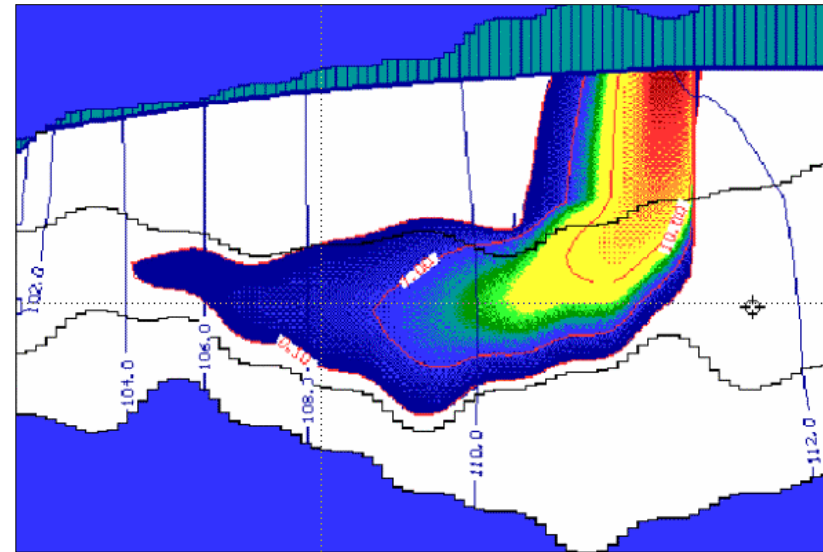
2. 污染运移的数学模型及其参数

●控制方程：对流-弥散方程

$$\underbrace{-\frac{\partial}{\partial x_i}(v_i C)}_{\text{对流}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i}\left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j}\right)}_{\text{弥散}} - \underbrace{\lambda\left(C + \rho_b \frac{S}{\theta}\right)}_{\text{反应}} \pm \underbrace{\frac{q_s}{\theta} C_s}_{\text{源汇项}} = \underbrace{R \frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{存贮项}}$$

● 其中：

- v_i 实际渗流速度(m/d)
- D_{ij} 弥散系数分量(m²/d)
- S 吸附相浓度(kg/kg)
- C_s 源汇项浓度(kg/m³)
- θ 有效孔隙度(-)
- R 阻滞系数(-)
- ρ_b 体积密度(kg/m³)



2. 污染运移的数学模型及其参数

● 对流项:

$$v_i = -\frac{K_i}{\theta} \frac{\partial H}{\partial x_i}$$

- 需要先模拟得到地下水的水头分布
利用MODFLOW
- 根据水头分布计算Darcy流速
利用Darcy定律
- 将Darcy流速/孔隙度

2. 污染运移的数学模型及其参数

● 弥散项：弥散系数

$$D_{ii} = \alpha_L |V_{ii}| + \alpha_T |V_{ij}| + \alpha_T |V_{ik}| + D^*$$

$$D_{ij} = (\alpha_L - \alpha_T) |V_{ij}|$$

- 计算出各个方向的绝对流速
- 根据以下参数计算弥散系数

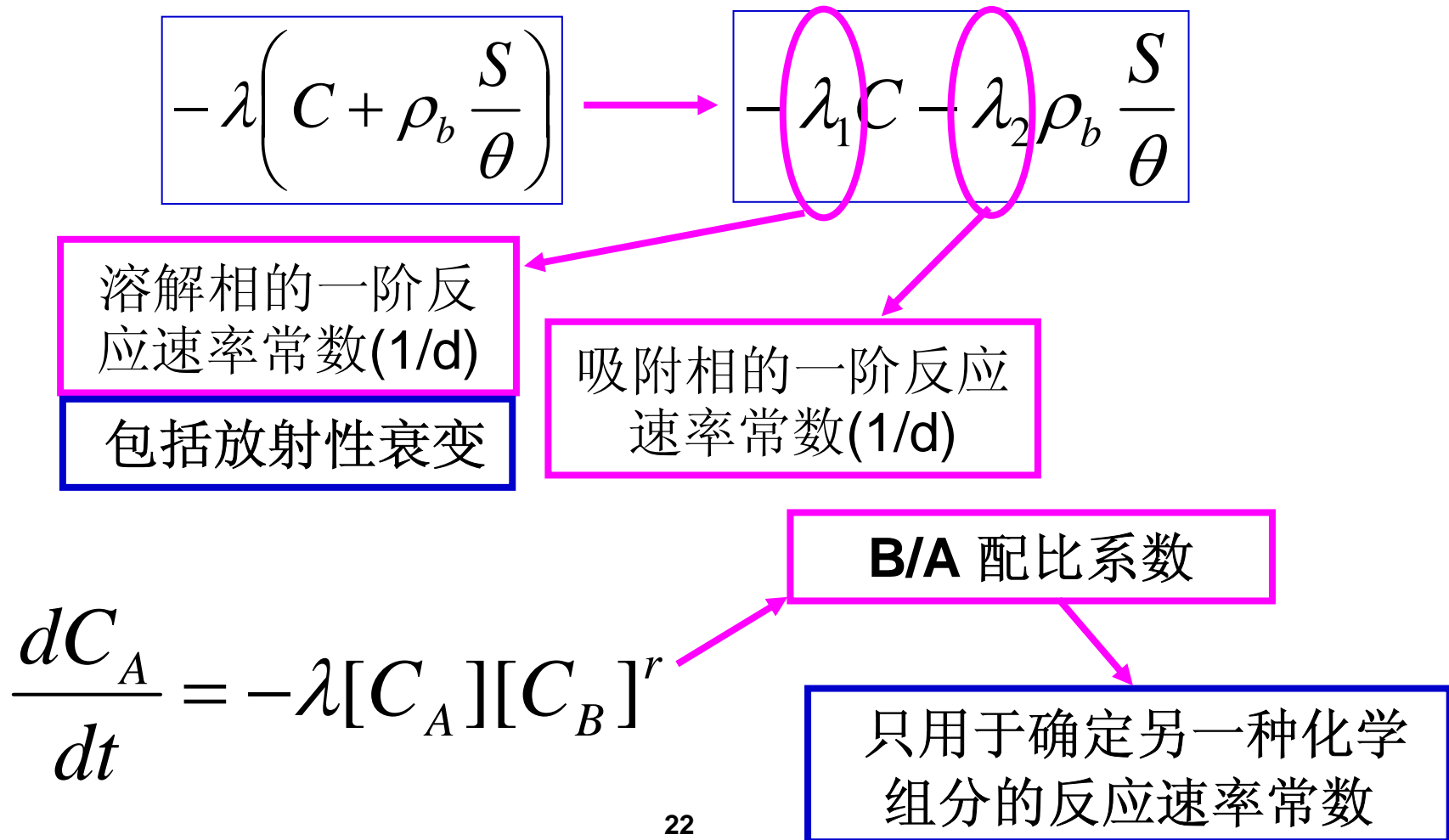
α_L , 纵向弥散度 (m)

α_T / α_L , 横纵弥散度比值 (-)

D^* , 分子扩散系数 (m²/d)

2. 污染运移的数学模型及其参数

● 反应项:



2. 污染运移的数学模型及其参数

● 存贮项:

$$R \frac{\partial C}{\partial t}$$

阻滞系数(-)

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} K_d$$

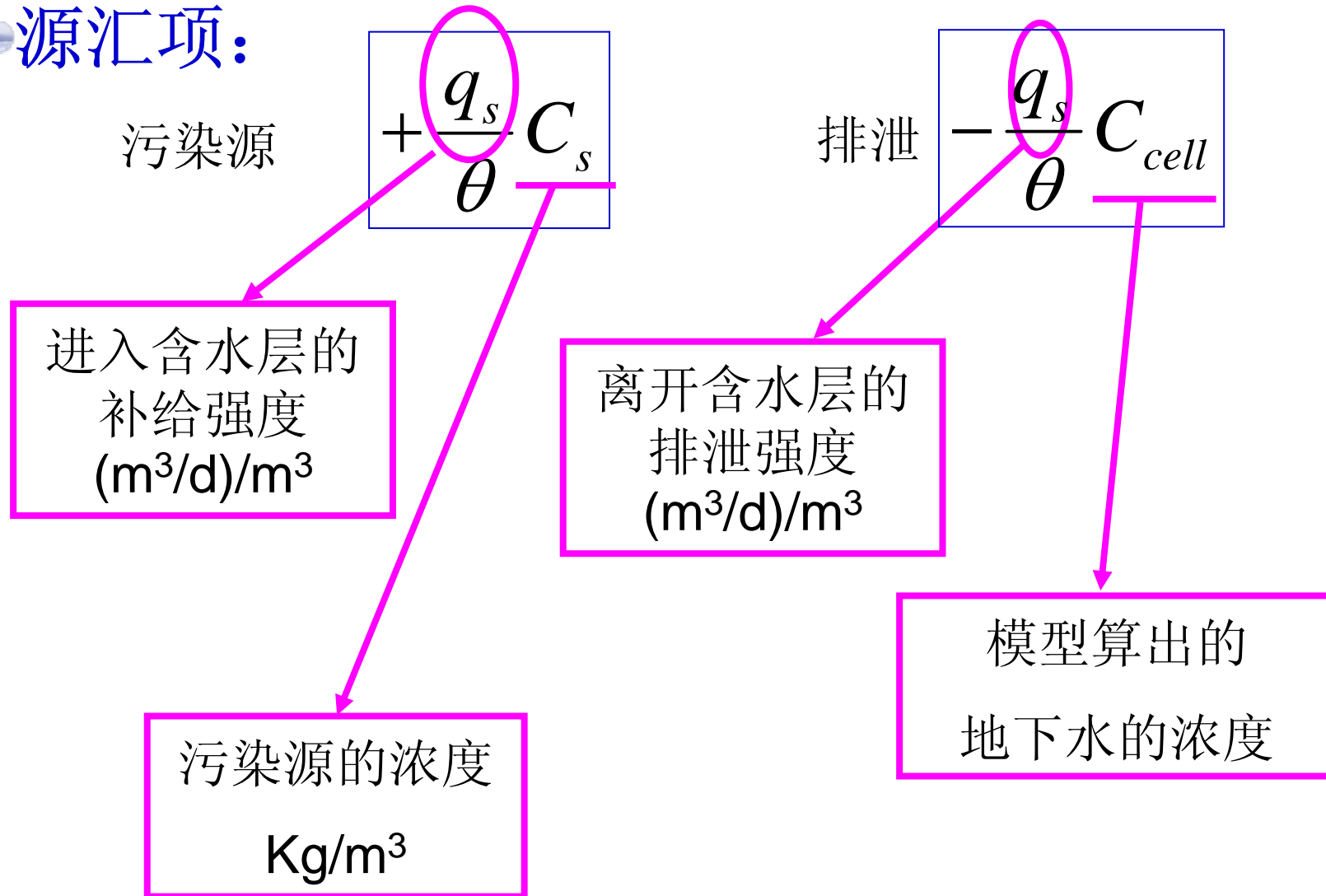
阻滞系数使运移
速率降低

$$v^* = \frac{v}{R}$$

吸附作用的分配系数
 m^3/kg

2. 污染运移的数学模型及其参数

●源汇项：



2. 污染运移的数学模型及其参数

●初始条件:

地下水的化学背景

●边界条件:

定浓度边界;

入渗补给浓度边界（面源输入的浓度）;

蒸发浓度边界（蒸发带走的浓度，也可 ≈ 0 ）;

点源边界。

3. 对流-弥散-反应模型**MT3D**

●**MT3D:**

基于MODFLOW的，模拟一种污染物的对流-弥散-反应过程的数值计算程序；

1990年，美国； Chunmiao Zheng, 郑春苗.

●**MT3DMS:**

MT3D的扩展程序；模拟多种污染物的对流-弥散-反应过程； 1999年，美国； Chunmiao Zheng, P. Patrick Wang.

3. 对流-弥散-反应模型MT3D

● MT3DMS

郑春苗.



**US Army Corps
of Engineers**

Engineer Research and
Development Center

Contract Report SERDP-99-1
December 1999

Strategic Environmental Research and Development Program

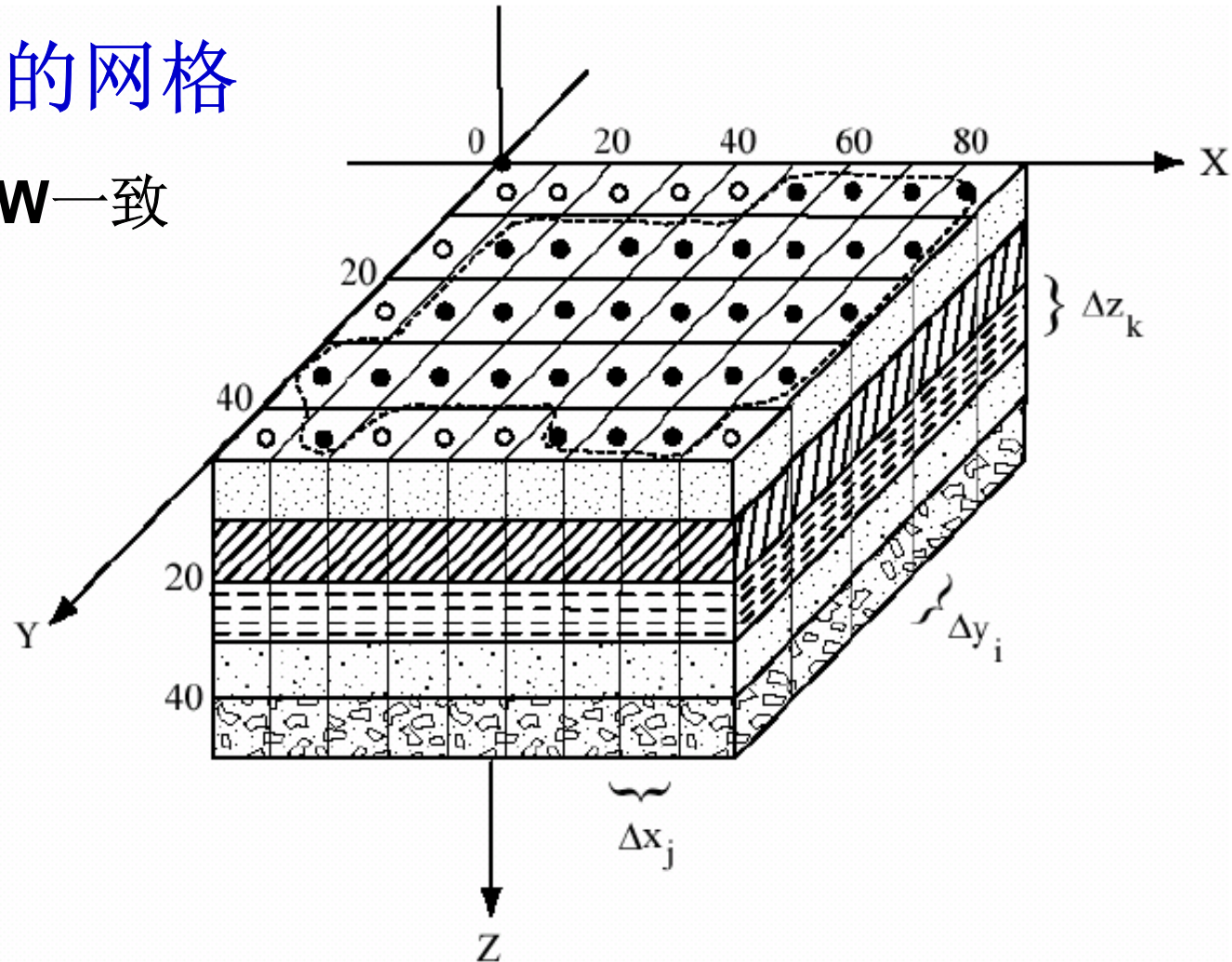
**MT3DMS: A Modular Three-Dimensional
Multispecies Transport Model for Simulation
of Advection, Dispersion, and Chemical
Reactions of Contaminants in Groundwater
Systems; Documentation and User's Guide**

*by Chunmiao Zheng, P. Patrick Wang
University of Alabama*

3. 对流-弥散-反应模型MT3D

●数值模型的网格

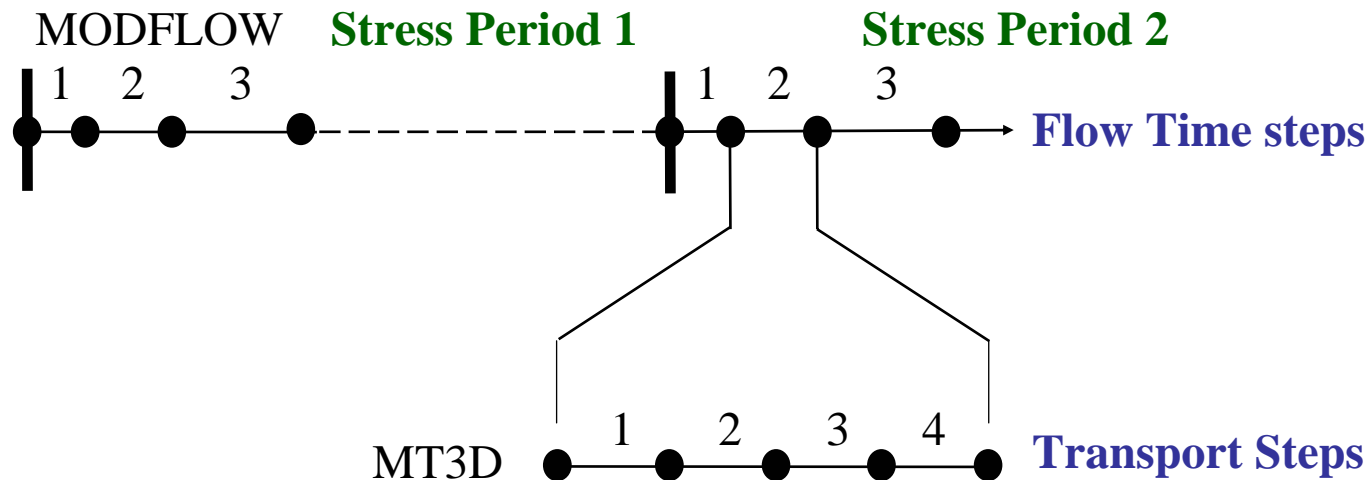
与MODFLOW一致



3. 对流-弥散-反应模型MT3D

● 时间剖分

比MODFLOW短



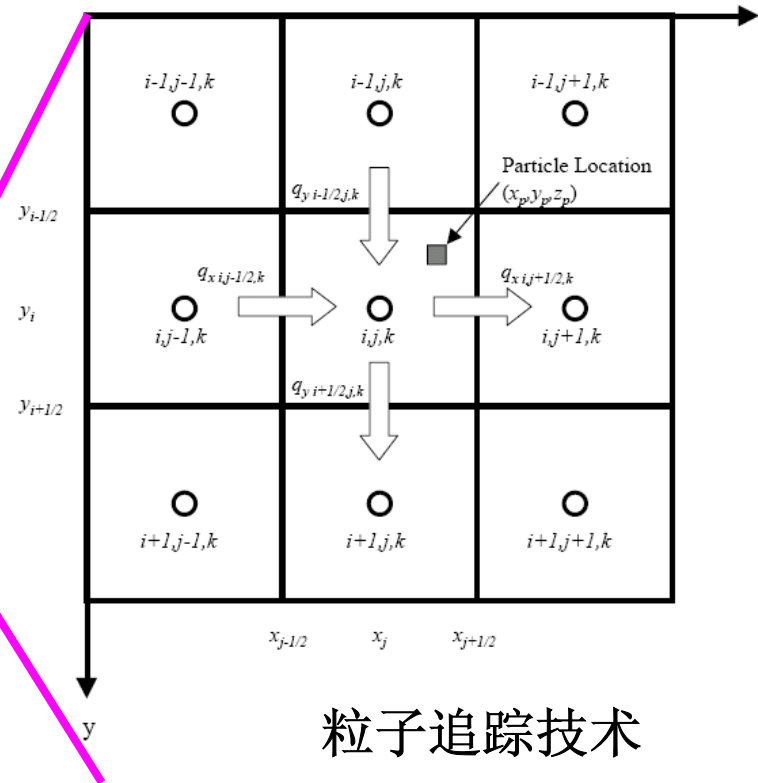
3. 对流-弥散-反应模型MT3D

●求解方法

先用分解技术求出对流项, 然后用有限差分法求出其它项。

●对流项的求解方法包括:

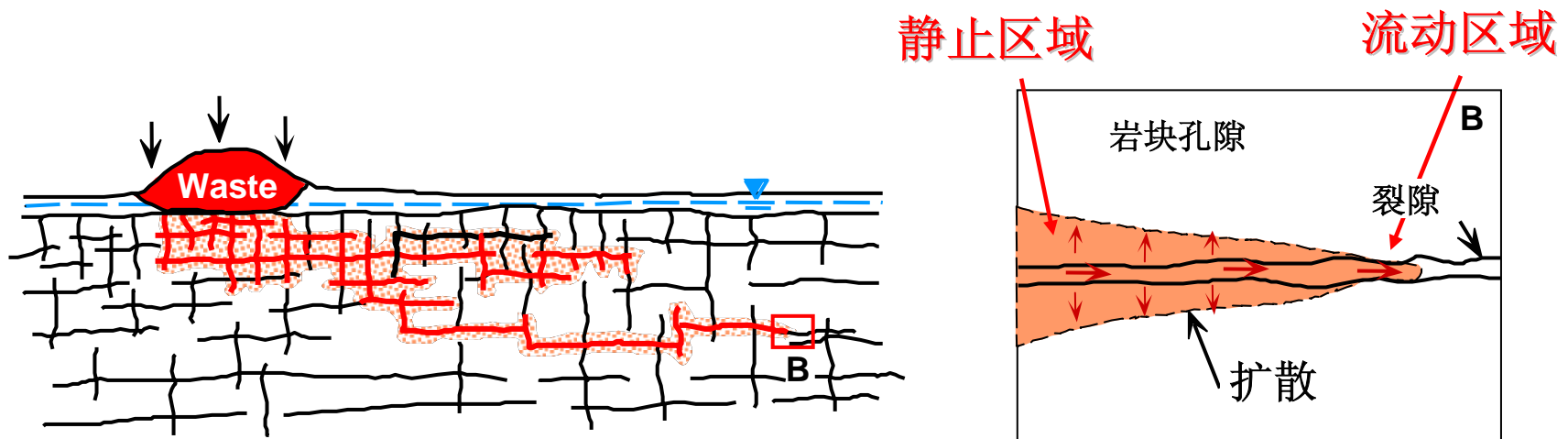
- 有限差分法: 显式和隐式
- 特征值法
- 修正特征值法
- 混合特征值法
- 3阶显式 TVD 法



3. 对流-弥散-反应模型MT3D

●对双孔介质模型的处理

溶质存在于**2**种孔隙空间内： **(1)**可自由流动的； **(2)** 不能流动，只能交换。



4. MT3D的应用

● 污染场地评价

渗滤强度

$q=600 \text{ mm/yr}$

浓度

800 mg/L

其它参数

$\alpha=20 \text{ m}$

$\lambda_1=0.001 \text{ (1/d)}$

