

水位波动下包气带透镜体影响LNAPL迁移的数值模拟研究

潘明浩, 时健, 左锐, 赵晓, 刘嘉蔚, 薛镇坤, 王金生, 胡立堂

A numerical simulation study of the effect of the vadose zone with lenses on LNAPL migration under the fluctuating water table

PAN Minghao, SHI Jian, ZUO Rui, ZHAO Xiao, LIU Jiawei, XUE Zhenkun, WANG Jinsheng, and HU Litang

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202105027>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

含单裂隙非饱和带中轻非水相流体修复的数值模拟

Numerical simulation of light non-aqueous phase liquids remediation in the unsaturated zone with single fractures

赵科锋, 王锦国, 曹慧群 水文地质工程地质. 2020, 47(5): 43-55

地下水位波动带三氮迁移转化过程研究进展

Advances in researches on ammonia, nitrite and nitrate on migration and transformation in the groundwater level fluctuation zone

刘鑫, 左锐, 王金生, 何柱锟, 李桥 水文地质工程地质. 2021, 48(2): 27-36

井间分溶示踪估计重非水相污染物残留量的影响因素数值分析

Numerical analysis of the influencing factors for estimating DNAPL residual by the partitioning interwell tracer tests

郭琼泽, 施小清, 王慧婷, 徐红霞, 吴吉春 水文地质工程地质. 2019, 46(6): 165-172

非饱和花岗岩残积土水-气两相驱替过程数值模拟

Numerical simulation of water-gas two-phase displacement process in unsaturated granite residual soil

蔡沛辰, 阙云, 李显 水文地质工程地质. 2021, 48(6): 54-63

多孔介质界面对重非水相液体迁移过程影响的图像法研究

Investigation on the influence of porous media interface on DNAPL migration based on image methods

刘汉乐, 郝胜瑶, 马建初 水文地质工程地质. 2019, 46(5): 169-174

水汽场中气液态水质量比的确定方法

Determination of the ratio of liquid water mass to gaseous water mass in water vapor field

易珍莲, 宁立波, 尹峰, 赵国红 水文地质工程地质. 2019, 46(1): 43-43



关注微信公众号, 获得更多资讯信息

DOI: 10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.202105027

潘明浩, 时健, 左锐, 等. 水位波动下包气带透镜体影响 LNAPL 迁移的数值模拟研究 [J]. 水文地质工程地质, 2022, 49(1): 154-163.

PAN Minghao, SHI Jian, ZUO Rui, *et al.* A numerical simulation study of the effect of the vadose zone with lenses on LNAPL migration under the fluctuating water table[J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2022, 49(1): 154-163.

水位波动下包气带透镜体影响 LNAPL 迁移的数值模拟研究

潘明浩^{1,2}, 时健^{1,2}, 左锐^{1,2}, 赵晓^{1,2}, 刘嘉蔚^{1,2}, 薛镇坤^{1,2}, 王金生^{1,2}, 胡立堂^{1,2}

(1. 北京师范大学水科学研究院, 北京 100875;

2. 地下水污染控制与修复教育部工程研究中心, 北京 100875)

摘要: 轻质非水相液体(LNAPLs)在土壤包气带中具有多相态特征, 非均质性、地下水位波动等因素将显著增加包气带内 LNAPLs 污染的复杂程度。已有研究多关注于揭示包气带内自由相 LNAPLs 的污染过程, 少有更为深入地探究水位波动时非均质结构对 LNAPLs 迁移及各相态分布规律的影响。基于 TOUGH2 程序构建包气带多相流数值模型, 以揭示透镜体结构与地下水位波动共同作用下 LNAPLs 迁移过程及相态分布。研究表明: (1) 含水率变化是 LNAPLs 迁移分布的主要控制因素, 包气带内受透镜体介质岩性、水位波动影响所呈现的含水率变化直接控制 LNAPLs 迁移规律及分布特征; (2) 水位恒定时, 细砂透镜体使 LNAPL 呈“蓄积穿透-横向扩展-绕流”迁移, 粗砂透镜体则是 LNAPL 垂向迁移的“优势通道”, 水位波动引起的细砂透镜体含水率变化使“绕流”显著增强, 粗砂透镜体则进一步呈现“优势空间”作用; (3) 水位恒定时, 细砂透镜体模型中 LNAPL 滞留于透镜体内部, 粗砂模型中 LNAPL 则集中于透镜体下方, 水位波动下透镜体附近 LNAPL 分布范围扩展, 两模型 LNAPL 分布面积较水位恒定时分别增大 51%、63%; (4) 两模型中 LNAPL 挥发通量均呈“先减小-后增大”规律, 并受 LNAPL-气体接触条件及 LNAPL 分布状况共同作用, 水位波动打破三相平衡状态, 主要表现为水位抬升阶段 LNAPL 挥发增强, 此时两模型中平均挥发量较水位恒定时增大 124%~126%。研究为非均质石油污染场地中的 LNAPL 污染过程认识提供了科学的理论依据。

关键词: 轻质非水相液体; 包气带; 非均质性; 数值模型

中图分类号: P641.2

文献标志码: A

文章编号: 1000-3665(2022)01-0154-10

A numerical simulation study of the effect of the vadose zone with lenses on LNAPL migration under the fluctuating water table

PAN Minghao^{1,2}, SHI Jian^{1,2}, ZUO Rui^{1,2}, ZHAO Xiao^{1,2}, LIU Jiawei^{1,2}, XUE Zhenkun^{1,2},
WANG Jinsheng^{1,2}, HU Litang^{1,2}

(1. College of Water Sciences, Beijing Normal University, Beijing 100875, China; 2. Engineering Research Center of Groundwater Pollution Control and Remediation, Ministry of Education, Beijing 100875, China)

Abstract: Light Non-Aqueous Phase Liquids (LNAPLs) in vadose zone is of multi-phase characteristics, while factors such as heterogeneity and groundwater fluctuation are expected to significantly increase the complexity of

收稿日期: 2021-05-18; 修订日期: 2021-07-06

投稿网址: www.swdzgcdz.com

基金项目: 国家自然科学基金项目(41877181; 41831283); 111 引智项目(B18006)

第一作者: 潘明浩(1998-), 男, 硕士研究生, 主要从事地下水污染研究。E-mail: 202021470021@mail.bnu.edu.cn

通讯作者: 左锐(1981-), 男, 博士, 教授级高工, 主要从事地下水污染控制与修复研究。E-mail: zr@bnu.edu.cn

LNAPLs contamination in vadose zone. Previous studies have mostly focused on revealing the contamination process of free-phase LNAPLs, few have explored deeply the influence of the heterogeneous structure on the migration and phase distribution pattern of LNAPLs when the water table fluctuates. A numerical model of multiphase flow in vadose zone is established based on TOUGH2 to reveal the migration and phase distribution of LNAPLs under the joint effect of different lithological lenses and water table fluctuation. The results show that (1) the migration and distribution regularity of LNAPLs in vadose zone is predominantly controlled by the variation in water content, which is presented under the effect of heterogeneity and water fluctuation. (2) In the steady groundwater scenario, LNAPL migrates in an "accumulation-lateral expansion-flow bypass" pattern around the fine-sand lens, while the coarse-sand lens acts as the "preferential route" for the vertical movement of LNAPL. Flow around the fine-sand lens is significantly enhanced by the variation in water content induced by groundwater fluctuation, and the coarse-sand lens further exhibits the "preferential space" effect. (3) When the water table is steady, LNAPL are concentrated inside and below the lens body in the fine-sand and coarse-sand lens models, respectively. In the fluctuating groundwater scenario, a greater range of LNAPL is presented in the vicinity of the lens with the distribution area in each model is 51% and 63% larger than that in the steady scenario. (4) Volatile flux of LNAPL, affected by the LNAPL-gas exposure conditions and the distribution of LNAPL, shows a "decreasing-then increasing" pattern in both models. The three-phase equilibrium state is disrupted by groundwater fluctuation, which is manifested by the enhanced volatilization during the stage of groundwater elevation, when the average volatile flux in the two models is 124% ~ 126% higher compared to the steady scenario. This research provides a theoretical basis for the understanding of LNAPL pollution process in heterogeneous contaminated sites.

Keywords: LNAPL; vadose zone; heterogeneity; numerical model

轻质非水相液体(Light Non-Aqueous Phase Liquid, LNAPL)是土壤及地下水环境中有机污染问题的重要来源,往往具有持续危害性^[1-2]。土壤包气带是 LNAPL 下渗迁移过程中的重要通道^[3],其含水量、氧化还原条件等随土壤深度变化,使得 LNAPL 在包气带中的多相流迁移行为变得较为复杂^[4-5]。一般认为, LNAPL 进入包气带后首先以垂向迁移为主,到达地下水位上方的毛细带后将在毛细力作用下驱替孔隙水,发生侧向迁移扩展^[6-8]。LNAPL 在包气带中的迁移行为受黏度、密度等流体性质的控制^[9-10]以及介质岩性、地下水位波动等外部因素的影响^[7,11],其中非均质性(如透镜体、非均质夹层、裂隙等)^[12-13]以及水动力条件^[14-15]在很大程度上将影响 LNAPL 的迁移规律和相态分布特征。

国内外学者广泛采用物理模型试验或数值模拟方法探究包气带内的 LNAPL 迁移过程。非均质条件下的介质含水率差异以及毛细力作用均被认为是控制 LNAPL 迁移规律的重要因素。Schroth^[16]在通过砂箱实验探究 LNAPL 在非均质包气带中的迁移过程时发现含水量对 LNAPL 分布存在显著影响。束善治等^[7]、陶佳辉等^[17]则通过数值模拟探究不同地层结构中 LNAPL 的迁移过程,发现介质含水率差异决定了非均质结构对 LNAPL 运动的阻碍或促进作用。此

外, Simantiraki^[18]与 Wipfler^[19]分别运用图像分析与数值模拟手段分析 LNAPL 迁移过程,二者均认为毛细力是污染物迁移过程的重要控制因素, LNAPL 垂向运动受阻可能与界面形成的毛细屏障有关。水位波动是土壤及地下水污染问题中的另一关键因素,对于 LNAPL 污染物而言,水位波动将显著影响气-水-LNAPL 三相之间的相互驱替,进而改变污染物迁移及相态分布过程^[20]。罗凌云^[11]通过实验探究水位波动条件下柴油进入包气带的迁移行为时,发现 LNAPL 在水位上升时将会优先驱替多孔介质中的气体,在水位下降时则将优先驱替水相;杨明星^[15]结合实验及数值模拟手段对石油组分在水位波动带内分异演化机理进行研究,发现污染物在水位波动条件下受“界面效应”影响,趋向于滞留在较低渗透性的介质中,水位波动将加剧 LNAPL 吸附、溶解等过程并使其对水的驱替过程减弱。因此可以说,地下水位波动将显著影响 LNAPL 的迁移过程^[21]。

为探究土壤包气带内存在透镜体结构这一复杂环境条件下 LNAPL 的迁移过程及其相态分布,本文基于北京市通州区张家湾包气带试验基地的场地状况及其地下水位波动背景,采用 TOUGH2(transport of unsaturated groundwater and heat)程序的 TMVOC 模块

进行算例研究,构建二维非均质剖面中 LNAPL 入渗迁移的多相流模型,以透镜体介质岩性、地下水位波动作为共同影响因素,模拟非均质包气带内 LNAPL 的迁移规律、分布特征及挥发过程,以期为复杂条件下的石油污染场地修复提供理论参考。

1 材料与方法

1.1 模型背景

TOUGH2 程序可用于模拟多孔介质中的地下水流、非等温热量运移等多相流过程^[22],TMVOC 模块是该程序后续版本中用于模拟 NAPLs 在饱和-非饱和介质中迁移、VOCs(挥发性有机污染物)溶解与挥发等过程的模块^[23],采用积分有限差分法进行模拟区域的空间离散^[24]。

通州区为北京城市副中心,近年来该地区地下水位总体呈上升趋势,但伴有水位的持续波动。在水位波动背景下,其土壤地下水中有有机物污染问题愈发受到关注。通州区张家湾包气带试验基地位于永定河与潮白河冲洪积扇中下部的交汇地带,属于第四系沉积地层,其上部地层岩性主要包括细砂、粉细砂、中砂等,场地介质非均质性较强且局部存在厚度为几厘米至几十厘米不等的微观非均质透镜体结构。在此基础上,本文设计包气带内存在透镜体的非均质地层结构,假定 LNAPL 污染物由近地表泄漏,采用 TMOVC 模块建立 XZ 方向的二维剖面数值模型。如图 1 所示,模型尺寸为 90 cm×10 cm×110 cm,其中 X 方

向剖分为 18 列网格,Z 方向剖分为 22 层网格,网格水平及垂直间距均为 5 cm。透镜体区域坐标范围为 X=30~60 cm;Z=-70~-75 cm, LNAPL 泄漏源坐标范围为 X=40~50 cm;Z=0~-5 cm。此外,模型共设置 6 个观察点用于观察透镜体周围的 LNAPL 运移状况。

1.2 模型参数

本文采用中砂介质作为包气带内的主要介质,分别采用细砂及粗砂作为透镜体介质。采用 Stone 模型作为相对渗透率函数,其中 S_{wr} 为水相残余饱和度; S_{nr} 为 NAPL 相残余饱和度; S_{gr} 为气相残余饱和度; n 为拟合参数。采用 van Genuchten 模型作为毛细压力函数,其中 $m=1-1/n$; S_{lr} 为液相残余饱和度; S_{ls} 为饱和液相的饱和度; P_0 为进气值; P_{max} 为最大进气压力值。介质相关各参数如表 1 所示。

表 1 介质相关参数^[17,25-26]

介质类型	中砂	细砂	粗砂
孔隙度	0.35	0.40	0.30
饱和渗透率/(m ²)	2.37×10 ⁻¹¹	1.48×10 ⁻¹²	2.26×10 ⁻¹⁰
颗粒比重/(kg·m ⁻³)	1 650.00	1 510.00	1 749.00
相对渗透率 Stone模型	S_{wr}	S_{nr}	S_{gr}
	0.05	0.15	0.03
	0.04	0.08	0.03
	0.00	0.00	0.00
	n	2.93	3.00
	m	0.66	0.67
	S_{lr}	0.02	0.12
毛细压力 van-Genuchten模型	P_0^{-1}	5.105×10 ⁻⁴	3.75×10 ⁻⁴
	P_{max}	5×10 ⁵	1×10 ⁷
	S_{ls}	1.00	1.00
		6.02×10 ⁻⁴	5×10 ⁵
		1.00	1.00

苯系物(BTEX)是较为常见的 LNAPL 污染物^[27],本文采用甲苯作为算例中的 LNAPL 污染物,考虑甲苯的挥发及溶解等相态传质过程,相关参数如表 2 所示。模型在等温模式下运行,温度恒定为 25 ℃。

表 2 甲苯相关参数^[24]

参数	气相中扩散系数/(m ² ·s ⁻¹)	水相中扩散系数/(m ² ·s ⁻¹)	NAPL 相扩散系数/(m ² ·s ⁻¹)	水中溶解度/(mol·mol ⁻¹)
数值	8.8×10 ⁻⁶	6.0×10 ⁻¹⁰	6.0×10 ⁻¹⁰	1.01×10 ⁻⁴

1.3 边界条件及初始条件

模型顶部单元格设定为大气边界(Dirichlet 边界),垂向范围为 Z=0~5 cm,压力值恒定为大气压 1.013×10⁵ Pa,气体饱和度为 0.99。模型底部一层单元格为定压 Dirichlet 边界,其深度范围 Z=-100~-105 cm,初始压力值按照地下水位-100 cm 计算并设定为 1.017 9×10⁵ Pa。模型构建完成后首先计算得到初始水水分

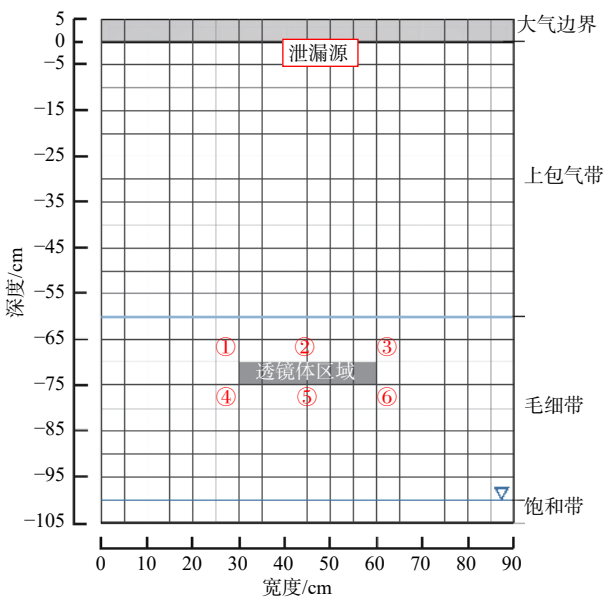


图 1 概念模型示意图

Fig. 1 Schematic diagram of the conceptual model

布, 图 2 所示分别为中砂介质包气带内存在细砂、粗砂透镜体时模型中的初始水分分布情况。

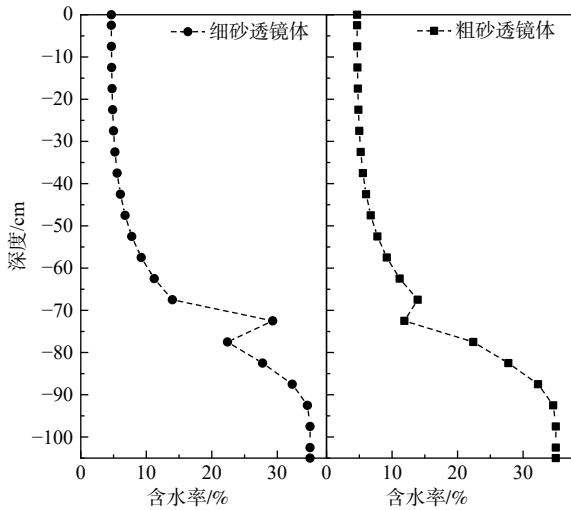


图 2 各透镜体模型中的含水率变化规律
Fig. 2 Variation pattern of water content in each model

2 结果与讨论

2.1 不同岩性透镜体条件下自由相迁移分布

本节设计包气带内存在细砂、粗砂透镜体两种模型算例, 分别以 LNAPL 饱和度 S_{LNAPL} 、LNAPL 在水相中的质量分数 $x(aq)$ 作为表征自由相、溶解相分布的

定量指标, 分析水位恒定时 LNAPL 在包气带内的迁移分布。LNAPL 释放时间为 0 ~ 180 min, 释放速率为 4.483 mL/min。图 3 及图 4 分别代表包气带内存在细砂、粗砂透镜体时 LNAPL 的迁移过程。

对于细砂透镜体模型, LNAPL 迁移到达透镜体上方时存在明显的蓄积和横向扩展现象, 180 min 前透镜体两侧 S_{LNAPL} 几乎为 0, 且透镜体上方(观察点 2)及下方(观察点 5) S_{LNAPL} 相对较大, 表明部分 LNAPL 已优先以“穿过透镜体”形式向下迁移。对于粗砂透镜体模型, LNAPL 更多以垂向迁移为主, 表现为 150 min 时 LNAPL 分布深度超过细砂模型约 17%, 105 ~ 180 min 时 LNAPL 在透镜体下方发生横向扩展。污染物释放阶段的模拟结果表明, 粗砂透镜体成为 LNAPL 垂向迁移的“优势通道”, 细砂透镜体则表现出对 LNAPL 垂向运动的阻碍, 蓄积于透镜体上方的 LNAPL, 在其横向扩展超过透镜体宽度之前以“穿过透镜体”为主。上述不同的迁移过程与介质参数及含水率差异存在较大联系: 由于水-气-NAPL 三相体系中, NAPL 驱替水相、气相发生运移的难易程度与 NAPL/水界面的进气压力值密切相关^[7,28], 故粗砂介质相对较小的进气压力值 P_{max} (表 1) 决定了 LNAPL 更容易驱替粗砂介质中的水相、气相, 因此 LNAPL 到达粗砂透镜体附近时具有更强的迁移能力。其次, 细砂介质较强的

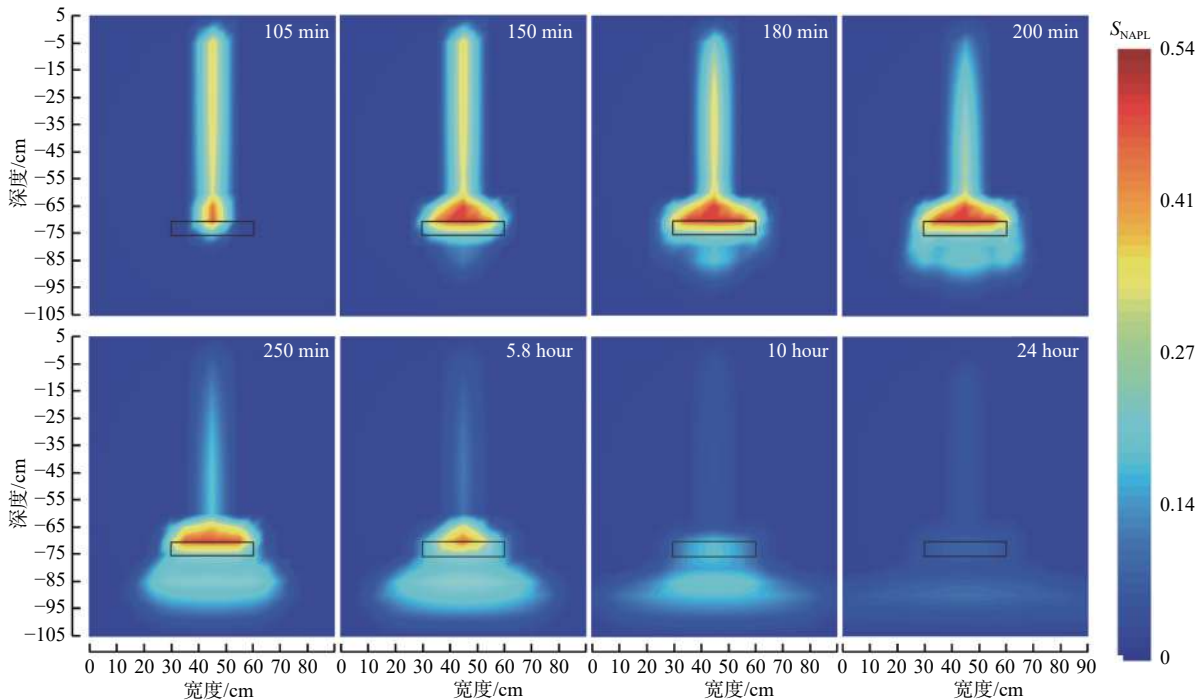


图 3 细砂透镜体中不同时刻 LNAPL 饱和度分布
Fig. 3 Distribution of LNAPL saturation at different moments in the fine-sand lens model

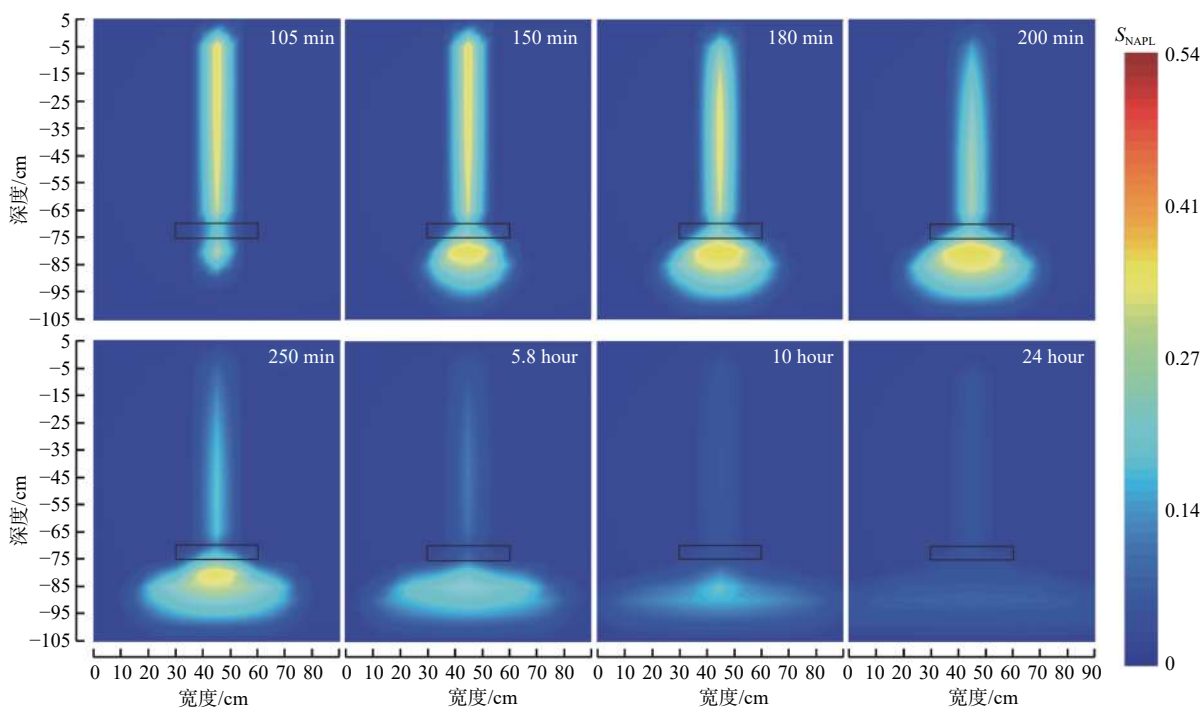


图 4 粗砂透镜体中不同时刻 LNAPL 饱和度分布

Fig. 4 Distribution of LNAPL saturation at different moments in the coarse-sand lens model

持水性显著改变包气带内水分分布,水分占据孔隙空间使细砂透镜体对 LNAPL 垂向迁移表现出一定阻碍作用;而粗砂透镜体则使-70~-90 cm 深度范围内的含水率变化更加显著,促使 LNAPL 在透镜体及其下方发生显著的横向扩展。

污染物停止释放(180 min)后,粗砂透镜体模型中 LNAPL 迁移过程与释放阶段一致,而对于细砂透镜体模型,180~200 min 内透镜体两侧 4 个观察点中 S_{LNAPL} 均呈现“迅速上升-逐渐降低”规律(图 5),表明 LNAPL 横向扩展超过细砂透镜体宽度后将转而主要以“绕

流”形式运移,释放停止约 5.8 h 后透镜体上方污染物横向扩展范围逐渐减小,“绕流”减弱。

就污染物分布状况而言,180 min 后两模型-85 cm 深度以下的 LNAPL 横向扩展情况趋于一致,且两透镜体模型在该深度范围内的含水率分布规律一致(图 2),故可推断包气带内的含水率分布规律是控制 LNAPL 分布形态的主要因素。透镜体岩性差异亦将影响两模型中的 LNAPL 分布:由于细砂介质孔隙度较大且渗透性较差,10~24 h 部分 LNAPL 在透镜体内部产生滞留现象;而粗砂介质较好的渗透性则决定了其对污染物的滞留能力较差,大部分 LNAPL 集中分布于透镜体下方。模拟至 24 h 时,粗砂透镜体模型中污染物分布深度范围相比细砂透镜体模型小 28.5%,包气带内 LNAPL 分布面积(约 1 950 cm²)相比细砂透镜体模型(约 2 300 cm²)小 15.2%。

2.2 水位波动条件下自由相迁移分布

各种原因造成的地下水补排不平衡将导致水位短时波动(如地表水-地下水相互转化、降水入渗等^[29]),使包气带内 LNAPL 迁移分布状况复杂化^[15]。本节以细砂、粗砂透镜体模型作为水位波动算例基础,保持 LNAPL 瞬时释放(4.483 mL/min,释放 180 min),通过下层 18 个网格作为控制水位波动的源汇项,在 250 min 时控制水位由-100 cm 升至-80 cm,并于 12 h 时恢复至-100 cm。图 6(a)、(b) 分别代表水位波动条

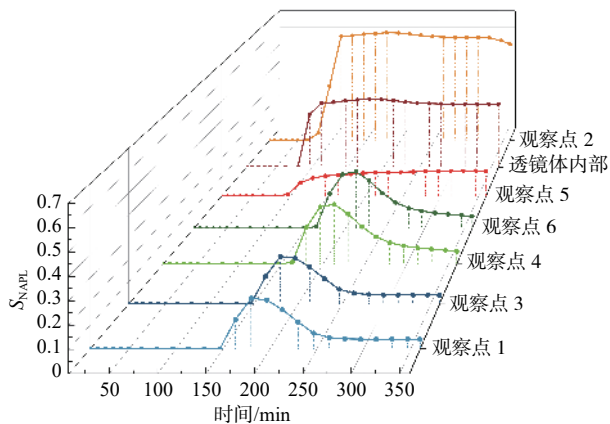


图 5 细砂透镜体周围各观察点 S_{LNAPL} 对比 (0~360 min)

Fig. 5 Comparison of S_{LNAPL} at each observation point around the fine-sand lens (0~360 min)

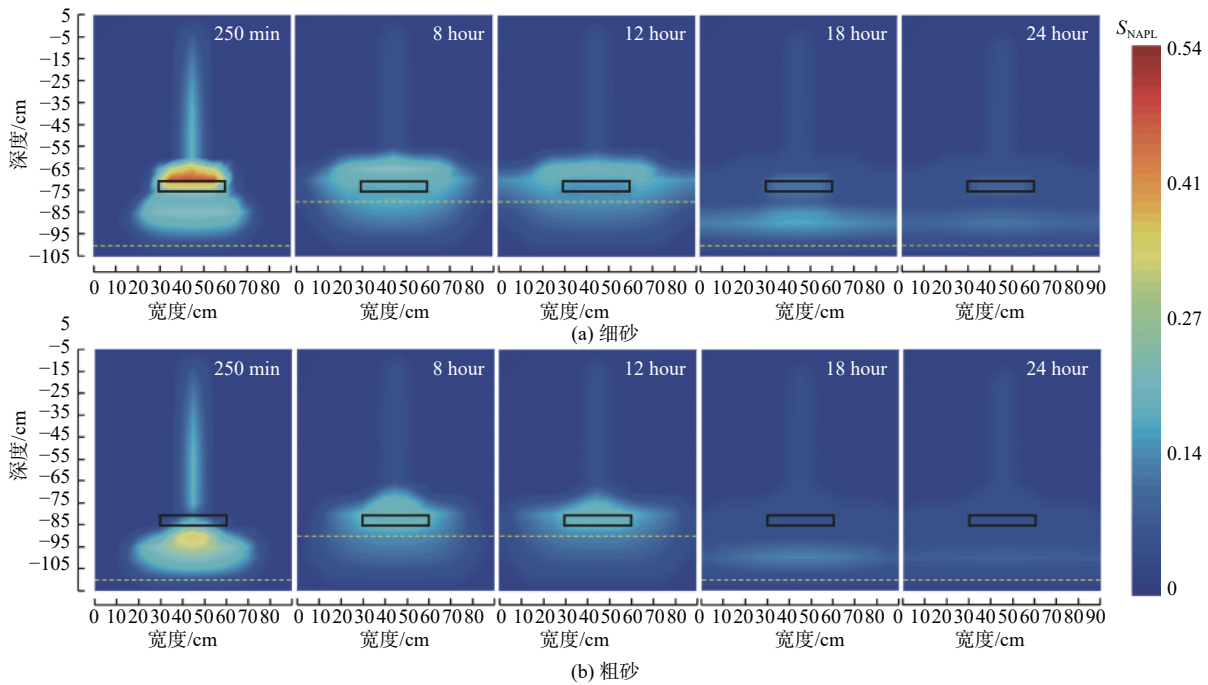


图 6 地下水位波动情景中不同时刻 LNAPL 饱和度分布

Fig. 6 Distribution of LNAPL saturation at different moments in the water table fluctuation scenario

件下细砂、粗砂透镜体模型中 LNAPL 迁移分布。

对于细砂透镜体模型, 水位上升阶段污染物在浮力作用下向上抬升, 至 12 h 时 LNAPL 主要分布于透镜体上方并呈连续池状(Pool)^[30], 此时透镜体上方(观察点 2) S_{NAPL} 相比水位恒定时上升 0.15。同时, 水位升高使 LNAPL 迁移过程发生显著变化, 图 7 所示为 100 min 至 24 h 内透镜体上方(观察点 2)、下方(观察点 5)以及透镜体内部 S_{NAPL} 变化状况, 对比可知, 水位升高时细砂透镜体内部 S_{NAPL} 相比水位恒定情景减小 0.13 ~ 0.20, 透镜体两侧 S_{NAPL} 平均值相比水位恒定时增大

257% ~ 386%, 表明水位升高时 LNAPL 将主要以“绕流”形式在包气带内运动, 其原因为水位升高时细砂透镜体含水率增大至 35.8%, 更加显著的透镜体高含水率特征导致其对 LNAPL 迁移的阻碍作用增强。

水位降低时(12 ~ 24 h)包气带内含水率分布恢复为水位波动前状况, 已大范围横向扩展的 LNAPL 在重力作用下向下迁移, 故 18 h 后透镜体内部及其周围 S_{NAPL} 变为与水位恒定情景一致(图 7)。经水位波动, -60 ~ -80 cm 深度内 LNAPL 分布范围大幅增加, 导致包气带内 LNAPL 分布面积相比水位恒定情景中增大大约 51%。此外, 24 h 时部分 LNAPL 蓄积于地下水位以上呈透镜体状, 其横向分布范围、 S_{NAPL} 最大值相比水位恒定时分别增大 12.5%、5.6%, 表明水位开始降低时部分 LNAPL 仍以“绕流”形式运动, 由此造成更多污染物向下部区域迁移。

对于粗砂透镜体模型, 水位升高时大部分 LNAPL 分布于透镜体内部及上方, 结合图 8 可知, 250 min 后粗砂透镜体内部及其上方 S_{NAPL} 均出现上升, 透镜体内部 S_{NAPL} 相比水位恒定时平均增大 0.19, 其原因为: 水位升高使透镜体进一步成为 LNAPL 迁移分布过程的相对“优势空间”。此外, 水位升高时透镜体两侧 S_{NAPL} 相比水位恒定时平均增大 0.13 ~ 0.16, 表明水位抬升使 LNAPL 转为在透镜体区域发生横向迁移, 透镜体所处的 -70 ~ -75 cm 深度内污染物横向扩展范

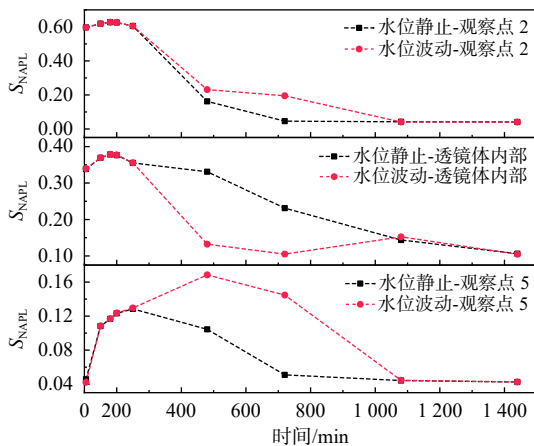


图 7 水位恒定与波动条件下细砂透镜体附近 S_{NAPL} 对比

Fig. 7 Comparison of S_{NAPL} near the fine-sand lens under the stationary and fluctuating water table conditions

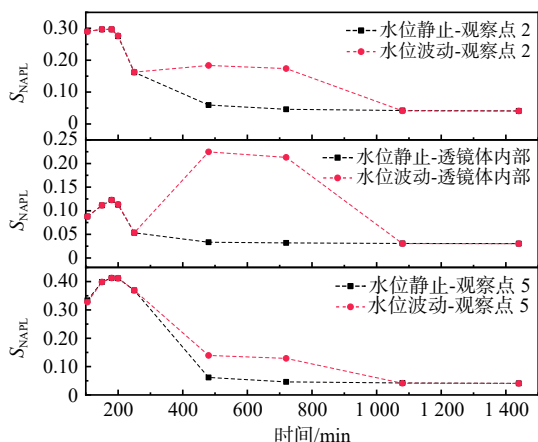


图 8 水位恒定与波动条件下粗砂透镜体附近 S_{NAPL} 对比

Fig. 8 Comparison of S_{NAPL} near the coarse-sand lens under the stationary and fluctuating water table conditions

围相对增大约 64.3 cm。

水位降低过程中,粗砂透镜体内部及其上方聚集的 LNAPL 向透镜体下方迁移,至 24 h 时同样在地下水位附近蓄积形成 LNAPL 污染晕。经历水位波动

后,该模型包气带内污染物分布面积相对水位恒定时增大约 63%,对比细砂透镜体模型可知,水位波动对粗砂透镜体模型中污染物分布的影响更加显著。

2.3 溶解相分布特征

以 LNAPL 在水相中的质量分数 $x(aq)$ 作为表征 LNAPL 溶解相分布特征的定量指标,图 9(a)(b) 分别代表水位恒定时,两种透镜体模型中溶解相 LNAPL 的分布变化情况。LNAPL 释放阶段两模型中溶解相分布差异主要体现在透镜体附近,细砂透镜体模型观察点 1、3 中 $x(aq)$ 平均值均为 6.98×10^{-5} ,相比粗砂透镜体模型高 81%。其次,由于粗砂透镜体的“优势通道”作用以及粗砂较好的渗透性,至 180 min 时粗砂透镜体下方的溶解相分布面积相比细砂透镜体大 46% 左右。释放结束后,随自由相的迁移,两模型内溶解相均出现较大扩展,至 24 h 时细砂透镜体模型包气带内溶解相分布面积(约 $2\,600\text{ cm}^2$)相比粗砂透镜体模型(约 $2\,150\text{ cm}^2$)大 20.9%。上述结果表明,两模型包气带内溶解相的分布规律均与自由相一致,但其分布范围的差异相比自由相表现得更为显著。

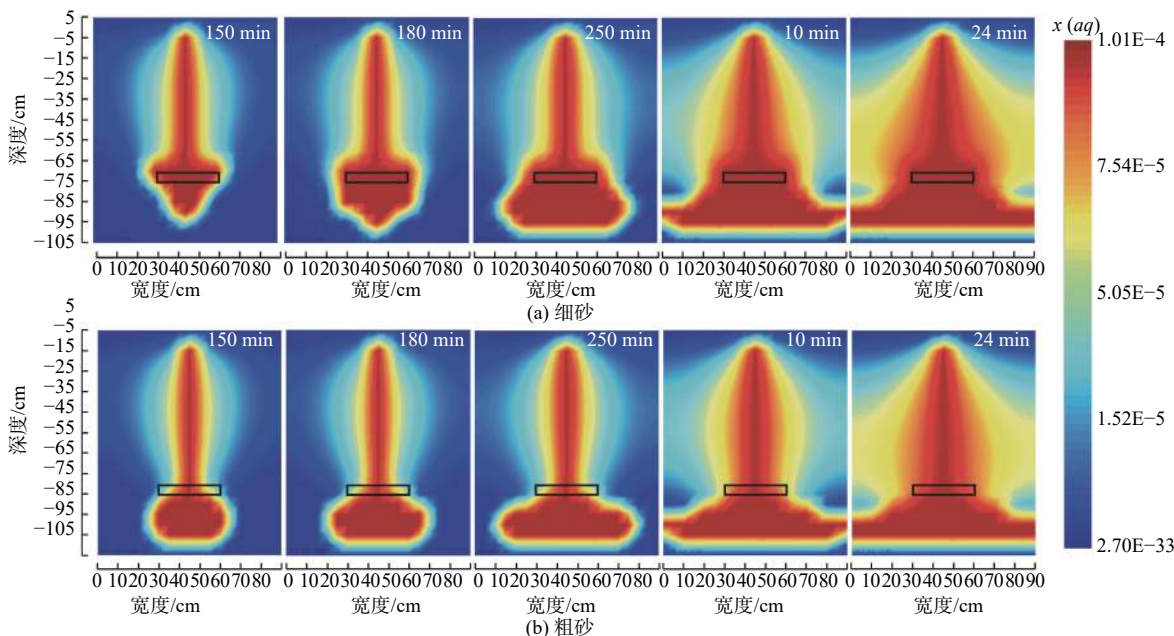


图 9 细砂、粗砂透镜体中不同时刻 LNAPL 在水相中的质量分数 $x(aq)$

Fig. 9 Distribution of $x(aq)$ at different moments in the fine sand-lens model

地下水位波动条件下,溶解相分布特征亦与自由相 LNAPL 密切相关,水位升高时两模型中自由相均集中分布于 $-70 \sim -85\text{ cm}$,由此使该深度成为水位波动条件下溶解相分布最广泛的区域。水位波动使溶解相分布状况趋于一致:12 h 时两模型在 -60 cm 以下的溶解相分布面积仅相差约 100 cm^2 ,至 24 h 时两模

型的溶解相分布差异仅体现在包气带上部。

2.4 LNAPL 挥发过程

LNAPL 通过质量交换进入气相,将以挥发方式向上穿过包气带到达地表^[31],本节通过模型顶部单元格计算得到的平均气相 VOC 通量数据表征 LNAPL 挥发,图 10 及图 11 所示分别为水位恒定、水位波动条

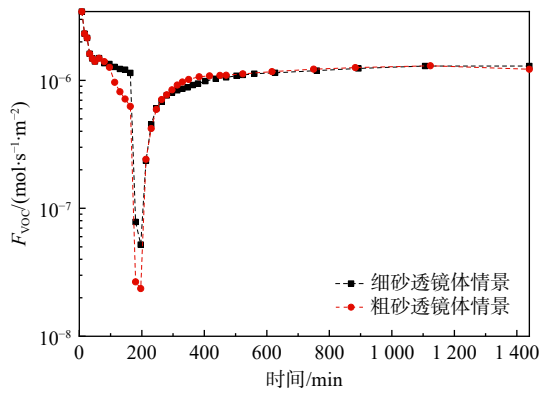


图 10 不同透镜体模型中 LNAPL 挥发通量对比

Fig. 10 Comparison of LNAPL volatile flux in each lens structure model

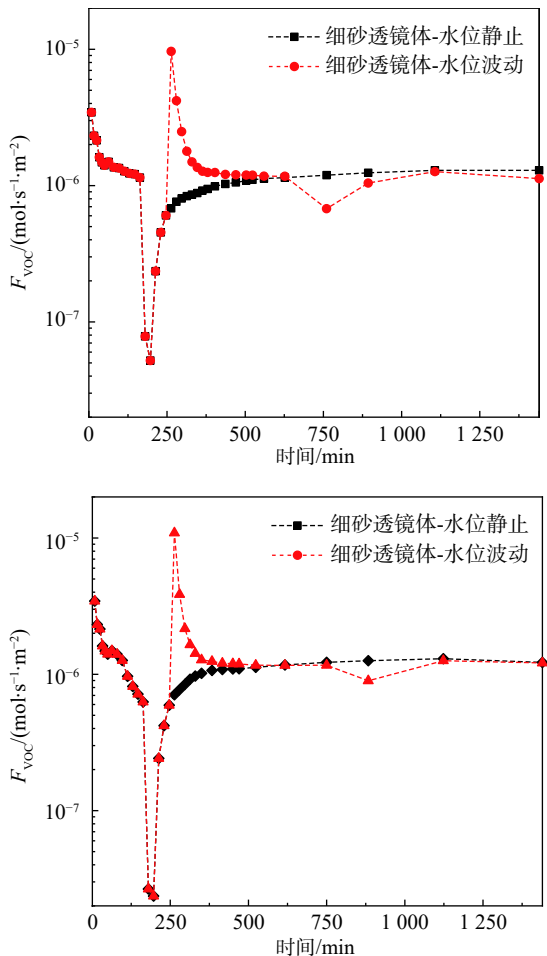


图 11 不同水位情景中 LNAPL 挥发通量对比

Fig. 11 Comparison of LNAPL volatile flux in different water table scenarios

件下两模型中挥发通量的变化情况。

水位恒定时,由于污染物横向扩展阻碍了气体-LNAPL 质量交换,因此两模型中挥发通量在此阶段均呈降低趋势(图 10)。此阶段两模型挥发过程存在一定区别:结合图 3、图 4 对比挥发通量可知,由于粗砂

透镜体对 LNAPL 垂向运动呈“优势通道”作用,透镜体下方污染物分布范围更大,故粗砂透镜体模型中溶解过程更显著,其挥发通量平均值($1.40 \times 10^{-6} \text{ mol}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$)相比细砂模型($1.53 \times 10^{-6} \text{ mol}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$)小 8.5%。LNAPL 释放停止后,两模型中挥发过程均呈现出“先减弱-后增强”趋势,并在 23 h 左右达到峰值($1.3 \times 10^{-6} \text{ mol}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$)。结合气体质点方向分析,释放停止后包气带上部的 LNAPL 对水、气驱替减缓,部分气体快速向原 LNAPL 下渗路径上运动,填补多孔介质中 LNAPL 减少所产生的“空缺”,且由于 180 min 后包气带下部的 LNAPL 分布范围扩大,故挥发通量上升。

地下水位波动时,由于水位抬升打破饱和带内原有的三相平衡状态,且水位升高时 LNAPL 将优先驱替多孔介质内的气体^[11],故水位开始抬升时细砂、粗砂透镜体模型中挥发通量分别迅速上升至 $9.64 \times 10^{-6} \text{ mol}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$ 、 $1.09 \times 10^{-5} \text{ mol}/(\text{s} \cdot \text{m}^2)$,此时分别于细砂透镜体两侧、粗砂透镜体上部观察到挥发通量快速增大,部分 LNAPL 迅速以气相形态向上逸散。挥发通量快速到达峰值后,由于两模型中 LNAPL 均在透镜体区域横向扩展,阻碍了气体-LNAPL 质量交换过程,故此阶段模型中挥发通量呈逐渐降低趋势。两透镜体模型在水位上升阶段(250 min 至 12 h)的平均挥发通量相比水位恒定时分别增大 124%、126%,表明水位上升将大幅增强 LNAPL 的挥发过程。水位降低时两模型的挥发通量均出现小幅度波动,结合气体质点运动方向分析,随着水位降低,模型下部介质孔隙内 LNAPL 及水分均向下迁移,模型上部挥发相随之转为向下部运动,故模型上部挥发通量均有所降低。

3 结论

(1) 地下水位恒定时,介质含水率差异导致粗砂透镜体表现出对 LNAPL 垂向迁移的“优势通道”作用,细砂透镜体则起不完全阻碍作用,使 LNAPL 呈现“蓄积穿透-横向扩展-绕流”迁移过程。细砂、粗砂透镜体模型中 LNAPL 主要分布于透镜体内部、下方,两模型包气带内污染物分布面积相差约 15.2%。

(2) 地下水位波动将使粗砂透镜体进一步成为 LNAPL 迁移分布的“优势空间”,而其导致的细砂透镜体含水率变化则使“绕流”显著增强。水位波动使 -60 ~ -80 cm 深度内 LNAPL 分布范围大幅增加,细砂、粗砂模型包气带内 LNAPL 分布面积相比水位恒定情景分别增大 51%、63%。

(3) 溶解相分布规律与自由相迁移密切相关,水

位恒定时两模型中溶解相分布差异主要体现在透镜体附近,至 24 h 时溶解相分布面积相差 20.9%,地下水位波动则使该差距显著减小至约 100 cm²。

(4) 气体-LNAPL 接触条件、LNAPL 分布状况决定 LNAPL 挥发强度变化,两模型中挥发强度变化均呈“先减弱-后增强”趋势,前 180 min 粗砂透镜体模型平均挥发量相比细砂透镜体模型小 8.5%。水位波动使包气带内三相平衡状态受扰动,主要表现在水位抬升阶段 LNAPL 挥发增强,该阶段两模型中平均挥发量相比水位恒定时分别增大 124%、126%。

参考文献 (References) :

- [1] YOON H, WERTH C J, BARKAN C P L, et al. An environmental screening model to assess the consequences to soil and groundwater from railroad-tank-car spills of light non-aqueous phase liquids[J]. *Journal of Hazardous Materials*, 2009, 165(1-3): 332 - 344.
- [2] 刘玉兰,程莉蓉,丁爱中,等. NAPL 泄漏事故场地地下水污染风险快速评估与决策[J]. *中国环境科学*, 2011, 31(7): 1219 - 1224. [LIU Yulan, CHENG Lirong, DING Aizhong, et al. Quick assessment of groundwater risk after NAPL spill and its application in site emergency management[J]. *China Environmental Science*, 2011, 31(7): 1219 - 1224. (in Chinese with English abstract)]
- [3] 刘汉乐,周启友,徐速. 非饱和带中非均质条件下 LNAPL 运移与分布特性实验研究[J]. *水文地质工程地质*, 2006, 33(5): 52 - 57. [LIU Hanle, ZHOU Qiyu, XU Su. An experimental investigation of LNAPL migration and redistribution in unsaturated heterogeneous porous media[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2006, 33(5): 52 - 57. (in Chinese with English abstract)]
- [4] DUNN A M, SILLIMAN S E. Air and water entrapment in the vicinity of the water table[J]. *Groundwater*, 2003, 41(6): 729 - 734.
- [5] ALAZAIZA M Y D, NGIEN S K, COPTY N, et al. Assessing the influence of infiltration on the migration of light non-aqueous phase liquid in double-porosity soil media using a light transmission visualization method[J]. *Hydrogeology Journal*, 2019, 27(2): 581 - 593.
- [6] 王莹莹,郭秀军,邵帅,等. 土壤毛细带内油污染区探地雷达异常特征分析及状态评价[J]. *地球物理学进展*, 2018, 33(5): 2172 - 2180. [WANG Yingying, GUO Xiujun, SHAO Shuai, et al. Abnormal features analysis and status evaluation for oil contaminated site in capillary zone based on ground penetrating radar[J]. *Progress in Geophysics*, 2018, 33(5): 2172 - 2180. (in Chinese with English abstract)]
- [7] 束善治,梁宏伟,袁勇. 轻非水相液体在非均质地层包气带中运移和分布特征数值分析[J]. *水利学报*, 2002, 33(11): 31 - 37. [SHU Shanzhi, LIANG Hongwei, YUAN Yong. Numerical analysis of transportation and distribution of light non-aqueous phase liquids in partially saturated heterogeneous soils[J]. *Journal of Hydraulic Engineering*, 2002, 33(11): 31 - 37. (in Chinese with English abstract)]
- [8] SLEEP B E, SEHAYEK L, CHIEN C C. A modeling and experimental study of light nonaqueous phase liquid (LNAPL) accumulation in wells and LNAPL recovery from wells[J]. *Water Resources Research*, 2000, 36(12): 3535 - 3545.
- [9] SOOKHAK LARI K, KING A, RAYNER J L, et al. Quantifying the benefits of in-time and in-place responses to remediate acute LNAPL release incidents[J]. *Journal of Environmental Management*, 2021, 287: 112356.
- [10] DOBSON R, SCHROTH M H, ZEYER J. Effect of water-table fluctuation on dissolution and biodegradation of a multi-component, light nonaqueous-phase liquid[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2007, 94(3/4): 235 - 248.
- [11] 罗凌云. LNAPL 在包气带形成的透镜体形状及水位波动对其的影响[D]. 长春: 吉林大学, 2017. [LUO Lingyun. The shape of lens formed of LNAPL in vadose zone and the influence of the fluctuation of the water table[D]. Changchun: Jilin University, 2017. (in Chinese with English abstract)]
- [12] 刘汉乐,张晨富,刘宝臣,等. 轻非水相液体在不同粒径多孔介质中的运移与分布特性[J]. *水文地质工程地质*, 2014, 41(2): 105 - 110. [LIU Hanle, ZHANG Chenfu, LIU Baochen, et al. Experimental investigation of migration and distribution characteristics of LNAPL contaminants in porous media of different particle sizes[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2014, 41(2): 105 - 110. (in Chinese with English abstract)]
- [13] 任璇. LNAPLs 在包气带层状非均质界面迁移规律的研究[D]. 长春: 吉林大学, 2019. [REN Xuan. Study on migration law of LNAPLs at layered heterogeneous interface in vadose zone[D]. Changchun: Jilin University, 2019. (in Chinese with English abstract)]
- [14] 王颖,陈雷,杨洋,等. 基于 TMVOC 的地下水位波动带苯系物迁移转化模拟[J]. *环境科学研究*, 2020, 33(3): 634 - 642. [WANG Ying, CHEN Lei, YANG Yang, et al. Numerical simulation of BTEX migration in groundwater table fluctuation zone based on TMOVC[J]. *Research of Environmental Sciences*, 2020, 33(3): 634 -

642. (in Chinese with English abstract)]
- [15] 杨明星. 石油有机污染组分在水位波动带中的分异演化机理研究[D]. 长春: 吉林大学, 2014. [YANG Mingxing. Fate and transport of petroleum organic compounds in water table fluctuation zone[D]. Changchun: Jilin University, 2014. (in Chinese with English abstract)]
- [16] SCHROTH M H, ISTOK J D, SELKER J S. Three-phase immiscible fluid movement in the vicinity of textural interfaces[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 1998, 32(1): 1 – 23.
- [17] 陶佳辉, 施小清, 康学远, 等. 轻非水相液体污染源区结构的影响因素数值分析[J]. *水文地质工程地质*, 2018, 45(6): 132 – 140. [TAO Jiahui, SHI Xiaoqing, KANG Xueyuan, et al. Numerical analyses of factors affecting the LNAPL source-zone architecture[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2018, 45(6): 132 – 140. (in Chinese with English abstract)]
- [18] SIMANTIRAKI F, AIVALIOTI M, GIDARAKOS E. Implementation of an image analysis technique to determine LNAPL infiltration and distribution in unsaturated porous media[J]. *Desalination*, 2009, 248(1): 705 – 715.
- [19] WIPFLER E L, NESS M, BREEDVELD G D, et al. Infiltration and redistribution of LNAPL into unsaturated layered porous media[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2004, 71(1–4): 47 – 66.
- [20] 刘月峤, 丁爱中, 刘宝蕴, 等. 地下水水位波动带中石油烃污染迁移转化规律综述[J]. *科学技术与工程*, 2018, 18(24): 172 – 178. [LIU Yueqiao, DING Aizhong, LIU Baoyun, et al. A review of the petroleum hydrocarbon contamination transformation performance in the zone of intermittent saturation[J]. *Science Technology and Engineering*, 2018, 18(24): 172 – 178. (in Chinese with English abstract)]
- [21] BAEDECKER M J, EGANHOUSE R P, BEKINS B A, et al. Loss of volatile hydrocarbons from an LNAPL oil source[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2011, 126(3–4): 140 – 152.
- [22] 赵科锋, 王锦国, 曹慧群. 含单裂隙非饱和带中轻非水相流体修复的数值模拟[J]. *水文地质工程地质*, 2020, 47(5): 43 – 55. [ZHAO Kefeng, WANG Jinguo, CAO Huiqun. Numerical simulation of light non-aqueous phase liquids remediation in the unsaturated zone with single fractures[J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2020, 47(5): 43 – 55. (in Chinese with English abstract)]
- [23] PRUESS K, BATTISTELLI A. TMVOC, A numerical simulator for three-phase non-isothermal flows of multicomponent hydrocarbon mixtures in saturated-unsaturated heterogeneous media[R]. Berkeley, CA, USA: Lawrence Berkeley National Laboratory, 2002.
- [24] 王颖, 汪洋, 唐军, 等. 基于TMVOC的水位波动带土壤气相抽提模拟[J]. *中国环境科学*, 2020, 40(1): 350 – 356. [WANG Ying, WANG Yang, TANG Jun, et al. Numerical simulation of SVE in groundwater table fluctuation zone based on TMVOC[J]. *China Environmental Science*, 2020, 40(1): 350 – 356. (in Chinese with English abstract)]
- [25] 李永涛. LNAPLs在包气带中运移机理及模拟研究[D]. 西安: 长安大学, 2010. [LI Yongtao. Study on migration mechanism and simulation of light nonaqueous-phase liquids in vadose zone[D]. Xi'an: Chang'an University, 2010. (in Chinese with English abstract)]
- [26] 浦焯枫, 江思珉, 栗现文, 等. DNAPLs在低渗透性夹层影响下的迁移和分布特征研究[J]. *工程勘察*, 2015, 43(12): 43 – 47. [PU Yefeng, JIANG Simin, LI Xianwen, et al. Study on migration and distribution of DNAPLs affected by layers with low permeability[J]. *Geotechnical Investigation & Surveying*, 2015, 43(12): 43 – 47. (in Chinese with English abstract)]
- [27] KARADAG K, YATI I, BULBUL SONMEZ H. Effective clean-up of organic liquid contaminants including BTEX, fuels, and organic solvents from the environment by poly(alkoxysilane) sorbents[J]. *Journal of Environmental Management*, 2016, 174: 45 – 54.
- [28] 朱振慧, 高宗军, 张晓海, 等. 轻质非水相流体(柴油)在多孔介质中的垂向运移[J]. *环境工程学报*, 2015, 9(4): 1842 – 1848. [ZHU Zhenhui, GAO Zongjun, ZHANG Xiaohai, et al. Vertical migration of LNAPLs(diesel) in porous medium[J]. *Chinese Journal of Environmental Engineering*, 2015, 9(4): 1842 – 1848. (in Chinese with English abstract)]
- [29] GRIBOVSKI Z, SZILAGYI J, KALICZ P. Diurnal fluctuations in shallow groundwater levels and streamflow rates and their interpretation-A review[J]. *Journal of Hydrology*, 2010, 385(1/2/3/4): 371 – 383.
- [30] HA J H, SEAGREN E A, SONG X. Oxygen transport across the capillary fringe in LNAPL pool-source zones[J]. *Journal of Environmental Engineering*, 2014, 140(12): 1 – 11.
- [31] KIM J, CORAPCIOGLU M Y. Modeling dissolution and volatilization of LNAPL sources migrating on the groundwater table[J]. *Journal of Contaminant Hydrology*, 2003, 65(1/2): 137 – 158.