陈 航,杨 洁,杜文强,等.潜水位变动对非均匀介质中 DNAPL 分布影响的数值模拟研究 [J]. 中国环境科学, 2025,45(10):5796-5810.
Chen H, Yang J, Du W Q, et al. The numerical simulation study of the impact on DNAPL distribution in heterogeneous media due to fluctuation of water table [J]. China Environmental Science, 2025,45(10):5796-5810.

潜水位变动对非均匀介质中 DNAPL 分布影响的数值模拟研究

陈 航[1,2,3],杨 洁[2,3*],杜文强[4],胡立堂[2,3],宋权威[1],刘 俊[5] (1.石油石化污染物控制与处理国家重点实验室,北京 102206；2.北京师范大学水科学研究院,北京 100875；3.地下水污染控制与修复教育部工程研究中心,北京 100875；4.中国石油乌鲁木齐石化分公司,新疆 乌鲁木齐 830019；5.北京师范大学自然科学高等研究院水科学研究中心,广东 珠海 519087)

摘要：为了准确刻画近年华北滨海地区地下水回升对重非水相液体(DNAPL)污染物运移的影响,以天津某非水相液体(NAPL)污染场地为例,利用多相流数值模型 TOUGH/TMVOC,模拟了潜水位变动条件下 DNAPL 在均质与层状非均质介质中的迁移特征,重点研究了其在潜水位界面附近的变化规律.研究发现:NAPL 相是 DNAPL 在地下水中迁移的主要存在形态,在均质饱和介质中,DNAPL 迁移呈现垂向渗透与横向扩散的双重特征.在非饱和-饱和含水层系统中,潜水位界面下方 DNAPL 饱和度呈现显著跃升特征,较初始泄漏阶段增加 47.5%.水位回升条件下,污染物 DNAPL 饱和度突增及纵向迁移现象减弱,延伸速率较之低水位降低 1.5~1.8 倍;同时,溶解相组分的气化相变受到抑制,导致气相 DNAPL 含量减少.潜水位动态变化与层状非均质地层结构共同调控 DNAPL 迁移过程,低渗透层阻滞 DNAPL 迁移.尽管穿越潜水面后 DNAPL 饱和度有所增加,但其最大饱和度相较饱和条件仍降低 6%~7%,污染物质量减少 13%~15%.建议在潜水位附近 DNAPL 达到最低饱和度时,进行污染物阻断,以提升修复效率.

关键词：重非水相液体(DNAPL)；潜水位；TMVOC;数值模拟
中图分类号：X53 **文献标识码**：A **文章编号**：1000-6923(2025)10-5796-15

The numerical simulation study of the impact on DNAPL distribution in heterogeneous media due to fluctuation of water table.

CHEN Hang[1,2,3], YANG Jie[2,3*], DU Wen-qiang[4], HU Li-tang[2,3], SONG Quan-wei[1] , LIU Jun[5] (1.State Key Laboratory of Petroleum Pollution Control, Beijing 102206, China；2.College of Water Science, Beijing Normal University, Beijing 100875, China；3.Engineering Research Center of Groundwater Pollution and Remediation, Ministry of Education, Beijing 100875, China；4.Petro China Urumqi Petrochemical Company, Urumqi 830019, China；5.Advanced Institute of Natural Sciences, Beijing Normal University, Guangdong 519087, China). *China Environmental Science*, 2025,45(10)：5796~5810

Abstract：To accurately characterize the impact on DNAPL contaminant migration under the background of groundwater level rise in the coastal areas of North China in recent years, a case study was conducted at a NAPL contaminated site in Tianjin. Utilizing the multiphase flow numerical model TOUGH/TMVOC, a simulation was constructed to analyse the migration characteristics of DNAPL in both homogeneous and layered heterogeneous media under varying groundwater levels. The focus of the study was on the variation of DNAPL movement above and below the water table interface. The key findings were as follows: the NAPL phase was the primary form in which DNAPL migrates in groundwater. In homogeneous saturated media, DNAPL migration exhibited both vertical infiltration and horizontal diffusion. In the unsaturated-saturated aquifer system, a significant increase in DNAPL saturation was observed below the water table interface, with an increase of 47.5% compared to the initial leakage stage. Under water level recovery conditions, the phenomena of sudden increases in DNAPL saturation and vertical migration of contaminants were weakened, with the extension rate decreasing by 1.5~1.8 times compared to low water levels; simultaneously, the phase change of dissolved components to gaseous state was inhibited, resulting in reduced amount of gas phase DNAPL. The dynamic changes in the water table, in conjunction with the layered heterogeneous stratum structure, jointly regulated the DNAPL migration process. Low-permeability layers impeded DNAPL migration. Although DNAPL saturation increased after crossing the water table, its maximum saturation still decreased by 6%~7% compared to the saturated conditions, and the mass of contaminants decreased by 13%~15%. It is recommended to implement contaminant interception when DNAPL reached minimum saturation near the water table to improve remediation efficiency.

Key words：dense non-aqueous phase liquids (DNAPL)；water table；TMVOC；numerical simulation

收稿日期：2025-03-17
基金项目：石油石化污染物控制与处理国家重点实验室开放基金资助项目(PPC2020016);国家重点研发计划项目(2023YFC3711300);国家自然科学基金资助项目(41403085)

* 责任作者, 副教授, yangjie@bnu.edu.cn

在石油及其化工产品的生产、储运和使用过程中,由于非正规管理或操作不当等原因,导致土壤和地下水污染问题日益严重[1-2].重非水相液体(DNAPL)主要为含氯的碳氢化合物以及氯化有机溶剂[3],例如三氯乙烯(TCE)、四氯乙烯(PCE)、二氯甲烷及酚等有毒的成分,在地下水中的迁移机制复杂,以吸附态、自由态、溶解态、挥发态等形态存在于土壤地下水系统中,随着地下水位的变动对地下水造成长期的污染[4-5].DNAPL 具有较低的溶解度和粘度,以及较高的密度,因此能够穿透包气带并进入含水层,最终在地下水中形成污染池,该污染池将成为二次污染源,释放污染物污染地下水[6].近年来属于多相渗流现象的非水相液体污染在地下水污染和治理中变得越来越突出[7].

关于非水相液体的研究,目前国内研究成果主要集中于轻非水相问题[8],对于重非水相污染物研究分析相对不多[9-10].针对 DNAPL 的监测方法主要有钻孔取样法、图像法[11-12]、电阻率成像法[13-14]、数值模拟[10]等.但由于野外复杂的地质条件与较高的监测成本,多数研究以室内实验尺度为主.其中,图像法作为一种快速、准确的非侵入式监测方法,可有效研究 DNAPL 在多孔介质中的迁移机理,常常被应用于 DNAPL 的迁移监测中[15].虽然图像法能有效获取污染物在二维多孔介质区域中的迁移规律,但无法定量分析污染物饱和度分布特征[16].因此,为进一步探究 DNAPL 在地下水中的污染入渗过程,需结合数值模拟方法来确定入渗过程中 DNAPL 的位置与空间分布特征.在国内,学者们通过数值模拟揭示了介质特性与流体动力学的耦合作用机制.施小清等[17]和胡立堂等[18]分别构建多相流模型,发现垂向迁移主导性、毛管压力函数选择性,如 Parker 模型较 van Genuchten 模型阻滞作用更强[3],以及吸附-生物降解主导的自然衰减过程.张梦琳[19]和巨梦蝶等[20]强调了动态监测的重要性,前者建立了污染羽分布图谱用于主控因素识别,后者指出渗透系数场前期勘测以及基于非水相液体(NAPL)相分布的动态更新可提升模型预测精度.在国外研究中,污染迁移领域呈现出方法融合与过程细化的显著特征.在技术创新方面,学者们通过多学科方法融合取得了重要突破:Kang 等[21]创新性地将深度学习技术与质量传递模型相结合,开发出新型污染源反演方法;Yu 等[22]则基于 CT 图像分析技术,提出了孔隙结构代表性单元体积(REV)筛选的新方法.在机理研究层面,最新成果系统揭示了含水层类型等关键控制因素对 DNAPL 迁移的影响机制,主要包括:承压条件更利于污染物扩散[6]、重力作用会显著改变流体运移前沿形态[23]、水位波动条件下气态污染物浓度随水位下降而增加[24]、毛细力驱动流导致低渗透区溶质累积[25],以及粘性力和裂隙开度场空间异质性对残留态 NAPL 分布的影响[26].其中,Feo 等[27]开发的紧急处理决策支持模型和 Cochennec 等[23]开展的重力效应机理研究,为实际污染应急处置提供了重要的理论依据和技术支撑.由此可见,数值模拟技术已经成为研究 DNAPL 迁移行为的重要工具,尤其是在应对复杂介质非均质条件的污染治理中,三维多相流数值模型为模拟 DNAPL 的迁移、溶解、扩散等提供了更高精度的支持.

近年来,地下水位的回升对污染物迁移过程产生了显著影响,其通过改变饱和-非饱和带的水文地球化学条件重构了污染物多相态迁移路径[28-30].然而,现有研究主要集中于潜水位对 LNAPL 迁移转化的影响机制[31-33],而针对 DNAPL 的相关研究有限.此外,由于现有 NAPL 污染场地数值模拟模型多局限于溶解相的模拟,对气相迁移及气-液-NAPL 三相间转化过程的关注明显不足[19],因此,系统研究 DNAPL 气相和 NAPL 相的扩散形态与空间分布特征具有重要的理论价值和现实意义.

本研究以天津滨海地区某 NAPL 污染场地为研究对象,采用多相流数值模拟技术,系统研究了 DNAPL 的扩散特征及其影响因素.研究首先通过控制变量法,分别揭示了潜水位动态变化和低渗介质对 DNAPL 迁移的单因素控制机制;进而通过多情景对比分析,阐明了潜水位动态变化与低渗介质共同对 DNAPL 迁移转化过程的影响,重点探讨了不同潜水位条件下 DNAPL 在均质与层状非均质介质中的多相态迁移过程,特别是潜水位界面附近的污染物时空分布规律,为深入理解 DNAPL 污染过程提供相关参考,同时为污染场地的修复方案制定和优化提供了理论支撑.

1　研究方法

1.1　模型选择

TOUGH 是由美国劳伦斯伯克利国家实验室开发的用于多维孔隙或裂隙介质的多相流、多组分非等温水流及热量运移的数值模拟程序(目前最新版本为 TOUGH3).TMVOC 是其中针对 NAPLs 在介质中运移、污染问题开发的模块.TMVOC 程序中模拟的多相流体系包括水、不可压缩气体、VOCs,各组分在气相、液相、NAPL 相之间通过挥发、溶解过程相互转化,可能出现相态的出现或消失,共出现 7 种不同的相态组合[34].

TMVOC 程序中,等温条件下,3 种组分(k=w−水,a−空气,n−NAPL)进行模拟时,假设同组分在不同相态中(β=gas−气相,aqueous−水相,NAPL−NAPL 相)的化学势等式:

$$u_{\mathrm{g}}^{k}=u_{\mathrm{w}}^{k}=u_{\mathrm{N}}^{k} \tag{1}$$

式中:$u_{\mathrm{g}}^{k},u_{\mathrm{w}}^{k},u_{\mathrm{N}}^{k}$ 分别是组分 k 的气相化学势,液相化学势,NAPL 相化学势.

其中组分 k 在气相中的化学势表示为:

$$u_{\mathrm{g}}^{k}=\varphi_{\mathrm{g}}^{k}P_{\mathrm{g}}X_{\mathrm{g}}^{k} \tag{2}$$

式中:φ_{g}^{k} 为组分 k 的逸度系数;X_{g}^{k} 为组分 k 在气相中的物质的量分数;P_{g} 为气相压力.

液相和 NAPL 相(β=w−water, N−NAPL)化学势为:

$$u_{\beta}^{k}=\gamma_{\beta}^{k}X_{\beta}^{k}f_{\beta}^{k,0} \tag{3}$$

式中:γ_{β}^{k} 为组分 k 在该相中的活度系数;X_{β}^{k} 为组分 k 在 β 相中的物质的量分数;$f_{\beta}^{k,0}$ 为相态 β 中组分 k 在标准态时的逸度系数.

TMVOC 中假设理想混合组分中逸度系数和活度系数均为 1,三相的分配系数以平衡常数表示:

$$K_{\mathrm{wN}}^{k}=\frac{x_{\mathrm{w}}^{k}}{x_{\mathrm{N}}^{k}},K_{\mathrm{wg}}^{k}=\frac{x_{\mathrm{w}}^{k}}{x_{\mathrm{g}}^{k}},K_{\mathrm{Ng}}^{k}=\frac{x_{\mathrm{N}}^{k}}{x_{\mathrm{g}}^{k}} \tag{4}$$

式中:K_{wN}^{k}、K_{wg}^{k} 和 K_{Ng}^{k} 分别为液相−NAPL 相、液相−气相和 NAPL 相−气相间的分配系数;x 为组分 k 在各相的物质的量分数.

且对任一体积为 V_{m},表面积为 Γ_{m} 的流动区,组成 k 的质量、能量守恒方程为:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{V_{\mathrm{m}}}M^{k}\mathrm{d}V_{\mathrm{m}}=\int_{\Gamma_{\mathrm{m}}}F^{k}m\mathrm{d}\Gamma_{\mathrm{m}}+\int_{V_{\mathrm{m}}}q^{k}\mathrm{d}V_{\mathrm{m}} \tag{5}$$

式中:V_{m} 为流动单元体的体积;为表面积;M^{k} 为组分 k 在单位体积土壤介质中的质量;F^{k} 为进入流体单元体的组分 k 的总通量;q^{k} 为组分 k 在单元体的源汇相;m 为流动区单元体表面的外法向单元矢量.

对各组分,M^{k} 包含了气相、液相和 NAPL 相的总和.其中,单位体积内水相和气相的总质量可以表示为:

$$M^{k}=\Phi\sum_{\beta}S_{\beta}\rho_{\beta}X_{\beta}^{k} \tag{6}$$

式中:Φ 表示多孔介质的孔隙度;S_{β} 为 β 相的饱和度(β=g,w);ρ_{β} 为 β 相的密度,g/cm^3;X_{β}^{k} 为组分 k 在 β 相中的质量分数.

在单位体积内 NAPL 相的总质量可以表示为:

$$M^{k}=\Phi\sum_{\beta}S_{\beta}\rho_{\beta}X_{\beta}^{k}+M_{\mathrm{ads}}^{k} \tag{7}$$

式中:S_{β}为 β 相的饱和度(β=w,g,NAPL);M_{ads}^{k} 表示组分被土壤介质瞬时逆吸附的吸附量,可用下式表示:

$$M_{\mathrm{ads}}^{k}=\left(1-\Phi\right)\rho_{\mathrm{R}}\rho_{\mathrm{w}}X_{\mathrm{w}}^{k}K_{\mathrm{oc}}f_{\mathrm{oc}} \tag{8}$$

式中:X_{w}^{k} 是组分 k 在水相中的物质的量分数;ρ_{R} 为多孔介质颗粒密度,g/cm^3;K_{oc} 是有机物在水和有机碳间的分配系数,L/kg;f_{oc} 是土壤中有机碳质量百分数.

各组分流量通量包含各相态的总和,且任一相态在重力与毛细压力的共同作用下均遵循达西定理:

$$F^{k}=\sum_{\beta}F_{\beta}^{k}=\sum_{\beta}-k\frac{k_{r\beta}\rho_{\beta}}{u_{\beta}}\left(\nabla P_{\beta}-P_{\beta}g\right) \tag{9}$$

式中:k 是岩石的固有渗透率;$k_{r\beta}$ 是 β 相的相对渗透率;u_{β} 是 β 相的动力粘度;P_{β} 是 β 相的压力;g 是重力加速度.

相对渗透率函数和毛细管压力函数是多相流模拟流体在地下水系统中运移分布的重要因子.相对渗透率函数采用 Stone 模型,具体表达式为[36]:

$$k_{\mathrm{gr}}=\left[\frac{S_{\mathrm{g}}-S_{\mathrm{gr}}}{1-S_{\mathrm{wr}}}\right]^{n} \tag{10}$$

$$k_{\mathrm{wr}}=\left[\frac{S_{\mathrm{w}}-S_{\mathrm{wr}}}{1-S_{\mathrm{wr}}}\right]^{n} \tag{11}$$

$$k_{\mathrm{nr}}=\left[\frac{1-S_{\mathrm{g}}-S_{\mathrm{w}}-S_{\mathrm{nr}}}{1-S_{\mathrm{g}}-S_{\mathrm{wr}}-S_{\mathrm{nr}}}\right]\left[\frac{1-S_{\mathrm{wr}}-S_{\mathrm{nr}}}{1-S_{\mathrm{w}}-S_{\mathrm{nr}}}\right].\left[\frac{\left(1-S_{\mathrm{g}}-S_{\mathrm{wr}}-S_{\mathrm{nr}}\right)\left(1-S_{\mathrm{w}}\right)}{1-S_{\mathrm{wr}}}\right]^{n} \tag{12}$$

式中:k_{wr}、k_{gr}、k_{nr} 为水相、气相、NAPL 相的相对渗透率;S_{wr} 为残余水饱和度;S_{nr} 为残余非水相(NAPL)饱和度;S_{gr} 为残余气相饱和度;n 为拟合参数.

三相毛细压力函数采用 Parker 模型[37],具体表达式如下:

$$\overline{S_{\mathrm{w}}}=\frac{S_{\mathrm{w}}-S_{\mathrm{m}}}{1-S_{\mathrm{m}}} \tag{13}$$

$$\overline{S_{\mathrm{l}}}=\frac{S_{\mathrm{w}}+S_{\mathrm{n}}-S_{\mathrm{m}}}{1-S_{\mathrm{m}}} \tag{14}$$

$$P_{\mathrm{cgn}}=-\frac{\rho_{\mathrm{wg}}}{\alpha_{\mathrm{gn}}}\left[\left(\overline{S_{\mathrm{l}}}\right)^{-1/m}-1\right]^{1/n} \tag{15}$$

$$P_{\mathrm{cgw}}=-\frac{\rho_{\mathrm{wg}}}{\alpha_{\mathrm{nw}}}\left[\left(\overline{S_{w}}\right)^{-1/m}-1\right]^{1/n}-\frac{\rho_{\mathrm{wg}}}{\alpha_{\mathrm{gn}}}\left[\left(\overline{S_{\mathrm{l}}}\right)^{-1/m}-1\right]^{1/n} \tag{16}$$

式中:S_{m} 为残余相饱和度;$\overline{S_{\mathrm{w}}}$、$\overline{S_{\mathrm{l}}}$ 分别为水相和液相的有效饱和度;P_{cgn}、P_{cgw} 分别为气相−NAPL 相和气相−水相之间毛细管压力;α_{gn},α_{nw} 分别为气相−NAPL 相、NAPL 相−水相之间的进气压力的倒数;ρ_{w} 为水相密度;g 为重力加速度;m、n 为 Parker 模型的拟合参数,$m=1-1/n$.

扩散系数参考了 TOUGH2 手册[38]以及 Hayduk 等[39]文章中给出的经验值(表 1).模型参数值参考了 TOUGH2 手册中给出的经验值(表 2)[38].

表 1　扩散系数

Table 1　Diffusion coefficient

介质	气相 (m^2/s)	溶解相 (m^2/s)	NAPL 相 (m^2/s)
水	2.5×10^{-5}	0	0
空气	0	2×10^{-9}	0
DNAPL	1×10^{-5}	1×10^{-9}	5×10^{-10}

表 2　模型参数

Table 2　Model parameters

介质	相对渗透率函数 Stone 模型				三相毛管压力函数 Parker 模型			
	S_{wr}	S_{nr}	S_{gr}	n	S_{m}	n	α_{gn}	α_{nw}
砂	0.0	0.05	0.001	3.0	0.0	1.84	10.0	11.0
黏土	0.15	0.05	0.001	3.0	0.15	1.86	10.8	5.58

1.2　饱和度

饱和度为多孔介质中流体所占据多孔介质体积的百分比.在 TMVOC 模型中,饱和度指气相、液相、NAPL 相的相饱和度(SG、SW、SO),多孔介质中某点的饱和度被定义为:

$$S_{\beta}=\frac{\text{在REV内流体相}\beta\text{的体积}}{\text{在REV内孔隙的体积}} \tag{17}$$

式中:β=g,w,n;REV 为该点的典型单元体.

1.3　参数敏感度分析

采用了扰动分析法进行了参数敏感性分析,扰动分析法是将目标参数在初始值附近给定人工干扰,不改变其他参数的值,计算分析模拟结果对目标参数扰动响应的敏感程度[40-41].计算方法如下:

$$S=\frac{\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\left(Q_{i+1}-Q_{i}\right)/Q_{\mathrm{a}}}{\left(P_{i+1}-P_{i}\right)/P_{\mathrm{a}}}}{n-1} \tag{18}$$

式中:S 为敏感度;n 为模拟次数;P_{i+1}、P_i 为第 i+1 次和第 i 次输入的目标参数值;P_{a} 为 P_{i+1} 和 P_i 的平均值;Q_{i+1}、Q_i 为第 i+1 次和第 i 次模拟结果;Q_{a} 为 Q_{i+1} 和 Q_i 的平均值.

2　场地条件和模型概化

2.1　场地特征

很多有机污染场地存在低渗透地层,常见于华北、长三角等区域,以黏土、粉黏土或透镜体等非均质形式存在.NAPL 污染物在不同介质中呈现出不同的迁移转化特征,在高渗区运移速度快,在低渗透区速度较慢[42].选取天津某滨海地区 NAPL 污染厂区,根据场地勘察资料显示,该区地势平坦,为滨海平原,由新生代冲积、湖积和海积形成,平均海拔高度为 3.4m.浅层地层为粉砂、粉质黏土互层,埋深 10~15m 存在滨海相黏土层,渗透系数为 5×10^{-7}cm/s 左右,场地污染特征显示,DNAPL 类污染物(如三氯乙烯)在黏土−砂界面富集,黏土夹层阻滞导致污染富集.研究区位于第四系覆盖区,无基岩出露,地下水系统主要由第四系及第三系松散层孔隙含水层构成.区域属半干旱气候,地下水开采强度较低,但矿化度偏高,仅能满足工业用水需求,不具备饮用及农业灌溉功能.天然条件下浅层地下水总体呈现西北至东南流向,与区域地势平坦特征相符.根据抽水试验数据,潜水含水层等效渗透系数为 6.9×10^{-7}~8.2×10^{-6}cm/s,微承压含水层导水系数为 0.28~2.14cm^2/s[19].

近年来,受华北地区地下水位回升影响,研究区由传统的低水位条件逐渐转变为高水位状态.这一水文地质条件的改变显著影响了污染物迁移过程,高水位期导致饱和带范围持续扩大,促进了污染物在砂层中的水平扩散.

2.2 模型概化

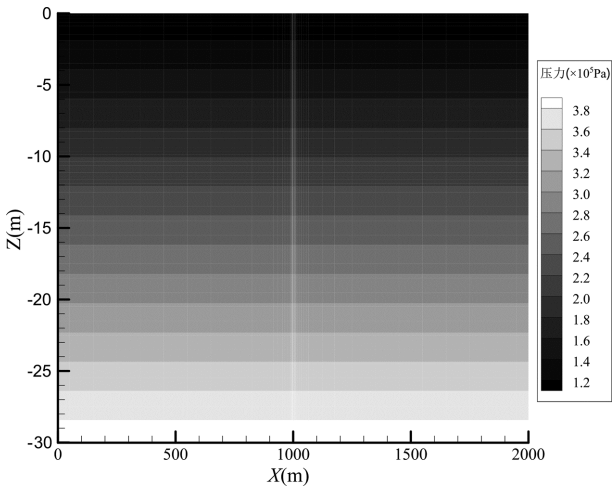


图 1 含水层初始流场中静水压力

Fig.1 Initial hydrostatic pressure in the aquifer

选择典型二维剖面进行模拟分析,模拟范围为 2000m×30m 的 X–Z 平面上的二维垂向剖面,水平方向上长 2000m(X轴),宽度 0.25m(Y轴),垂向上从地表面延伸至地下 30m(Z轴),对模型进行不均匀剖分,总体上,网格剖分越密,污染羽刻画越精细,网格剖分密度对污染羽刻画极为重要.总计剖分为 4272 个网格,在污染物泄露处及其垂直方向采用 0.25×0.25m 的剖分密度,X方向以 1000m 为中心,剖分的 40 个网格,每个为 0.25m,Y 轴方向在−9~−12m 以及模型顶部与底部各 1m 处,剖分的 20 个网格各为 0.25m.模型顶部为大气边界,压力为 1.013×10^5Pa,左右边界为定压边界,左右边界保持压力不变,模型底部为不透水的黏土层,即零通量边界.在近地表处降雨以 10cm/a 的入渗速率均匀补给包气带.单位网格的降水入渗速率由下式得出[10]:

$$\theta = \alpha \cdot P \cdot A \cdot \rho_{\mathrm{w}} \tag{19}$$

式中:θ 为单位网格的降水入渗的质量速率,kg/s;α 为降水入渗系数,取经验值;P 为年平均降水量,取 10cm/a;A 为与大气接触的单位网格的面积,因模型为不均匀剖分,取最小单元格,计算得到每个网格降水入渗的质量速率为 1.98×10^{-7}kg/s.

2.3 特征污染物选择

本实验选用 TCE 作为 DNAPL 典型代表污染物开展实验,TCE 作为一种无色、易流动的液体,其主要物理化学性质见表 3.模型中 TCE 传质速率为 3×10^{-6}kg/s,泄露时间为 10a,泄漏点位置距地表 0.25m,距左边界 990~1010m,在未注入污染组分前,介质中不含任何有机污染物.

表 3 TCE 理化特征

Table 3 Physicochemical properties of TCE

分子量 (g/mol)	粘滞度 (Pa/s)	溶解度 (mg/L)	扩散系数 (cm^2/S)	吸附系数 (mg/g)	密度 (g/cm^3)
131.39	5.8×10^{-3}	1100	8.434×10^{-6}	19.2	1.46

2.4 模拟情景

基于华北地区地下水位回升的背景,本研究设计了高、低两种水位条件,系统研究了不同潜水位条件下 DNAPL 污染物在均质和非均质介质中的迁移转化特征.研究重点分析了潜水位界面附近的污染物迁移扩散形状与范围,数值模拟中的主要参数如下(表 4).

表 4 介质参数

Table 4 Parameters of different media

介质	密度 (kg/m^3)	孔隙度	渗透率 (m^2)	导热系数 [W/(m.K)]	比热 [J/(kg·K)]
砂	2600	0.42	5×10^{-12}	2	1000
黏土	2600	0.42	5×10^{-15}	2	1000

表 5 各情景模型设置

Table 5 Settings of scenario models

方案设计	影响因素		模型设计	设置目的
S1	饱和度	饱和介质	填充物为砂	探究 DNAPL 污染物在均质介质中的迁移过程,同时作为对照组 A
S2		饱和−非饱和	潜水位埋深 5m	探究不同潜水位下 DNAPL 污染物在均质介质中的迁移过程
S3		不同潜水面界面	潜水位埋深 12.5m	
S4	层状非均质	饱和介质	在 S1 情景下, 埋深 10~15m 处介质为黏土	探究 DNAPL 污染物在非均质介质中的迁移过程,同时作为对照组 B
S5		饱和−非饱和	在 S2 情景下, 埋深 10~15m 处介质为黏土	探究不同潜水位下 DNAPL 污染物在非均质介质中的迁移过程

并据此设计了 5 种模拟方案(表 5),建立多相流数值模拟模型,对比不同方案的结果,分析不同因素

对 DNAPL 污染羽分布的影响.模拟时环境温度恒定为 20°C,研究区内压力达到稳定状态的分布作为初始压力场,此时含水层内静水压力分布如图 1 所示.利用 TMVOC 建立二维多相流模型,采用笛卡尔坐标系剖分网格,使用编程语言提取输出文件中相关结果,转化为 TECPLOT 文件数据格式并进行绘图.

表 6　参数敏感度计算结果

Table 6　Result of sensitivity of key parameters

项目	初始值	−5%	−10%	−20%	+5%	+10%	+20%	敏感度
渗透率	5×10^{-12}	4.75×10^{-12}	4.5×10^{-12}	4×10^{-12}	5.25×10^{-12}	5.5×10^{-12}	6×10^{-12}	−0.330
TCE 饱和度	0.1028	0.1046	0.1064	0.1106	0.1012	0.0996	0.0968	
S_{nr}	0.05	0.0475	0.045	0.04	0.0525	0.055	0.06	0.0574
TCE 饱和度	0.1028	0.1025	0.1022	0.1016	0.1031	0.1034	0.1040	
α_{nw}	11	10.45	9.9	8.8	11.55	12.1	13.2	0.0173
TCE 饱和度	0.1028	0.1027	0.1026	0.1024	0.1029	0.1030	0.1031	

3　结果与讨论

3.1　参数敏感性分析

选取关键参数:渗透率、毛管压力函数中的 NAPL 相饱和度 S_{nr}、相对渗透率函数中的 NAPL 相−水相之间的进气压力的倒数 α_{nw} 进行敏感度分析,各目标参数取表 2、表 5 初始值及在其基础上增减 5%、10%、20%对应的值进行计算分析,并选取泄漏点所在垂线上的 P1(1000,−5)作为 TCE 饱和度观测点.为定量表示各目标参数的敏感度,选取泄漏 180d 时各观测点处的 TCE 稳定饱和度作为模拟结果,计算观测点处参数的敏感度,计算过程见表 6,计算得渗透率敏感度为 −0.330,S_{nr} 的敏感度为 0.0574,a_{nw} 的敏感度为 0.0173.各参数敏感度大小表现渗透率>S_{nr}>a_{nw},其中绝对渗透率敏感度最大,这与施小清等[3]、徐云翔等[41]的论文结果相符,进一步验证了模型参数设置的合理性,可以为后续模型调参与校正提供有效参考.

3.2　DNAPL 存在形态及泄露总量

表 7 展示了污染物泄漏 10a 后地下介质中各组分污染物的三相物质的量及总质量分布特征.数据显示,NAPL 相是污染物的主要存在形态.其中,S1 与 S4 情景下研究区域呈现饱和状态,而 S2、S3 与 S5 情景则为饱和−非饱和状态.通过对比分析 S1、S2 和 S3 三种情景的模拟结果,发现相较于饱水带,饱和−非饱和带中 DNAPL 污染物质量减少 13%~15%.值得注意的是,在层状非均质地层情景(S4、S5)下,污染物质量显著增加,较均质介质情景增加约 463%.

表 7　泄露 10a 后污染物的三相物质的量

Table 7　The molar quantities in the three phases after 10years of leakage

情景	溶解相 (mol)	气相 (mol)	NAPL (mol)	总物质的量 (mol)
S1	20.2	0.0	60128.5	60148.7
S2	15.0	0.5	44957.4	44972.9
S3	15.7	0.5	52003.8	52020.0
S4	123.1	5.5	366006.4	366135.0
S5	85.1	3.6	253074.2	253162.9

3.3　初始饱和均质地层(S1)

图 2 为对照组 S1 情景下,饱和多孔介质中 NAPL 相饱和度随时间变化图,30d 时,DNAPL 呈集中状态,垂向渗透与横向扩散均有限;180d 时,垂向渗透加深,横向扩散有明显的滞后现象;1a 时,垂向深度增加,横向扩散范围扩大;433d 时,污染物垂向迁移至隔水底板,在底部形成二次污染源,底部横向扩展趋势显现;到 10a,基本达到相对稳定迁移深度,底部横向分布较宽,影响范围超过 400m.在模拟注入污染物的前期,DNAPL 以垂向迁移为主,其污染区域饱和度相对较低,基本低于 0.1;随 DNAPL 的持续注入,其污染区域面积也不断增大,当 DNAPL 到达砂槽底部后,在底部聚集并形成长期的饱和态污染源区,并以源区为中心向周围横向扩散,也会出现一定的反向扩散[44],中心点的饱和度高达 0.8,较扩散初期增加了 7 倍,同以源区为核心向外逐渐减小.本研究模拟的 DNAPL 迁移过程与前人研究结果高度一致[16],这一发现不仅验证了数值模拟的准确性,同时证实了 TMVOC 模型在预测饱和多孔介质中 DNAPL 迁移行为及其污染空间分布特征方面具有较高的可靠性和预测精度.

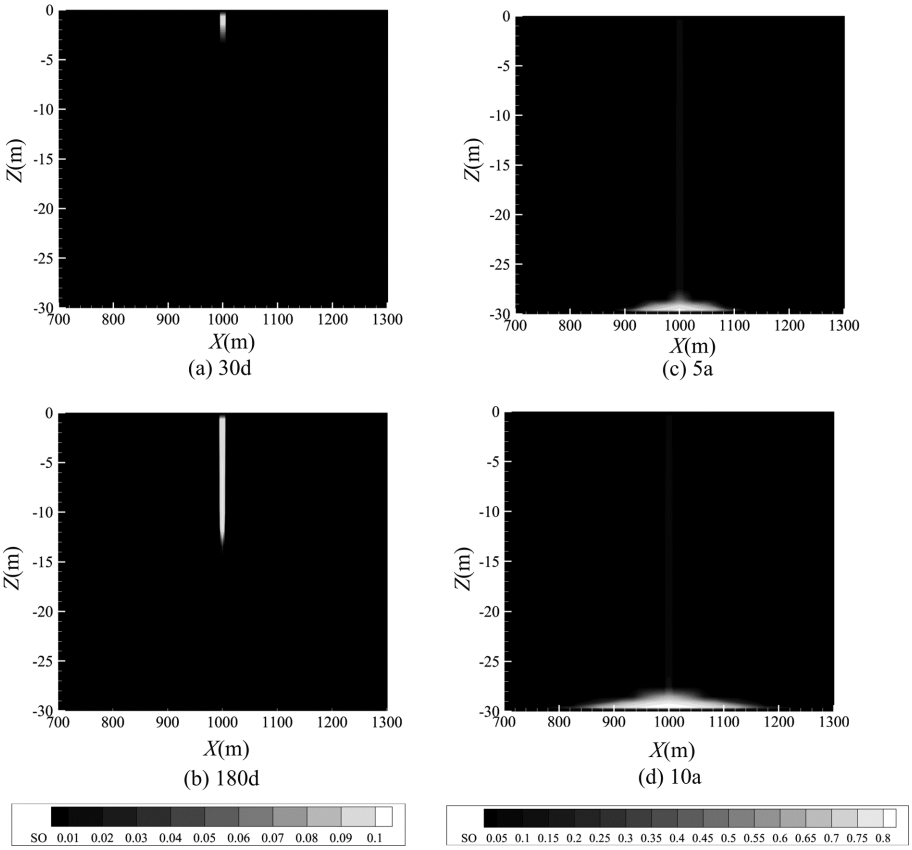
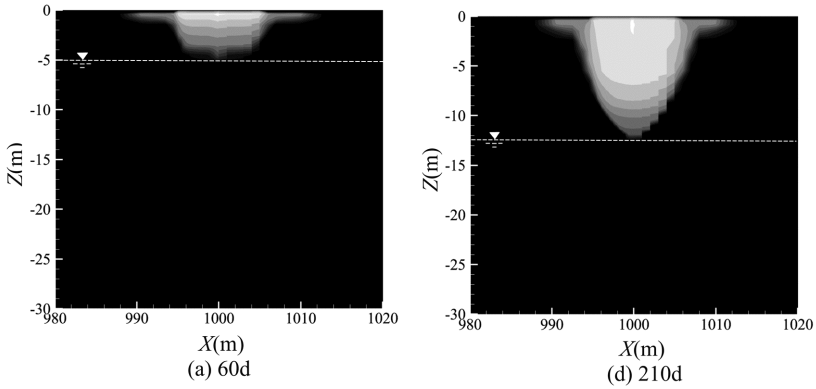


图 2 饱和砂土中 NAPL 相饱和度随时间变化分布(S1)

Fig.2 Distribution of NAPL phase saturation with time in saturated sand soil

3.4 非饱和砂土下不同潜水面界面影响(S2−S3)

图 3 揭示了 S2 和 S3 情景下不同潜水位埋深对 NAPL 相饱和度时空演化的影响机制.当潜水位埋深 5m 时,污染物在 60d 时呈现均匀下渗态势(NAPL 相饱和度 0.01~0.03),至 85d 局部区域饱和度突增至 0.05~0.07,形成与 S1 情景相似的“优先通道”,与 DNAPL 在粗砂透镜体中的迁移路径[45]相似,128d 时(图 3(c)),饱和度进一步跃升至 0.09~0.11,污染物前锋运移速率较初始阶段提升 2.3~2.8 倍.在 S3 情景下(潜水位埋深 12.5m),污染物呈现出更显著的 DNAPL 饱和度突增与深层迁移加速现象,250d 时在潜水位附近初步形成二次污染羽(饱和度 0.01~0.03),至 318d 时饱和度高达 0.09~0.11(图 3(f)),其纵向延伸速率较高水位期提升了 1.5~1.8 倍.这种突增现象主要源于潜水位界面处力系平衡转变[46]:在非饱和带,基质势与毛细力共同主导污染物的运移;进入饱和带后,重力势梯度成为主导驱动力,促使污染物沿渗透率差异显著区域形成优势通道[47].此外,高水位期导致饱和带范围持续扩大,促进了污染物在砂层中的水平扩散;同时,潜水位的抬升,降低了 DNAPL 挥发性组分的气化迁移风险.



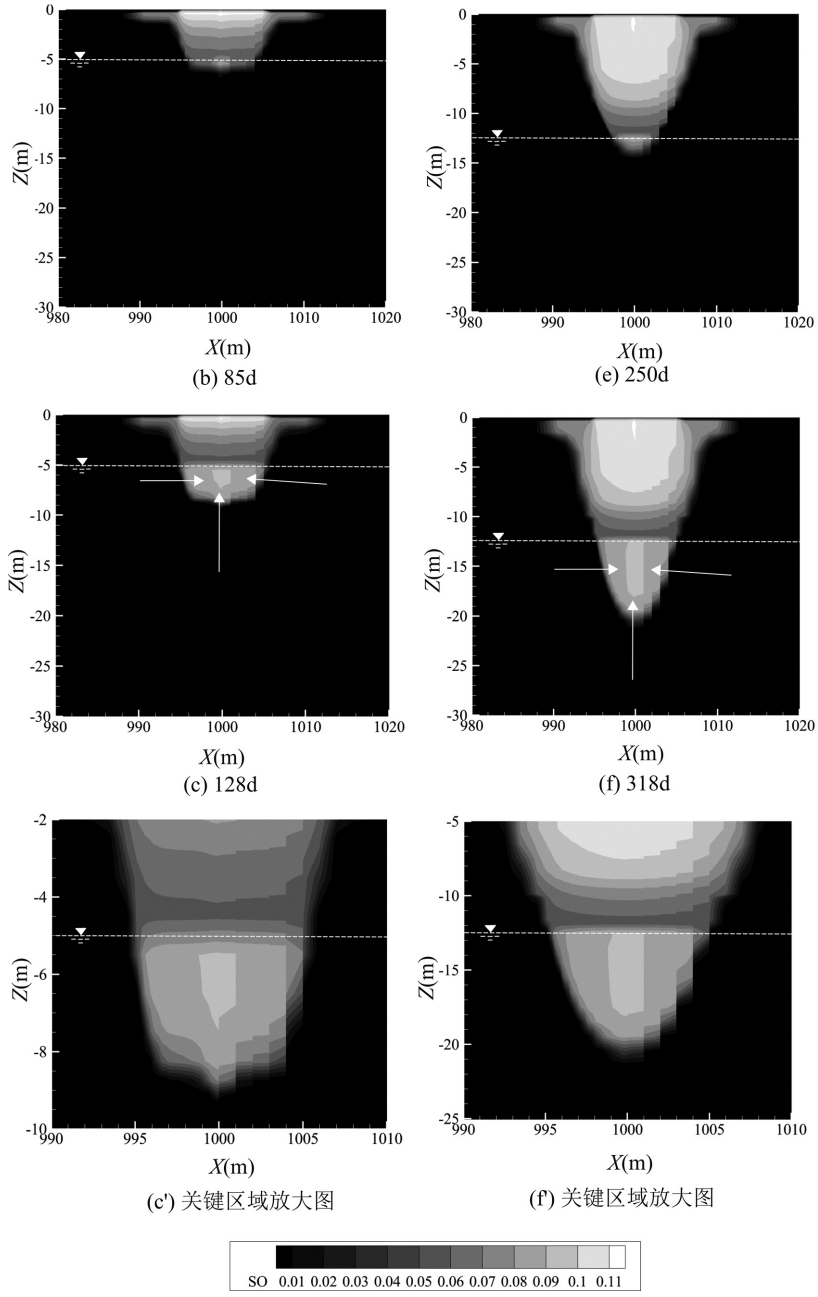


图 3　不同潜水位下 NAPL 相饱和度随时间变化分布 (S2−S3)

Fig.3　Distribution of NAPL phase saturation with time in saturated sand soil

(a)(b)(c)为潜水埋深 5m,(d)(e)(f)为潜水位埋深 12.5m;(c')(f')分别为(c) (f)的局部放大图

图 4 为不同潜水位下气相饱和度变化(S2−S3),在污染物未泄露时(图 4(a)、(c)),研究区域呈现典型的气相饱和度垂向分层特征:随深度增加气相饱和度递减,潜水面以下区域气相饱和度为 0.污染物注入后,原有的气相分布格局被打破.泄漏点附近首先生成气相 DNAPL,其扩散表现出明显的优势上向迁移趋势.在穿透包气带抵达潜水面后,气相 DNAPL 开始呈现双向扩散特征:在保持较高上向通量的同时,沿潜水面进行横向扩散.当污染物泄露 1a 后(图 4(b)、(d)),气相 DNAPL 的污染羽基本已经稳定,不再变化.

泄漏 1a 后(图 4(b)、(d)),气相 DNAPL 污染羽达到动态平衡状态.对比分析表明,随着地下水位的下降,污染羽的扩散更为显著[24],具体表现为:(1) 部分气相 DNAPL 向深部区域迁移聚集,这主要归因于重力沉降效应和介质孔隙结构的共同作用;(2) 随着污染物垂向运移距离的增加,除 NAPL 相 DNAPL 持续气化产生气相组分外,下移的 DNAPL 还促使包气

带中的溶解相组分发生气化相变,进一步扩大了污染范围[6].此外,实际环境中的水位波动可以促进污染物在气-溶解-NAPL 三相之间的转化,从而可能导致气相污染物的生成[48-49].

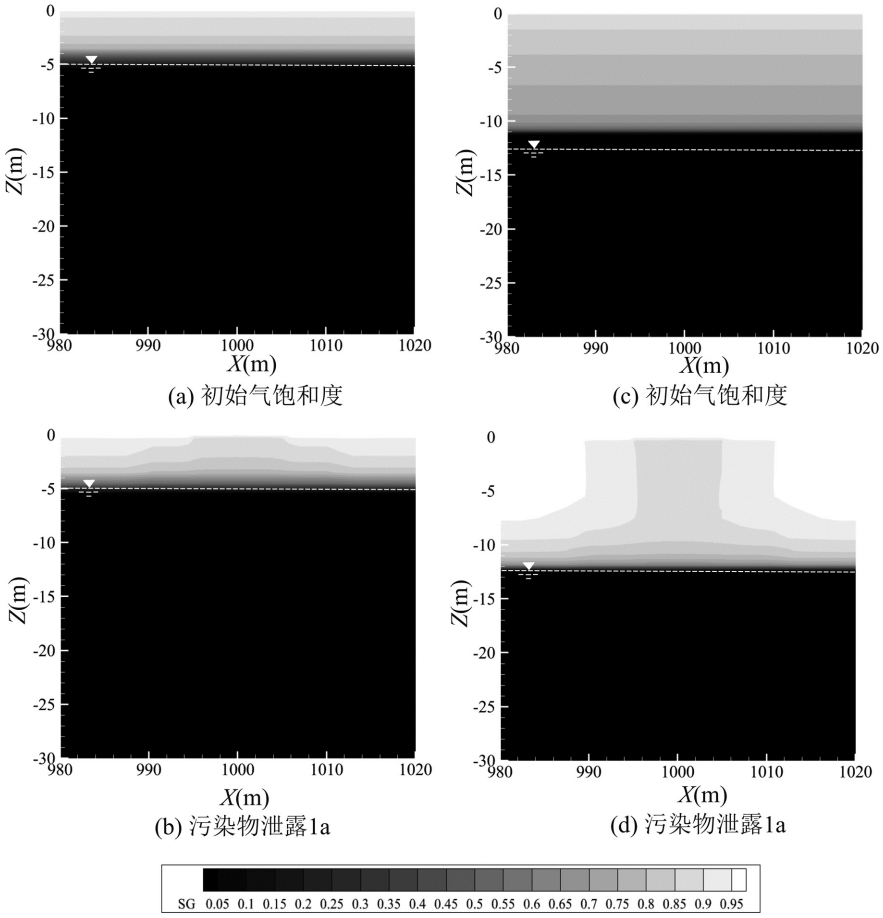
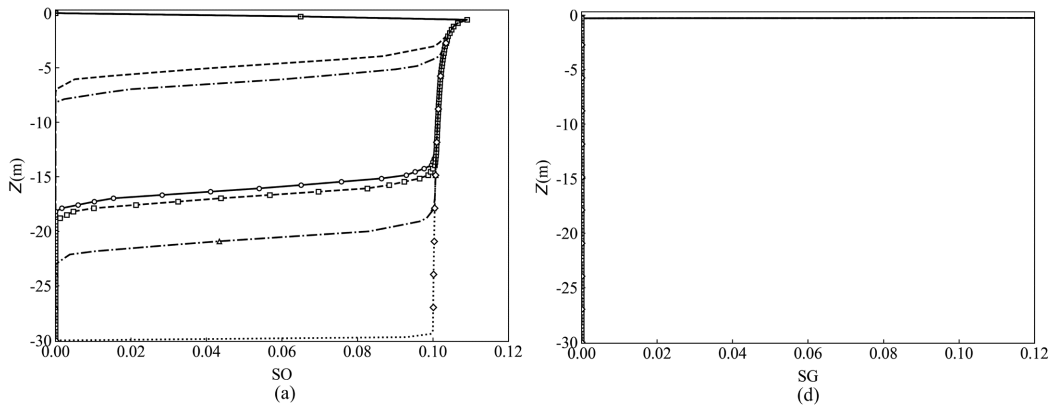


图 4 不同潜水位下气相饱和度变化(S2-S3)

Fig.4 Variation of gas phase saturation at different water table levels (S2-S3)

(a)(b)为潜水埋深 5m,(c)(d)为潜水位埋深 12.5m

为了更好的研究污染晕的特征,绘制了饱和砂土及不同潜水位下泄漏点所在垂线上(x=1000m)饱和度变化(图 5).饱和砂土中(图 5(a)) DNAPL 表现出明显的垂向渗透,之后 DNAPL 饱和度随着深度增加而减少,也伴随着一定的向上扩散;随着时间的推移,在 1.5a 时污染物达到隔水底板,所在垂线上所有点饱和度接近 0.1,纵向迁移基本稳定.



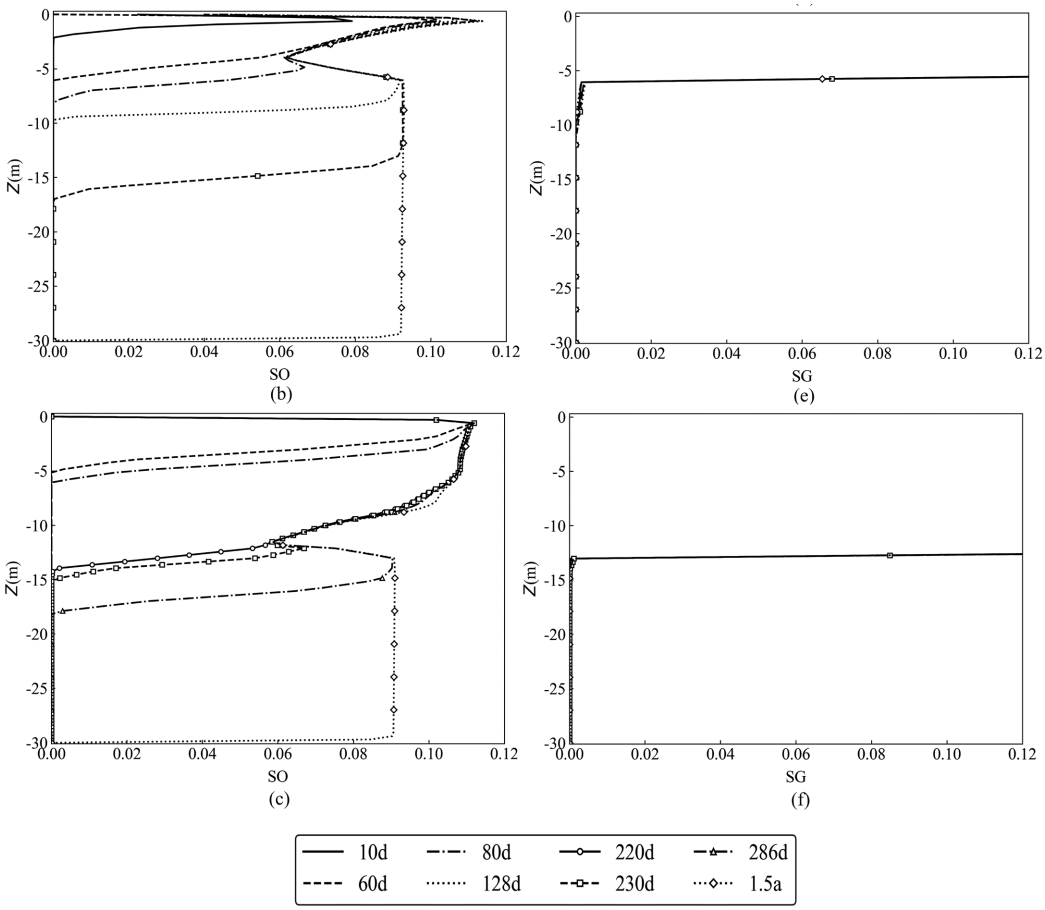
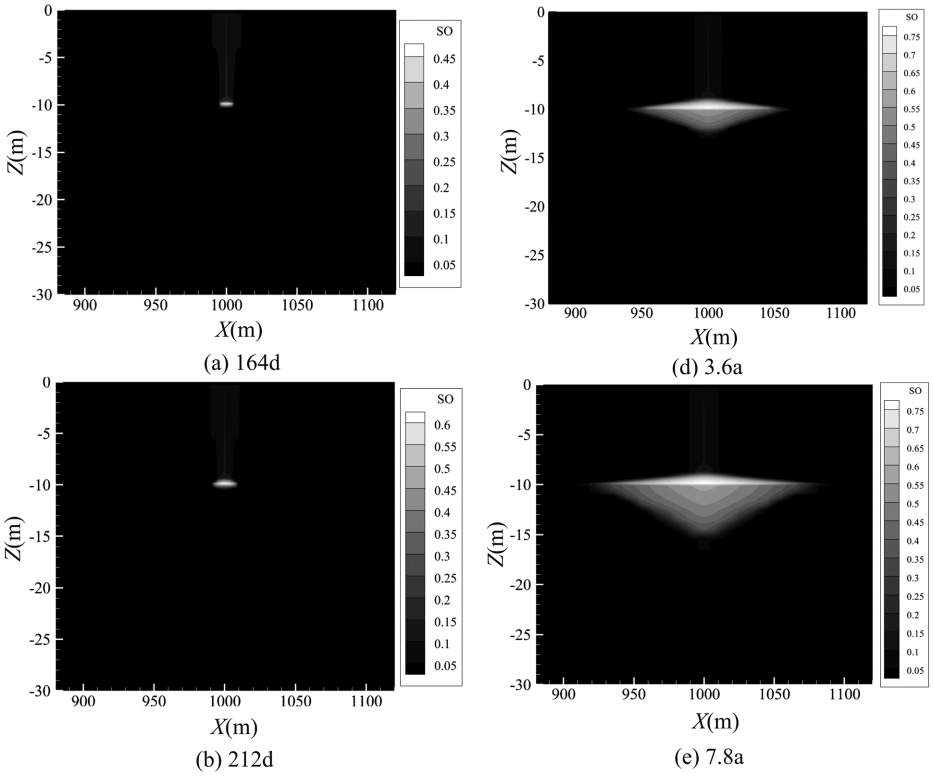


图 5　泄漏点所在垂线上(x=1000m)饱和度变化

Fig.5　Saturation variation at the line of x=1000m

(a)(d)、(b)(e)、(c)(f)分别为模拟情景 S1、S2、S3 下的 NAPL 相饱和度和气相饱和度



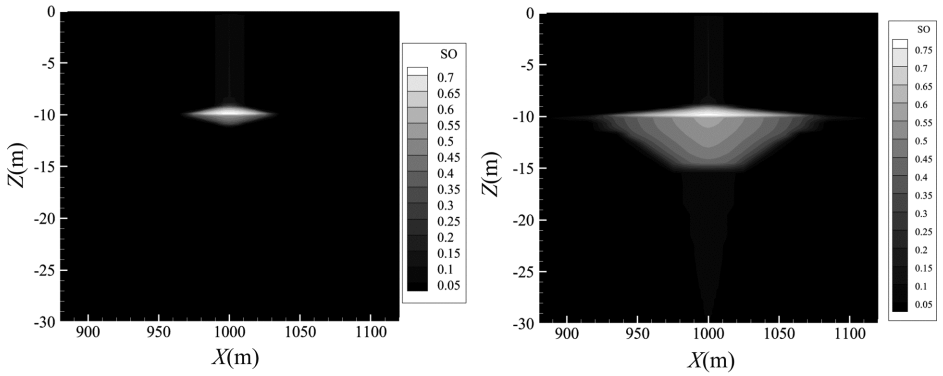


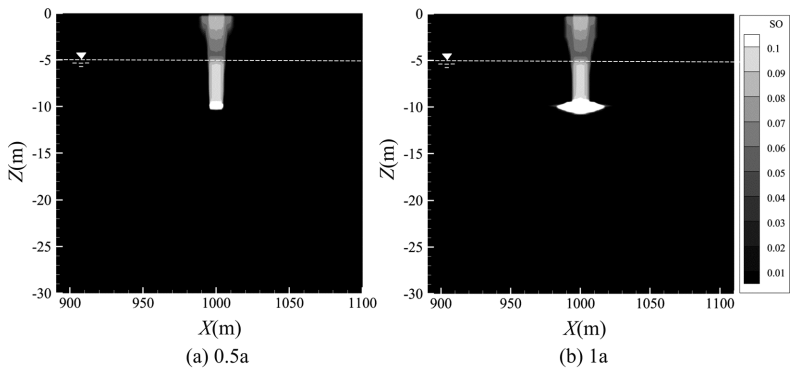
图 6 饱和层状非均质介质中 NAPL 相饱和度变化(S4)

Fig.6 Variation of NAPL phase saturation in saturated layered heterogeneous media

潜水位埋深 5m 时(图 5(b)),在 60d,DNAPL 的饱和度保持在较低水平(约 0.02),至 80d 时,潜水位界面下方出现突增(由 0.02 增至 0.06),NAPL 相饱和度在−7.5m 处形成突增峰,随后再随着深度的增加而逐步减少,且相较于图 5(a)相同时间的曲线出现了不明显的滞后现象,随着时间推移,峰值逐渐增大,直到当污染物运移 128d 时,峰值基本不再变化,达到最大为 0.09,且潜水位周围,埋深 1~7m 处的油饱和度趋于稳定,基本不再变化,之后随着时间推移,从潜水埋深 7.5m 处继续随着深度增加,饱和度逐渐减少,直到 1.5a 时,污染羽前锋抵达隔水底板,剖面整体饱和度趋于稳态分布. 当潜水位埋深 12.5m 时(图 5(c)),油饱和度在潜水之下发生了相同的减少,230d 时,在埋深 14m 处出现了峰值,当污染物运移 286d 时,峰值基本不再变化.但是相较于高水位,低水位下污染物运移表现出更强的滞后效应,对比同一时刻,低水位中的污染物纵向迁移的距离更短.但无论是低水位还是高水位,污染物在潜水位附近都出现了 NAPL 相饱和度最小值,之后慢慢回升,最大提升 47.5%,值得注意的是,此时油饱和度最大值均小于饱和介质的最大油饱和度(表 8),说明潜水位一定程度上阻碍了污染物的纵向运移.图 5(d)(e)(f)揭示了泄漏点垂向剖面(x=1000m)气相饱和度的分布特征.模拟结果表明,潜水位以上区域的气相饱和度随深度增加呈单调递减趋势,至潜水位界面时降至零值.时序分析显示,气相饱和度的纵向分布格局随时间推移未发生显著改变,表明时间变量对纵向扩散过程的调控作用较弱.

3.5 层状非均质地层(S4−S5)

图 6 为 S4 情境下饱和层状非均质介质中 DNAPL 饱和度变化,埋深 10~15m 处为黏土介质,由于介质渗透率低,当 DNAPL 运移至该黏土层界面时,其向下渗透的速度急剧减慢.DNAPL 无法顺利穿过低渗透率的黏土层,便在黏土层上方形成显著聚集区.随着在黏土层上 DNAPL 的堆积量增加,DNAPL 会寻求新的运移路径,由于垂直向下迁移困难,DNAPL 开始向两侧相对渗透率较高的区域扩散,在 164d(图 6(a))时,DNAPL 主要集中在中部向下迁移,而到 212d(图 6(b))及之后,在黏土层上方可以明显看到 DNAPL 向两侧展开,形成侧向扩散的趋势.



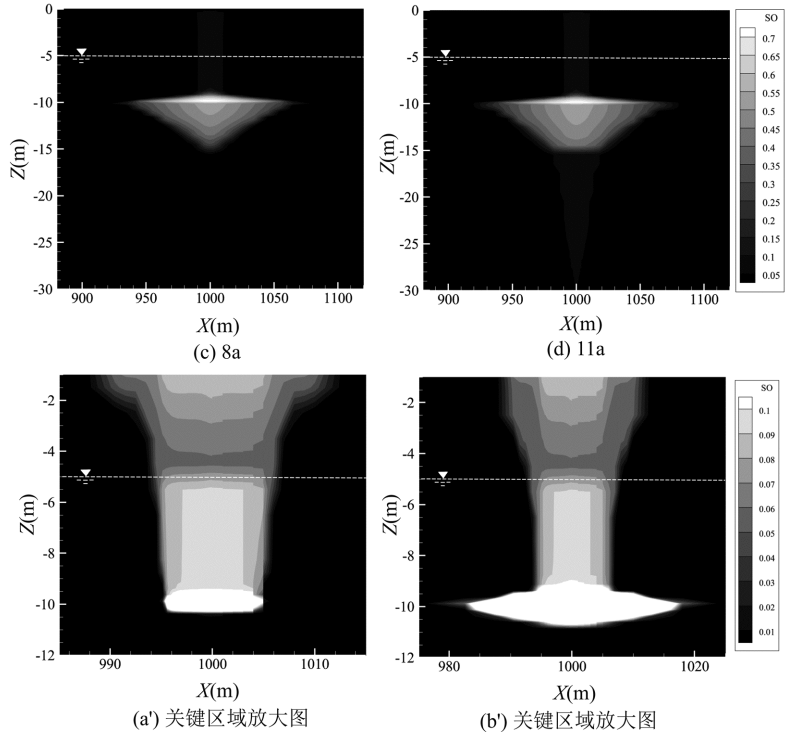


图 7　饱和−非饱和条件下层状非均质介质中 NAPL 相饱和度变化(S5)

Fig.7　Variation of NAPL phase saturation in layered heterogeneous media under saturated and unsaturated conditions

(a')(b')分别为(a) (b)的局部放大图

表 8　泄漏点所在垂线上(x=1000m)NAPL 相饱和度沿垂向距离变化

Table 8　NAPL phase saturation at the line of x=1000m

时间	230d	1.5a	230d	1.5a	230d	1.5a
垂向迁移距离(m)	饱和介质		潜水埋深 5m		潜水埋深 12.5m	
−2.5	0.104	0.103	0.077	0.077	0.11	0.109
−5	0.102	0.102	0.073	0.064	0.10	0.107
−10	0.101	0.101	0.093	0.092	0.07	0.080
−12.5	0.100	0.100	0.092	0.092	0.063	0.061
−13	0.100	0.100	0.08	0.092	0.066	0.090
−15	0.096	0.100	0.043	0.092	0	0.091

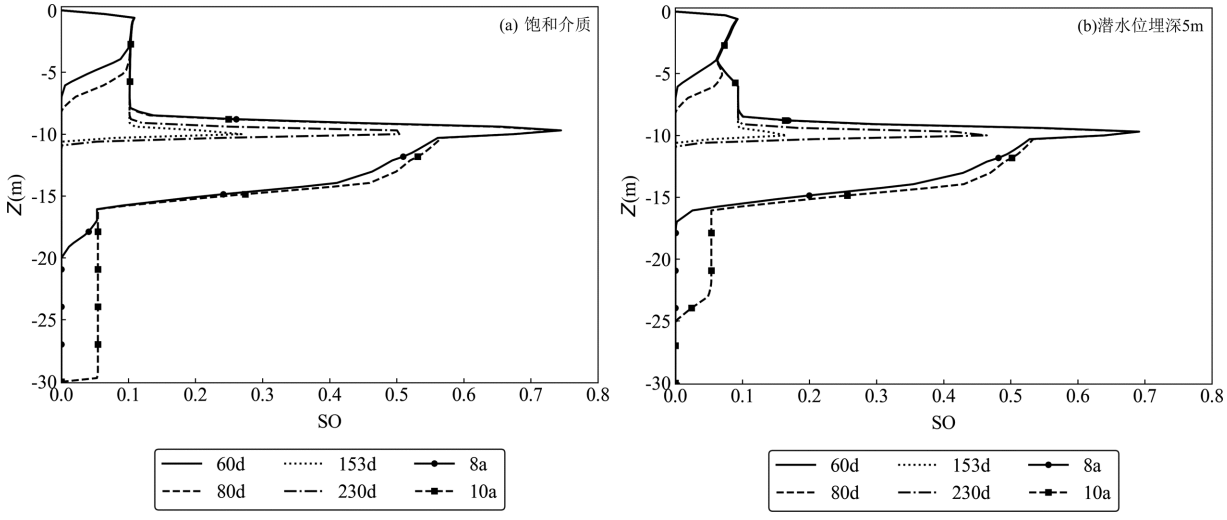


图 8　层状非均质介质中泄漏点所在垂线上(x=1000m) NAPL 相饱和度变化

Fig.8　NAPL phase saturation variation at the line of x=1000m under Layered Heterogeneous Media

这种现象源于介质非均质性诱导的润湿性差异:过渡带相对发育的孔隙网络促使污染物优先沿优势通道迁移[43],使 DNAPL 得以规避黏土层主体低渗透区,转而向深层介质迁移.相关的研究分析表明,黏土边缘形成的优势通道源于毛细力-重力耦合作用:黏性土-砂质过渡带存在的孔径梯度导致毛细屏障效应显著弱化,使得 DNAPL 突破阈值压力[38].这一地质特征促使污染物在边缘区发生绕流迁移,形成具有空间选择性的三维污染路径.

基于潜水位动态变化和层状黏土层特征的单因素研究结果,结合场地实测数据,构建了饱和-非饱和层状非均质介质模型,用于模拟 DNAPL 在实际场地中的迁移转化过程及污染空间分布特征.图 7 展示了潜水埋深 5m 时层状非均质介质中 DNAPL 饱和度演化规律,数值模拟结果显示(图 7(a)),当潜水位处于黏性土层上覆区域时,渗流优势通道现象依然显著,具体表现为潜水位界面下方出现饱和度跃升至 0.08 的突变区. 图 8 进一步揭示了 DNAPL 迁移的污染晕特征,通过对比饱和介质条件(图 8(a))与潜水位埋深 5m(图 8(b))可见,潜水位动态变化与层状非均质地层结构共同调控 DNAPL 迁移过程,具体而言,在潜水位界面以下-5m 处观测到 DNAPL 饱和度急剧下降至 0.08,当污染物运移至低渗透性地层时,受毛细阻滞作用影响发生横向扩展,并在层状地层顶板形成饱和度峰值达 0.7 的二次污染源.值得注意的是,尽管穿越潜水面后 DNAPL 饱和度呈恢复趋势,但在非饱和条件下 NAPL 相饱和度较饱和含水层仍降低了 6%~7%,表明潜水位在一定程度上阻碍了污染物的纵向运移.且由于潜水位的存在,污染物运移速率变缓,10a 仍未达到隔水底板.结果表明,需对黏土层界面滞污效应实施长期动态监测,同时建议将修复工程重点部署于潜水位以下区域,在 DNAPL 达到最低饱和度时,通过开展高分辨率地球物理探测[13],进行污染物迁移通道的立体化阻断,并采用原位表面活性剂强化抽提技术进行精准阻断[10],以提升场地修复效率.

4 结论

4.1 NAPL 相是 TCE 在地下水中的主要迁移形态,受介质特性、潜水位深度及地层非均质性调控. 在均质饱和介质中,DNAPL 同时发生垂向渗透和横向扩散,导致污染物在底部聚集并形成二次污染源.数值模拟显示,泄漏 10a 后污染羽面积扩大 1900%,污染中心 NAPL 饱和度达 0.8,较初期增加 7 倍,表明其迁移具有显著时空依赖性.后期气相饱和度趋于稳定,时间对气相 DNAPL 扩散的影响减弱.

4.2 潜水位变化显著影响非饱和-饱和含水层中 DNAPL 的迁移行为.高水位时期,饱和带扩大加速了污染物在砂层中的横向扩散.运移机制分析表明,非饱和区污染物主要受基质势和毛细力控制,而进入饱和区后则以重力驱动为主,使 DNAPL 在潜水面下形成高饱和度迁移通道,较初始状态增加 47.5%.值得注意的是,潜水位回升会抑制污染物纵向迁移,使其速率降低 1.5~1.8 倍,同时减少溶解相气化导致的 DNAPL 气相含量.

4.3 在层状非均质介质中,低渗透黏土层显著阻滞 DNAPL 迁移,使其在黏土表层聚集并侧向扩散后突破下移.潜水位动态变化与层状非均质地层结构共同调控 DNAPL 迁移过程: 在非饱和-饱和过渡带,污染物运移速率显著降低.尽管穿越潜水面后 NAPL 饱和度有所上升,但仍比饱和条件低 6%~7%,污染物总量减少 13%~15%,证实潜水位在一定程度上阻碍了污染物的纵向运移.

参考文献:

[1] Shi J, Yang Y, Li J, et al. A study of layered-unlayered extraction of benzene in soil by SVE [J]. Environmental Pollution, 2020,263: 114219.

[2] Wu W, Liao R, Hu Y, et al. Quantitative assessment of groundwater pollution risk in reclaimed water irrigation areas of northern China [J]. Environmental Pollution, 2020,261:114173.

[3] 施小清,吴吉春,刘德朋,等.饱和介质中重非水相液体运移的数值模拟及敏感性分析 [J]. 南京大学学报(自然科学版), 2011,47(3):299-307.
Shi X Q, Wu J C, Liu D P, et al. Numerical simulation of transportation of dense non-aqueous phase liquids in the subsurface environment [J]. Journal of Nanjing University (Natural Sciences), 2011,47(3):299-307.

[4] 王慧婷,徐红霞,郭琼泽,等.饱和多孔介质中 DNAPL 污染源区结构及质量溶出 [J]. 中国环境科学, 2019,39(8):3474-3483.
Wang H T, Xu H X, Guo Q Z, et al. Dense non-aqueous phase liquid source zone architecture and dissolution in saturated porous media [J]. China Environmental Science, 2019,39(8):3474-3483.

[5] 郑 菲,高燕维,施小清,等.地下水流速及介质非均质性对重非水相流体运移的影响 [J]. 水利学报, 2015,46(8):925-933.
Zheng F, Gao Y W, Xu H X, et al. An experimental study of the influence of heterogeneity on the DNAPL source-zone architecture [J].

Hydrogeology & Engineering Geology, 2016,43(5):140–148.

[6] Shi J, Chen X, Ye B, et al. A comparative study of DNAPL migration and transformation in confined and unconfined groundwater systems [J]. Water Research, 2023,245:120649.

[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,(11):31−37.
Shu S Z, Liang H W, Yuan Y. Numerical analysis of transportation and distribution of light non−aqueous phase liquids in partially saturated heterogeneous soils [J]. Journal of Hydraulic Engineering, 2002,(11): 31−37.

[8] 李永涛,王文科,王　丽,等.非饱和带轻非水相液体污染研究进展 [J]. 地球科学与环境学报, 2007,(3):326−330.
Li Y T, Wang W K, Wang L, et al. Research progress on light non−aqueous phase liquid contamination in unsaturated zones [J]. Journal of Earth Sciences and Environment, 2007,(3):326−330.

[9] 李　宏,Ranjith P G.地下水中非水相流体污染运移的三维有限元法 [J]. 岩石力学与工程学报, 2008,27(12):2509−2516.
Li H, Ranjith P G. Three−dimensional finite element method for non−aqueous phase fluid transport in groundwater [J]. Journal of Rock Mechanics and Engineering, 2008,27(12):2509−2516.

[10] 田　蕾,胡立堂,张梦琳.低渗透石化污染场地多相抽提修复效率的数值模拟 [J]. 中国环境科学, 2022,42(2):925−935.
Tian L, Hu L T, Zhang M L. A numerical simulation study on remediation efficiency of Multi−Phase Extraction (MPE) in petrochemical contaminated sites of low permeability [J]. China Environmental Science, 2022,42(2):925−935.

[11] Bob M M, Brooks M C, Mravik S C, et al. A modified light transmission visualization method for DNAPL saturation measurements in 2−D models [J]. Advances in Water Resources, 2008, 31(5):727−742.

[12] 刘汉乐,郝胜瑶,马建初.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 [J]. 水文地质工程地质, 2019,46(5):169−174.
Liu H L, Hao S Y, Ma J C. A study on the impact of porous media interfaces on the migration process of dense non−aqueous phase liquids using imaging methods [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2019,46(5):169−174.

[13] 朱建友,邓亚平,施小清,等.高密度电阻率法探测 DNAPLs 污染的适宜性探讨 [J]. 水文地质工程地质, 2017,44(1):144−151.
Zhu J Y, Deng Y P, Shi X Q, et al. Discussion on the suitability of high−density resistivity method for detecting DNAPLs contamination [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2017,44(1):144−151.

[14] 李培华,刘汉乐,侯森戈.融合电阻率成像法及图像法的 DNAPL 污染过程研究 [J]. 地球物理学进展, 2021,36(5):2185−2190.
Li P H, Liu H L, Hou S G. Investigation on DNAPL contamination process of fusing ERT and image method [J]. Progress in Geophysics, 2021,36(5):2185−2190.

[15] Engelmann C, Sookhak Lari K, Schmidt L, et al. Towards predicting DNAPL source zone formation to improve plume assessment: using robust laboratory and numerical experiments to evaluate the relevance of retention curve characteristics [J]. Journal of Hazardous Materials, 2021,407:124741.

[16] 肖　鹏,刘汉乐.饱和砂土中 DNAPL 污染物迁移过程及数值模拟 [J]. 中国环境科学, 2024,44(1):386−395.
Xiao P, Liu H L. Migration process and numerical simulation of DNAPL contaminants in saturated sandy soils [J]. China Environmental Science, 2024,44(1):386−395.

[17] 施小清,姜蓓蕾,吴吉春,等.非均质介质中重非水相污染物运移受泄漏速率影响数值分析 [J]. 水科学进展, 2012,23(3):376−382.
Shi X Q, Jiang B L, Wu J C, et al. Numerical analysis of the effect of leakage rate on dense non−aqueous phase liquid transport in heterogonous porous media [J]. Advances In Water Science, 2012, 23(3):376–382.

[18] 胡立堂,田　蕾,王　岽,等.考虑生物降解的含水层苯酚自然衰减的数值模拟研究 [J]. 地质科技通报, 2023,42(4):37−46.
Hu L T, Tian L, Wang D, et al. Numerical simulation studies on monitored natural attenuation of phenol in aquifers considering the biodegradation effect [J]. Bulletin of Geological Science and Technology, 2023,42(4):37−46.

[19] 张梦琳.石化污染场地地下水污染羽分布的准确识别技术研究 [D]. 北京:北京师范大学, 2021.
Zhang M L. Research on the accurate identification technology of groundwater pollution plume distribution in petrochemical contaminated sites [D]. Beijing: Beijing Normal University, 2021.

[20] 巨梦蝶,李　响,尹海龙,等.耦合多相流和溶质运移的地下水重非水相液体迁移转化模拟研究 [J]. 水动力学研究与进展 A 辑, 2025,40 (1):149−156.
Ju M D, Li X, Yin H L, et al. Modeling the fate and transport of dense non−aqueous phase liquids in groundwater based on multi−phase flow coupling solute transport [J]. Journal of Hydrodynamics Ser.A, 2025, 40(1):149−156.

[21] Kang X, Kokkinaki A, Shi X, et al. Integration of deep learning‐based inversion and upscaled mass-transfer model for DNAPL mass-discharge estimation and uncertainty assessment [J]. Water Resources Research, 2022,58(10):e2022WR033277.

[22] Yu P, Wang D, Wan C, et al. A pore−scale numerical study on the seepage characteristics in low−permeable porous media [J]. Environmental Earth Sciences, 2023,82(11):268.

[23] Cochennec M, Davarzani H, Davit Y, et al. Impact of gravity and inertia on stable displacements of DNAPL in highly permeable porous media [J]. Advances in Water Resources, 2022,162:104139.

[24] Yang Y, Zheng J, Li J, et al. Modeling BTEX multiphase partitioning with soil vapor extraction under groundwater table fluctuation using the TMVOC model [J]. Water, 2023,15(13):2477.

[25] Zahasky C, Benson S M. Preferential solute transport in low permeability zones during spontaneous imbibition in heterogeneous porous media [J]. Water Resources Research, 2022,58(1): e2020WR029460.

[26] Xing K, Shi X, Kokkinaki A, et al. Residual NAPL architectures in fractures: insights from microfluidic experiments [J]. Geophysical Research Letters, 2025,52(8):e2025GL114826.

[27] Feo A, Pinardi R, Artoni A, et al. Three−dimensional high−precision numerical simulations of free−product DNAPL extraction in potential emergency scenarios: A test study in a PCE−contaminated alluvial aquifer (Parma, Northern Italy) [J]. Sustainability, 2023,15(12):9166.

[28] 窦健伟,潘　玥,徐蓓艺,等.低渗透性介质中 DNAPL 污染物迁移与修复研究进展 [J]. 地质与勘探, 2024,60(6):1257−1271.

Dou J W, Pan Y, Xu P Y, et al. Research progress on migration and remediation of DNAPL pollutants in low-permeability media [J]. Geology and Exploration, 2024,60(6):1257-1271.

[29] Kim S M, Choi Y. SIMPL: a simplified model-based program for the analysis and visualization of groundwater rebound in abandoned mines to prevent contamination of water and soils by acid mine drainage [J]. International Journal of Environmental Research and Public Health, 2018,15(5):951.

[30] Si W, Li Q, Ren Y, et al. The influence of geological structure on the characteristics of groundwater pollution in the downstream of tailing pond [J]. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2021,621(1):12127.

[31] Alazaiza M Y D, Ramli M H, Copty N K, et al. LNAPL saturation distribution under the influence of water table fluctuations using simplified image analysis method [J]. Bulletin of Engineering Geology and the Environment, 2020,79(3):1543-1554.

[32] Oostrom M, Hofstee C, Wietsma T W. Behavior of a viscous LNAPL under variable water table conditions [J]. Soil and Sediment Contamination: An International Journal, 2006,15(6):543-564.

[33] Pasha A Y, Hu L, Meegoda J N. Numerical simulations of a light nonaqueous phase liquid (LNAPL) movement in variably saturated soils with capillary hysteresis [J]. Canadian Geotechnical Journal, 2014,51(9):1046-1062.

[34] Pruess K, Battistelli A. TMVOC: simulator for multiple volatile organic chemicals [R]. Berkeley: Lawrence Berkeley National Laboratory (LBNL), 2003.

[35] Lari K S, Davis G B, Johnston C D. Incorporating hysteresis in a multi-phase multi-component NAPL modeling framework: A multicomponent LNAPL gasoline example [J]. Advances in Water Resources, 2016,96:190-201.

[36] Stone H L. Probability model for estimating three-phase relative permeability [J]. Journal of Petroleum Technology, 1970,22(2):214-218.

[37] Parker J C, Lenhard R J, Kuppusamy T. A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media [J]. Water Resources Research, 1987,23(4):618-624.

[38] Pruess K, Battistelli A. TMVOC, simulator for multiple volatile organic chemicals [R]. Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), 2003.

[39] Hayduk W, Laudie H. Prediction of diffusion coefficients for nonelectrolytes in dilute aqueous solutions [J]. AIChE Journal, 1974, 20(3):611-615.

[40] 席 庆,李兆富,罗 川,等.基于扰动分析方法的 AnnAGNPS 模型水文水质参数敏感性分析 [J]. 环境科学, 2014,35(5):1773-1780.
Xi Q, Li Z F, Luo C, et al. Sensitivity analysis of AnnAGNPS model's hydrology and water quality parameters based on the perturbation analysis method [J]. Environmental Science, 2014,35(5):1773-1780.

[41] 徐云翔,左 锐,潘明浩,等.基于参数敏感性分析的轻质非水相液体在非均质包气带中迁移模拟研究 [J]. 环境污染与防治, 2023,45(4): 450-457,463.
Xu Y X, Zuo R, Pan M H, et al. A simulation study of the migration of light non-aqueous phase liquid in heterogeneous vadose zone based on parameter sensitivity analysis [J]. Environmental Pollution & Control, 2023,45(4):450-457,463.

[42] Arshadi M, Gesho M, Qin T, et al. Impact of mineralogy and wettability on pore-scale displacement of NAPLs in heterogeneous porous media. Journal of Contaminant Hydrology, 2020,230,103599.

[43] 田苗壮,赵 龙,崔文君,等.南水北调背景下地下水位上升对地面沉降控制与影响——以北京潮白河地下水系统为例 [J]. 中国地质, 2023,50(3):872-886.
Tian M Z, Zhao L, Cui W J, et al. Control and influence of groundwater level rise on land subsidence under the background of the South-to-North Water Diversion Project: A case study of the Chaobai River groundwater system in Beijing [J]. Geological Journal of China, 2023,50(3):872-886.

[44] 宋易南,侯德义,赵勇胜,等.京津冀化工场地地下水污染修复治理对策研究 [J]. 环境科学研究, 2020,33(6):1345-1356.
Song Y N, Hou D Y, Zhao Y S, et al. Remediation strategies for contaminated groundwater at chemical industrial sites in the BeijingTianjin-Hebei Region [J]. Research of Environmental Sciences, 2020,33(6):1345-1356.

[45] 侯森戈,杨博天,杨登波,等.饱和砂土中粗砂透镜体对 DNAPL 迁移过程的影响研究 [J]. 环境科学与技术, 2022,45(7):105-111.
Hou S G, Yang B T, Yang D B, et al. Investigation of coarse sand lens effect on DNAPL migration process in saturated sand [J]. Environmental Science & Tech-nology, 2022,45(7):105-111.

[46] 雷 沛,张 洪,王 超,等.沉积物水界面污染物迁移扩散的研究进展 [J]. 湖泊科学, 2018,30(6):1489-1508.
Lei P, Zhang H, Wang C, et al. Research progress on the migration and diffusion of pollutants at the sediment-water interface [J]. Journal of Lake Sciences, 2018,30(6):1489-1508.

[47] 韩科学.毛细带对 LNAPL 污染物的迁移阻滞及作用机理研究 [D]. 北京:北京师范大学, 2022.
Han K. Study on the migration retardation and mechanism of capillary fringe on LNAPL contaminants [D]. Beijing: Beijing Normal University, 2022.

[48] Gribovszki Z, Szilágyi J, Kalicz P. Diurnal fluctuations in shallow groundwater levels and streamflow rates and their interpretation – a review [J]. Journal of Hydrology, 2010,385:371–383.

[49] Shi J, Yang Y, Lu H, et al. Effect of water-level fluctuation on the removal of benzene from soil by SVE [J]. Chemosphere, 2021,274: 129796.

作者简介：陈 航(2001-),男,湖北恩施人,北京师范大学硕士研究生,主要从事地下水污染方面的研究.chenhang@mail.bnu.edu.cn.