

基于GMS数值模拟的炼化一体化项目地下水污染物运移研究

李良朴¹ 刘国东^{1,2*}

1. 四川大学水利水电学院, 中国·四川 成都 610065

2. 四川大学水力学与山区河流开发保护国家重点实验室, 中国·四川 成都 610065

摘要: 针对新疆山前冲洪积平原某炼化项目的地下水污染风险, 基于GMS平台构建三维非稳定流-多组分溶质耦合模型, 模拟新老厂区石油类和苯污染物在非正常工况下的迁移规律。结果表明: 污染物持续向南扩散, 非正常工况下20年最大迁移距离达4.24 km, 浓度最大超标403万倍, 污染晕面积1.92 km², 最大超标面积27.07 m²。该模型精准刻画了高渗透卵砾石层中污染物的时空分异规律, 为该区工业项目地下水风险防控提供量化依据。

关键词: GMS数值模拟; 地下水污染; 溶质运移

Research on Numerical Simulation of Groundwater Contaminant Transport in an Integrated Petrochemical Complex Based on GMS

Li Liangpu¹, Liu Guodong^{1,2*}

1. College of Water Resources and Hydropower, Sichuan University, China Sichuan Chengdu 610065

2. State Key Laboratory of Hydraulics and Mountain River Engineering, Sichuan University, China Sichuan Chengdu 610065

Abstract: To assess the groundwater contamination risk of a petrochemical project in a piedmont alluvial-proluvial plain in Xinjiang, a three-dimensional transient flow and multicomponent solute transport coupled model was constructed based on the Groundwater Modeling System (GMS) platform. This model simulated the migration patterns of petroleum hydrocarbons and benzene pollutants from both existing and new plant areas under abnormal operating conditions. The results indicate that the contaminants migrate persistently southward. Under abnormal conditions, the maximum migration distance over 20 years reaches 4.24 km, with the peak concentration exceeding the standard limit by a factor of 4.03 million. The contamination plume area expands to 1.92 km², with a maximum exceedance area of 270,700 m². The model accurately delineates the spatiotemporal distribution characteristics of pollutants within the highly permeable gravel layer, providing a quantitative basis for groundwater risk prevention and control of industrial projects in the region.

Keywords: GMS numerical simulation; Groundwater pollution; Contaminant migration

0 引言

随着石化产业的发展, 大型炼化项目的环境风险管控至关重要。新疆生态环境脆弱, 地下水保护是关键。项目区含水层以卵砾石为主, 渗透系数大(平均21.89 m/d), 污染物易快速扩散。现有研究多聚焦平原均质含水层, 对山前倾斜平原非均质含水层, 尤其是高渗透地层中多情景泄漏的对比研究不足^[1-3]。

GMS平台集成MODFLOW、MT3DMS等模块, 可有效模拟复杂含水层中的水流与溶质运移^[4-6]。本研究以某炼化一体化项目为例, 运用GMS构建三维耦合模型, 模拟石油类、苯在非正常工况下的运移过程, 预测其时空分

布, 以为防渗设计与应急预案提供支撑。

1 研究区概况

研究区属大陆性暖温带干旱气候。地貌为山前冲洪积平原, 地势北高南低。地下水类型为第四系松散岩类孔隙潜水, 主要赋存于冲积砂砾卵石层中。含水层由北向南从单一潜水过渡为潜水-承压水双层结构。地下水主要接受北部侧向径流补给, 以侧向径流和开采为主要排泄方式^[7-8]。

2 地下水场模拟

2.1 概念模型

将含水层概化为等效非均质多孔介质潜水含水层。模

拟区边界概化为已知水头边界（第一类边界），边界初始水头值以 2024 年 3 月水头观测数据采用空间插值得到。根据水文地质图、地下水等水位线图、地形地貌和水文地质勘察资料，确定模拟区范围（见图 1）。



图1 研究区地理位置图

模拟区内补给量根据降雨入渗系数法确定，地下水埋深超过蒸发极限深度，蒸发量极微弱，因此不考虑蒸发排泄对浅层地下水影响。

2.2 数学模型

地下水模拟采用非均质、各向同性、非稳定三维模型，控制方程如下：

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial H}{\partial z} \right) + \omega = \mu_s \frac{\partial H}{\partial t} & (x, y, z) \in \Omega, t > 0 \\ H(x, y, z, t)|_{z=0} = H_0(x, y, z) & (x, y, z) \in \Omega \\ H(x, y, z, t)|_{\Gamma_1} = H_1(x, y, z, t) & (x, y, z) \in \Gamma_1, t > 0 \\ K_z \frac{\partial H}{\partial z} |_{\Gamma_2} = v(x, y, z, t) & (x, y, z) \in \Gamma_2, t > 0 \end{cases}$$

式中，H 为水头 (m)；K 为渗透系数 (m/d)； ω 为源汇项强度 (1/d)； μ_s 为弹性储水率 (1/m)。

2.3 模型识别与验证

以 2023 年 3 月流场为初始状态，2023 年 7 月、9 月流场分别用于模型识别与验证。通过调参，将含水层划分为 11 个参数区。校准后的参数空间分布详见图 3，各区水文地质参数见表 2，使模拟流场与实测流场吻合良好。

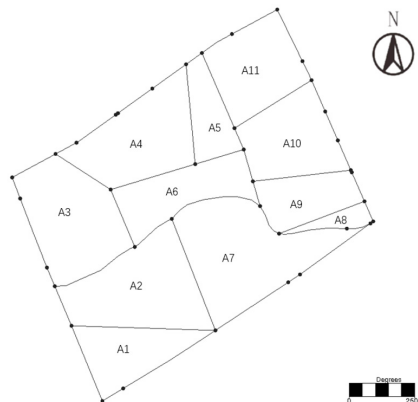


图2 模型潜水含水层渗透系数K分区

表2 模型识别的水文地质参数一览表

参数区	渗透系数 (m/d)	给水度	储水系数
A1	16	\	0.0004
A2	16	\	0.0004
A3	12	0.1	\
A4	18	0.1	\
A5	16	0.1	\
A6	14	0.1	\
A7	20	\	0.0004
A8	10	0.1	\
A9	12	0.1	\
A10	25	0.1	\
A11	28	0.1	\

3 污染物运移模拟与预测

3.1 数学模型

基于地下水二维模型，地下水溶质运移选择如下数学模型刻画：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \frac{u_x}{n_e} \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{u_y}{n_e} \frac{\partial C}{\partial y} + f$$

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y) \quad (x, y) \in \Omega, t = 0$$

$$C(x, y, t) |_{\Gamma_1} = C_1(x, y, t) \quad (x, y) \in \Gamma_1, t > 0$$

$$(Cu - D \text{grad} C) \cdot \vec{n} |_{\Gamma_2} = \varphi(x, y, t) \quad (x, y) \in \Gamma_2, t \geq 0$$

式中，C 为浓度；D 为弥散系数；u 为渗流速度； n_e 为有效孔隙度。 D_{xx} 、 D_{yy} 分别为 x、y 两个主方向的弥散系数：

$$D_{xx} = a_L u ; D_{yy} = a_T u$$

$$u = \frac{1}{n_e} \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$$

式中 a_L 和 a_T 分别为纵向弥散度和横向弥散度。弥散度选取 $8m^{[9]}$ 。

3.2 污染泄漏情景设置

在非正常工况下，因维护缺失导致罐底出现裂缝或破损时，防渗功能部分失效，罐内液态污染物将穿透包气带渗滤进入地下水环境。假设罐区存在单一储罐老化问题，钢筋混凝土结构池体渗水量不得超过 $2L / (m^2 \cdot d)$ ，假设非正常工况下有破损部分渗水量为正常工况下的 10 倍，则非正常工况的渗水量为 $20L / (m^2 \cdot d)^{[10]}$ 。

计算公式如下：

$$M = 20 \rho A t$$

式中，M——泄漏质量 (mg)，A——池底或罐底面积 (m^2)；T——按 1 年计算；P——污染物的浓度或液体密度 (mg/L)。

非正常工况下，厂区泄漏进入地下水的污染源强见表3。

3.3 污染物运移预测结果

基于已构建的地下水流模型，采用GMS平台的MT3DMS模块预测石油类与苯的污染晕时空演变。获得20年时间尺度下以0.05mg/L（石油类）和0.01mg/L（苯）为边界浓度的污染晕扩展特征。

非正常工况下，污染物持续向南运移，老厂区中原油罐泄漏的石油类、中间罐泄漏的苯将在厂区内形成污染晕（见图5~6）。老厂区石油类污染物最大浓度20.15万mg/L，泄漏20年后污染晕迁移1910m；中间罐区的苯污染物最大浓度4.23万mg/L，泄漏20年后污染晕迁移1826m。

新厂区中原料罐泄漏的石油类、产品罐泄漏的苯将在厂区内形成污染晕（见图7~8）。原料罐区的石油类污染物最大浓度15.24万mg/L，泄漏20年后污染晕迁移4145m；产品罐区的苯污染物最大浓度15.68万mg/L，泄漏20年后污染晕迁移4237m。污染晕运移范围见表5。

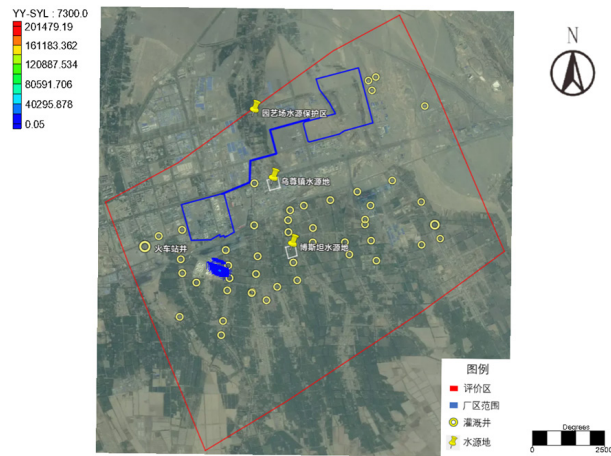


图3 非正常工况后老厂区原油罐石油类运移情况

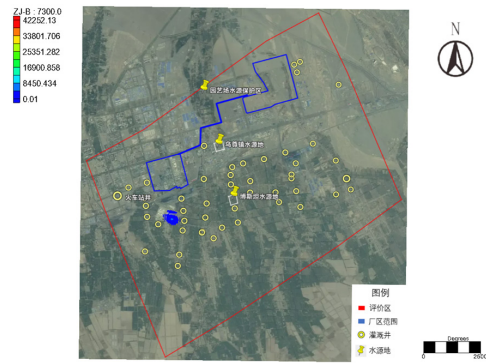


图4 非正常工况后老厂区中间罐苯运移情况



图5 非正常工况后新厂区原料罐石油类运移情况

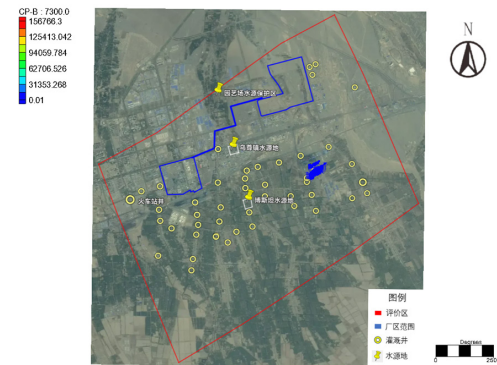


图6 非正常工况后新厂区产品罐苯运移情况

表3 厂区非正常工况污染源强一览表

厂区	污染源位置	底面积A (m ²)	污染物	储存量 (m ³)	密度ρ (kg/m ³)	标准限值 (mg/L)	进入地下水的质量 (kg)
老厂区	原油罐	1256	石油类	20000	730	0.05	18337.6
	中间罐	227	苯	2000	880	0.01	3995.2
新厂区	原料罐	962	石油类	10000	750	0.05	14430
	产品罐	962	苯	10000	860	0.01	16546.4

表4 罐区非正常工况下污染晕运移情况

厂区	装置区	污染物	污染泄漏后时间	超标范围 (m ²)	最大运移距离 (m)
老厂区	原油罐区	石油类	20年	252 000	1 909.69
	中间罐区	苯		234 440	1 825.68
新厂区	原料罐区	石油类		208 500	4 145.43
	产品罐区	苯		213 504	4 237.10

4 结语

(1) 在非正常工况下, 污染物向南运移扩散出厂区, 对下游构成潜在污染风险。

(2) 研究表明, 必须采取严格的“源头阻控-分区防控-监测-应急”综合策略。建议划定重点管控区, 布设监测井网, 并规划应急截获井。

(3) 本研究基于 GMS 的模拟, 成功阐明了研究区污染物在高渗透地层中的时空迁移规律, 可为同类项目地下水风险防控提供定量依据。

参考文献:

[1] 张捷杰. 石化企业地下水污染防治问题探析[J]. 清洗世界, 2023,39(5):92-94.

[2] 史秋云, 刘国东. 基于 GMS 的石化园区地下水数值模拟研究[J]. 吉林水利, 2024(6):51-57.

[3] 刘景兰, 李立伟, 朱明奕等. 基于 GMS 的某典型石化园区地下水污染运移研究[J]. 能源与环保, 2022, 44(5):7-12.

[4] 陈冬琴. GMS 软件在杭嘉湖地下水资源评价中的应用[J]. 软件导刊, 2007,(9):49-51.

[5] Kresic, N., Panday, S. Modeling of groundwater flow

and transport in coastal karst aquifers. Hydrogeol J 29, 249 - 258 (2021).

[6] 祝晓彬. 地下水模拟系统 (GMS) 软件[J]. 水文地质工程地质, 2003, (05): 53-55.

[7] 买合木提·艾合买提. 库车县地下水资源开发水文地质条件与矿化度分析[J]. 能源与节能, 2021(10):109-110+123.DOI:10.16643/j.cnki.14-1360/td.2021.10.039.

[8] 庞鹏, 刘威. 新疆库车县地质灾害分布特征及形成条件分析[J]. 地下水, 2016, 38(04): 233-235.

[9] Neuman S P.A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers[J]. Water Resources Research, 1993,29(6):1863-1865.

[10] GB 50141-2008. 给水排水构筑物工程施工验收规范[S]. 北京: 中国建筑工业出版社, 2008.

作者简介: 李良朴 (2001-), 男, 硕士研究生, 主要从事水环境保护等工作。E-mail: llp9427@163.com。

* 通讯作者: 刘国东 (1962-), 男, 博士, 教授, 主要从事地下水科学, 生态水文学等工作。E-mail: liugd988@163.com。