

石油污染物在土壤中运移的数值模拟初探

王洪涛¹, 罗 剑¹, 李雨松¹, 牛冬杰¹, 李立清¹, 李光富² (1. 清华大学环境科学与工程系, 北京 100084; 2. 大庆市环境监测站, 大庆 163312)

摘要: 针对大庆石油管理局宋芳屯油田开发建设的实际情况, 分析了石油污染物在土壤中运移的规律, 并建立了非饱和带污染物迁移和地下水运动模型. 通过求有限元数值解, 利用该模型对石油污染物在土壤中的迁移情况进行了模拟预测, 结果显示了石油污染物可能对土壤造成污染的范围和影响程度.

关键词: 石油污染物; 土壤; 地下水; 运移; 数值模拟

Numerical simulation of petroleum pollutant transport in soil

WANG Hongtao¹, LUO Jian¹, LI Yusong¹, NIU Dongjie¹, LI Liqing¹, LI Guangfu² (1. Department of Environmental Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084; 2. Environmental Monitor Center of Daqing)

Abstract: On the basis of case studies on the oil field construction, the mechanism of the petroleum pollutant transport in soil was analyzed. A coupled numerical model of pollutant transport and groundwater flow in the unsaturated subsoil is established. This model is applied to simulate the transport of petroleum pollutants in Songfangtun oil field, Daqing Petroleum Administration, which is one of the biggest oil fields in China. In combination with the field survey, the extent of the petroleum pollution to the soil in relation to oil field construction is simulated and the mechanism of pollution and its influence factors are analyzed.

Key words: petroleum pollutant; soil; groundwater; transport; numerical simulation

石油主要是由烷烃、环烷烃和芳香烃组成的混合物, 具有致癌、致畸和致突变的潜在性^[1]. 在石油开采过程中, 试油、洗井、油井大修、堵水、松泵、下泵等井下作业和油气集输, 均有原油洒落于地面^[2], 含油污水外排更是直接将石油类污染物排入环境中. 石油污染物不仅残留包气带, 而且可能造成地下水含水层污染, 对人类健康和环境质量产生威胁. 早在 60 年代, 国外已着手研究土壤和地下水的污染问题^[3-5]. 近年来, 国内开始重视污染物在土壤中的迁移与转化问题^[6,7], 但研究成果多集中在定性分析和实验分析上, 定量数值分析研究成果不多^[8,9]. 在定性分析和实验研究基础上, 使用数值模拟技术定量分析预测研究石油污染物在土壤中的迁移行为是该领域研究工作的深化, 可以预测分析石油开发造成土壤污染的范围和程度, 为石油开发和污染土壤治理提供依据.

1 石油污染物在土壤中的迁移和转化

石油污染物在土壤中的迁移途径为: 污染源 表层土壤 犁底层土壤 下包气带土壤 地下含水层. 污染物在非饱和区主要存在 3 个物理形态的迁移: 残留流体污染物(液相油类)、污染物蒸汽、在孔隙水中溶解了的污染物(非水溶态液体 NAPLs 的溶解).

土壤表面上的石油类污染物质向土壤中入渗, 并在土壤中残留. 由于土壤中存在大量的有机和无机胶体、微生物和土壤动物, 使进入土壤中的污染物通过土壤的物理、化学和生物等

过程,不断地被吸附、分解、迁移和转化.一般石油在土壤中的迁移能力很弱,使石油污染区的表层土聚集许多原油.在土壤中,石油类污染物质可以被土壤所吸附,且土壤中的微生物对石油类污染物质也有一定的降解作用.土壤表面的石油还可通过挥发进行自净.当污染强度较大且小分子烃类含量较高时,则可以迁移进入地下水含水层中.

2 数学模型与数值解

油田开发影响土壤环境的主要污染源有二:一是落地油,二是含油污水.其中后者主要污染物也是石油.为了定量分析预测石油在土壤中的迁移转化过程,建立了非饱和带污染物迁移和水运动耦合模型分析预测石油在土壤中的迁移规律和浓度分布.

2.1 水运动数学模型

土壤中的石油随水迁移运动.非饱和水运动可用下面数学模型描述:

$$\left\{ \begin{array}{l} C \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + \frac{\partial K_{zz}}{\partial z} \quad (1) \\ \text{初始条件} \quad h|_{t=0} = h_0(x, z) \quad (2) \\ \text{Dirichlet 边界条件} \quad h|_{\Gamma_1} = h_1(x, z, t), \quad (x, z) \in \Gamma_1 \quad (3) \\ \text{Neumann 边界条件} \quad -K \frac{\partial h}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = q(x, z, t), \quad (x, z) \in \Gamma_2 \quad (4) \end{array} \right.$$

式中, K_{xx} , K_{zz} :横向和纵向水力传导系数; C :比水容量; h :基质势; h_0 :初始值; h_1 :基质势边界条件; q :通量边界条件; n :边界外法线向量; Γ_1, Γ_2 :Dirichlet 和 Neumann 边界.

2.2 污染物迁移的数学模型

石油污染物在非饱和带中的迁移可以用下面数学模型描述:

$$\left\{ \begin{array}{l} R_d \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial(v_x c)}{\partial x} - \frac{\partial(v_z c)}{\partial z} + \left(\frac{\partial}{\partial t} - R_d \right) c \pm M \quad (5) \\ \text{初始条件} \quad c|_{t=0} = c_0(x, z) \quad (6) \\ \text{Dirichlet 边界条件} \quad c|_{\Gamma_1} = c_1(x, z, t), \quad (x, z) \in \Gamma_1 \quad (7) \\ \text{Neumann 边界条件} \quad -D \frac{\partial c}{\partial n} \Big|_{\Gamma_2} = f_1(x, z, t), \quad (x, z) \in \Gamma_2 \quad (8) \\ \text{Cauchy 边界条件} \quad \left(v_c - D \frac{\partial c}{\partial n} \right) \Big|_{\Gamma_3} = f_2(x, z, t), \quad (x, z) \in \Gamma_3 \quad (9) \end{array} \right.$$

式中, R_d :滞留因子; c :污染物浓度; D_{xx} , D_{zz} :横向和纵向弥散系数; v_x , v_z :横向和纵向实际平均流速,由水运动模型确定; θ :土壤含水率; λ :污染物的衰减系数; M :源汇项; c_0 :初始条件; c_1 :浓度边界条件; f_1 :弥散通量边界条件; f_2 :对流弥散通量边界条件; n :边界外法线向量; $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$:Dirichlet, Neumann 和 Cauchy 边界.

2.3 模型的有限元求解

将研究区域进行有限元剖分;使用 Galerkin 有限元方法将水运动数学模型形成变分问题;将基质势 h 对时间 t 的导数用差分代替,可以得到

$$[M] \frac{\{h\}_{t+\Delta t} - \{h\}_t}{\Delta t} + [S] \{h\}_{t+\Delta t} = \{G\}_{t+\Delta t} + \{Q\}_{t+\Delta t} + \{B\}_{t+\Delta t} \quad (10)$$

整理得到水运动数学模型的基本有限元方程组为

$$[T]\{h\} = \{y\} \tag{11}$$

其中, $[T]$: 传导矩阵, $[T] = [M] / \Delta t + [S]$; $\{h\}$: 待求未知量列向量; $\{y\}$: 右端项已知向量, $\{y\} = [M]\{h\} / \Delta t + \{G\} + \{Q\} + \{B\}$.

必须指出, 对于非饱和水运动模型而言, K_{xx} 和 K_{zz} 是 h 的函数, 因此模型是非线性模型不能直接求出 h 来. 这里使用迭代法求解模型, 基本步骤如下: 令 $h = h_0$, 根据 K 和 h 的关系确定 K , 求解模型得到第 1 次迭代解 h ; 运用迭代解 h 确定 K ; 已知 K 值, 求解模型得到本次迭代解 h ; 重复上述步骤, 直至达到迭代精度为止. 这一迭代格式的收敛速度很快, 一般只需迭代 8—10 次即可达到收敛标准.

对于污染质迁移数学模型, 类似于水运动模型的情况, 将研究区域进行有限元离散, 将浓度对时间的导数用差分代替可得

$$[M_{ij}] \frac{\{C_i\}_{t+\Delta t} - \{C_i\}_t}{\Delta t} + [S_{ij}]\{C_i\}_{t+\Delta t} + \{D_j\}_{t+\Delta t} + \{Q_i\}_{t+\Delta t} = 0 \tag{12}$$

整理得污染质迁移模型的有限元方程为

$$[T]\{C\} = \{Y\} \tag{13}$$

式中: $[T]$: 系数矩阵; $\{C\}$: 待求浓度列向量; $\{Y\}$: 右端已知向量.

水运动模型和污染质迁移模型是耦合存在的, 需要联立求解. 先求解水运动模型的解定流速场, 然后将其带入污染质迁移模型中求解, 即可得到土壤中污染物质的浓度分布.

2.4 模型验证

为了说明模型模拟结果的有效性, 用 10 年石油在土壤中迁移的模拟预测结果与宋芳屯油田典型土壤剖面的监测数据进行比较, 如图 1 所示. 可见, 预测石油含量与实测值具有较好的一致性, 说明模型参数识别是正确的.

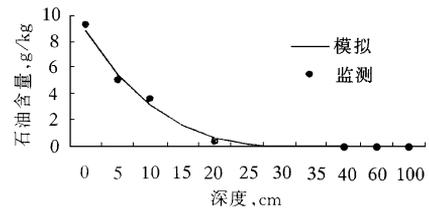


图 1 模拟结果与实测结果对比

Fig. 1 Comparison between measured and simulated content of petroleum pollutant

3 宋芳屯油田典型油井石油污染物在土壤中迁移模拟分析

3.1 井场条件概述

宋芳屯油田是大庆石油管理局的重要产油油田之一, 1983 年开始开发. 结合项目研究工作, 取该油田典型油井 F58 的土壤剖面进行模拟分析. 该井建于 1984 年, 正常运行至今. F58 井附近为荒地, 土壤剖面主要有 3 个岩性层. 上层为壤土层, 厚度小 (5—10 cm 厚), 有机物含量低 (< 1.0%). 壤土层之下为灰色、褐色粘质粉土, 厚度较大 (5.2—6.5 m). 其下为粉砂层, 构成潜水含水层.

3.2 模拟范围和有限元剖分

根据井场作业的特点、影响范围以及地下水埋深, 选择模拟分析范围为: 以油井为中心, 沿径向向两侧各 100 m. 下边界为浅层地下水面, 埋深 6 m. 采用矩形剖分网格, 共剖分 640 个单元, 693 个节点. 根据落地油分布和迁移特点, 剖分网近地表加密, 向下部变疏, 在井点附近加密, 向两侧变疏.

3.3 污染源分析

油田土壤的主要污染源是试油及井下作业产生的落地原油. 宋芳屯油田 1998 年投产油井数为 739 口, 按回收率为 80 % 计算, 废弃在环境中的落地油为 73.9—295.6 t/a. F58 井附近石油污染物的实测剖面结果如表 1 所示. 野外调查结果显示, 落地原油污染物主要分布在以油井为中心的一定范围内. 油井附近浓度最大, 离井越远, 浓度越小, 60—70 m 以外, 几乎没有污染. F58 井落地油的平均产量按 1.0 t/a 计算, 源强为落地油量的 20 %, 以油井为中心呈正态分布.

表 1 F58 油井土壤剖面石油污染物监测值 (单位: mg/kg)
Table 1 Measured contents of petroleum pollutant of F58 oil well section

距离, m	深度, cm						
	0	5	10	20	40	60	100
5	9327.2	5110.3	3711.0	141.7	58.7	46.3	39.7
20	7962.6	-	-	123.7	58.8	50.1	36.8
40	589.7	-	-	68.2	51.6	40.3	37.6
60	98.3	43.3	-	-	42.2	38.5	40.0
100	71.3	-	-	41.5	42.3	40.1	38.5

3.4 初始条件和边界条件

对于污染质迁移模型, 油田开发前土壤的石油含量为初始值, 根据监测资料取 42 mg/kg. 上边界为 Cauchy 边界, 给定污染物的对流弥散通量, 将 0.2 t/a 的落地油以油井为中心按正态分布分配到半径为 60 m 的区域. 考虑到污染物在下边界的浓度或者通量是未知的, 下边界取为 Neumann 边界, 作为边界条件, 给定污染物的弥散通量为 0, 考虑到污染物质分布范围以及污染物的迁移方向, 左右边界取零通量边界.

表 2 土壤含水量和基质势监测值

Table 2 Measured contents of soil moisture and matrix potential					
深度, cm	10	20	60	100	200
含水量, %	18.2	20.6	24.1	26.4	37.7
基质势, cm 水柱	315.2	264.5	201.5	158.6	64.4

水运动模型的上边界为降雨补给(蒸发排泄)边界, 为降雨量减去地表径流和实际蒸发量等之后的净入渗强度通量, 根据当地实际月平均降水量和蒸发量逐月计算. 下边界为潜水面, 给定水头值为潜水位. 由于非饱和带的水运动主要是垂向运动, 因此

取左右边界通量为零. 在计算的初始时刻, 在计算域上给定基质势. 实测土壤含水量和基质势见表 2, 不同深度上的基质势变化按实测值插值得到.

3.5 参数确定

模拟中使用的参数主要有三个来源: 一是现场试验, 二是实验室实验, 三是文献调研. 土层的渗透系数、基质势由现场试验结果确定. 通过野外入渗试验可以得到土层的渗透系数参数 (10.1 cm/d). 但土层对水的渗透能力远大于对石油类污染物的渗透能力. 参考《朝阳沟油田开发工程环境影响报告书》中的实验成果和本研究的野外入渗实验成果, 取石油在土层中的渗透系数为水渗透系数的 1/50—100. 吸附系数和降解系数由实验室实验结果确定, 通过吸附平衡实验和土柱实验分别得到了粘土、粘质粉土、粉砂土和细砂土的吸附等温线, 结合 F58 油井周围的地质条件, 确定其吸附系数. 降解系数则由实验得到的不同温度 (3, 10, 20, 30) 条件下石油污染物在不同岩性 (粘土、粘质粉土、粉砂土) 中的降解系数来确定 (现场试验和实验

室实验的成果另文发表).石油在纵向和横向弥散度为经验值,参考前人在本地区工作的成果给定*.主要参数选取如表 3 所示.

3.6 模拟预测结果及分析

运用水运动模型模拟土壤中水分的运动,得到不同时间 F58 油井附近土壤剖面的水头和水运动速度.再运用污染物迁移模型模拟得出不同时段未刻的石油含量分布情况.结果见图 2.

表 3 计算参数取值表

Table 3 Parameters of numerical simulation

参数名称	符号	取值区间	典型值
吸附分配系数, cm^3/mg	K_d	1.0 ~ 1.5	1.21
渗透系数, cm/d	$K_x K_z$	0.5 ~ 0.01	0.1
纵向弥散度, cm	L	1 ~ 0.1	0.2
横向弥散度, cm	T	0.1 L	0.02
降解系数, $1/\text{d}$		$1.0 \sim 10.0 \times 10^{-4}$	4.0×10^{-4}
孔隙度	n	0.23 ~ 0.42	0.3

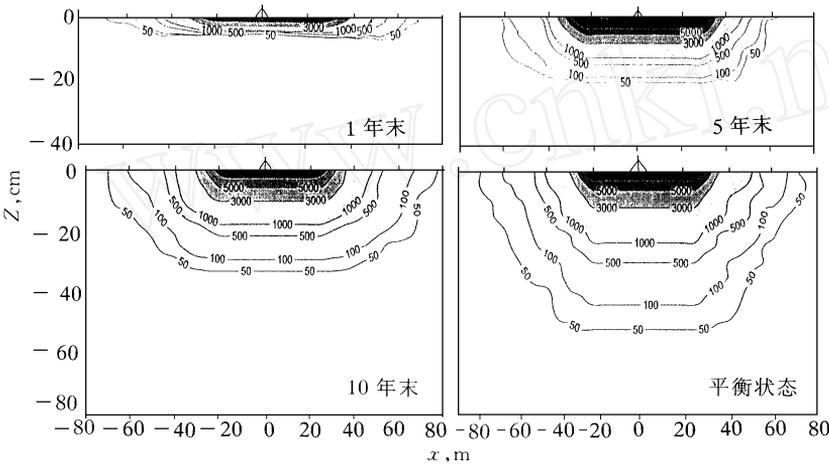


图 2 不同时段土壤中石油含量等值线图(单位: mg/kg)

Fig. 2 The contour of petroleum pollutant concentration in soil in different periods of time

从模拟结果可以看出石油类污染物在土壤中的迁移具有下面一些特征:

(1) 从水平方向看,在采油井井场附近,石油对土壤的污染程度与距井口距离成反比.可能产生落地油污染的区域在油井附近 40 m 范围,向外围迅速降低.

(2) 从垂直方向上看,落地油主要在表层土壤中聚集,一般集中在地表之下 20—30 cm 的范围内,其中 0—5 cm 深度范围含量最高,向深部按指数规律迅速降低.达到平衡时,石油污染物的影响深度为 40—50 cm,污染深度为 30—40 cm,平均有 90% 以上的石油残留在 20 cm 以上的土层内.这一结果说明石油在土壤中的迁移能力很弱,见图 3 和图 4.由于宋芳屯地区地下水埋深为 6 m,模拟结果显示石油污染物对本地地下水影响较小,这与实际监测情况相符.

(3) 从时间上看,随着油田的开采,采油井附近土壤表层的石油含量呈现累加的趋势.在污染物源强一定的情况下,随着石油污染物在土壤中的迁移,参与吸附和生物降解等作用的土壤量不断增加.且由于生物降解等作用,土壤的吸附作用不断的得到部分恢复.当土壤的吸附与生物降解等自净作用与石油的增加量大体持平时,这时几者之间达到动态平衡状态.模拟分析结果显示,达到平衡的时间大约需要 15—20 年,平衡条件下油井附近的土壤含油量一般为 7000—12000 mg/kg ,见图 5.

* 田德新,李长兴.大庆油田开发建设对环境影响研究.大庆石油管理局.1995

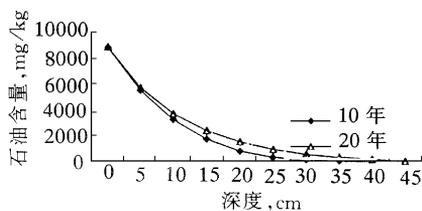


图3 土壤石油含量随深度变化

Fig. 3 The change of petroleum pollutant concentration with depth

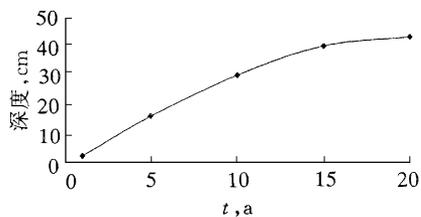


图4 入渗深度随时间的变化

Fig. 4 The change of contaminated depth as a function of time

4 结论

(1) 落地油主要在表层土壤 20—30 cm 的范围内中聚集,其中 0—5 cm 深度范围含量最高,向深部按指数规律迅速降低,不会对深部土壤构成污染。落地油的环境影响主要在油井附近,其范围以油井为中心半径为 50—70 m 的区域。产生落地油污染的区域在油井附近 40 m 范围,向外围迅速降低。(2) 随着油田的开采,采油井附近土壤表层的石油含量曾现累加的趋势,达到平衡的时间大约需要 15—20 年,平衡条件下油井附近的土壤含油量一般为 7000—12000 mg/kg。(3) 落地油对环境的污染集中在油井附近的地表土壤,将对油井附近的地表生态环境产生影响。由于落地油在土壤中迁移深度较浅,因此不会对宋芳屯地区地下水造成污染。

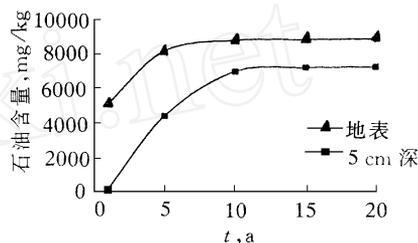


图5 土壤石油含量随时间的变化

Fig. 5 The change of petroleum pollutant concentration as a function of time

参考文献:

- [1] 韩长锦,姜永年,杨世玉.水中石油烃污染的特点及监测分析中若干问题[J].环境科学与技术,1988,(3):20—22
- [2] 郑西来,荆静,席临平.包气带原油的迁移和降解研究[J].水文地质工程地质,1998,(2):35—37
- [3] Peter Grathwohl. Diffusion in natural porous media: contaminant transport, sorption/desorption and dissolution kinetics [M]. Boston: Kluwer Academic Publishers. 1998
- [4] Faust C R. Transport of immiscible fluids within and below the unsaturated zone: A numerical media[J]. Water Resources Research, 1985, 21(4): 587—596
- [5] Mearthy J F, Zachara J M. Subsurface transport of contaminants [J]. Environmental Science and Technology, 1989, 18: 41—55
- [6] 刘兆昌,张兰生,聂永丰,等.地下水系统的污染与控制[M].北京:中国环境科学出版社.1991
- [7] 郑西来,刘孝义,席临平.多孔介质吸附对石油污染物运移的阻滞效应研究[J].长春科技大学学报,1999,29(1):52—54
- [8] Nunzio Romano, Bruno Brunone. Numerical analysis of one-dimensional unsaturated flow in layered soils [J]. Advances in Water Resources, 1998, 21(4): 315—324
- [9] 王秉忱.地下水污染地下水水质模拟方法[M].北京:师范学院出版社.1985