

地下水溶质迁移数值模型中的参数敏感性分析

李木子^{1,2,3}, 翟远征^{2,3}, 左锐^{2,3}, 王金生^{2,3}

(1. 中国地质大学(北京) 水资源与环境学院, 北京 100083; 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)

摘要: 为提高地下水溶质迁移模型的模拟精度, 减小因水文地质参数不确定性产生的误差, 需要对数值模型进行参数敏感性分析。以某冲洪积扇平原孔隙水为例, 利用GMS 7.0软件建立了地下水流模型和溶质迁移模型, 并对模型进行了验证。通过引入敏感性指数作为量化指标, 运用局部分析法中的因子变换法对模型中的渗透系数、孔隙度、弥散度三个参数进行了敏感性分析, 参数变幅设置为20%。研究结果表明: (1) 渗透系数和孔隙度的变化对污染物迁移距离影响最大, 二者的敏感性指数相差20%; (2) 弥散度的变化对污染物迁移距离的影响最小, 与渗透系数和孔隙度相比, 其敏感性指数相差一个数量级; (3) 在20%的参数变幅内, 污染物迁移距离与渗透系数和孔隙度呈良好的线性相关关系。

关键词: 地下水; 数值模拟; 溶质迁移; 参数敏感性

中图分类号: P641.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1672-1683(2014)03-0133-05

Sensitivity Analysis of Parameters in Numerical Simulation of Solute Transport in Groundwater

LI Mu zi^{1,2,3}, ZHAI Yuan zheng^{2,3}, ZU O Rui^{2,3}, WANG Jin sheng^{2,3}

(1. School of Water Resources and Environment, China University of Geosciences (Beijing), Beijing 100083, China;
2. College of Water Sciences, Beijing Normal University, Beijing 100875, China; 3. Engineering Research Center of Groundwater Pollution Control and Remediation, Ministry of Education, Beijing 100875, China)

Abstract: In order to improve the precision of groundwater solute transport model and reduce the errors caused by the uncertainties of hydrogeological parameters, sensitivity analysis of parameters is needed for the numerical model. In this paper, a groundwater flow and solute transport model was established to simulate the pore water in an alluvial fan plain using GMS 7.0, and the model was verified. Sensitivity index was introduced to quantify parameter sensitivity. Factor transformation method, known as a local analysis method, was used to perform sensitivity analysis of permeability coefficient, porosity, and dispersity. Variation range of the parameters was set to be 20%. The results showed that (1) permeability coefficient and porosity have the greatest impact on contaminant migration distance, and the difference of sensitivity index between the two parameters is about 20%; (2) dispersity has the least impact on contaminant migration distance, and the sensitivity index of dispersity is one order of magnitude lower than that of permeability coefficient and porosity; and (3) contaminant migration distance shows a good linear correlation with permeability coefficient and porosity within 20% of variation ranges of both parameters.

Key words: groundwater; numerical simulation; solute transport; parameter sensitivity

近几十年来,随着地下水科学和计算机技术的发展,地下水数值模拟技术得到了迅速发展,已成为解决地下水问题的重要工具^[1-2]。目前地下水数值模拟采用的软件主要有GMS、MODFLOW、Visual MODFLOW、FEFLOW、SUTRA、TOUGH2等^[3]。在地下水数值模拟过程中,研究数值模型

的模拟结果(包括水流和溶质迁移)对模型中重要参数变化的响应规律(即模型参数的敏感性分析),有助于提高模型的可靠性和模拟预测结果的准确性^[4-5],因而被认为是地下水建模的一个基本步骤^[6-7]。

国内外学者在敏感性研究方面开展了大量工作,积累了

收稿日期: 2013-12-14 修回日期: 2014-04-17 网络出版时间: 2014-04-14

网络出版地址: <http://www.cnki.net/kcms/doi/10.13476/j.cnki.nsbdtqk.2014.03.001.html>

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金(20130003120009); 国家国防科工局高放废物地质处置研究开发项目(科工计[2012]240号)

作者简介: 李木子(1987-),男,河北保定人,博士研究生,主要从事地下水数值模拟研究。E-mail: Limzsky@163.com

通讯作者: 王金生(1957-),男,河南太康人,教授,博士生导师,主要从事地下水污染及数值模拟研究。E-mail: wangjs@bnu.edu.cn

丰富的成果^[8-10]。但是纵观以往的相关研究,大多针对的是地下水动力模型,而对于地下水溶质迁移模型的敏感性分析较少。近年来地下水污染问题日益严重,因此溶质迁移模型中污染晕对参数变化的响应研究十分必要。另一方面,2011年发布的《环境影响评价技术导则—地下水环境(HJ 610-2011)》中明确规定,建设项目对地下水环境影响的一级评价以及水文地质条件复杂时的二级评价都应采用数值法,预示着地下水数值模拟技术的应用更加广泛,因此有理由相信地下水数值模型中的参数敏感性分析,尤其是参数的不确定性对溶质迁移模拟结果的影响问题,必将受到越来越多的关注和重视。

在用数值法进行地下水溶质迁移模拟时,渗透系数、孔隙度、弥散度均为重要的参数。渗透系数是表征含水层渗透能力的指标,对溶质迁移有重要影响。弥散作用对溶质在含水层中的扩散产生影响,特别是当地下水流速小、对流作用不太强时,弥散作用更为重要。在实际工作中,弥散度数值存在较大的不确定性^[17]。孔隙度是对流作用中的一个关键参数,当模拟溶质在含水层中迁移时,孔隙度的较小变化会对地下水流速和溶质迁移产生较大影响。因此,本文拟对上述三个参数进行敏感性分析。

本文以某冲洪积扇平原孔隙地下水为例,利用GMS 7.0模拟软件建立该研究区的地下水水流和溶质迁移数值模型,并以此为基础,采用局部分析法中的因子变换法,研究地下水溶质迁移模型中污染晕的迁移变化对模型参数(渗透系数、孔隙度、弥散度)变化的响应。

1 研究区概况

研究区地处某山前冲洪积扇平原,区内分布巨厚的第四系沉积物,受基底构造控制,有南厚北薄的变化趋势。表层以粉土、粉质黏土为主,下部主要为粉细砂、砂砾石。本文研究对象为孔隙型潜水,含水层岩性为粉细砂、砂砾石互层,底板岩性为粉质黏土,连续分布。潜水位埋深2.3~7.0 m,地下水流向总体为由南向北。地下水补给来源主要为侧向径流、地表水、大气降水等,排泄方式为蒸发、泉溪等。

2 数值模型的建立和验证

根据区域水文地质条件,利用模拟软件GMS 7.0建立了地下水溶质迁移模型。在模型中设置污染物泄露区,并对污染物泄露及迁移情况进行模拟预测。模型情况如下:(1)含水层概化为一层;(2)均质各向同性的潜水含水层,厚度35~50 m;(3)稳定流二维模型;(4)模拟区南北长10 km,东西宽7 km,模拟计算区面积50 km²;(5)在水平方向上进行网格剖分,剖分后单个网格大小为100 m(南北向)×70 m(东西向);(6)在污染物泄露区对网格进行加密,加密后为3 m×3 m;(7)污染物泄露时间为30年,模拟期为30年;(8)污染物泄露区位于研究区北部,面积200 m²。为方便计算,排放浓度设为1 mg/L,排放方式为连续泄露,污染晕浓度下限以《地下水质量标准》中氨氮的Ⅲ类标准浓度0.2 mg/L为例。

采用模拟区内16个观测井的实测水位数据对模型进行验证,验证后得到的参数值见表1。验证结果显示,模拟水位与观测水位整体拟合效果较好(图1及图2)。模型模拟结果表明,地下水模拟流场与实际流场基本一致,说明所建立的

模型基本能够客观反映研究区地下水流动系统的规律,即该模型具有适用性,可以用于参数敏感性分析。

表1 模型中采用的参数值

Table 1 Parameter values used in the model

参数	渗透系数/(m·d ⁻¹)	孔隙度	纵向弥散度/m
数值	10	0.3	2

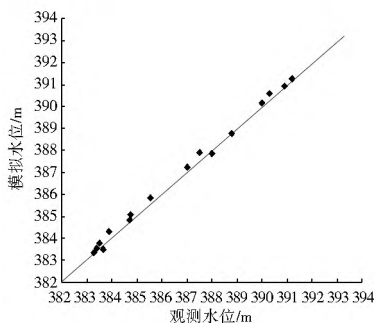


图1 模拟水位和观测水位对比

Fig. 1 Comparison of simulated and measured water levels

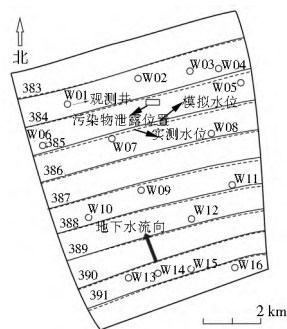


图2 地下水流场拟合

Fig. 2 Fitting curve of groundwater flow field

3 敏感性分析方法

按照参数的数量,一般可将参数敏感性分析方法分为局部分析法和全局分析法^[9]。局部分析法研究单个参数的变化对模拟结果的影响,分析时只改变某一参数的值,其他参数保持不变^[18]。该方法主要通过因子变化法或偏差变化法,将某一待分析的参数增减一定幅度,或者将参数增减一个标准偏差^[19]。全局分析法研究不同参数共同作用对模拟结果产生的影响,该方法主要有多元回归法^[20]、Morris法^[21]、Sobol法^[22]等。由于全局敏感性分析法操作较复杂,目前国内对地下水数值模型的参数敏感性分析以局部分析法为主^[19]。

本次敏感性分析采用局部分析法中的因子变换法,对三种参数(渗透系数、孔隙度、弥散度)分别做相同幅度的变化,分析它们对溶质迁移模拟结果的影响情况。根据以往敏感性研究经验和本次模拟的实际情况,各参数均设置八个水平值。各水平值为对照组分别做上下5%、10%、15%和20%的浮动。对照组为模型经过识别验证后采用的参数值。模拟时,分别改变模型中这三种参数值,模拟计算出八种情况下的污染物迁移情况。由于在该模型中不考虑污染物的化学反应,因此分析结果与污染物种类无关,只与污染物浓度和释放方式有关。

采用设计的敏感性指数 L 作为衡量参数敏感性大小的标准^[23]: L 值越大, 表明参数改变对污染物迁移距离的影响越大, 即该参数的敏感性越高。敏感性指数计算公式如下:

$$L = \frac{\sum_{j=1}^n \frac{\sqrt{c_j' - c_j}^2}{c_j}}{n}$$

式中: L 为敏感性指数(无量纲); n 为参数水平值个数, 即每种参数的模拟次数, 本次取 8(对照组不参与计算); c_j 为对照组污染物迁移距离(m); c_j' 为做敏感性分析时每次模拟出的污染物迁移距离(m)。

4 结果分析

4.1 模拟结果对不同参数的响应

在模型中首先采用识别验证后的参数值(表 1) 进行模

拟, 得到的结果作为对照组(图 3(a))。之后分别改变三种参数的值, 得到对应每种参数的 8 组不同水平值的模拟结果。以渗透系数上调 10% 为例, 污染晕迁移模拟结果见图 3(b)。各参数不同变幅情况下的迁移距离变幅见表 2。为了直观地对比分析模拟结果, 根据模拟得出的迁移距离数据制作了图 4。由表 2 和图 4 可见, 孔隙度对污染物迁移距离影响最大, 迁移距离可达 527 m, 变幅 102 m(相对于基准值变化了 24%); 渗透系数对污染物迁移距离的影响次之, 迁移距离最大变幅 71 m(相对于基准值变化了 17%); 弥散度对污染物迁移距离的影响最小, 迁移距离最大变幅只有 3 m(相对于基准值变化了 2%)。研究还发现, 在 20% 的参数浮动范围内, 污染物迁移距离与渗透系数和孔隙度呈良好的线性相关关系, 其中迁移距离随渗透系数的增加而递增, 随孔隙度的增加而递减。

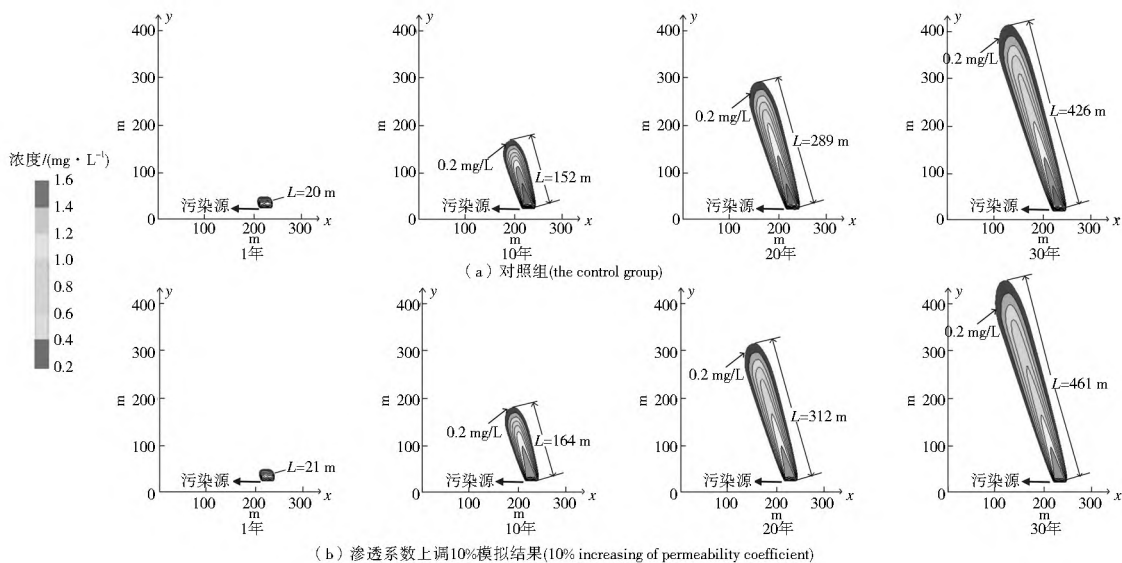


图 3 不同年份及参数值情况下污染物迁移情况

Fig. 3 Results of contaminant transport under different parameter conditions and at different times

表 2 各参数不同变幅情况下的污染物迁移距离变幅

Table 2 The amplitude of contaminant migration distance under different amplitudes of parameters

		(%)									
时间	参数	水平 1 (- 20%)	水平 2 (- 15%)	水平 3 (- 10%)	水平 4 (- 5%)	对照组 0	水平 5 (5%)	水平 6 (10%)	水平 7 (15%)	水平 8 (20%)	
1 年	渗透系数	- 14.9	- 9.6	- 7.0	- 2.5	0	3.1	7.3	9.2	14.7	
	孔隙度	18.1	14.9	8.8	4.6	0	- 4.0	- 8.1	- 11.2	- 13.3	
	弥散度	- 0.3	- 0.5	- 0.6	- 0.2	0	0.6	1.3	1.1	1.7	
10 年	渗透系数	- 16.6	- 11.0	- 7.5	- 3.5	0	4.3	8.3	12.0	15.9	
	孔隙度	23.5	16.5	10.6	5.4	0	- 4.1	- 8.4	- 11.5	- 15.2	
	弥散度	- 0.5	- 0.3	- 0.1	- 0.1	0	0.3	0.9	1.3	1.1	
20 年	渗透系数	- 16.0	- 12.2	- 8.0	- 3.7	0	4.2	8.1	12.4	16.0	
	孔隙度	23.6	16.7	10.7	4.9	0	- 4.4	- 8.2	- 11.9	- 15.8	
	弥散度	- 0.4	- 0.5	0.0	- 0.3	0	0.4	0.5	0.7	0.8	
30 年	渗透系数	- 16.7	- 12.4	- 8.2	- 4.0	0	4.5	8.4	12.6	16.3	
	孔隙度	23.9	17.0	10.6	5.4	0	- 4.6	- 8.3	- 12.1	- 15.8	
	弥散度	- 0.6	- 0.4	- 0.2	- 0.1	0	0.3	0.4	0.6	0.6	

注: 水平 1(- 20%) 表示在采用值(表 1) 的基础上下调 20%, 即相当于采用值的 80%, 其它与此类同。

4.2 敏感性指数分析

通过对各参数的敏感性指数进行计算和对比分析(结果

见图 5), 发现污染物迁移距离对渗透系数和孔隙度最为敏感, 而孔隙度的敏感性指数略高于渗透系数, 二者的敏感性

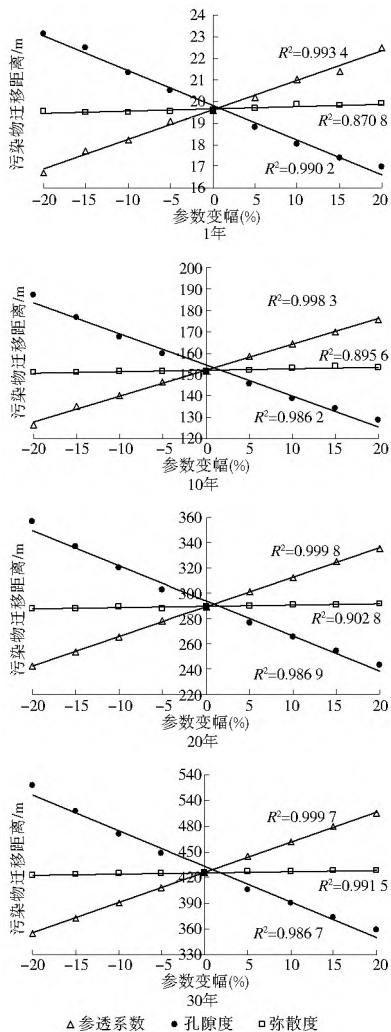


图 4 不同参数值情况下污染物迁移距离模拟结果及其对比
Fig. 4 The simulation results of contaminant migration distance under different parameter conditions

指数相差 20%；弥散度对迁移距离的影响很小，其敏感性指数与渗透系数、孔隙度相差一个数量级；渗透系数、孔隙度和弥散度的敏感性指数不受迁移时间的影响，即参数的敏感性与迁移距离和时间无关（第 1 年的敏感性指数受模型精度的限制存在一定误差）。

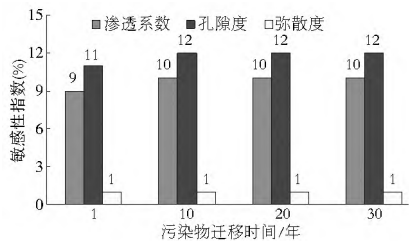


图 5 不同参数的敏感性指数对比

Fig. 5 Comparison of sensitivity indexes of different parameters

5 结论与讨论

本文在建立溶质迁移数值模型的基础上，运用因子变换法分析了地下水溶质迁移模型中渗透系数、孔隙度和弥散度等参数的变化对模拟结果的影响，得出以下认识。

(1) 污染物迁移距离对孔隙度和渗透系数最敏感，孔隙

度和渗透系数在 20% 的变幅范围内，污染物迁移距离最大变幅分别可达 24% 和 17%，二者的敏感性指数相差 20%。

(2) 弥散度对迁移距离的影响最小，弥散度在 20% 的变幅范围内，污染物迁移距离变幅不超过 2%。其敏感性指数与渗透系数和孔隙度的敏感性指数相差一个数量级，即渗透系数和孔隙度的改变对溶质迁移距离的影响远大于弥散度。

(3) 在 20% 的参数浮动范围内，污染物迁移距离与渗透系数和孔隙度呈良好的线性相关关系。

综上所述，参数值的设置对溶质迁移计算结果影响巨大。由于水文地质条件的复杂性及资料的有限性，参数值的确定对于模型来说，既至关重要，又存在较大难度。同时，除水文地质参数外，模型中还应考虑其他因素（如边界条件、源汇项、污染物浓度、化学反应速率等）对模拟结果的影响程度，并结合实际情况和以往的经验值，优化模型，得到更加准确的模拟结果。由于模型精度的限制，本次模拟尚不能进行 5% 以内微小变幅的参数敏感性分析。另外，污染物的泄露面积和泄露源强对溶质迁移结果产生的影响，还有待进一步研究。

参考文献 (References):

- [1] 薛禹群. 中国地下水数值模拟的现状与展望[J]. 高校地质学报, 2010, 16(1): 1-6. (XUE Yur qun. Present Situation and Prospect of Groundwater Numerical Simulation in China[J]. Geological Journal of China Universities, 2010, 16(1): 1-6. (in Chinese))
- [2] 李瑞航, 张永波, 刘天霸, 等. 三维水文地质建模技术研究综述[J]. 南水北调与水利科技, 2011, 9(6): 98-101. (LI Rui hang, ZHANG Yong bo, LIU Tian ba, et al. An Overview on the Study of Three dimensional Hydrogeology Modeling[J]. South to North Water Transfers and Water Science & Technology, 2011, 9(6): 98-101. (in Chinese))
- [3] 王浩. 地下水数值计算与应用研究进展综述[J]. 地学前缘, 2010, 17(6): 1-12. (WANG Hao. Review of Research Progress about Groundwater Numerical Calculation and Application[J]. Earth Science Frontiers, 2010, 17(6): 1-12. (in Chinese))
- [4] 薛禹群, 谢春红. 地下水数值模拟[M]. 北京: 科学出版社, 2007. (XUE Yur qun, XIE Chun hong. Numerical Simulation of Groundwater[M]. Beijing: Science Press, 2007. (in Chinese))
- [5] 王洪涛. 多孔介质污染物迁移动力学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008. (WANG Hong tao. Contaminant Transport Dynamics in Porous Medium[M]. Beijing: Higher Education Press, 2008. (in Chinese))
- [6] Zheng C M, Bennet G D. Applied Contaminant Transport Modeling[M]. New York: John Wiley & Sons, INC, 2002.
- [7] 吴吉春, 陆乐. 地下水模拟不确定性分析[J]. 南京大学学报(自然科学), 2011, 47(3): 227-234. (WU Ji chun, LU Le. Uncertainty Analysis for Groundwater Modeling[J]. Journal of Nanjing University (Natural Sciences), 2011, 47(3): 227-234. (in Chinese))
- [8] Lenhart T, Eckhardt K. Comparison of Two Different Approaches of Sensitivity Analysis[J]. Physics and Chemistry of the Earth, 2002, 27(3): 645-655.
- [9] Saltelli A, Chan K, Scott M, et al. Sensitivity Analysis, Probab

- bility and Statistics Series[M]. New York: John Wiley & Sons, 2000: 40-47.
- [10] Cvetkovic V. How Accurate is Predictive Modeling of Groundwater Transport? A Case Study of Advection, Macrodispersion, and Diffusive Mass Transfer at the Forsmark Site (Sweden) [J]. Water Resources Research, 2013, 49: 5317-5327.
- [11] Stothoff S A. Uncertainty and Variability of Infiltration at Yucca Mountain: Part 2. Model Results and Corroboration [J]. Water Resources Research, 2013, 49: 3804-3824.
- [12] Wu J C, Zeng X K. Review of the Uncertainty Analysis of Groundwater Numerical Simulation [J]. Chinese Science Bulletin, 2013, 58 (25): 3044-3052.
- [13] 束龙仓, 刘佩贵, 刘波, 等. 傍河水源数学模型的参数灵敏度分析: 以辽宁省北票市某傍河水源地为例 [J]. 工程勘察, 2006 (8): 29-31. (SHU Long cang, LIU Pei gui, LIU Bo, et al. Parameter Sensitivity Analysis of Mathematical Models of Riverside Source Fields: Use a Riverside Source Field in Beipiao City of Liaoning Province as an Example [J]. Geotechnical Investigation and Surveying, 2006(8): 29-31. (in Chinese))
- [14] 翟远征, 王金生, 苏小四. 正交试验法在地下水数值模拟敏感性分析中的应用 [J]. 工程勘察, 2011 (1): 46-50. (ZHAI Yuan zheng, WANG Jin sheng, SU Xiao si. The Application of Orthogonal Experiment Method in Sensitivity Analysis of Parameters in Groundwater Numerical Simulation [J]. Geotechnical Investigation and Surveying, 2011(1): 46-50. (in Chinese))
- [15] 翟远征, 王金生, 苏小四, 等. 地下水数值模拟中的参数敏感性分析 [J]. 人民黄河, 2010, 32(12): 99-101. (ZHAI Yuan zheng, WANG Jin sheng, SU Xiao si, et al. Sensitivity Analysis of Parameters in Numerical Simulation of Groundwater [J]. Yellow River, 2010, 32(12): 99-101. (in Chinese))
- [16] 陈建, 梁川, 陈梁. SWAT 模型的参数灵敏度分析—以贡嘎山海螺沟不同植被类型流域为例 [J]. 南水北调与水利科技, 2011, 9(2): 4-45. (CHEN Jian, LIANG Chuan, CHEN Li ang. Parameter Sensitivity Analysis of SWAT Model: A Case Study of Small Watersheds with Different Land Cover Types in Hailuoguo Valley [J]. South to North Water Transfers and Water Science & Technology, 2011, 9(2): 4-45. (in Chinese))
- [17] 郑西来, 钱会, 杨喜成. 地下水含水介质的弥散度测定 [J]. 西安工程学院学报, 1998, 20(4): 33-36. (ZHENG Xi lai, QIAN Hui, YANG Xi cheng. Measurement on the Dispersivity of Porous Medium in Groundwater [J]. Journal of Xi'an Engineering University, 1998, 20(4): 33-36. (in Chinese))
- [18] 束龙仓, 王茂枚, 刘瑞国, 等. 地下水数值模拟中的参数灵敏度分析 [J]. 河海大学学报(自然科学版), 2007, 35(5): 49-495. (SHU Long cang, WANG Mao mei, LIU Rui guo, et al. Sensitivity Analysis of Parameters in Numerical Simulation of Groundwater [J]. Journal of Hohai University (Natural Sciences), 2007, 35(5): 49-495. (in Chinese))
- [19] 吴志伟, 宋汉周. 温度时序资料确定地下水流速解析模型灵敏度分析 [J]. 水科学进展, 2013, 24(6): 877-882. ((WU Zhi wei, SONG Han zhou. Sensitivity Analysis of Determining Seepage Velocity Using Temperature Records [J]. Advances in Water Science, 2013, 24(6): 877-882. (in Chinese))
- [20] McKay M D, Beckman R J, Conover W J. A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code [J]. Technometrics, 1979, 21(4): 239-245.
- [21] Morris M D. Factorial Sampling Plans for Preliminary Computational Experiments [J]. Technometrics, 1991, 33(2): 159-172.
- [22] Sobol' I M. Sensitivity Estimates for Nonlinear Mathematical Models [J]. Mathematical Modeling Computational Experiments, 1993, 1(4): 407-414.
- [23] 翟远征. 鄂尔多斯白垩系盆地乌兰陶勒盖水源地地下水数值模拟中介质参数的敏感度分析 [D]. 长春: 吉林大学, 2008. (ZHAI Yuan zheng. Sensitivity Analysis of Media Parameters in Numerical Simulation of Groundwater Flow in Wulantaolegai Water Source Region in Ordos Cretaceous Basin [D]. Changchun: Jilin University, 2008. (in Chinese))

(下接第 200 页)

- [5] 燕守勋, 曲永新, 韩胜杰. 蒙皂石含量与膨胀土膨胀势指标相关关系研究 [J]. 工程地质学报, 2004, 12(1). (YAN Shou xun, QU Yong xin, HAN Sheng jie. Study on the Correlation between Smectite Content and Swell Potential of Swelling Soil Index [J]. Journal of Engineering Geology, 2004, 12(1). (in Chinese))
- [6] 陈浮华. 膨胀土上的基础 [M]. 中国建筑工业出版社, 1979. (CHEN Fu hua, The Basis of the Swelling Soil [M]. China Architecture And Building Press, 1979. (in Chinese))
- [7] [苏] E. A. 索洛昌. 膨胀土上建筑物的设计与施工 [M]. 中国建筑工业出版社, 1982. ([Russia] E. A. Suo Luo Chang. Design and Construction of Buildings on the Swelling Soils [M]. China Architecture And Building Press, 1982. (in Chinese))
- [8] 陈善雄, 余颂, 孔令伟, 等. 膨胀土判别与分类方法探讨 [J]. 岩土力学, 2005, (12): 1895-1901. (CHEN Shan xiong, XU Song, KONG Ling wei, et al. Identification and Classification Method of the Swelling Soil [J]. Rock And Soil Mechanics, 2005, (12): 1895-1901. (in Chinese))