

变密度地下水流模拟软件 SEAWAT-2000 简介*

栾熙明 郑西来 黄 翠 马玉杰

(中国海洋大学环境科学与工程学院, 青岛 266100)

滨海地区是全球经济最发达、人类聚居密度最大的地区, 滨海含水层中的地下水是这一地区重要的淡水资源。海水入侵到地下水中是由于天然或人类活动, 使咸淡水之间的动态平衡被打破而出现海水向滨海淡水含水层入侵的现象。海水入侵将会导致(如水质恶化、土壤盐渍化及荒漠化等)一系列生态、环境恶化问题(成建梅等, 2004)。滨海地区的丹东、大连、营口、秦皇岛、烟台、青岛等城市, 出现了不同程度的海水(咸水)入侵问题。如何保证这类地区海域咸水与含水层淡水的平衡, 控制这类地区海(咸)水入侵的状况, 保证这类地区地下水资源的可持续利用, 研究滨海地区多孔介质含水层的海水入侵动力学模型, 具有重要的应用价值(作彦卿, 2007)。

地下水中包含了很多溶解组分, 这些溶解组分在浓度相对低的情况下, 对地下水的密度不会产生实质性的影响, 但是随着溶解物质浓度的增加, 这种影响就达到了不可以忽略的程度。在海岸带含水层中, 淡水和海水或者咸水之间存在一个过渡带, 水流的密度从淡水的密度(大约 1000kg/m^3)一直增加到海水的密度(大约 1025kg/m^3), 增幅达到 2.5%。野外观测和数值分析都已经证明, 地下水流密度的这种相对较小的变化均可以对其流速和流态产生实质性的影响(Langevin *et al.*, 2003)。因此在研究滨海地下水问题(如海水入侵、地下咸水扩散、地下水污染修复以及地下水入海通量)时, 考虑地下水的密度变化变得非常重要。

一、SEAWAT 发展概况

1998 年, Guo 等(1998)第一次提出将 MODFLOW 和 MT3D 耦合成为一个单独的模型来模拟三维变密度地下水流的概念。随后, 2001 年在美国地质调查局评价地下水如何排泄到佛罗里达州的比斯坎湾(Langevin, 2001)的过程中, SEAWAT 作为其中一个模块得到了改进和升级, 并且通过了一系列的基准化问题的验证(Langevin *et al.*, Guo, 2006; Guo *et al.*, 2002; Langevin, 2003)。

10 年来, SEAWAT 代码历经了数个版本。Guo 等(1998)提出第一版本, 是在 MODFLOW-88(McDonald *et al.*, 1988)和 MT3D96(Zheng, 1996)的基础上发展起来的, 具有初步模拟变密度地下水流与溶质运移问题的能力; 第二个版本由 Guo 和 Langevin(2002)进行改进, 将溶质运移模型由 MT3D96 升级到 MT3DMS(Zheng *et al.*,

* 收稿日期: 2008 年 10 月。

1998),把水流方程由体积守恒转化为质量守恒,更新了变密度水流边界,并采用双精度重新设计了代码;第三个版本由 Langevin 等(2003)采用了全新的模块化概念,对原有的代码进行了较大幅度的修改,将水流模型和溶质运移模型分别更新为 MODFLOW-2000 (Harbaugh *et al.*, 2000)和 MT3DMS (Zheng *et al.*, 1999),使软件功能较以前版本得到了实质性的提升,并更名为 SEAWAT-2000;最新版本 SEAWAT 即第四版由 Langevin 等(2008)采用更新版本的 MODFLOW-2000 和 MT3DMS (Zheng,2006)对 SEAWAT 进行了升级,不仅使模型能模拟由浓度引起的变密度溶质运移问题,还能模拟由浓度和温度同时引起的变密度溶质运移问题,使 SEAWAT 的功能再一次得到了重大的提升,更名为 SEAWAT Version 4。SEAWAT 代码升级详细信息见表 1。

表 1 SEAWAT 代码版本更新信息统计表

| 名称 | 版本号 | 更新日期 | 水流模块版本号 | 溶质运移模块版本号 |
|-------------|----------|-----------|-----------------------|----------------|
| SEAWAT | V1.10 | 1998-5-1 | MODFLOW88 | MT3D96 |
| | V2.10 | 2002-2-7 | | |
| SEAWAT | V2.11 | 2002-8-9 | MODFLOW88 | MT3DMS V3.50.A |
| | V2.12 | 2002-9-13 | | |
| SEAWAT-2000 | V3.10.00 | 2003-2-13 | | |
| | V3.10.01 | 2004-3-30 | MODFLOW-2000 V1.12.01 | MT3DMS V4.500 |
| | V3.11.00 | 2005-4-29 | | |
| | V3.11.01 | 2005-7-25 | MODFLOW-2000 V1.15.00 | MT3DMS V5.00 |
| | V3.11.02 | 2005-9-23 | | |
| | V3.12.00 | 2006-3-14 | MODFLOW-2000 V1.15.00 | MT3DMS V5.10 |
| SEAWAT_V4 | V3.13.00 | 2006-4-21 | MODFLOW-2000 V1.16.00 | MT3DMS V5.10 |
| | V4.00.00 | 2008-3-28 | | |
| | V4.00.01 | 2008-4-29 | MODFLOW-2000 V1.18.00 | MT3DMS V5.20 |

数据来源于美国地质调查局(USGS)网站

二、变密度地下水流与溶质运移模型的建立

鉴于 SEAWAT-2000 版本的成熟性和应用的广泛性,本文作者介绍 SEAWAT 模型建立过程中未特殊说明的都是基于 SEAWAT-2000 版本,其变密度地下水流与溶质运移模型的建立以 Langevin 等(2003)的研究为依据。

1. 建立方程的基本假定

SEAWAT 模型中采用的水流和溶质运移方程是建立在以下假设的基础上:含水层水流服从达西(Darcy)定律;承压含水层储水率关系式符合标准定义;弥散方程中的扩散方式服从菲克(Fick)定律;温度恒定;空隙介质完全饱水;同时流体完全混溶且不可压缩。

2. 等价淡水水头

SEAWAT 在处理咸水环境时是以淡水水头或者称为等价的淡水水头为基础,实测的

水头都是通过转化为等价淡水水头后参与模型计算。因此，充分理解淡水水头的含义对正确掌握 SEAWAT 模型及解释其运算结果有非常重要的作用。Guo 等 (1988) 和 Langevin 等 (2003) 分别给出了地下咸水实测水头与等价淡水水头的关系式

$$h_f = \frac{\rho}{\rho_f} h - \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} Z \quad (1)$$

式中, h_f 为等价淡水水头, [L]; h 为实测水头, [L]; ρ_f 为淡水的密度, [$M \cdot L^{-3}$]; ρ 为测量点实际地下水的密度, [$M \cdot L^{-3}$]; g 为重力加速度, [$L \cdot T^{-2}$]; Z 为测量点的高程, [L]。

3. 变密度地下水流方程

经典的恒密度水流模型 MODFLOW 采用体积守恒来建立水流方程, 但对于变密度地下水模型, 体积守恒不再适用。因此, SEAWAT-2000 采用质量守恒来建立水流方程, 并将地下水的密度定义为地下水中溶解物质浓度的函数, 忽略温度对地下水密度的影响。Guo 等 (2002) 推导出包含等价淡水水头的变密度地下水流动方程

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left[\rho K_{f\alpha} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \alpha} + \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \frac{\partial Z}{\partial \alpha} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \beta} \left[\rho K_{f\beta} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \beta} + \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right) \right] \\ + \frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\rho K_{f\gamma} \left(\frac{\partial h_f}{\partial \gamma} + \frac{\rho - \rho_f}{\rho_f} \frac{\partial Z}{\partial \gamma} \right) \right] = \rho S_f \frac{\partial h_f}{\partial t} + \theta \frac{\partial \rho \partial C}{\partial C \partial t} - \rho_s q_s \end{aligned} \quad (2)$$

式中, α 、 β 、 γ 为渗透的主方向; $K_{f\alpha}$ 、 $K_{f\beta}$ 、 $K_{f\gamma}$ 为沿 α 、 β 、 γ 方向的渗透率, [$L \cdot T^{-1}$]; S_f 为以等价淡水水头表示的储水率, [L^{-1}]; ρ 为地下水的密度, [$M \cdot L^{-3}$]; θ 为有效孔隙度, [无量纲]; C 为溶解物质的浓度, [$kg \cdot L^{-3}$]; q_s 为单位时间进入单位体积含水层源、汇项的体积, [T^{-1}]; ρ_s 为源、汇项中溶解物质的密度, [$M \cdot L^{-3}$]。

4. 溶质运移方程

由于地下水流动方程式中右边包含描述了含水层中浓度随时间改变的偏微分项, 所以地下水流动会引起浓度的重新分配, 而浓度的重新分配又会影响到流场。因此, 地下水流动和溶质运移是一个耦合的过程, 两个控制方程必须耦合求解。多孔介质的溶质运移方程包括水动力弥散项、地下水对流项、源汇项以及反应项。SEAWAT 代码中采用的地下水溶质运移方程 (Zheng *et al.*, 1998)

$$\frac{\partial (\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (\theta v_i C^k) + q_s C_k^s + \sum R_n \quad (3)$$

式中, C^k 为物质 k 的溶解浓度, [$M \cdot L^{-3}$]; C_k^s 为源或汇项中物质 k 的浓度, [$M \cdot L^{-3}$]; D_{ij} 为水动力弥散系数 [$L \cdot T^{-1}$]; θ 为有效孔隙度, [无量纲]; $\sum R_n$ 为化学物质反应项, [$M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}$]。

5. 初始条件和边界条件

初始条件和边界条件对求解一个特定非稳定流地下水模型来说是必不可少的, 也是

至关重要的,往往也关系到模型模拟结果的好坏。SEAWAT 模型中的初始条件包括初始水头边界和初始浓度边界,分别定义了模拟初始时的流场和浓度场,但只能用于非稳定流模拟。

SEAWAT 模型中主要包括三种边界: Dirichlet(恒定水头或恒定浓度)边界、Neumann(给定通量)边界和 Cauchy(水头依赖通量或混合情况)边界。在模拟中许多边界条件(如蒸发、补给、河流、抽注水井等)都是以方程(2)、(3)中源汇项的方式加入模型计算的。

三、SEAWAT 的总体结构与子程序包

SEAWAT 是通过 MODFLOW-2000 与 MT3DMS 耦合运行来求解模型的。整个模拟过程中包括三大循环:应力期循环、时间步长循环以及耦合求解循环。应力期循环中又可分为一系列应力期,每个应力期内,所有的外应力,如抽水量、蒸发量、降雨量等保持为常量。每个应力期又可再分为若干个时间步长。每个时间步长内通过对水流和溶质运移有限差分方程组的耦合求解,可以得到每个时间段结束时的流场和浓度场。

SEAWAT-2000 沿用了 MODFLOW-2000 模块化概念(每个特定子程序包解决一个特定功能)的编写方式,保留了 MODFLOW-2000 原有的 5 大子程序包:全局子程序包(GLO)、恒密度地下水流子程序包(GWF)、观测子程序包(OBS)、敏感度子程序包(SEN)和参数估计子程序包(PES),同时加入了变密度地下水流子程序包(VDF)和整合的 MT3DMS 污染运移子程序包(IMT)。SEAWAT-2000 可以模拟恒密度和变密度水流与溶质运移问题,但通常情况下,建议使用者采用 MODFLOW 和 MT3DMS 联合求解的传统方式来模拟恒密度水流与溶质运移问题。

由于 VDF 只采用了与 GWF 同样格式的矩阵方程,所以为 GWF 设计的解法不用修改就可以用于解 VDF。因此,SEAWAT-2000 也沿用了 MODFLOW-2000 原有的解法子程序来求解变密度水流方程,包括:强隐式解法子程序(SIP)、分层逐次超松弛解法子程序(SSOR)、预调共轭梯度解法子程序(PCG)、直接求解解法子程序(DE4)和联合代数多格解法子程序(LMG)。不同的解法具有不同的特点,使用者要根据解决问题的情况选择最适合的解法,使模拟的结果更贴近实际情况。

四、SEAWAT 的应用

SEAWAT-2000 已经被广泛地应用于模拟变密度地下水问题,如咸水入侵含水层、海岛地区地下咸水运移、滨海地下水入海通量、含水层修复、注入深层咸水含水层废水的迁移与转化等问题。Christian(2003)运用 MODFLOW 和 MT3DMS 耦合模型 SEAWAT 对佛罗里达州东南部地下水排泄比斯坎湾进行模拟,表明变密度模型是评估大区域地下水入海通量的有效工具。林锦等(2007)将遗传算法和变密度地下水流及溶质运移模拟程序 SEAWAT 耦合起来,开发了一个新的用于地下水模拟优化管理的通用程序——SWTGA,以求解变密度条件下地下水优化管理问题,从而为地下水管理决策者提供科学依据和技术支持。Lin 等(2008)运用 SEAWAT 模型预测美国阿拉巴马州海湾海水层咸水入侵范围,

模型运行 40 年,成功地预测了海水入侵的状况会进一步加剧,同时也显示深层含水层海水入侵状况比浅层含水层严重。

我国是海咸水入侵情况比较严重的国家,近年来随着人们环境保护意识的增强和水资源短缺问题的凸显,国家提高了对海咸水入侵地区的控制与治理力度,这为 SEAWAT 软件的应用提供了广阔的舞台。SEAWAT 软件发布 10 年来,得到了不断的发展和完善,其成功的应用范例证明其科学性和可靠性,也为其赢得了许多国家政府部门和广大科技工作者的认可。同时 SEAWAT 软件采用的原理易于理解,应用灵活,参考资料丰富,有利于使用者掌握其操作方法,便于推广。

参 考 文 献

- 成建梅, 黄丹红, 胡进武. 2004. 海水入侵模拟理论与方法研究进展. 水资源保护, (02): 3-8
- 林锦, 郑春苗, 吴剑锋等. 2007. 基于遗传算法的变密度条件下地下水模拟优化模型. 水利学报, (10): 1236-1244
- 仵彦卿. 2007. 多孔介质污染物迁移动力学. 上海: 上海交通大学出版社 145
- Bakker M, Oude E G, Langevin C D. 2004. The rotating movement of three immiscible fluids—a benchmark problem. *Journal of Hydrology*, 287 (1-4): 270-278
- Guo W, Bennett G D. 1998. Simulation of saline/fresh water flows using MODFLOW. Golden, Colorado, Colorado School of Mines: Proceedings of MODFLOW '98 Conference at the International Ground Water Modeling Center. 261-274
- Guo W, Langevin C D. 2002. User's Guide to SEAWAT: A Computer Program for Simulation of Three-Dimensional Variable-Density Ground-Water Flow. Tallahassee, Florida: US Geological Survey. 1-77
- Harbaugh A W, Banta E R, Hill M C *et al.* 2000. MODFLOW-2000, the US Geological Survey Modular Ground-Water Model - User Guide to Modularization Concepts and the Ground-Water Flow Process. Reston, Virginia: US Geological Survey
- Langevin C D, Shoemaker W B, Guo W. 2003. MODFLOW-2000, the US Geological Survey Modular Ground-Water Model—Documentation of the SEAWAT-2000 Version with the Variable-Density Flow Process (VDF) and the Integrated MT3DMS Transport Process (IMT). Tallahassee, Florida: US Geological Survey. 3, 4
- Langevin C D. 2001. Simulation of Ground-Water Discharge to Biscayne Bay, Southeastern Florida. Tallahassee, Florida: US Geological Survey. 1-127
- Langevin C D. 2003. Simulation of submarine ground water discharge to a marine estuary: Biscayne Bay, Florida. *Ground Water*, 41 (6): 758-771
- Langevin C D, Guo W. 2006. MODFLOW/MT3DMS-based simulation of variable-density ground water flow and transport. *Ground Water*, 44 (3): 339-351
- Langevin C D, Thorne D T, Dausman A M *et al.* 2008. SEAWAT Version 4: a Computer Program for Simulation of Multi-Species Solute and Heat Transport. Reston, Virginia: US Geological Survey
- Lin J, Snodsmith B, Zheng C *et al.* 2008. A modeling study of seawater intrusion in Alabama Gulf Coast, USA. *Environmental Geology*, 57 (1): 119-130
- McDonald M G, Harbaugh A W. 1988. A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground-Water Flow Model. Techniques of Water-Resources Investigations, Book 6, Chapter A1. US Geological Survey
- Zheng C. 1996. MT3D—a Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems. Bethesda, Md: SS Papadopoulos & Associates, Inc
- Zheng C. 2006. MT3DMS v5.2 Supplemental User's Guide, Technical Report to the US Army Engineer Research and Development Center. Washington, DC: US Army Corps of Engineers
- Zheng C, Wang P P. 1998. MT3DMS: a Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Ground-Water Systems; Documentation and User's Guide. Vicksburg, Mississippi: US Army Corps of Engineers

Zheng C, Wang P P.1999. MT3DMS: a Modular Three-Dimensional Multi-Species Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User Guide. Vicksburg, MS: US Army Engineer Research and Development Center Contract Report SERDP-99-1

Introduction to Software Seawat-2000 for Variable Density Groundwater Flow Simulation

LUAN Ximing ZHENG Xilai HUANG Cui MA Yujie

(College of Environmental Science and Engineering, Ocean University of China, Qingdao 266100)

ABSTRACT

SEAWAT-2000 is a mature three-dimensional variable density groundwater flow and solute transport simulation software, mainly used in simulating seawater intrusion, the proliferation of underground saline water, groundwater contaminated site remediation and other issues. The paper systemically introduces the development, model-building, structure and packages of SEAWAT-2000, and describes its application and promotion prospects in China.