

DOI:10.3969/j.issn.1003-5060.2025.06.002

土著微生物原位梯级修复地下水 氮污染的数值模拟研究

苏子文¹, 蒋美艳²

(1. 山东省菏泽市定陶区水利监测中心, 山东 菏泽 274100; 2. 合肥工业大学 土木与水利工程学院, 安徽 合肥 230009)

摘要:土著微生物作为微生物群体类型之一,在降解地下水硝酸盐方面发挥着重要作用,具有成本较低、基本不产生二次污染等优点。文章基于已开展的矩形槽修复试验数据和模型结构,建立地下水数值模拟模型,通过联合水流和溶质运移模型,确定梯级修复不同距离处对应的最大氨氮负荷、硝酸盐负荷和水力负荷。结果表明:以地下水Ⅲ类标准值作为约束条件,当补给强度为0.68 m/d时,模拟区范围内可以承载的氨氮、硝酸盐污染物最大负荷为18.05、54.14 g/(m²·d);氨氮质量浓度为15 mg/L、硝化作用20 cm区段内的最大水力负荷为1.62 m³/(m²·d),硝酸盐质量浓度为40 mg/L时的最大水力负荷为1.14 m³/(m²·d)。该研究结果以期为地下水的原位硝酸盐污染修复和治理提供技术参考。

关键词:硝酸盐污染;微生物;数值模型;原位梯级修复

中图分类号:X523

文献标志码:A

文章编号:1003-5060(2025)06-0727-05

Numerical simulation of in situ cascade remediation of groundwater nitrogen pollution by indigenous microorganisms

SU Ziwen¹, JIANG Meiyang²

(1. Water Resources Monitoring Center of Dingtao District, Heze City, Shandong Province, Heze 274100, China; 2. School of Civil and Hydraulic Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: As a type of the microbial community, indigenous microorganisms play an important role in degrading nitrate in groundwater, which has the advantages of low cost and basically no secondary pollution. In this paper, a numerical simulation model of groundwater was established based on the experimental data and model structure of the rectangular tank remediation, and the maximum ammonia nitrogen load, nitrate load and hydraulic load corresponding to the different distances of the cascade remediation were determined by combining the flow and solute transport models. The results show that the maximum loads of ammonia nitrogen and nitrate pollutants in the simulated area are 18.05 g/(m²·d) and 54.14 g/(m²·d) when the recharge intensity is 0.68 m/d with the Class III standard value for groundwater as the constraint condition. The maximum hydraulic load in the 15 mg/L ammonia nitrogen and 20 cm nitrification zone is 1.62 m³/(m²·d), and the corresponding maximum hydraulic load is 1.14 m³/(m²·d) when nitrate concentration is 40 mg/L. These findings are expected to provide technical reference for remediation and treatment of in situ nitrate pollution in groundwater.

Key words: nitrate pollution; microorganism; numerical model; in situ cascade remediation

收稿日期:2024-11-06;修回日期:2025-01-17

基金项目:国家自然科学基金资助项目(52009024);国家水利发展资金资助项目(Z175070060001)和安徽省自然科学基金资助项目(2408085MD093)

作者简介:苏子文(1976—),男,山东菏泽人,山东省菏泽市定陶区水利监测中心高级工程师,通信作者,E-mail:15898693276@163.com.

地表水作为地下水的主要补给来源之一,地下水在获得补给量的同时也增加了地表水体中的部分污染物,致使地下水面临着水质恶化的风险,特别是对于三氮污染(NH_4^+-N 、 NO_2^--N 和 NO_3^--N),氨氮作为地表水体的主要无机污染物,经黏土矿物固定、生物固定、淋滤、土壤吸附等作用后,在土著微生物硝化作用下经过亚硝酸盐转化为硝酸盐进入地下水,导致地下水硝酸盐不断积累,影响到地下水的供水安全^[1]。地表水与地下水存在密切的水力联系,聚焦于地下水硝酸盐污染治理与修复时,难以切断该地表水的氮污染源,因此,在两者存在水力联系区域,需要探寻一种不会引发含水层二次污染的原位修复技术,解决地下水硝酸盐质量浓度超标问题。其中,微生物修复技术利用含水介质中天然存在的反硝化细菌,在一定的人工干预作用下,添加甲醇、乙醇、乙酸、葡萄糖等碳源促进反硝化作用,使硝态氮转化为氮气或有机氮化合物从而实现脱氮,少量以合成微生物物质形式在地下水中失去迁移能力,修复效果较好^[2-4]。

自然界中氮的迁移转化循环与微生物作用联系密切,硝酸盐是氨氮硝化作用转化来的,其质量浓度取决于硝化作用程度及污染源的质量浓度,反硝化又直接影响到修复效果,难以明确两者的反应界线。文献[5]开展多组试验槽试验,通过引入缓释氧材料和添加液态碳源,提出原位梯级修复地下水氮污染技术,从物理试验角度验证该技术的有效性和可行性。但物理试验受试验时间和试验槽尺度等因素限制,不能考虑到所有情景,因此,基于文献[5]的试验方案和试验数据,本文通过建立地下水溶质运移数值模型,剖析土著微生物原位梯级修复地下水氮污染的特征和规律,确定梯级修复的氨氮负荷、硝酸盐负荷及水力负荷,以期提升地下水氮污染修复效能,为地下水的管理和利用提供技术支撑。

1 地下水数值模拟模型

1.1 水文地质概念模型

基于文献[5]的矩形槽试验设计,模拟区范围与装置体积相同,概化为一个细砂含水层,其尺寸(长×宽×高)为 $120\text{ cm}\times 50\text{ cm}\times 50\text{ cm}$,即含水层厚度 50 cm ,用以模拟地下水氮污染修复区域,上部与大气相通,接受大气降水的补给和蒸发排泄,下部为矩形槽底部概化为含水层底板,左侧为矩形试验槽的补给区(模拟氮污染源),右侧为地

下水的排泄区(模拟经含水介质修复后的地下水),均概化为一类给定水头边界。含水层分布区域内设置两排观测井,用以观测地下水水位和污染物质量浓度,井间距 20 cm (编号 $\text{OW1}\sim\text{OW10}$),如图1所示。平面上剖分 120×50 个单元格,每个单元格为 $1\text{ cm}\times 1\text{ cm}$,试验温度为夏天试验室温度,地下水温度基本在 $20\sim 22\text{ }^\circ\text{C}$,pH值为 7.0 。

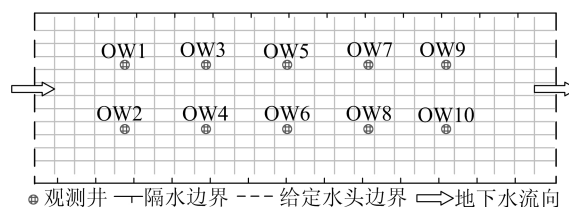


图1 模拟区范围及边界条件

1.2 数学模型

矩形槽模拟均质细砂含水层中地下水的流动,微生物挂膜成功后,地下水动状态基本为稳定的层流,渗流符合达西定律,因此,将模拟区地下水流概化为均质各向同性非稳定二维地下水流系统,并依据水文地质概念模型,建立相应的数学模型。

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} \left[K(h-z) \frac{\partial h}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[K(h-z) \frac{\partial h}{\partial y} \right] + \\ W = \mu \frac{\partial h}{\partial t}; \\ H(x, y, t) |_{t=0} = H_0(x, y), \quad (x, y) \in \Omega; \\ H(x, y, t) |_{(x, y, z) \in B_1} = H_1(x, y), \\ (x, y) \in B_1; \\ K_n \frac{\partial H}{\partial n} \Big|_{(x, y) \in B_2} = q(x, y), \quad (x, y) \in B_2 \end{cases} \quad (1)$$

其中: h 为地下水水位; z 为含水层底板; K 为渗透系数; $H_0(x, y)$ 为初始水头函数; $H_1(x, y)$ 为第一类边界水头函数; μ 为给水度; $q(x, y)$ 为第二类边界单位面积过水断面补给流量函数; W 为源汇项强度; Ω 为渗流区域; B_1 为第一类边界; B_2 为第二类边界; n 为渗流区边界的单位外法线方向; t 为时间。

目标污染物为氨氮和硝酸盐,物理试验证明细砂对氨氮的吸附量较低并且硝酸盐不易被细砂吸附固定^[1],因此不考虑矩形槽内介质对污染物的阻滞、净化作用。槽试验环境为氧化还原环境以及发生的硝化、反硝化作用,硝化、反硝化作用借助 K -mobile参数(溶解相溶质一阶反应速率常数)运用准一级动力学反应表达^[6],即

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = D_x \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial C}{\partial y} \right)^2 - U_x \frac{\partial C}{\partial x} - \\ U_y \frac{\partial C}{\partial y} + I - \sum R_k; \\ C(x, y, t) |_{t=0} = C_0(x, y), (x, y) \in D; \\ C(x, y, t) |_{\Gamma_1} = C_1(x, y), \\ (x, y) \in \Gamma_1, t > 0 \end{cases} \quad (2)$$

其中: C 为溶质质量浓度; D_x 、 D_y 为各坐标轴方向的水动力弥散系数; U_x 、 U_y 为各方向的流速分量; I 为溶质源汇项; $\sum R_k$ 为反应项(代表溶质的硝化、反硝化作用); C_0 为初始质量浓度(初始质量浓度为各阶段末污染物质量浓度); Γ_1 为第一类边界; C_1 为实测溶质质量浓度。

1.3 模型识别

采用文献[7]的缓释氧材料为硝化反应提供溶解氧,该材料集中装填在试验槽左侧 40 cm 区域内,用以反映硝化反应,OW3 和 OW4 孔处添加乙醇液态碳源,即矩形槽后 80 cm 区域模拟微生物的反硝化作用,从而形成梯级修复过程。试验中采用的细砂采自淮北平原浅层含水层,不额外添加微生物菌群,左、右两侧水头差 20 cm,污染源自左侧补给边界持续流入细砂区域。

模型参数主要包括含水层的渗透系数、给水度、弥散度等,试验过程中通过多次取样、平行样、重复测样等方法尽可能减少采样和检测误差等对试验结果的影响。

选取其中一组试验数据,通过试错法调参,得到矩形槽水位及氨氮质量浓度计算值与实测值拟合曲线如图 2 所示。

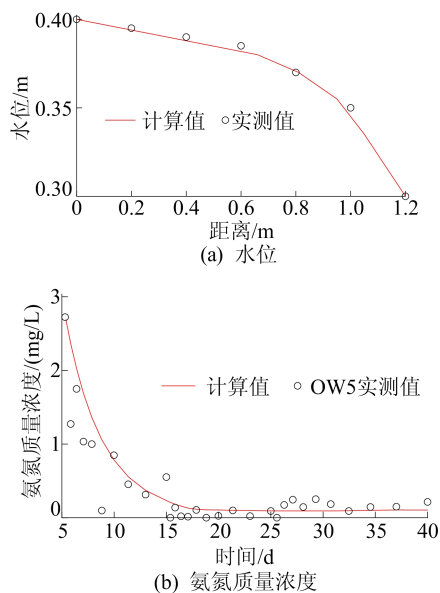


图2 水位和氨氮质量浓度拟合曲线

从图 2 可以看出,水位和氨氮质量浓度计算值与实测值拟合状况较好,水位和质量浓度的绝对误差分别小于 0.05 m、0.1 mg/L,拟合优度 R^2 达到 0.97,表明数值模型可以反映含水介质及水流特征,可以用其开展地下水水位及水质质量浓度变化分析。经模型识别得到含水介质渗透系数为 0.002 cm/s,给水度为 0.11,孔隙度为 0.15,弥散度为 10,氨氮、硝酸盐溶解相溶质一阶反应速率常数 K -mobile 分别为 0.95、2.5 d^{-1} 。

2 地下水氮污染修复特征及分析

2.1 预测方案

基于矩形槽试验硝化区和反硝化区 1:2 的范围比例设置,设计的地下水硝酸盐修复预测情景方案见表 1 所列。其中:T1 和 T2 对比分析相同补给强度下不同污染物质量浓度对修复效果的影响,另外 3 个预测方案则用以探索相同污染物质量浓度下,不同补给强度对修复效果的影响。

表 1 预测情景方案

预测阶段	质量浓度/(mg/L)		补给强度/(m/d)
	氨氮	硝酸盐	
T1	10	50	0.68
T2	20	60	
T3	15	40	0.68
T4			0.90
T5			1.20

2.2 修复效果分析

因缓释氧材料和碳源添加量直接影响到微生物降解修复氨氮和硝酸盐的效果和去除率,根据文献[7-8]得到的缓释氧材料的释氧速率和碳氮质量比 1:2,调整污染物不同质量浓度对应的缓释氧材料的数量和乙醇碳源添加量,以此调整不同方案的源汇项及初始质量浓度等参数,不同预测情景下均保持硝化作用与反硝化作用区域比例为 1:2。

2.2.1 污染物负荷

污染源补给强度相同、氨氮和硝酸盐质量浓度不相同情景下,微生物挂膜成功后氨氮和硝酸盐质量浓度变化过程如图 3 所示。

为进一步分析质量浓度变化特征并评价修复能力,在 30、35、50、55 cm 处增加了观测点。由变化过程线可以看出,T1 和 T2 阶段,氨氮和硝酸盐质量浓度在 5 d 内迅速下降,OW1 反应距离仅 20 cm 处,氨氮质量浓度由初始 10.00 mg/L 下降

至 3.72 mg/L, 去除率达到 62.8%, 距离补给源 35 cm 处, 反应距离增大 1.75 倍后, 氨氮质量浓度由初始 10.00 mg/L 下降至 0.39 mg/L, 去除率提升到 96.1%, 已低于 III 类水标准 0.5 mg/L。因硝化反应阶段氨氮硝化为硝酸盐, 致使在 OW3 监测点处硝酸盐质量浓度比初始质量浓度增大, 但经 5 d 的反硝化作用后, 质量浓度已衰减至 27.69 mg/L, 15 d 左右基本达到 III 类水限值。污染源补给强度维持在 0.68 m/d, 适当增大氨氮和硝酸盐质量浓度(T2)阶段, 基本在 1~2 d 呈现质量浓度小幅增大现象, 随后质量浓度继续呈衰减趋势, 表明该梯级修复系统可以承载一定污染负荷的波动, 系统修复效果较稳定。

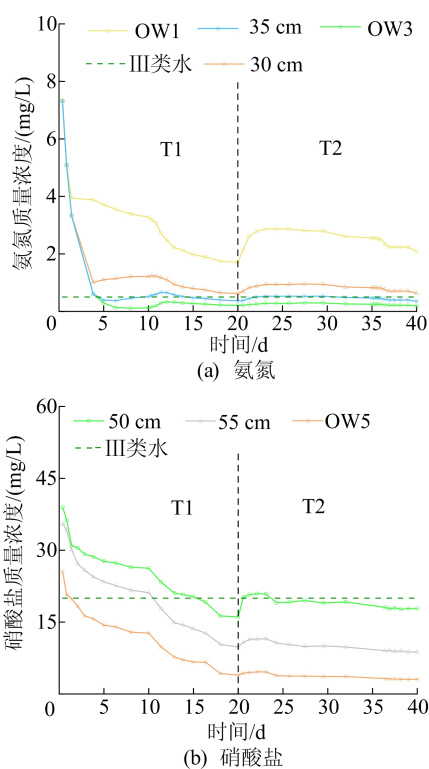


图 3 氨氮和硝酸盐氮质量浓度变化曲线

质量浓度变化过程线表明, 矩形槽 30 cm 反应距离不能将氨氮污染修复至 III 类标准, 通过进一步调整氨氮和硝酸盐质量浓度, 以 III 类标准值为约束条件, 计算得到污染源补给强度 0.68 m/d 时, 矩形槽 20~40 cm 范围内氨氮污染物最大负荷为 18.05 g/(m²·d), 40~50 cm 范围硝酸盐最大负荷为 54.14 g/(m²·d)。

2.2.2 水力负荷

氨氮和硝酸盐质量浓度不变时, 随着水力负荷的增大, 因单位时间单位体积内需修复的污染物质量增多, 理论上将出现质量浓度增大状况, 因

此, 存在一个最大水力负荷。基于模型识别的数值模型, 得到不同水力负荷下氨氮和硝酸盐质量浓度变化过程如图 4 所示。

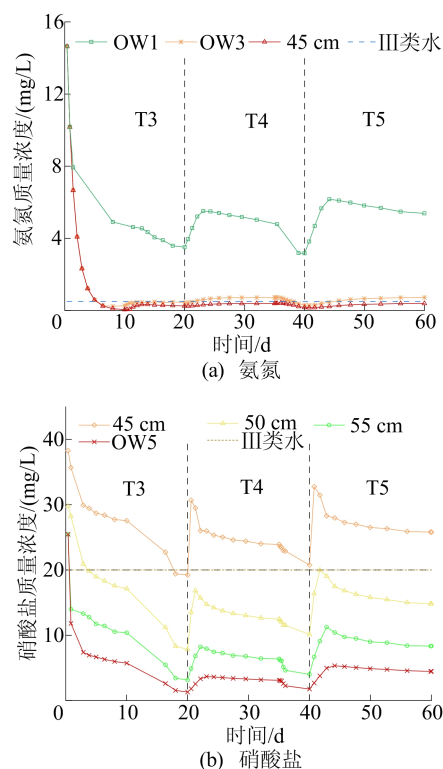


图 4 污染物质量浓度随水力负荷变化过程

由图 4 可知, 随着水力负荷变化, 污染物质量浓度水力负荷的瞬时增大, 致使修复系统相同监测点处污染物质量浓度突然增大。T3 阶段, 水力负荷为 0.68 m/d 时, 虽然污染物质量浓度未超过最大污染负荷, 但因 OW1 监测点距离小于 20 cm, 因此在图 4a 中出现了质量浓度大于 III 类水限值情况, 以 OW3 孔为例, 当水力负荷由 0.68 m/d 增大至 1.20 m/d 时, 氨氮质量浓度仍然小于 0.50 mg/L, 但硝酸盐质量浓度不能满足 III 类水限值, 通过进一步预测氨氮质量浓度衰减情况, 得到氨氮质量浓度为 15.00 mg/L、矩形槽 20~40 cm 段对应最大水力负荷为 1.62 m³/(m²·d)。40~50 cm 区段经 10 cm 的反应距离微生物可以将硝酸盐质量浓度修复至 III 类标准, 对应的最大水力负荷为 1.14 m³/(m²·d)。

3 结 论

地下水与地表水之间存在不同程度的水力联系, 无法阻隔地下水中氮的来源。地下水赋存条件中特有的土著微生物为开展地下水污染修复提供

(下转第 763 页)

- [2023-04-17]. https://www.moa.gov.cn/gk/tzgg_1/tfw/201801/t20180122_6135486.htm.
- [12] 安徽省统计局,国家统计局安徽调查总队. 安徽统计年鉴(2018—2022) [M]. 北京:中国统计出版社,2022.
- [13] 郑莉,张晴雯,张爱平,等. 山东省畜禽粪污土地承载力时空分异特征分析[J]. 农业环境科学学报,2019,38(4):882-891.
- [14] 安徽省农业农村厅. 关于发布《2021年安徽省耕地质量监测报告》的通知[EB/OL]. (2022-03-02) [2023-04-17]. <http://nync.ah.gov.cn/ggfw/trfl/56144441.html>.
- [15] 安徽省农业农村厅. 关于《安徽省畜禽养殖废弃物资源化利用提升行动计划(2021—2025年)》公开征求意见的通知[EB/OL]. (2022-01-25) [2023-04-17]. <http://nync.ah.gov.cn/public/7021/56103011.html>.
- [16] 王海莲,何忠伟,刘芳. 基于耕地消纳的畜牧业粪污环境承载力研究:以北京市为例[J]. 农业展望,2021,17(5):63-69.
- [17] 王舫. 基于环境承载力的黑龙江省畜禽产业布局优化研究[D]. 黑龙江:东北农业大学,2020.
- [18] 张英,武淑霞,刘宏斌,等. 基于种养平衡的河南省畜禽养殖分析及其环境污染风险研究[J]. 中国土壤与肥料,2019(4):24-30,52.
- [19] 张大牛,沈玉君,程红胜,等. 河南省粪肥养分供需及土地承载力时空差异特征分析[J]. 江苏农业科学,2022,50(10):217-225.
- [20] 林宁,查向浩,蔡吉祥,等. 喀什地区畜禽养殖粪污土地承载力时空分布[J]. 四川农业大学学报,2023,41(5):935-944,960.
- [21] 安徽省人民政府办公厅. 安徽省人民政府办公厅关于印发安徽省畜禽养殖废弃物资源化利用三年行动计划(2018—2020年)等文件的通知[EB/OL]. (2018-08-28) [2023-04-17]. <https://www.ah.gov.cn/public/1681/7939961.html>.
- [22] 王恩玲,张永翠,王元臻,等. 枣庄市畜禽粪污土地承载潜力及畜禽粪便环境污染预警分析[J]. 家畜生态学报,2021,42(7):73-77.
- [23] 王一如,周妍宏,梁馨月,等. 基于种养平衡的吉林省畜禽养殖环境承载力研究[J]. 中国饲料,2022(7):140-145.

(责任编辑 吴亮)

(上接第730页)

了可行的方法。本文基于原位梯级修复技术,通过建立地下水数值模型,结合物理试验数据对数值模型进行了识别,预测了水力负荷、污染物质量浓度对原位梯级修复效果的影响,在分析污染物质量浓度衰减过程基础上,计算得到了模拟区范围内可以承载的氨氮、硝酸盐污染物最大负荷。

当地下水温度在20~22℃、含水介质渗透性能为0.002 cm/s、污染源补给强度为0.68 m/d时,距离排污口20~40 cm范围内氨氮污染物最大负荷为18.05 g/(m²·d),40~50 cm范围硝酸盐最大负荷为54.14 g/(m²·d);氨氮质量浓度为15 mg/L时对应的硝化作用20 cm区段内的最大水力负荷为1.62 m³/(m²·d)。进入反硝化区域后在40~50 cm区段,大约经过10 cm反应距离后微生物可将硝酸盐质量浓度修复至Ⅲ类标准,此时对应的最大水力负荷为1.14 m³/(m²·d)。试验过程中突变的水力负荷及污染负荷也间接验证了该修复系统的稳定性,从而可以为工程实际应用提供可参考的修复技术参数。

受氧化及还原环境等因素的影响,从地表水经包气带入渗至含水层转化为地下水,氮的迁移转化过程复杂,在反硝化作用阶段可能会发生异化性硝酸盐还原作用,NO₃⁻被厌氧菌或兼性厌氧菌还原为NH₄⁺,致使反硝化作用的部分产物为氨氮,这是开展原位梯级修复地下水氮污染过

程中需重点关注的问题之一。

[参 考 文 献]

- [1] 易星源. 人工包气带去除降雨氨氮污染的研究[D]. 合肥:合肥工业大学,2021.
- [2] HANG Z, ZHANG Y, CHEN Y. Recent advances in partial denitrification in biological nitrogen removal: from enrichment to application[J]. Bioresource Technology, 2020, 298: 122444.
- [3] 严琼. 我国地下水污染现状、治理技术及防治建议[J]. 山东化工, 2021, 50(22): 225-227.
- [4] 张广禄, 刘海燕, 郭华明, 等. 华北平原典型山前冲洪积扇高硝态氮地下水分布特征及健康风险评估[J]. 地学前缘, 2023, 30(4): 485-503.
- [5] 潘继隆. 傍河地下水氮污染原位梯级修复效果试验研究[D]. 合肥:合肥工业大学,2023.
- [6] 郝晨西, 董深, 谋吕. 基于Visual MODFLOW Flex的硝酸盐氮迁移转化特性研究[J]. 人民黄河, 2022, 44(11): 78-81.
- [7] 刘佩贵, 潘继隆, 尚曼廷, 等. CaO₂缓释氧材料去除地下水氨氮的效能研究[J]. 合肥工业大学学报(自然科学版), 2023, 46(8): 1018-1023.
- [8] LIU P G, LIU M C, SHANG M T, et al. Horizontal well test for simulating the in situ remediation of nitrate contaminated groundwater by microbial denitrification[J]. Water Air Soil Pollution, 2019, 230: 189-199.

(责任编辑 吴亮)