

doi:10.3799/dqkx.2012.114

# 表面活性剂强化的 DNAPLs 污染 含水层修复过程的数值模拟

卢文喜, 罗建男, 辛 欣, 陈社明

吉林大学地下水资源与环境教育部重点实验室, 吉林长春 130021

**摘要:** 根据含水层中水、表面活性剂和 DNAPLs 的运移规律和相互作用机理, 建立三维多相流数值模拟模型, 用以模拟表面活性剂强化的 DNAPLs 污染含水层的修复过程. 将所建立的模型应用于一个被 PCE 污染的非均质含水层中, 并分别对污染物的污染过程以及修复过程进行模拟. 研究表明: 数值模拟模型给出了表面活性剂强化含水层修复过程中非水相流体迁移转化的数学描述, 能够在短时间内、参数有限的条件下真实地刻画 DNAPLs 在含水层中的运移规律, 并能有效地模拟表面活性剂的修复过程. 此外, 模拟结果显示, 由于表面活性剂对 PCE 的增溶增流作用, 有效地提高了 PCE 在水中的溶解性和迁移性, 其修复 40 d 的去除率达到 63.5%, 与抽出处理法(去除率为 31.8%)相比修复效果明显增强.

**关键词:** 表面活性剂; 重非水相流体; 数值模拟; 修复.

**中图分类号:** P641

**文章编号:** 1000-2383(2012)05-1075-07

**收稿日期:** 2011-05-09

## Numerical Simulation of Surfactant Enhanced Aquifer Remediation Processes at DNAPLs Contaminated Aquifer

LU Wen-xi, LUO Jian-nan, XIN Xin, CHEN She-ming

Key Laboratory of Groundwater Resources and Environment, Ministry of Education, Jilin University, Changchun 130021, China

**Abstract:** According to the migration of water, surfactant, DNAPLs (dense nonaqueous phase liquid), and their interaction mechanism, a three-dimensional numerical simulation model was build to simulate the process of surfactant enhanced aquifer remediation at DNAPLs contaminated aquifer. The model was applied to a heterogeneous PCE-contaminated aquifer for simulating both the contamination process and remediation process. The result show that the numerical simulation model provided the mathematical description of migration and fate of NAPLs (nonaqueous phase liquids) in surfactant enhanced aquifer remediation processes, and with limited time and parameters it can depict NAPLs migration law in aquifer realistically and simulate surfactant remediation processes effectively. Moreover, the modeling results show that, it's removal efficiency is 63.5% after 40 days remediation due to the solubilization and mobilization of surfactant which is 32% higher than that of pump and treat (removal efficiency is 31.8%).

**Key words:** surfactant; dense nonaqueous phase liquid; numerical simulation; remediation.

石油类有机污染物难溶于水并难于自然降解, 泄漏进入土壤水环境系统后, 可能在自然环境中存留几年至数十年之久, 污染土壤和地下水, 威胁人体健康. 因此, 研究这类有机污染物在地下环境中的迁移转化规律, 进行数值模拟, 预测污染物泄漏后在地下环境中的分布情况, 并采取相应的方法对其进行修复是亟待解决的问题.

石油类有机污染物进入地下环境后通常以非水相流体 (nonaqueous phase liquids, 简称 NAPLs) 的形式存在. 非水相流体根据密度的不同可分为两类: 密度小于水的称为轻非水相流体 (light nonaqueous phase liquid, 简称 LNAPLs); 密度大于水的称为重非水相流体 (dense nonaqueous phase liquid, 简称 DNAPLs) (Fetter, 1999).

**基金项目:** 国家自然科学基金项目 (No. 41072171); 中国地质调查局项目 (No. 1212011140027).

**作者简介:** 卢文喜 (1956-), 教授, 博士生导师, 主要从事地下水数值模拟与优化管理及生态水文等方面的研究. E-mail: luwenxi@jlu.edu.cn

DNAPLs 具有高密度、低水溶性和高界面张力的特性,比 LNAPLs 更难修复,常用的抽出一处理技术对它都难以奏效(Liu, 2005). 近年来出现的表面活性剂强化含水层修复技术(surfactant enhanced aquifer remediation, SEAR),是对抽出一处理技术的改进,是一项应用前景良好的 DNAPLs 污染含水层修复技术.

由于室内实验周期长、分析测试难度高、野外研究获取参数困难等原因,实验研究进展有限. 随着计算机技术和多相流数值模拟方法的发展,通过建立多相流数学模型,应用数值法求解多相流模型成为研究和应用的热点. 在国外,已有文献对表面活性剂强化 NAPLs 污染含水层修复的数值模拟模型进行研究,Delshad *et al.* (1996)对 NAPLs 迁移转化的数学方程进行了研究;Liu(2005)开发了一个多相态多组分模拟模型来模拟表面活性剂对地下含水层的修复过程,并将其应用到 PCE 污染场地. 到目前为止,国外对表面活性剂强化 DNAPLs 污染含水层修复过程数值模拟模型的研究成果主要集中在偏微分方程的研究,而很少有人将偏微分方程、辅助方程以及其定解条件统一起来进行研究. 而在国内,对 NAPLs 模拟模型的研究多数集中在 LNAPLs 的模拟与求解(薛强, 2003; 崔学会, 2006; 胡黎明等, 2007),对 DNAPLs 的数值模拟(尤其是表面活性剂修复过程的数值模拟)研究还很少.

本文根据非水相流体的迁移转化规律,建立三维多相流数值模拟模型,将描述非水相流体迁移转化规律的偏微分方程、描述流体物理化学性质变化的辅助方程以及其定解条件统一起来进行系统的研究;分析方程及未知量的个数,用有限差分法进行求解. 将所建立的数值模拟模型应用于一个被 PCE 污

染的非均质含水层中,分别对污染物的污染过程以及修复过程进行模拟.

## 1 NAPLs 在地下环境中的迁移转化规律

当 NAPLs 渗透进入地表以下,在重力的作用下,首先在包气带中向下运移;同时受毛细力和非均质土壤的影响,会产生一定程度的横向扩散. 其中有一部分经挥发以气态的形式(气态 NAPLs)在包气带土壤孔隙中扩散. 在流经包气带时,会有部分 NAPLs 滞留残存在细小的土壤孔隙中(残余 NAPLs). 当 NAPLs 到达潜水面后, LNAPLs 会在毛细带中产生横向运移,而 DNAPLs 会驱使地下水继续向下运移,只有当遇到隔水层时才会停止向下运移,最终聚集滞留在含水层的底部(自由态 NAPLs). 在与水接触的过程中, NAPLs 会不断向水中溶解释放(溶解态 NAPLs),形成污染晕.

## 2 表面活性剂强化含水层修复技术作用原理

表面活性剂对憎水性有机污染物具有增溶作用(Solubilization)和增流作用(Mobilization),能有效提高 DNAPLs 在水中的溶解性和迁移性,从而大幅度提高抽出一处理技术对于 DNAPLs 修复的有效性(Pennell *et al.*, 1996; Zhong *et al.*, 2003; 支银芳等, 2006; 李隋, 2008).

表面活性剂是由性质不同的两部分组成的:一部分是由疏水亲油的碳氢链组成的非极性基团;另

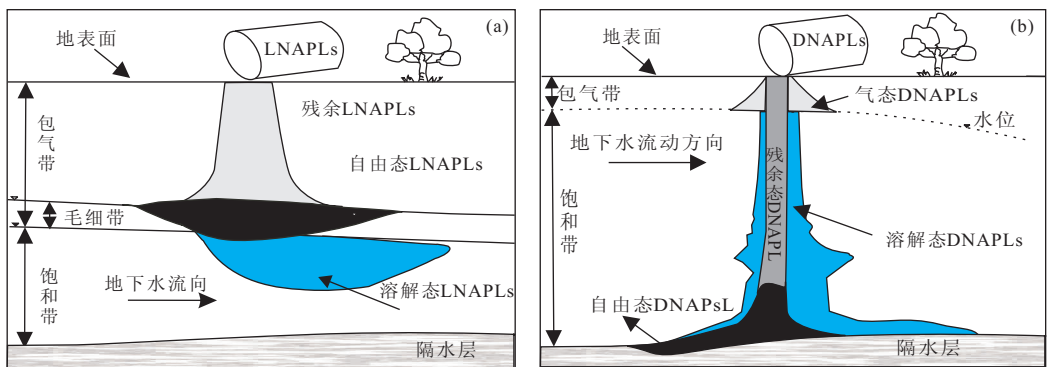


图 1 NAPLs 在地下环境系统中的迁移转化

Fig. 1 Migration and transformation of NAPLs in the subsurface environment  
a. LNAPLs 在地下环境系统中的迁移变化; b. DNAPLs 在地下环境系统中的迁移变化

一部分则是亲油疏水的极性基团. 这两部分分别处于表面活性剂的两端, 表面活性剂溶液的浓度增大时, 表面活性剂将缔合形成胶团, 胶团溶液具有独特的使原来不溶于水或微溶于水的有机物被加溶在胶团中的功能(增溶作用)(韩冬和沈平平, 2001; 赵国玺和朱步瑶, 2003).

增加驱动压力差以及降低油水间的界面张力都能有效地提高石油污染物在多孔介质中的流动性. 在实际条件下巨大的压力差难以实现, 因此降低界面张力是迫使多孔介质中石油污染物流动的唯一方式. 表面活性剂能够降低油水界面张力, 提高 NAPLs 在多孔介质中的流动性(增流作用)(廖广志等, 1999).

### 3 NAPLs 在含水层中运移的数学模型

描述非水相流体迁移转化规律的数学模型包括两部分: ①描述该非水相流体迁移转化规律的偏微分方程, 以及描述流体物理化学性质变化的辅助方程; ②定解条件, 即初始条件和边界条件.

#### 3.1 基本方程

**3.1.1 偏微分方程** 非水相流体在地下环境中的运移主要受对流和弥散的控制. 根据质量守恒定律, 组分  $k$  单位时间内流入流出的质量差等于质量的变化量(Delshad *et al.*, 1996; 易立新和徐鹤, 2009):

$$\frac{\partial(\phi \tilde{C}_k \rho_k)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[ \sum_{l=1}^{n_p} \rho_k (C_{kl} \mathbf{u}_l - \phi S_l \mathbf{K}_{kl} \nabla C_{kl}) \right] = R_k,$$

其中,  $l$  是相数,  $k$  是组分数. 在加入表面活性剂之前, DNAPLs 在地下环境中的运移为两相流, 即水相( $l=1$ )和油相( $l=2$ ), 系统中有水( $k=1$ )和 DNAPLs( $k=2$ )两个组分; 而在地下环境系统中加入表面活性剂之后, 则形成了水相( $l=1$ )、油相( $l=2$ )和微乳相( $l=3$ )三相流系统, 系统中有水( $k=1$ )、DNAPLs( $k=2$ )和表面活性剂( $k=3$ )三种组分.  $\phi$  是土壤孔隙度;  $\tilde{C}_k$  是组分  $k$  的总浓度(体积百分数);  $\rho_k$  是组分  $k$  的密度 [ $\text{g} \cdot \text{m}^{-3}$ ];  $n_p$  是相的数量;  $C_{kl}$  是组分  $k$  在相  $l$  中的浓度(体积百分数);  $\mathbf{u}_l$  是相  $l$  的达西流速 [ $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $S_l$  是相  $l$  的饱和度(体积百分数);  $R_k$  是组分  $k$  的源汇项 [ $\text{kg} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $\mathbf{K}_{kl}$  是物质  $k$  在  $l$  相的弥散张量 [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ]. 弥散张量可以由下面的式子表示:

$$\mathbf{K}_{klj} = \frac{D_{lk}}{\tau} \delta_{ij} + \frac{a_{Tl}}{\phi S_l} |\mathbf{u}_{ij}| \delta_{ij} + \frac{a_{Tl} - a_{Tl}}{\phi S_l} \frac{u_{ii} u_{ij}}{|\mathbf{u}_{ij}|},$$

式中,  $\tau$  为扭曲系数, 其值大于 1;  $D_{lk}$  是组分  $k$  在  $l$  相

的分子扩散系数 [ $\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ ];  $\delta_{ij}$  是克罗内克  $\delta$  函数;  $a_{Tl}$  和  $a_{Tl}$  分别为  $l$  相的纵向和横向弥散系数 ( $\text{m}$ );  $u_{ii}$  和  $u_{ij}$  分别为相  $l$  在  $i$  和  $j$  方向的达西流速分量 ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ). 相  $l$  的达西流速可以由多相流的达西定律来表示:

$$\mathbf{u}_l = -\frac{k_{rl} \mathbf{k}}{\mu_l} (\nabla P_l - \rho_l \mathbf{g} \nabla h),$$

式中:  $k_{rl}$  为相  $l$  的相对渗透率;  $\mathbf{k}$  为渗透率 [ $\text{m}^2$ ];  $\mu_l$  为相  $l$  的粘滞度 [ $\text{cp}$ ] ( $1 \text{cp} = 0.001 \text{pa} \cdot \text{s}$ );  $\rho_l$  为相  $l$  的密度 ( $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ );  $\mathbf{g}$  是重力加速度 ( $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$ );  $h$  是垂向距离 ( $\text{m}$ );  $P_l$  是相  $l$  的压力 ( $\text{kPa}$ ).

**3.1.2 辅助方程** 在表面活性剂强化 DNAPLs 污染含水层修复的过程中, 共有水相( $l=1$ ), 油相( $l=2$ ), 微乳相( $l=3$ )三个相态, 即  $n_p=3$ , 我们考虑水( $k=1$ ), 油( $k=2$ ), 表面活性剂( $k=3$ )三个组分, 即  $n=3$ . 质量守恒方程中的未知量个数如表 1 所示.

#### 3.2 定解条件

**3.2.1 初始条件** 初始条件是指多相流内部各点的压力、各相饱和度的分布情况.

①初始压力:

$$P_l(x, y, z, t) |_{t=0} = P_l^0(x, y, z);$$

②初始饱和度:

$$S_l(x, y, z, t) |_{t=0} = S_l^0(x, y, z).$$

#### 3.2.2 边界条件

边界条件分为外边界条件和内边界条件. 外边界条件是指多相流体外边界的状态, 内边界条件指

表 1 未知量个数

Table 1 Number of the unknown variable

| 未知量 | $\tilde{C}_k$ | $C_{kl}$        | $S_l$   | $P_l$   | $\rho_l$ | $k_{rl}$ | $\mu_l$ |
|-----|---------------|-----------------|---------|---------|----------|----------|---------|
| 个数  | $N=3$         | $n \cdot n_p=9$ | $n_p=3$ | $n_p=3$ | $n_p=3$  | $n_p=3$  | $n_p=3$ |

共  $n_p(n+5)+n=27$  个基本变量, 前面已经有了 3 个质量守恒方程, 因此还需要 24 个辅助方程才能解此问题. 辅助方程个数见表 2.

表 2 辅助方程个数

Table 2 Number of the auxiliary equation

| 辅助方程  | 个数 |
|---|----|
| 各相的饱和度之和为 1   | 1  |
| 所有组分的浓度之和为 1  | 1  |
| 每个相中, 组分的相浓度之和为 1   | 3  |
| 各相流体的密度和粘度都是压力的函数(Qin <i>et al.</i> , 2007)                   | 6  |
| 组分浓度与相浓度和饱和度之间的关系(陈月明, 1989)                                  | 8  |
| 相对渗透率是饱和度的函数(Brooks and Corey, 1966)                          | 3  |
| 毛细压力是饱和度的函数(Van Genuchten, 1980; Parker <i>et al.</i> , 1987) | 2  |

以上共 24 个辅助方程, 基本方程数与未知量个数相等, 方程组可解.

流场中抽水井或注入井的状态(李淑霞和谷建伟, 2009)。

(1)外边界条件:

①已知压力外边界  $P|_R = f_1(x, y, z, t)$ ;

②已知流量外边界

$$\frac{\partial P}{\partial n}|_R = f_2(x, y, z, t);$$

③混合边界  $(\frac{\partial P}{\partial n} + \alpha P)|_R = f_3(x, y, z, t)$ 。

对实际问题,混合边界在某一特定时间内可以近似为第一类或第二类边界条件,这类边界在表面活性剂修复污染含水层的模拟中比较少见。

(2)内边界条件:

①定抽水量(定注水量)

当井的抽水量或注水量给定时,渗流方程中只需要加入源汇质量项(注水井为正,抽水井为负):

$$r \frac{\partial P(x, y, z, t)}{\partial r} |_{x=x_w, y=y_w, z=z_w} = Q_w(t);$$

②定井底压力

$$P(x, y, z, t) |_{x=x_w, y=y_w, z=z_w} = P_w(t)。$$

## 4 算例分析

### 4.1 问题描述

研究区位于承压含水层,面积为  $49 \text{ m} \times 21 \text{ m}$ ,含水层厚  $12 \text{ m}$ (图 2)。地下水流方向为由左向右,左边界和右边界为已知压力边界,其余边界均为隔水边界。如图所示,在研究区中心有一个四氯乙烯(perchloroethylene, PCE)泄漏点,泄漏量为  $1 \text{ m}^3/\text{d}$ ,PCE 浓度  $100\%$ 。含水层非均质各项异性,主要由粘土和砂岩构成,X 方向渗透率  $k_x$  在  $8 \times 10^{-13} \sim 3 \times 10^{-11} \text{ m}^2$  之间变化,Y 方向渗透率  $k_y = 8 \times 10^{-12} \text{ m}^2$ ,Z 方向渗透率取决于 X 方向的渗透率,

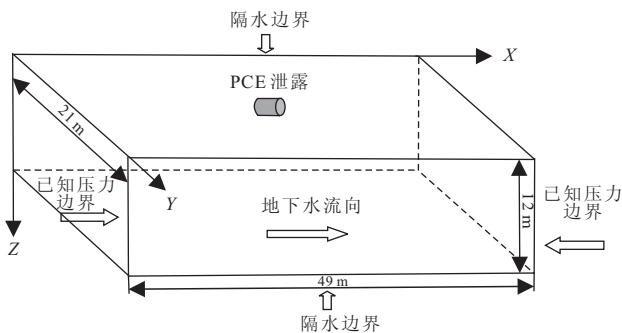


图 2 研究区概况

Fig. 2 The research domain

$k_z/k_x = 0.5$ ,图 3 为 X 方向的渗透率分布。其他设定参数见表 3(Kueper and McWhorter, 1991; Qin et al., 2007)。针对上述问题应用 UTCHEM 模块建立承压三维多相流数值模拟模型。

### 4.2 时空离散

将研究区剖分成 49 行,7 列,12 层,共 4 116 个单元体。每个单元体积为  $1 \text{ m} \times 3 \text{ m} \times 1 \text{ m}$ 。我们主要研究有机污染物在地下水中的迁移转化规律以及表面活性剂的修复效率。因此在时间上分为两个阶段:(1)污染阶段(0~90 d),即 PCE 泄露阶段,PCE 以  $1 \text{ m}^3/\text{d}$  的速度在研究区中心泄露 30 d,自由扩散 60 d;(2)修复阶段(91~130 d),在泄露 30 d,自由扩散 60 d 之后,分别用抽出一处理法和表面活性剂强化含水层修复法对 PCE 污染场地修复 40 d。

### 4.3 模拟结果

**4.3.1 污染阶段** 在 PCE 进入含水层以后,污染物在重力、水力梯度以及毛细力的作用下向下运动。PCE 在地下水中是部分溶解的,因此模拟 PCE 污染的整个过程既包括液相也包括油相。图 4 所示为 PCE 的浓度在污染阶段中 XY 方向上的情况,图 5 所示为 PCE 的浓度在污染阶段中 XZ 方向上的情况。

PCE 泄露 30 d 的模拟结果表明:PCE 经过了 30 d 的泄漏后到达了含水层中不透水的下边界(Z 方向的第 12 层),大量的 PCE 为残余态。X 方向上 PCE 的污染羽扩大为 13 m(第 20 列~33 列)。

PCE 泄露 30 d、自由扩散 60 d 的结果表明:PCE 在水力梯度驱动下随着地下水流运动。在重力作用下 PCE 通过含水层向下运移,上层污染物浓度减小,下层污染物不断汇集。同时 PCE 在 XY 平面上的污染羽不断扩大,如图 4b 所示,第 12 层 Y 方向上的污染羽将扩散为 18 m(第 1~7 列),X 方向上的污染羽将扩散为 17 m(第 20~37 行)。在水力梯度的影响下,PCE 随着地下水流向含水层右边界

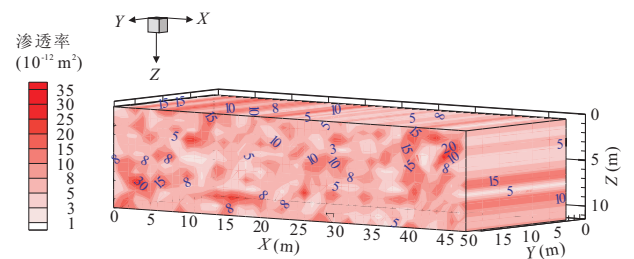


图 3 X 方向渗透率分布

Fig. 3 Permeability in X direction distribution

表 3 研究区物理、化学参数值

Table 3 Physical and chemical parameters in the research domain

| 参数       | 数值                     | 参数           | 数值                        |
|----------|------------------------|--------------|---------------------------|
| 孔隙度      | 0.34                   | 水的粘度         | 0.001 Pa · s              |
| 水力梯度     | 0.004 706              | PCE 的粘度      | 0.000 89 Pa · s           |
| 纵向弥散度    | 0.03 m                 | PCE 与水间的界面张力 | 0.045 N · m <sup>-1</sup> |
| 横向弥散度    | 0.009 m                | PCE 在水中的溶解度  | 0.24 kg · m <sup>-3</sup> |
| 水的密度     | 1.00 g/cm <sup>3</sup> | 水残余饱和度       | 0.24                      |
| PCE 的密度  | 1.62 g/cm <sup>3</sup> | PCE 残余饱和度    | 0.17                      |
| 表面活性剂的密度 | 1.15 g/cm <sup>3</sup> |              |                           |

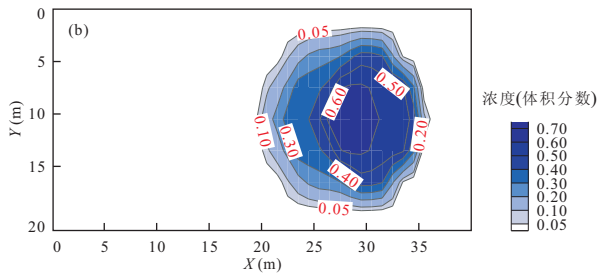
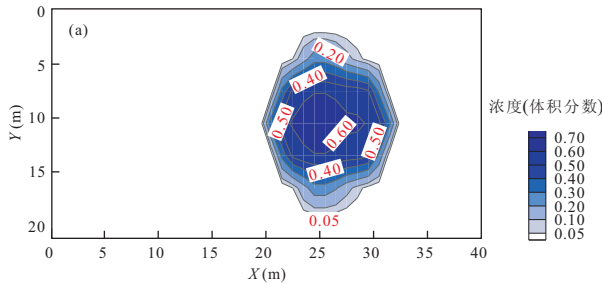


图 4 X-Y 方向上污染阶段 PCE 的浓度分布(第 12 层)

Fig. 4 PCE concentration distribution at contaminate phase over the X-Y plane

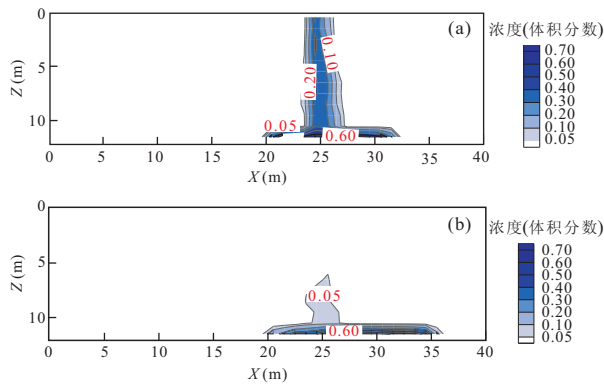


图 5 X-Z 方向上污染阶段 PCE 的浓度分布(第 4 列)

Fig. 5 PCE concentration distribution at contaminate phase over the X-Z plane

a. PCE 泄露 30 d 的浓度分布; b. PCE 泄露 30 d、自由扩散 60 d 的浓度分布

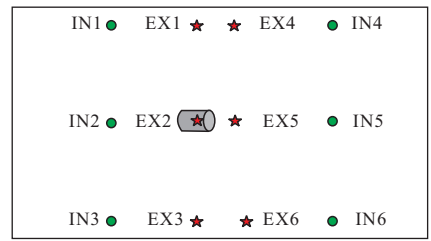


图 6 抽水井以及注入井的位置分布

Fig. 6 Locations for injection wells and extraction wells

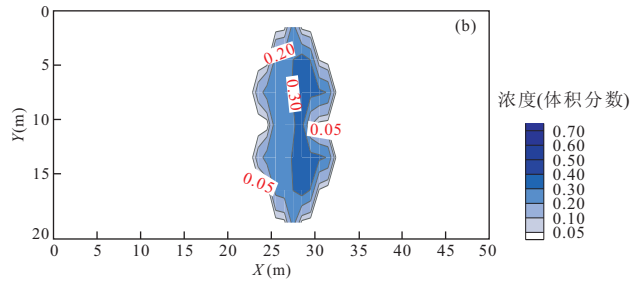
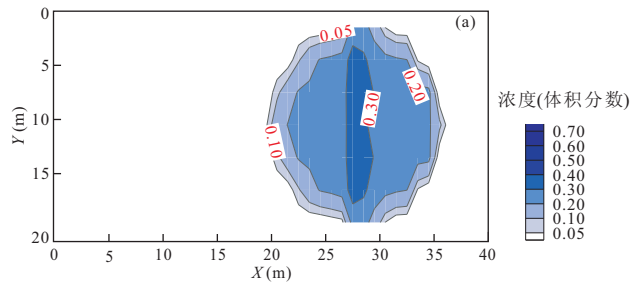


图 7 X-Y 方向上修复阶段 PCE 的浓度分布(第 12 层)

Fig. 7 PCE concentration distribution at remediation phase over the X-Y plane

a. 抽出处理法修复 40 d 后的浓度分布; b. 表面活性剂修复 40 d 后的浓度分布

运动,因此,PCE 在 X 方向上向右的扩散距离比向左的扩散距离要大.

### 4.3.2 修复阶段 分别用抽出一处理法和表面活性剂强化修复法对 PCE 污染的含水层进行修复.

(1)抽出一处理法. 根据污染物的分布状况,设



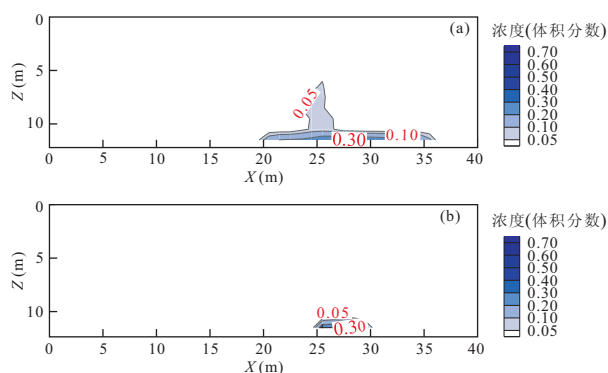


图 8 X-Z 方向上修复阶段 PCE 的浓度分布(第 4 列)

Fig. 8 PCE concentration distribution at remediation phase over the X-Z plane

a. 抽出处理法修复 40 d 后的浓度分布; b. 表面活性剂修复 40 d 后的浓度分布

计了 6 口抽水井和 6 口注入井的抽出处理方案. 根据图 5b, 90 d 后, 在 XZ 方向上有两个高浓度的 PCE 汇集区, 因此抽水井 EX1、EX3 和 EX5 布置在第 8 层污染羽的中心(第 25 行, 第 1、4、7 列), 抽水井 EX2、EX4 和 EX6 将布置在第 12 层污染羽的中心(第 29 行, 第 1、4、7 列). 6 口注入井分别布置在污染最严重的第 12 层的污染羽两侧的扩散边界上(第 20 行, 第 1、4、7 列; 第 37 行, 1、4、7 列). 所有的抽水井和注入井都是完整井, 穿透了整个含水层. 6 口抽水井以  $20 \text{ m}^3/\text{d}$  的速度进行抽水, 6 口注入井以  $20 \text{ m}^3/\text{d}$  的速度向含水层中注水. 抽出处理 40d 后, 含水层中 PCE 的浓度分布如图 7a、8a 所示, 含水层中 PCE 平均浓度从 0.71 减小为 0.48, PCE 去除率为 31.8%, 但污染羽的范围与修复前相比变化不大.

(2) 表面活性剂强化修复法. 表面活性剂强化含水层修复过程中, 抽水井、注入井的位置以及注入与抽取速率相同, 只是注入井注入的是浓度为 1% 的表面活性剂. 表面活性剂修复 40 d 后, 含水层中 PCE 的浓度分布如图 7b、8b 所示, 含水层中 PCE 平均浓度从 0.71 减小为 0.26, PCE 去除率达到 63.5% (比抽出处理法的去除率大了 32%). X 方向上污染羽的范围减小为抽出处理法的 1/2. 残余的 PCE 只集中在含水层底部.

## 5 结论

(1) 根据含水层中水、表面活性剂和 DNAPLs 的运移规律和相互作用机理, 建立三维多相数值

模拟模型, 对描述非水相流体迁移转化规律的偏微分方程、描述流体物理化学性质变化的辅助方程以及其定解条件进行了系统的分析, 揭示了表面活性剂强化含水层修复过程中非水相流体迁移转化规律. (2) 应用 UTCHEM 模块建立了一个被 PCE 污染的非均质含水层来模拟表面活性剂的修复过程数值模拟模型. 数值模拟模型能够在短时间内、参数有限的条件下刻画 DNAPLs 在含水层中的运移规律, 并能有效地模拟表面活性剂的修复过程. 该数值模拟模型可用于非水相流体污染含水层修复效果的预测、修复方案的优选等方面. (3) 根据算例的数值模拟结果, 将表面活性剂修复效果与抽出一处理法修复效果进行对比, 结果表明: 由于表面活性剂的增溶增流作用, 表面活性剂强化法修复 40 d 的去除率达到 63.5%, 与抽出处理法相比去除率明显增强. 由此结果推断, 表面活性剂强化法在实际的 DNAPLs 污染场地修复方面将发挥巨大的作用.

## References

- Brooks, R. H., Corey, A. T., 1966. Properties of porous media affecting fluid flow. *Journal of the Irrigation and Drainage Division*, 92(2): 61–88.
- Chen, Y. M., 1989. Basis of numerical reservoir simulation. Petroleum University Press, Dongying, 1–29 (in Chinese).
- Cui, X. H., 2006. Numerical simulation for multiphase flow and transport in groundwater system (Dissertation). China University of Geosciences, Beijing (in Chinese).
- Delshad, M., Pope, G. A., Sepehrnoori, K., 1996. A compositional simulator for modeling surfactant enhanced aquifer remediation, 1. Formulation. *Journal of Contaminant Hydrology*, 23(4): 303–327. doi: 10.1016/0169-7722(95)00106-9
- Fetter, C. W., 1999. Contaminant hydrogeology (second edition). Macmillan Publishing Company, New York.
- Han, D., Shen, P. P., 2001. Principles and applications of surfactant flooding. Petroleum Industry Press, Beijing (in Chinese).
- Hu, L. M., Xing, W. W., Wu, Z. Q., 2007. Numerical simulation of non-aqueous phase liquids migration in porous media. *Rock and Soil Mechanics*, 28(5): 951–955 (in Chinese with English abstract).
- Kueper, B. H., McWhorter, D. B., 1991. The behavior of dense, nonaqueous phase liquids in fractured clay and rock. *Ground Water*, 29(5): 716–728. doi: 10.1111/j.1745-6584.1991.tb00563.x

- Li, S. X., Gu, J. W., 2009. Basis of numerical reservoir simulation. Petroleum University Press, Dongying (in Chinese).
- Li, S., 2008. Research on surfactant enhanced pump and treat remediation of a DNAPL contaminated aquifer—case study on nitrobenzene (Dissertation). Jilin University, Changchun (in Chinese).
- Liao, G. Z., Wang, Q. M., Wang, D. M., 1999. Principle and application of chemical flooding. Petroleum Industry Press, Beijing (in Chinese).
- Liu, L., 2005. Modeling for surfactant-enhanced groundwater remediation processes at DNAPLs-contaminated sites. *Journal of Environmental Informatics*, 5(2): 42–52. doi: 10.3808/jei.200500045
- Parker, J. C., Lenhard, R. J., Kuppasamy, T., 1987. A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media. *Water Resources Research*, 23(4): 618–624. doi: 10.1029/WR023i004p00618
- Pennell, K. D., Jin, M., Pope, G. A., et al., 1996. Surfactant enhanced remediation of soil columns contaminated by residual tetrachloroethylene. *Journal of Contaminant Hydrology*, 16(1): 35–53. doi: 10.1016/0169-7722(94)90071-X
- Qin, X. S., Huang, G. H., Chakma, A., et al., 2007. Simulation-based process optimization for surfactant-enhanced aquifer remediation at heterogeneous DNAPL-contaminated sites. *Science of the Total Environment*, 381(1–3): 17–37. doi: 10.1016/j.scitotenv.2007.04.011
- Van Genuchten, M. T., 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5): 892–899.
- Xue, Q., 2003. Research on multiphase flow model of petroleum pollutant transport in subsurface system (Dissertation). Liaoning Technical University, Fuxin (in Chinese).
- Yi, L. X., Xu, H., 2009. Groundwater numerical modeling: the application examples of GMS. Chemical Industry Press, Beijing (in Chinese).
- Zhao, G. X., Zhu, B. Y., 2003. Principles of surfactant action. Chinese Light Industry Press, Beijing (in Chinese).
- Zhi, Y. F., Chen, J. J., Yang, G. G., et al., 2006. Review of study on multiphase flow related to NAPLs pollution remediation by surfactant flushing. *Techniques and Equipment for Environmental Pollution Control*, 7(3): 25–29 (in Chinese with English abstract).
- Zhong, L., Mayer, A. S., Pope, G. A., 2003. The effects of surfactant formulation on nonequilibrium NAPL solubilization. *Journal of Contaminant Hydrology*, 60(1–2): 55–75. doi: 10.1016/S0169-7722(02)00063-3

### 附中文参考文献

- 陈月明, 1989. 油藏数值模拟基础. 东营: 石油大学出版社, 1–29.
- 崔学会, 2006. 地下水系统中多相流体数值模拟(博士学位论文). 北京: 中国地质大学.
- 韩冬, 沈平平, 2001. 表面活性剂驱油原理及其应用. 北京: 石油工业出版社.
- 胡黎明, 邢巍巍, 吴照群, 2007. 多孔介质中非水相流体运移的数值模拟. 岩土力学, 28(5): 951–955.
- 李淑霞 谷建伟, 2009. 油藏数值模拟基础. 东营: 石油大学出版社.
- 李隋, 2008. 表面活性剂强化抽取处理修复 DNAPLs 污染含水层的实验研究——以硝基苯为例(博士学位论文). 长春: 吉林大学.
- 廖广志, 王启民, 王德民, 1999. 化学复合驱原理及应用. 北京: 石油工业出版社.
- 薛强, 2003. 石油污染物在地下环境系统中运移的多相流模型研究(博士学位论文). 阜新: 辽宁工程技术大学.
- 易立新, 徐鹤, 2009. 地下水数值模拟: GMS 应用基础与实例. 北京: 化学工业出版社.
- 赵国玺, 朱步瑶, 2003. 表面活性剂作用原理. 北京: 中国轻工业出版社.
- 支银芳, 陈家军, 杨官光, 等, 2006. 表面活性剂冲洗法治理非水相流体污染多相流研究进展. 环境污染治理技术与设备, 7(3): 25–29.