

地下水污染健康风险模拟预测评估中 参数的敏感度分析

陈建平^{1,2}, 王淑扬¹, 万长园¹, 王明玉²

(1. 辽宁工程技术大学, 辽宁 阜新 123000;

2. 中国科学院研究生院水系统安全研究中心, 北京 100049)

摘要: 随着地下水污染健康风险评估逐渐被重视, 其风险的影响程度和发展趋势也越来越被关注, 因此解析解模拟预测评估地下水污染健康风险也逐渐被应用。本文旨在研究解析解模型对污染物健康风险模拟的敏感度, 为该方法更广泛的应用提供依据。选取解析解模型中的渗透系数(K)、纵向弥散度(α_x)、污染物有机碳分配系数(K_{oc})和半衰期($t_{1/2}$) 4个参数, 在其他参数不变的情况下, 依次改变各参数的值并进行解析解计算, 记录对应的参数值与模拟结果, 绘出模拟预测值与各个分析参数的变化曲线, 分析解析解对各个参数的响应程度, 从而为处理不确定因素提供依据。

关键词: 解析解; 敏感度分析; 地下水污染; 健康风险

中图分类号: X5

文献标识码: A

文章编号: 1672-643X(2013)01-0123-04

Sensitivity analysis of parameters in health risk simulation and forecast assessment of groundwater pollution

CHEN Jianping^{1,2}, WANG Shuyang¹, WAN Changyuan¹, WANG Mingyu²

(1. Liaoning technical University, Fuxin 123000, China; 2. Center for Water System Security,

Graduate University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract: With the health risk assessment of groundwater pollution having been paid more attention gradually; more and more concern has focused on the influence degree and the development trend of its risk, therefore using analytical solution to simulate, predict and assess the health risk of groundwater pollution has been gradually applied as well. This paper aims to study the sensitivity of analytical solution model when simulating health risks of pollutants and underlying more extensive application of this method. It selects four parameters from analytical solution model, including permeability coefficient (K), longitudinal dispersity (α_x), pollutants organic carbon distribution coefficient (K_{oc}) and half-life ($t_{1/2}$). In the cases of other parameters being constant, it changes the value of each parameter successively and calculates analytical solution, records the corresponding parameter value and simulation results, draws simulated prediction value and each change curve of analytical parameter, elaborates the respond degree of analytical solution to each parameter, thus provides basis for coping with uncertain factors.

Key words: analytical solution; sensitivity analysis; groundwater pollution; health risk

1 研究背景

解析解模拟预测地下水污染健康风险评估是基于溶质的运移过程。至今为止, 溶质的运移已经有将近60年的研究历史。1952年, Lapidus和Amundson提出的类似于对流-弥散方程(CDE)的模拟模型, 为此项研究拉开了序幕。此后随着研究的不断

深入, 国内外研究者不断取得各种显著成果。Nielson建立了溶质运移理论研究的经典方程-CDE方程, 并首次系统论述了其合理性和科学性^[1]。目前, 国内外对地下水溶质运移模型及其对应的数学模型日趋成熟, 加之计算机性能的快速提高、更新, 给地下水溶质运移模拟软件的问世提供了硬件支持, 并结合理论使其走向成熟。美国地质调查局

收稿日期: 2012-10-19

基金项目: 国家重点基础研究发展计划“973”项目(2010CB428801)

作者简介: 陈建平(1971-), 男, 辽宁阜新人, 博士, 副教授, 从事环境工程和地质工程等方面的教学和科研工作。

通讯作者: 王明玉(1961-), 男, 山东乐陵人, 博导, 教授, 从事水文地质和环境科学的教学和科研工作。

McDonald 博士等设计出三维有限差分模拟程序 MODFLOW,加拿大 WHI 公司的 Visual Modflow,以及美国地下水服务中心设计的 BIOCHLOR 等都是目前较为流行的地下水水质模拟软件。

在地下水模拟软件得到广泛应用的同时,使用者对于模型本身不确定性也有所关注,因此,研究者应进一步分析模型对其本身参数的敏感度。敏感度分析,即一种确定模型各个参数对模型模拟结果影响程度的一种手段。在运用模型模拟过程中,模型的敏感度分析是处理参数的测量误差或区域间参数选择的重要依据,同时为模型不确定性提供参考,具有较高的研究价值。

2 应用于健康风险评估的解析解模型简介

应用于健康风险评估的解析解模型是一种以 DOMENICO 溶质运移分析模型为基础,并在此基础上结合地下水污染健康风险监测分析评估方法而形成的,可用于预测不同时间和空间尺度上地下水污染健康风险值。

基于瞬时反应叠加算法的 DOMENICO 分析模型方程如下:

$$\begin{aligned} \frac{C(x,y,0,t)}{(C_0 + BC)} = & \frac{1}{8} \exp\left[\frac{x}{2\alpha_x}(1 - (1 + 4\lambda\alpha_x/v)^{1/2})\right] \cdot \\ & \operatorname{erfc}\left[\frac{(x - vt(1 + 4\lambda\alpha_x/v)^{1/2})}{2(\alpha_x vt)^{1/2}}\right] \cdot \\ & \left\{\operatorname{erf}\left[\frac{(y + Y/2)}{2(\alpha_y x)^{1/2}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{(y - Y/2)}{2(\alpha_y x)^{1/2}}\right]\right\} \cdot \\ & \left\{\operatorname{erf}\left[\frac{Z}{2(\alpha_z x)^{1/2}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{(-Z)}{2(\alpha_z x)^{1/2}}\right]\right\} - B \end{aligned}$$

其中: $v = \frac{K \cdot i}{\theta_e R}$

式中: B 为生物降解能力, mg/L ; $C(x,y,z,t)$ 为在 t 时污点 (x,y,z) 的某溶质浓度; C_0 为 $t = 0$ 时污染源的溶质浓度, mg/L ; x 为距污染源底端距离, m ; y 为距污染羽纵向向中心线距离, m ; z 为距饱和带顶端距离, m ; $C(ea)_n$ 为地下水中电子受体浓度, mg/L ; α_x 为地下水纵向扩散能力, ft ; α_y 为地下水侧向扩散能力, ft ; α_z 为地下水垂直扩散能力, ft ; θ_e 为有效土壤孔隙度; λ 为一阶序列降解系数, d^{-1} ; v 为地下水渗透速度, ft/a ; K 为渗透系数, ft/a ; R 为延迟因子; i 为水力梯度, cm/cm ; Y 为污染源宽度, ft ; Z 为污染源厚度, ft [2-3]。

地下水污染健康风险监测分析评估:详见 NAS 四步法 [9]。将解析解模拟预测的不同时间与空间风险值进行加权平均,以计算受体整个生命周期 (70 年) 内的平均风险值。

3 研究方法

主要研究方法选择解析解模型敏感度的相关参数以及用于表征模型响应程度的输出结果,即分别改变参数数值,利用解析解进行模拟,记录模拟表征结果,进而对调整参数及所得结果进行数据处理和分析,通过回归分析和敏感性分析,获得模拟值与各参数的函数关系,直观地分析比较不同模型参数对模拟结果的影响程度和趋势。

另外,采用敏感性比例 (SR) 来表征模型参数的敏感性,即参数的变动对模型计算风险值的影响程度。 SR 的值越大,表示风险变动的程度越大,而该参数对于风险计算的影响也越大。对于风险影响较大的参数,在后续风险管理或模拟预测风险评估调查时应引起足够的重视。

SR 计算公式如下:

$$SR = \frac{R_2 - R_1}{R_1} \times 100\% \left/ \left(\frac{P_2 - P_1}{P_1} \times 100\% \right) \right.$$

式中: R_1 为原风险评估中所计算出的结果 (致癌风险或非致癌风险); R_2 为参数变化后的风险计算结果; P_1 为原风险评估中所使用的参数; P_2 为参数变化后的数值。

针对同一个参数来说, SR 值分为小范围 SR (Local SR) 和大范围 SR (Range SR) 两种。小范围 SR 的计算方式为将参数上下变动 5%, 来评估风险值的变化,而大范围的 SR 计算方式则为将变动参数上下变动 50%, 或是其最大与最小可能数值来看风险在参数变动范围中的变化。在进行各参数敏感性分析时,这两种敏感性分析都应该执行。

3.1 研究假设条件

假设源为稳定源,即源浓度不变;受体为 12 岁以上的成人;风险仅为饮水途径的致癌风险。

3.2 模型参数选择

解析解模型中共有平流参数、扩散参数、吸附参数、生物降解参数 一阶序列降解系数、常规数据、污染源数据及野外实测数据 7 个模块,其中平流参数、扩散参数、吸附参数及生物降解参数,是影响地下水中溶质运移的 4 个基本因素。本次敏感度分析中,分别选择了平流参数模块、扩散参数模块、吸附参数及一阶降解系数 4 个模块中的渗透系数 (K)、纵向

弥散度(α_x)、污染物有机碳分配系数(K_{oc})和半衰期($t_{1/2}$)4个参数进行研究分析。

3.3 模型参数及响应指标的选取

以某垃圾填埋场中主要污染物质苯为例,分析较大尺度简单地质结构下模型模拟参数的敏感度,分别对渗透系数 K ,纵向弥散度 α_x ,污染物有机碳分配系数 K_{oc} 和半衰期 $t_{1/2}$,适当取其 0.1、0.25、0.5、0.75、1、1.25、1.5、2 倍 (K :0.05 cm/s; α_x :490 ft; K_{oc} :146 L/kg; $t_{1/2}$:2 a),在其他参数不变的情况下依次改变某一参数,记录输出结果与参数值,进行比对分析。

由于在初始模拟中在 3281 ft 处实测值与预测值最为接近,因此选 3281 ft 处的输出结果作为本次敏感度分析的响应指标。

4 结果分析

敏感度分析是使模型的变量在某特定范围内变动,以观察模型行为或变化情形的一种分析方式。模型的评估总是存在着风险;敏感度分析有助于降低此风险。模型敏感度分析,可以指导模型应用中对各参数值影响作出判断,并且可指导野外调查工作的一种针对模型的分析手段。针对解析解模型进行苯致癌风险的模拟分析其敏感度,主要是改变模型中渗透系数、纵向弥散度、苯的有机碳分配系数和半衰期,就各参数数值改变时对模型结果数值得影响程度大小做出分析。

对通对上述参数的改变,得到不同模拟距离和时间的苯致癌风险,根据各参数值与结果值的对应散点图,经数值分析选择最优的回归模型,对参数值与模型响应结果值进行相关分析和回归分析,得到相应回归结果,并绘制曲线图。

4.1 渗透系数 K 对苯致癌风险 R 的影响分析

(1)渗透系数 K 与苯致癌风险值 R 的回归分析。由图 1 可见,苯致癌风险值在模拟距离 3281 ft 处随渗透系数的增加呈线性递增关系,且致癌风险值变化速率为 2×10^{-5} ,对于健康风险评估而言,此变化速率较大,因此渗透系数 K 对模型的敏感度较高,在健康风险评估过程中应尽量确保 K 值的准确程度。

(2)渗透系数 K 与苯致癌风险值 R 的敏感性分析。经计算,local $SR = 3.578$;Range $SR = 4.046$ 。

4.2 弥散度 α_x 对苯致癌风险值 R 的影响分析

(1)弥散度 α_x 对苯致癌风险值 R 的回归分析。由图 2 可见,模拟距离 3281 ft 处纵向弥散度 α_x 与苯致癌风险值也呈线性关系,苯致癌风险值随着 α_x 的增加而增加,且致癌风险值变化速率为 3×10^{-10} ,但与图 1 中结果比较,苯致癌风险值的变化速率甚微,据此, α_x 对模拟结果有一定程度的影响,但远小于渗透系数 K 。

(2)弥散度 α_x 对苯致癌风险值 R 的敏感性分析。经计算,local $SR = 0.571$;Range $SR = 0.286$ 。

4.3 有机碳分配系数 K_{oc} 对苯致癌风险值 R 的影响分析

(1)有机碳分配系数 K_{oc} 对苯致癌风险值 R 的回归分析。当吸附未达到饱和时,苯致癌风险值 R 随 K_{oc} 的增加逐渐降低(图 3 示),关系曲线为抛物线。可见,当 K_{oc} 取值小于 100 时,随着 K_{oc} 的增加苯致癌风险值呈极小的坡度下降,当 K_{oc} 取值大于 100 时,苯致癌风险值的变化速率有所增加。因此,当 K_{oc} 取值较大时,应着重考虑其取值的准确程度。

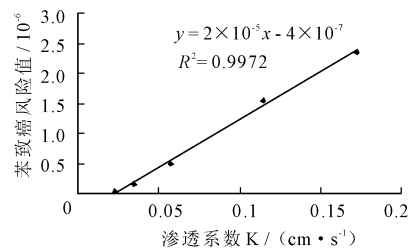


图1 渗透系数 K 与苯致癌风险值 R 关系

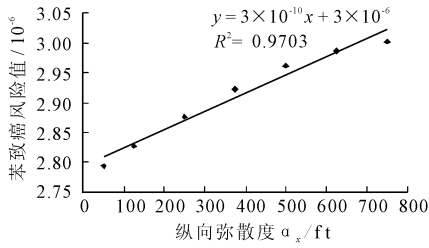


图2 纵向弥散度 α_x 与苯致癌风险值 R 关系

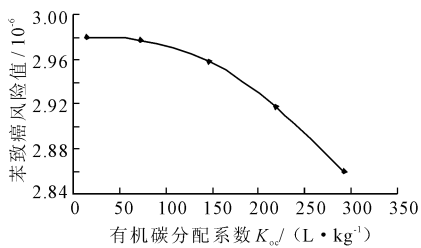


图3 有机碳分配系数 K_{oc} 与苯致癌风险值 R 关系

当吸附达到饱和时,随着模拟时间和距离的增大,风险值有略微回升的趋势。

(2)有机碳分配系数 K_{oc} 对苯致癌风险值 R 的敏感性分析。经计算,local $SR = -1.192$;Range $SR = 1.429$ 。

4.4 半衰期 $t_{1/2}$ 对苯致癌风险 R 的影响分析

(1)半衰期 $t_{1/2}$ 对苯致癌风险值 R 的回归分析。由图 4 可见,苯致癌风险值 R 随半衰期的增加而呈线性递增关系,且风险变化速率为 2×10^{-6} 且与图 1 相比,苯致癌风险值的变化速率差异不大。因此,半

衰期对于模拟结果的影响程度也较高。

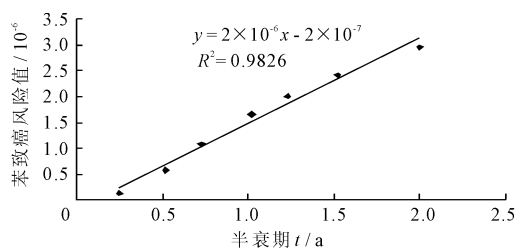


图4 半衰期 $t_{1/2}$ 与苯致癌风险值 R 关系

(2) 半衰期 $t_{1/2}$ 对苯致癌风险 R 的敏感性分析。经计算, local $SR = -3.556$; Range $SR = 3.457$ 。

5 结果讨论

(1) 经比较分析, 不同参数表现出了对解析解模型的不同程度的敏感度, 其中半衰期 $t_{1/2}$ 和渗透系数 K 对模拟结果的响应程度最大, 呈线性关系, 对模型表现出了较高的敏感性, 有机碳分配系数 K_{oc} 次之, 纵向弥散度 α_x 对解析解模型的响应程度最小。

(2) 在分析过程中, 各参数对模型的影响程度都有一定的规律和特性。致癌风险随渗透系数和半衰期的变化呈线性相关, 变化率稳定; 随纵向弥散度的变化呈线性关系, 但风险值的变化速率较小。

(3) 本次分析选择苯的致癌风险值为目标, 研究了解析解模型对模拟计算污染物健康风险值的准确性, 为模型的广泛应用提供了依据。但具有一定的主观性和单一性, 还需进一步做全面周详的研究工作。

参考文献:

- [1] 高川博, 姜 斌, 黄国强, 等. 土壤污染物溶质运移模型研究进展[J]. 环境保护科学, 2006, 32(5): 44-46.
- [2] Domenicopa. An analytical model for multidimensional transport of decaying contaminant species [J]. Journal of Hydrology, 1987, 91(1/2): 49-58.
- [3] Martin-haydenjm, Robbinsga. Plume distortion and apparent attenuation due to concentration averaging in monitoring wells [J]. Ground Water, 1997, 35(2): 339-346.
- [4] 程根伟, 舒栋材. 水文预报的理论与数字模型[M]. 北京: 中国水利水电出版社, 2006.
- [5] 薛红琴. 地下水溶质运移模型应用研究现状与发展[J]. 勘察科学技术, 2008(6): 17-22.
- [6] 于顺东, 尤学一. WASP 水质模型检验及参数敏感度分析[J]. 水资源与水工程学报, 2007, 18(6): 41-44.
- [7] Vogeltm, Mccartypl. Abiotic and biotic transformations of 1, 1, 1-trichloroethane under methanogenic conditions [J]. Environmental Science and Technology, 1987, 21(12): 1208-1213.
- [8] 杜恩昊, 张佳宝, 唐立松. 一种溶质运移数学模型的应用研究[J]. 干旱区研究, 2001, 18(1): 29-34.
- [9] EPA. Superfund public health evaluation manual [M]. Washington, US EPA, 1986.
- [10] 邹晓锦, 仇荣亮, 周小勇, 等. 大宝山矿区重金属污染对人体健康风险的研究[J]. 环境科学学报, 2008, 28(7): 1406-1412.
- [11] 王东红, 原盛广, 马 梅, 等. 饮用水中有毒污染物的筛查和健康风险评价[J]. 环境科学学报, 2007, 27(12): 1937-1943.

(上接第 122 页)

大, 不同地震波输入条件下, 渡槽响应时程和响应峰值有很大差异, 在进行结构地震响应分析时, 地震波的选择需要慎重考虑。

(4) 对隔震渡槽输入三向地震动, 当横槽向为主方向时, 槽身位移、支座总剪力及墩底最大主拉应力都达到峰值; 当顺槽向为主方向时, 槽身加速度、侧墙底最大主拉应力和槽底最大主拉应力达到峰值, 供设计时参考。

参考文献:

- [1] 张艳红. 大型渡槽抗震概论[M]. 北京: 地震出版社, 2004.
- [2] 陈玲玲, 钱胜国, 陈敏中, 等. 大型渡槽减隔震设计研究[J]. 南水北调与水利科技, 2008, 6(1): 212-215.

- [3] 朱 昆. 高阻尼橡胶支座力学性能及其隔震效果分析研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2009.
- [4] 范立础, 王志强. 桥梁减隔震设计[M]. 北京: 人民交通出版社, 2001.
- [5] Wai-fah Chen, Charles Scawthorn. Earthquake Engineering Handbook[M]. CRC Press, 2003.
- [6] 橡胶支座第 2 部分: 桥梁隔震橡胶支座 (GB20688.2-2006) [S]. 北京: 中国标准出版社, 2006.
- [7] 颜云燕. 大型渡槽高阻尼橡胶支座设计与地震响应分析[D]. 南京: 河海大学, 2011.
- [8] 朱伯芳. 有限单元法原理与应用[M]. 北京: 中国水利水电出版社, 1998.
- [9] 丁晓唐, 颜云燕, 唐德嘉. 铅芯橡胶隔震双槽渡槽设计与动力分析[J]. 水电能源科学, 2012, 30(1): 96-99.