

CONTAMINANT TRANSPORT NUMERICAL
MODELING IN ENVIRONMENTAL SYSTEM

环境污染数值模拟

仵彦卿 编著



科学出版社

环境污染数值模拟

CONTAMINANT TRANSPORT NUMERICAL
MODELING IN ENVIRONMENTAL SYSTEM

仵彦卿 编著

科学出版社

北 京

内 容 简 介

环境系统是一个复杂的多介质系统,污染物在多介质环境系统内迁移转化的定量描述,是控制和治理环境污染的基础。本书重点介绍了空气质量数学模型、水环境数学模型、土壤与地下水污染物迁移数学模型、环境系统污染物迁移耦合数学模型以及环境系统数值模拟方法等。

本书可作为环境科学与工程、土壤学、地下水科学与工程、水文学及水资源等学科研究生教材和研究人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

环境污染数值模拟 = Contaminant Transport Numerical Modeling in Environmental System/仵彦卿编著. —北京:科学出版社,2015.6

ISBN 978-7-03-044897-2

I. ①环… II. ①仵… III. ①环境污染-数值模拟 IV. ①X11

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 126822 号

责任编辑:朱 丽 杨新政 / 责任校对:赵桂芬

责任印制:赵 博 / 封面设计:耕者设计工作室

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

文林印务有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 6 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2015 年 6 月第一次印刷 印张:18

字数:363 000

定价:88.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

前 言

人们认识自然的过程总是从简单到复杂,从单个事物到多个事物及其间相互联系,同样,在研究环境系统时,传统的研究方法是从单学科问题入手,如在河流动力学的基础上研究河流污染物的迁移转化;在湖泊动力学的基础上研究湖泊的污染物迁移转化,尤其是湖泊富营养化规律及其数值模拟;在大气动力学的基础上研究空气质量时空变化的预报模型,分析各种污染物在大气中的传输和转化;在土壤水动力学的基础上研究土壤污染物的迁移转化,尤其是土壤的水分迁移、养分迁移、碳分迁移以及污染物的迁移转化;在地下水动力学的基础上研究地下水污染物的迁移转化规律等。这些研究分属不同学科,相互割裂,互不联系。但事实上,污染物进入到多介质环境系统内,在不同介质中相互转化和迁移,尽管介质不同,但都遵循着共同的原理,即质量守恒、能量守恒和物质不灭定律。因此说,多介质环境系统污染物迁移数学模型及其数值模拟方法研究,是环境科学家研究的前沿科学问题,也是多学科交叉研究的重要领域。美国为了研究多介质环境系统数值模拟,成立了由 8 个联邦机构组成的多介质环境模拟联邦跨部门协调委员会(Federal Interagency Steering Committee on Multimedia Environmental Models, ISC-MEM),研究与开发(R&D)多介质环境模型、软件和相关的数据库,主要是针对特定场地的、通用的和面向过程的多介质环境模型的开发、优化、应用和评估。2002 年由欧盟委员会资助的研究计划,目的是开发和执行欧洲开放模拟界面和环境(Open MI),以利于战略规划和集成流域管理。

本书试图从环境系统的基本概念出发,介绍污染物在大气、河流、湖泊、海洋、土壤和地下水中的迁移与转化的数学模型和数值模拟方法(普通微分方程求解方法、有限差分法和有限元法)。本书共 8 章,第 1 章绪论,包括环境系统的基本概念、模型与模拟、数学模型的类型、环境系统污染物迁移数值模拟的研究内容以及研究进展与趋势;第 2 章介绍环境系统污染物迁移基本数学模型;第 3 章地表水污染物迁移数学模型,包括河流水质模型、近海水域水质模型以及湖泊与水库水质模型等;第 4 章空气质量数学模型,包括空气质量数学模型的类型,大气污染物迁移的物理和化学过程,大气污染物迁移的基本数学模型,高架连续点源排放污染物迁移模型的解析解,线源、面源和体积源排放污染物迁移模型的解析解以及三维大气污染物迁移欧拉模型;第 5 章土壤污染物迁移数学模型,包括土壤水分运动的基本定律、土壤水动力方程、土壤多组分渗流方程、土壤水分运动数学模型的定解条件、土壤污染物迁移基本定理、土壤污染物迁移的对流-弥散方程、土壤污染物迁移的

对流-弥散-吸附方程、土壤污染物迁移的对流-弥散-吸附-化学反应方程、土壤污染物迁移的双域模型、土壤双重介质优势流污染物迁移方程、变饱和土壤渗流与污染物迁移方程、非饱和土壤污染物垂向一维迁移方程以及土壤污染物迁移的定解条件;第6章地下水污染物迁移数学模型,包括地下水基本定律、基本方程以及基本数学模型等;第7章环境系统污染物迁移耦合数学模型,包括大气-地表界面、植被-大气界面、地表-地下水界面以及多介质系统耦合模型;第8章环境系统数值模拟方法,介绍了普通微分方程的数值求解方法,包括欧拉积分法、改进欧拉法、龙格-库塔法、隐式解法等,偏微分方程的数值求解方法,包括有限差分法、有限元法。

本书内容是以作者多年的教学实践和部分科研成果的总结,尤其是以在上海交通大学为环境科学与工程专业开设的博士生课程《环境污染数值模拟》10多年的教学总结为基础,增加了作者本人的部分研究成果。

作者深深认识到,培养未来科学家,基本概念和基本理论的教学是训练未来科学家的基本功,对于一位专业学者来说,除了具有宽广的专业知识外,扎实的理论基础尤为重要。因此,本书力求从基本概念、基本定律、基本方程和基本数学模型着手,系统介绍多介质环境系统中污染物迁移与转化的数学模型及其数值方法。

数学模型有两类:一类是以统计数据为基础的统计学模型,另一类是以物理背景为基础的数学模型。统计学模型是从事物的外在数量上的表现去推断该事物可能的规律。科学规律一般隐藏得比较深,最初总是从其数量表现上通过统计分析看出一些线索,然后提出一定的假说,并需要作进一步深入的理论研究。当理论研究得出一定结论时,往往还需要实践的验证。即观测的一些自然现象或专门安排的实验所得数据,是否与理论相符,都需要用统计分析的方法处理。因此说,统计学模型是用有限的实验数据或监测数据,运用统计学方法构建的一种数学模型。本书介绍的数学模型是具有明确物理背景的数学模型,它是依据能量守恒原理和质量守恒原理,针对物理背景和实验研究成果,构建的数学模型,是前人在大量实验的基础上,并经过实践检验和理论分析论证,上升为普适理论,即数学模型,是把经验或艺术成果升华为科学。环境系统数学模型既来源于实验研究成果,又可以进行数值实验。一般来说,对于一个未知规律的科学问题,首先要进行大量实验,用大量的实验数据推测研究背景的科学本质和规律,它是数学模型研究的初级阶段,而具有物理背景的数学模型则是实验研究的升华。因此,数学模型及数值方法研究不是软科学(soft science),是硬科学(hard science),是科学家的核心研究工具。科学家用数学模型可以再现过去、评价现在、预测未来。学习数学模型的目的是要把复杂的环境系统的本质规律用简单的数学模型描述,再用简单的数学模型定量描述来分析复杂的环境系统问题;培养学生将复杂的现实环境问题抽象成数学问题,运用数学逻辑思维方式经过逻辑推理定量分析现实复杂环境问题的能力。

复杂的环境系统中存在多介质,如大气介质、水体介质、生物体介质、土壤非饱和和多相流介质、松散孔隙含水层介质、坚硬岩石裂隙网络介质以及喀斯特岩溶管道介质等;存在多过程,如污染物进入不同介质中发生物理过程(对流、弥散、物理吸附)、化学过程(化学反应和化学吸附)和生物过程(生物降解和生物转化);存在多组分,即环境介质中存在多种不同浓度的污染物,这些污染物在环境介质中迁移转化,尤其是有机污染物在降解过程中往往是链式反应动力学过程,一种目标可以产生多种中间产物,如四氯乙烯降解产生三氯乙烯、二氯乙烯、氯乙烯等;存在多动力驱动,如污染物在大气中运动,受到风力和热梯度的驱动产生对流和热迁移,污染物在海洋中受到风暴、潮汐、波浪、海流的驱动,在河流中受到水流运动的驱动,在土壤中受到基质势的驱动,在含水层中受到多种耦合势的驱动,如溶质势、变形势、温度势、生物地球化学势等。环境系统内复杂的多介质、多过程、多种势、多组分、多相(气相、液相、固相,在地层深部还存在超临界相等)等物理、化学和生物作用,使得污染物在环境系统中的迁移、转化、归趋更加复杂化,这对环境科学家提出了更高的要求,不仅能对污染环境进行有效控制与修复,而且要知道污染物在环境系统内的时间空间分布、环境行为、环境影响。

本书参考和引用了前人大量的研究成果,经过作者的理解、提炼和组织,同时也加入了作者本人及部分学生的研究成果,形成了系统描述污染物在复杂多介质环境系统中运动的理论著作——《环境污染数值模拟》。

作者衷心感谢在这一领域做出贡献的学者,没有他们的研究和长期积累,很难形成这一领域的理论和学科体系。也衷心感谢以各种方式对本书的编写提供过帮助的所有人。

由于时间有限,错误在所难免,恳切希望读者批评指正。

仵彦卿

2015年3月28日于上海

目 录

前言

第 1 章 绪论	1
1.1 为什么要学习“环境污染数值模拟”这门课程	1
1.1.1 学科发展的需要——定量化、精确化的需求	1
1.1.2 学术研究的需要——要揭示自然规律,重要的研究方法	2
1.1.3 工程实践的需要	2
1.2 如何学习这门课程	2
1.3 本课程的教学内容	3
1.4 环境系统的基本概念	4
1.4.1 环境系统	4
1.4.2 环境系统内的多界面性	4
1.4.3 环境系统的非线性	4
1.4.4 环境系统的多组分	5
1.4.5 环境系统的多过程	5
1.4.6 环境系统的多相流	5
1.4.7 环境系统的多尺度转化性	5
1.4.8 环境系统的多场耦合性	6
1.5 模型与模拟	7
1.5.1 模型	7
1.5.2 数学模型的分类	8
1.5.3 模拟或仿真	8
1.6 环境系统数值模拟研究进展与趋势	9
1.6.1 空气质量数学模型研究进展	9
1.6.2 河流水质数学模型的研究和发展	10
1.6.3 非点源污染模型研究进展	13
1.6.4 土壤-地下水污染数学模型研究与发展	15
1.6.5 环境系统耦合模型研究	16
1.6.6 环境系统数学模型研究展望	20
第 2 章 环境系统污染物迁移基本数学模型	22
2.1 环境系统污染物多过程迁移分析	22

2.1.1	污染物在环境介质中的对流作用	22
2.1.2	污染物在环境介质中的扩散和弥散作用	23
2.1.3	污染物在环境介质中的衰减与转化作用	25
2.2	环境系统污染物迁移的基本方程	26
2.2.1	环境系统污染物迁移的集总参数型方程	26
2.2.2	环境系统污染物迁移的分布参数型方程	31
2.2.3	环境系统污染物迁移转化的定解条件	36
2.3	环境介质污染物迁移数学模型的解析解	37
2.3.1	环境介质污染物迁移集总参数型模型的解析解	37
2.3.2	环境介质中一维均匀场数学模型的解析解	37
2.3.3	环境介质中二维均匀场数学模型的解析解	42
2.3.4	环境介质中均匀流场三维数学模型的解析解	50
第3章	地表水污染物迁移数学模型	52
3.1	地表水污染物迁移的多过程分析	52
3.1.1	地表水中污染物的主要类型	52
3.1.2	地表水质监测要素	52
3.1.3	地表水中污染物迁移的物理过程	52
3.1.4	地表水中污染物迁移转化的生物化学过程	52
3.1.5	地表水体的好氧与复氧过程	55
3.2	河流污染物迁移数学模型及其应用	62
3.2.1	Streeter-Phelps 模型的解	62
3.2.2	河流综合水质数学模型	65
3.2.3	河流水质数学模型在陕西泾河水水质模拟中的应用	69
3.3	湖泊(水库)污染物迁移数学模型	74
3.3.1	Vollenweider 模型	75
3.3.2	Baca 和 Arnett 湖泊模型	75
3.4	近海海域水体污染物迁移数学模型及其应用	80
3.4.1	海洋水动力数学模型	80
3.4.2	ECOMSED 模型的基本原理	80
3.4.3	边界条件	84
3.4.4	初始条件	86
3.4.5	数值计算方法	86
3.4.6	ECOMSED 模型在上海海域应用	87
3.4.7	海洋污染物迁移数学模型	97
3.4.8	上海海域及长江口地区三维水质数值模拟	102

第 4 章 空气质量数学模型	113
4.1 概述	113
4.2 空气质量数学模型的类型	113
4.2.1 按照数学方法分类	113
4.2.2 按照模拟目的分类	116
4.2.3 按照模拟的空间尺度分类	118
4.2.4 按污染排放源的类型分类	122
4.3 大气污染物迁移的物理和化学过程	124
4.4 大气污染物迁移的基本数学模型	125
4.4.1 无风瞬时点源排放的污染物迁移模型的解析解	127
4.4.2 有风条件下瞬时点源排放的污染物迁移模型的解析解	128
4.4.3 有风条件下连续点源排放的污染物迁移模型的解析解	128
4.5 高架连续点源排放污染物迁移模型	129
4.5.1 高架连续点源排放地面污染物浓度分布	131
4.5.2 高架连续点源排放地面轴线污染物浓度分布	131
4.5.3 高架连续点源排放最大落地污染物浓度分布	131
4.5.4 地面连续点源排放污染物浓度分布	132
4.5.5 逆温条件下空间污染物浓度分布	132
4.5.6 沉降颗粒物的空间浓度分布	133
4.6 线源、面源和体积源排放污染物迁移模型的解析解	134
4.6.1 无限长线源排放污染物迁移模型的解析解	134
4.6.2 有限长线源排放污染物迁移模型的解析解	135
4.6.3 面源排放污染物迁移模型的解析解	135
4.6.4 体积源排放污染物迁移模型的解析解	136
4.7 三维大气污染物迁移欧拉模型	137
第 5 章 土壤污染物迁移数学模型	139
5.1 概述	139
5.2 土壤水分运动的基本定律	139
5.3 土壤水力方程	142
5.3.1 土壤水分运动的连续性方程	142
5.3.2 土壤水分运动基本方程	142
5.3.3 以含水量表示的土壤水分运动方程	143
5.3.4 以毛细管压力水头表示的土壤水分运动方程	144
5.3.5 以水相压力表示的土壤水分运动方程	145
5.4 土壤多组分渗流方程	146

5.5	土壤水分运动数学模型的定解条件	147
5.5.1	初始条件	147
5.5.2	边界条件	147
5.6	土壤污染物迁移基本定理	149
5.6.1	土壤污染物迁移的对流作用	149
5.6.2	土壤污染物迁移的扩散作用	149
5.6.3	土壤污染物迁移的机械弥散作用	150
5.6.4	土壤水动力弥散作用	150
5.7	土壤污染物迁移的对流-弥散方程	151
5.8	土壤污染物迁移的对流-弥散-吸附方程	153
5.9	土壤污染物迁移的对流-弥散-吸附-化学反应方程	155
5.9.1	氧化/还原反应	155
5.9.2	酸/碱过程	155
5.9.3	沉淀/溶解作用	156
5.9.4	络合作用	157
5.9.5	水解/置换作用	157
5.9.6	生物降解或转化	158
5.9.7	土壤氮转化动力学方程	158
5.10	土壤污染物迁移的双域模型	161
5.11	土壤双重介质优势流污染物迁移方程	163
5.12	变饱和和土壤渗流与污染物迁移方程	163
5.12.1	变饱和和土壤渗流方程	163
5.12.2	变饱和和土壤污染物迁移方程	164
5.13	非饱和和土壤污染物垂向一维迁移方程	165
5.14	土壤污染物迁移的定解条件	168
5.14.1	初始条件	168
5.14.2	边界条件	168
第6章	地下水污染物迁移数学模型	172
6.1	概述	172
6.2	地下水基本定律	173
6.2.1	地下水流运动的达西定律	173
6.2.2	地下水污染物迁移的对流作用	175
6.2.3	地下水污染物扩散的非克定律	176
6.2.4	地下水污染物弥散的非克定律	178
6.2.5	地下水热迁移的傅里叶定律	181

6.3 地下水流方程	183
6.3.1 地下水流连续性方程	183
6.3.2 地下水流基本方程	184
6.3.3 潜水含水层水流方程	187
6.3.4 承压含水层水流方程	189
6.3.5 地下水多组分流动方程	191
6.3.6 初始条件	192
6.3.7 边界条件	192
6.4 地下水污染物迁移的对流-弥散方程	197
6.5 含水层的吸附与解吸附作用	201
6.5.1 等温线性吸附	202
6.5.2 等温非线性 Langmuir 吸附	202
6.5.3 等温非线性 Freundlich 吸附	203
6.5.4 动力学吸附(慢的、非平衡吸附)	203
6.6 地下水污染物的衰减与转化作用	203
6.6.1 发生在固体相中的源汇项	204
6.6.2 发生在液体相中的源汇项	204
6.6.3 生物降解或转化	207
6.7 地下水污染物迁移的双域模型	210
6.8 地下水多相多组分污染物迁移方程	211
6.9 地下水密度变化时的污染物迁移方程	213
6.10 多孔介质污染物迁移的定解条件	213
6.10.1 初始条件	213
6.10.2 边界条件	213
6.10.3 潜水面边界条件	216
第7章 环境系统污染物迁移耦合数学模型	219
7.1 环境系统数学模拟框架	219
7.2 大气水-地表水-地下水污染物迁移耦合模型	220
7.2.1 耦合地表水-地下水水流-污染物迁移模型	220
7.2.2 大气-地表水-地下水耦合模型	222
7.3 地下环境中水-热-力-化学(HTMC)多场耦合模型	223
第8章 环境系统数值模拟方法	227
8.1 概述	227
8.2 环境系统中普通微分方程的数值求解方法	227
8.2.1 普通微分方程一般形式	228

8.2.2	欧拉积分方法	228
8.2.3	改进欧拉方法	229
8.2.4	龙格-库塔方法	230
8.2.5	隐式解法	231
8.2.6	普通偏微分方程组的求解	233
8.3	环境系统中偏微分方程的有限差分法	234
8.3.1	概述	234
8.3.2	有限差分法的基本概念	235
8.3.3	一维非稳态地下水有限差分方法	238
8.3.4	二维稳态地下水有限差分方法	240
8.3.5	二维非稳态地下水有限差分方法	241
8.3.6	三维地下水流有限差分数值求解	245
8.3.7	三维地下水污染物迁移的有限差分数值求解	249
8.4	环境系统中偏微分方程求解的有限元法	256
8.4.1	概述	256
8.4.2	二维地下水流有限元数值求解法	257
8.4.3	三维地下水流有限元数值求解法	264
8.4.4	三维地下水污染物迁移有限元数值求解法	266
参考文献		270

第 1 章 绪 论

1.1 为什么要学习“环境污染数值模拟”这门课程

1.1.1 学科发展的需要——定量化、精确化的需求

当今几乎所有学科都把数学模型作为本学科或交叉学科的重要研究手段,目的是实现定量化和精确化,提高科学预测能力。每个学科在学术研究上的技术路线是:首先,科学问题的提出(new idea),这是科学研究的灵魂,是科学和技术创新的源泉。科学问题的提出,需要坚实的理论基础和雄厚的科学研究积累。其次,根据学术思想进行提出问题的物理背景(physical background)的描述,揭示该问题的物理内涵。再次,根据物理背景,进行室内和现场试验,以揭示提出问题的物理本质(essence)、物理(或化学、生物等)过程和动力学机理(dynamical process and mechanism)。然后,依据机理研究结果建立具有物理背景的数学模型(mathematical model),运用数学方法对建立的数学模型进行求解,获得数学模型的解析解或数值解。对于复杂的环境系统来说,往往难以获得复杂数学模型的解析解,通常要运用到数值求解方法进行数值模拟(numerical modeling or simulation),并科学预测(scientific predicting)未来系统状态的变化。最后,用定量化的数据解决提出的科学问题(solution to scientific questions proposed)。

数学模型是科学家进行科学研究的核心工具,它总结了前人大量的科学研究成果,尤其是大量的实验结果,成为普适的理论。它是一个学科发展成熟的标志,如流体力学的雷诺(Reynolds)输运定理,也称为输运方程或输运公式:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{D\phi}{Dt} = \int_U \frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} dU + \int_A \rho\phi V \cdot dA \quad (1.1)$$

输运公式遵循质量守恒和能量守恒原理,它奠定了流体力学的基础;伯努利(Nicolaus Bernoulli)方程:

$$H = z + \frac{P}{\gamma} + \frac{\alpha v^2}{2g} + h_w \quad (1.2)$$

该方程在实验的基础上,通过理论分析形成现今的普适公式,它遵循能量守恒原理,并奠定了水力学基础;太沙基(Terzaghi, 1923)提出了有效应力原理:

$$\sigma_e = \sigma - P \quad (1.3)$$

该公式反映了力学平衡原理,奠定了土力学基础;达西(Darcy, 1856)定律:

$$Q = KA \frac{H_1 - H_2}{L} \quad (1.4)$$

达西定律在实验的基础上,通过理论分析形成现今的普适公式,它遵循能量守恒原理。该公式奠定了渗流力学的基础,达西定律的提出使得渗流(渗流是水文地质学的基础)问题的研究从定性走向定量化,奠定了渗流力学和水文地质学科定量研究的基础,也标志着这门学科开始走向成熟。

1.1.2 学术研究的需要——要揭示自然规律,重要的研究方法

人类生存在地球上,人与自然的和谐相处是永恒的研究课题,而认识自然、从自然中学习知识、从自然中学会创造,是人类生存的本能。在自然科学研究上,人们通过观测和试验获得事物的本质,用简单的、抽象的数学模型描述事物的本质,用数学模拟来再现自然过程,因此,数学模型是前人通过大量观测和试验获得的具有普遍规律的知识的总结和结晶,是科学家核心的研究工具,已经广泛地应用于各个领域。数学模型是科学研究的重要工具,它可以用简单的数学符号描述复杂的物理背景、物理过程、物理机制以及事物的本质,同时数学模型也能够再现过去、评价现在、预测未来,尤其是对复杂的环境系统。

1.1.3 工程实践的需要

对于复杂的物理系统,尤其是地球环境系统,现场过程难以观测、物理模拟造价高,而数学模拟方便、造价低、易于修改,也可以进行数值试验,如核爆炸数值试验、材料力学和结构力学数值试验、爆破工程的数值试验、化学工程中的数值试验、岩土工程数值试验、土壤-地下水污染修复的数值试验等。通过数值试验可以提高工程设计的水平,提高人们对研究问题的控制能力和预见能力。

“环境污染数值模拟”这门课程,作为环境科学与工程专业的博士生的专业基础课(化学、生物学、数学模型),目的是通过这门课程的学习,使博士生打下本领域研究的重要基础,同时能运用数学模型进行本领域的课题研究。

1.2 如何学习这门课程

这门课程内容比较多,需要有一定的数学功底,因此,学生在学习了高等数学、流体力学之后,可以继续学习这门课程,重点掌握环境系统中污染迁移转化规律、污染物迁移转化的数学模型以及数值解法。

在教学过程中,重点掌握基本概念、基本定律、基本数学模型,培养学生的实践能力、直观理解问题和解决问题的能力;引导学生学会污染物在环境介质中迁移数学建模方法和部分求解方法,学会用简单的数学模型定量描述复杂的物理背景,以及定量分析和解决环境问题的能力。

在学习这门课程的同时,教学中要引导学生能够查阅部分参考书籍和这方面的参考文献,尽可能读作者原著,从原著中分析作者的研究方法、研究思想的构建以及分析问题的思路 and 全过程,使学生从中悟出科学研究的精髓。

1.3 本课程的教学内容

本书重点介绍环境系统的基本概念、基本理论、数学模型和数值求解方法,尤其是数学模型建立、求解、编程及其应用问题。在环境科学与工程领域,污染物的控制是一个重要的研究方向,而要做到对污染物在多介质环境系统中有效地控制,首先要知道污染物在环境介质中的迁移过程、转化机理及其变化规律。

第1章绪论,包括环境系统的基本概念,模型与模拟,数学模型类型的基本概念,环境系统污染物迁移数值模拟的研究内容、研究进展与趋势。

第2章环境系统污染物迁移基本数学模型,包括环境系统污染物多过程迁移分析;环境系统污染物迁移的基本方程;环境系统污染物迁移数学模型的解析解。

第3章地表水污染物迁移数学模型,包括地表水体污染物迁移的多过程分析;河流污染物迁移数学模型及其应用;湖泊(水库)污染物迁移数学模型;近海海域水体污染物迁移数学模型及其应用。

第4章空气质量数学模型,包括空气质量数学模型的类型,大气污染物迁移的物理和化学过程,大气污染物迁移的基本数学模型,高架连续点源扩散模型,线源、面源和体积源排放扩散模型以及多尺度大气污染物迁移数学模型。

第5章土壤污染物迁移数学模型,包括土壤水分迁移达西定律、土壤污染物扩散菲克定律、土壤水动力方程、土壤污染物迁移的对流-弥散-吸附-生物化学反应模型、变饱和土壤污染物迁移数学模型、土壤污染物迁移的双域模型、双重介质优势流迁移模型、一维土壤污染物迁移方程以及定解条件。

第6章地下水污染物迁移数学模型,包括地下水传力的达西定律、地下水传质的菲克定律、地下水传热的傅里叶定律、地下水流基本方程和数学模型、地下水污染物对流-弥散-吸附-生物化学反应方程以及地下水污染物迁移数学模型等。

第7章环境系统污染物迁移耦合数学模型,包括大气-地表界面、植被-大气界面、地表-地下水界面以及多介质系统耦合模型。

第8章环境系统数值模拟方法,介绍普通微分方程的数值求解方法,包括欧拉积分法、改进欧拉法、龙格-库塔法、隐式解法等;偏微分方程的数值求解方法,包括

有限差分法、有限元法。

1.4 环境系统的基本概念

1.4.1 环境系统

环境系统(environmental system)是由大气圈、水圈、岩石圈、生物圈组成的,污染物排放到环境系统中,与不同的环境要素发生物理的、化学的和生物的相互作用,产生着各种各样的变化;不同的污染物在不同的环境介质中,有着各自的迁移转化方式,但无论如何,都遵循质量守恒、能量守恒和物质不灭定律。

环境系统的要素有大气、水、岩土、生物体;从地球环境来讲是指大气圈(atmosphere)、水圈(hydrosphere)、生物圈(biosphere)和岩石圈(lithosphere)。有的将土壤圈(pedosphere)从岩石圈中分离开来。环境系统为多介质环境系统(multi-media environmental system),该系统具有多种性质,如多介质(multi-media)、多界面(multi-interfaces)、多组分(multi-components)、多过程(multi-processes)、多场耦合(coupling multi-fields)、多尺度转化(transformation of multi-scales)、多相流(multi-phase flow)等特点。

1.4.2 环境系统内的多界面性

多介质迁移与转化(transport and transformation of contaminants in environmental multi-media)是污染物在环境介质中运动的重要形式。由于环境介质具有不同的环境界面,诸如气-水界面(air-water interface)、气-土界面(air-soil interface)、气-植物界面(air-plant interface)、气-动物界面(air-animal interface)、水-土界面(water-soil interface)以及水-生物界面(water-living beings interface)等,污染物在环境介质中的分布是通过多介质迁移与转化来实现的。

污染物从它的发生源排出之后,通过三种途径进入周围环境:①单一污染物从污染源同时排入不同的环境介质单元,然后在这些不同的环境介质单元之间进行迁移与转化。②单一污染物首先排入某一环境介质单元,然后再由该介质单元转移到其他的介质单元。在这种情况下,前一个环境介质单元便成为后一个介质单元的污染源。③多种污染物从污染源同时排入不同的环境介质单元,然后在各介质间进行迁移与转化。

1.4.3 环境系统的非线性

在环境系统中存在着介质与介质之间的物理转换区,即界面(interface)。界面两侧的环境介质表现出状态、结构以及物理、化学性质的不同,污染物通过界面

时的传输相对于它原来所在介质中的传输将会加快或减慢,表现出明显的非线性(non-linear)特征。如空气与水界面的双膜理论,地表水与地下水之间的物质传输函数,生物新陈代谢与周围环境介质进行物质和能量交换的过程,以及有机污染物在有机碳含量极低的矿物质上的吸附行为等,都涉及污染物或其他物质在多介质环境界面行为的过程,这些过程大多数是非线性的,这种非线性使得污染物的迁移与转化更加复杂化。

1.4.4 环境系统的多组分

环境系统中存在着多种物质,当流体运动时,多种物质随同流体一起运动。第一种情况与流体的运动速度相同,处于混溶状态;第二种情况由于密度差异与流体运动速度不同,如水轻的油和比水重的硝基苯等,处于不混溶状态;第三种情况为多种组分在迁移的过程中发生化学反应。多组分物质的生物地球化学作用改变了岩土介质的化学组分和结构,从而影响岩土介质的力学性质;同时也改变了流体的组分和迁移特性。在大气环境系统中存在多种组分的物质,该物质不仅随大气迁移,同时也因发生光化学反应而转化成另外物质;在地表水体中同样存在多组分物质,这些物质不仅随地表水体迁移,也因发生化学反应和生物降解而转化成另外物质。

1.4.5 环境系统的多过程

环境系统污染物迁移过程中存在物理、化学和生物作用。物理过程:对流、弥散与扩散;化学过程:溶解(盐岩、碳酸盐岩及黄土等)、沉淀(化学淤堵)、放射性衰减(核素迁移)、酸离子反应(文化建筑物酸蚀、风化等)、络合、水解与置换(膨胀土)、离子交换、氧化与还原等化学反应;生物过程:有机物的生物降解,生物在多孔介质中生长、繁衍与死亡引起的空隙堵塞导致的渗流通道堵塞,生物作用会加速或改变化学过程。

1.4.6 环境系统的多相流

环境系统中存在着气相、固相、可移动的胶体相和液相[水、油、非水溶相液体(non-aqueous phase liquids, NAPLs)]。非水溶相液体由于密度的不同,又可分为两类:第一类是非水溶相重液(dense non-aqueous phase liquids, DNAPLs),像密度大于水的硝基苯、三氯乙烯等;第二类是非水溶相轻液(light non-aqueous phase liquids, LNAPLs),像密度小于水的汽油等。由于多相的存在,使得环境介质中污染物迁移动力学过程极为复杂。

1.4.7 环境系统的多尺度转化性

多尺度涉及时间尺度(temporal scale),如:日、月、年、10年、100年、1000年