

# 地下水运移 数学模型手册

〔美〕 I. Javandel 等著

林学钰 李生彩 赵勇胜 侯印伟 译

林学钰 校订

吉林科学技术出版社

# 地下水运移数学模型手册

〔美〕 I. Javandel 等 著

林学钰 李生彩 赵勇胜 侯印伟 译

林学钰 校 订

吉林科学技术出版社

## 内 容 提 要

本书为美国地球物理协会水资源专题10(1984出版),是目前世界上研究地下水溶质运移问题的一本代表作,基本反映了当代有关研究地下水污染及其模拟方法的最新研究成果,是环境水文地质工作者通晓地下水模拟技术的重要参考书,也是广大水文地质工作者学习、利用计算机,特别是利用微型计算机进行地下水资源评价和科学管理的一本好教材。

全书三十二万多字,不但简明通俗地介绍了研究地下水溶质运移所涉及的解析法、半解析法和数值法的数学原理、实际应用;还附大量的综合表和计算机程序,读者可方便地利用本书所提供的数学原理和计算机程序具体解决实践中提出的有关地下水污染和水质预测问题。

AMERICAN GEOPHYSICAL UNION · WATER RESOURCES MONOGRAPH 10

## Groundwater Transport

*Handbook of  
Mathematical Models*

By I. Javandel

C. Doughty

C. F. Tsang

AMERICAN GEOPHYSICAL UNION

WASHINGTON, D.C.

1984

## 地下水运移数学模型手册

(美) I. Javandel 等著

林学钰 李先彩 赵勇胜 侯印伟 译

林学钰 校订

※

吉林科学技术出版社出版 长春科技书刊发行中心发行

长春地质学院印刷厂印刷

※

787×1092毫米16开本 13.5印张 315,000字

1985年9月长春第1版·1985年9月长春第1次印刷

印长: 1—4100册

统一书号: 13376·26 定价: 3.20元

# 目 录

译者的话

前言

|                    |      |
|--------------------|------|
| <b>第一章 绪言</b>      | (3)  |
| 1.1 问题的说明          | (3)  |
| 1.2 目的和研究方法        | (3)  |
| 1.3 污染源            | (4)  |
| 1.3.1 工业废水贮水池      | (4)  |
| 1.3.2 固体垃圾的地面处置    | (5)  |
| 1.3.3 通过井的废物排放     | (6)  |
| 1.4 本手册的编排方式       | (8)  |
| <b>第二章 解析法</b>     | (9)  |
| 2.1 基本方程式          | (9)  |
| 2.1.1 初始条件和边界条件    | (12) |
| 2.2 一维问题           | (12) |
| 2.2.1 特殊情况         | (14) |
| 2.3 二维问题           | (15) |
| 2.3.1 二维平面弥散模型     | (15) |
| 2.3.2 径向流中的弥散      | (17) |
| 2.3.3 关于径向流中弥散的近似解 | (19) |
| 2.4 应用             | (20) |
| 2.4.1 实例1          | (20) |
| 2.4.2 实例2          | (22) |
| 2.4.3 实例3          | (24) |
| 2.5 解析法的优点         | (27) |
| 2.6 解析法的缺点         | (27) |
| <b>第三章 半解析法</b>    | (28) |
| 3.1 原理             | (28) |
| 3.1.1 均匀流          | (29) |
| 3.1.2 源和汇          | (29) |
| 3.1.3 源汇偶          | (30) |
| 3.2 具有点源和点汇的均匀流系统  | (31) |
| 3.3 具有有限长半径源的均匀流   | (33) |
| 3.4 使用一口生产井来进行污染监测 | (34) |

|                   |      |
|-------------------|------|
| 3.5 应用 .....      | (35) |
| 3.5.1 实例 1 .....  | (35) |
| 3.5.2 实例 2 .....  | (36) |
| 3.5.3 实例 3 .....  | (37) |
| 3.5.4 实例 4 .....  | (45) |
| 3.6 半解析法的优点 ..... | (49) |
| 3.7 半解析法的缺点 ..... | (49) |

## 第四章 数值法 .....

|                        |      |
|------------------------|------|
| 4.1 空间上的近似 .....       | (51) |
| 4.1.1 有限差分法 .....      | (51) |
| 4.1.2 有限差——积分离散法 ..... | (52) |
| 4.1.3 有限单元法 .....      | (52) |
| 4.1.4 流网法 .....        | (53) |
| 4.2 时间上的近似 .....       | (54) |
| 4.2.1 隐含方程 .....       | (54) |
| 4.2.2 偶合解的方法 .....     | (55) |
| 4.3 矩阵解算法 .....        | (55) |
| 4.3.1 直接消元法 .....      | (55) |
| 4.3.2 迭代法 .....        | (56) |
| 4.4 计算程序 .....         | (56) |
| 4.5 复杂数值模型的应用实例 .....  | (57) |
| 4.6 数值法的优点 .....       | (62) |
| 4.7 数值法的缺点 .....       | (62) |

## 第五章 计算方法的选择和所需资料的讨论 .....

|                      |      |
|----------------------|------|
| 5.1 所需资料 .....       | (63) |
| 5.1.1 解析法和半解析法 ..... | (63) |
| 5.1.2 数值法 .....      | (64) |
| 5.2 方法的选择 .....      | (65) |

## 第六章 结论 .....

## 附录

|                                             |       |
|---------------------------------------------|-------|
| A. 具有一维均匀流的含水层中一维污染质运移的无量纲浓度表 .....         | (66)  |
| B. ODAST: 一维污染质运移的解析解的计算机程序 .....           | (100) |
| C. 含水层中具有一维均匀流的二维污染质运移的无量纲浓度表 .....         | (104) |
| D. TDAST: 二维污染质运移的解析解的计算机程序 .....           | (129) |
| E. 径向流弥散的无量纲浓度表 .....                       | (135) |
| F. LTIRD: 在多孔介质中对于径向弥散的半解析解的计算机程序 .....     | (136) |
| G. 误差函数表 .....                              | (141) |
| H. RESSQ: 污染质运移的半解析解的计算机程序 .....            | (144) |
| I. RT: 在累计时间系列数据的基础上绘制含水层中浓度分布图的计算机程序 ..... | (184) |
| J. 用注水和抽水方法控制液体晕的运移 .....                   | (194) |
| 符号说明 .....                                  | (204) |
| 参考文献 .....                                  | (205) |

## 译 者 的 话

本书是研究地下水运移数学模型的手册。全书共分六章，著者以理论和实例相结合的形式阐述了如何利用有关数学模型研究地下水中的溶质运移规律，计算并预测地下水污染晕的范围和发展趋势。书中不但评述了有关研究地下水溶质运移理论的最新成果，而且还精选汇集了一些行之有效的数学方法，其中包括：用简单的解析法，概化野外条件，对污染质迁移范围进行定性评价；采用半解析法，计算稳定状态下具有源、汇项的溶质运移问题；采用数值近似法解决复杂任何形状和非均质中有弥散、扩散，化学阻滞过程（如：吸附、沉淀、放射性衰变、离子交换、分解等）的溶质运移问题。书中简明通俗地介绍了上述各方法的数学原理、实际应用前提和各种方法的优缺点，并附有各种方法的计算机程序及其使用说明、综合表、插图和应用实例。

本书具有鲜明的工具书的特点，着重于应用和实用，是环境水文地质工作者通晓地下水模拟技术的重要参考书，也是广大水文地质工作者学习、掌握和利用计算机，特别是利用微型计算机进行地下水资源评价和科学管理的一本好教材。

限于校译者的水平，译文中难免有错误和不当之处，敬请读者批评指正。

1985年4月 于长春

# 前 言

近十年来,地下水污染事件的发生迫使人们制定法律来控制污染和采取改良措施以保证适当的饮水水质。因人类活动引起的地下水污染主要有两种类型(1)施用农药,除草剂和肥料而造成的污染,这样地区的污染源的分面积是相当大的,(2)工业和城市造成的污染,这类污染一般集中于局部地区。对第二种类型来说,因地下水的污染是局部的,所以在制定改良措施时,必须了解污染晕的范围。可以用各种数学模型来计算其污染晕的大小形状和发展趋势。为此就需要有专著来论述这些数学研究的方法。

地下水中溶质运移的研究是一个老课题。最初,用各种解析法来解决非常简单的问题。而后发展了一些半解析法,它借助简单的计算机来解决实际问题。最近几年,则应用一些数值近似法来描述复杂的数值模型,以解决较复杂的问题。本专著试图把精选的解析法、半解析法和数值近似法汇集一起,并研究它们在应用中的长处和缺点。综合表和计算机程序列于书后的附录中。我们希望水文地质工作者能很方便地应用本专著来研究含水层中溶质晕的范围和发展。同时,我们也希望本专著能针对该主题给读者以一个简明的看法,以帮助读者有效地掌握这个重要的课题,并对各种数学方法做进一步的研究。

本专著的题材最初是为 U.S. Environmental Protection Agency(EPA), Robert S. Kerr Environmental Research Laboratory (RSKERL) 准备的,它部分是依据 U.S. EPA 和 U.S. Department of Energy 之间的 AD89F. 2A.175 协议,部分则是依据 U.S. Department of Energy 的 DE-AC03-76SF00098 契约编制的。RSKERL 的 Jack W. Keeley 在研究过程中提供了技术指导,RSKERL 的 Joseph F. Keely 审阅了手稿,提供了建设性的评论。我们感谢他们在出版这本专著中所给予的帮助和鼓励。虽然这本专著已经 EPA 批准出版,但这并不意味着所有的内容一定反映了 EPA 的观点和方针,也没有把它当作商品来保证或推荐其使用。

最后,作者在此对 J.S.Y. Wang 帮助编写第四章, J. Noorishad 审阅手稿, P. Fuller 协助计算和绘图以及 L. Armetta, J. Grant 和 S. Kerst 组织手稿和修改文句表示深深的谢意。

I. JAVANDEL

C. DOUGHTY

C. F. TSANG

Earth Sciences Division

Lawrence Berkeley Laboratory

University of California

Berkeley, California 94720

# 第一章 绪 言

## 1.1 问题的说明

人们把大量的、可能污染地下水的废物贮存或弃置于地表或地下。在许多情况下,于地底下发现的有机和无机化合物,以及细菌物质都证明多数废物弃置点和地下水资源之间是互相有联系的。

*Hazardous Substances and Waste Research Program* (简称 *HSWRP*, 意为有害物质和废物研究计划)的宗旨是为环境保护人员提供必需的科学和技术上的专门知识,使其能够发现、控制和清除由各种途径进入到环境中来的有害物质和石油。就总的方案来说,本手册将力图野外工作者提供一个有用的指南,使他们通晓模拟地下水中污染质迁移的现代科学技术的研究方法。本指南还将帮助用户对指定地区的污染质运移做初步的评价,协助用户在需要并具备相应资料的地区选择和使用复杂的数值模型。

## 1.2 目的和研究方法

本书的目的是评述、选择、搜集和论证某些最好和最有效的数学方法,野外工作者可有效地利用这些数学方法预测地下污染的程度。这些方法包括简单的解析解和半解析解法以及复杂的数值法。并对应用这些方法的假定前提做了详细的讨论。为了使该手册适用于野外,本书主要强调了简单公式和综合表的使用。

该手册用三种不同级别的复杂程度和精度来描述地下水中污染质运移的趋势。这三个级别是:

1. 在微分方程解的基础上,用简单的解析法,概化野外条件并对污染质运移的范围做定性的评价。

2. 在复合速度势概念的基础上,采用半解析法,确定稳定状态下的流线及其相应的任意个源和汇情形下的污染质的运移。

3. 采用高级数值模型以解决不仅有复杂的几何形状和非均质介质,并且还有弥散、扩散、化学阻滞的作用(例如:吸附,沉淀,放射性衰变,离子交换,分解)的溶质运移问题。

对前两种级别,给出了相应的方法,并附有计算机程序及其使用指南、综合表和插图。对于第三种级别,则介绍了各种数值近似法,并在最新研究的基础上,把目前一些可用的数值程序编成表。这些表包括模型的名称、主要特点和研制者。作为一个例证,描述了其中一个完善的模型并对其应用实例作了论证。

## 1.3 污 染 源

根据 *Environmental Protection Agency* 1977 年的会议报导, 在美国, 有  $17 \times 10^6$  多个废物处置设施, 每年至少向地下排放  $6.5 \times 10^9$  米<sup>3</sup> 的污染液。虽然其中  $16.6 \times 10^6$  个排放点是居民用的腐物槽, 但这些槽仅排放约  $3 \times 10^9$  米<sup>3</sup> 的污水。其余四十万个废物处理设施则排放余下的  $3.5 \times 10^9$  米<sup>3</sup> 的污水。这些设施在其他地方已有详述 [*U.S. Environmental Protection Agency* 1977]。它包括以下几方面: (1) 工业废水贮水池, (2) 固体垃圾的地面处置点, (3) 通过井的废物排放, (4) 腐物槽和污水池, (5) 汇集、处理和排放城市废水的工厂, (6) 淤渣的地面散布, (7) 因石油勘探和开发而产生的咸水排放, (8) 矿山废物的排放, (9) 农田渗漏, (10) 化学物品的溢出, (11) 从地下化学贮藏设备向外的渗出。下节我们将对上面列出的地下水污染的几个重要污染源做简要的讨论。

### 1.3.1 工业废水贮水池

工业废水贮水池是指临时或永久的贮存和 (或) 处理废液用的天然或人工的地面洼地。这些贮水池的面积可由几平方米到几公顷。但为了提高蒸发效率, 其深度一般则较小。根据报导 [Josephson, 1982] 约 70% 的工业贮水池都没有防渗衬垫。所以有害的液废可以很容易的向下渗入到地下水中。对有铺衬的来说, 按照一般规律, 铺衬的渗透系数要小于  $10^{-7}$  厘米/秒。每平方公里贮水池面其相应的渗漏量大约是 31,000 米<sup>3</sup>/年。据报导 [Andeson, 1982], 在这种贮水池内贮存某些有机化合物将会增加粘土铺衬的渗透性并导致贮水池的大量渗漏。可能有害的各种物质存在于工业废渣中并通过废渣排入贮水池。表 1 列出有关工业废水的组份, 这些组份极可能污染地下水 [*U.S. Environmental Protection Agency*, 1973]。其中含有的污染质是氯化物溶剂、砷、汞、铅、氰化物、铬、铀, 和其它有毒的有机和无机物。既然这些物质在饮用水中的最大允许浓度为几十亿分率 (PPb), 那么很显然, 从工业废水贮水池中的少量渗漏也将导致地下水污染的严重事故。

可能污染地下水的工业废水组分

表 1

|         |           |      |     |
|---------|-----------|------|-----|
| 纸浆和造纸工业 |           |      |     |
| 氮       | 重金属       | pH   | TDS |
| COD     | 营养物 (氮和磷) | 酚    | TOC |
| 颜色      |           | 亚硫酸盐 |     |
| 炼油工业    |           |      |     |
| 氮       | 氯化物       | 气味   | TDS |
| 氯化物     | 铁         | pH   | TOC |
| 铬       | 铅         | 酚    | 总磷  |
| COD     | 硫酸醇       | 硫酸盐  | 混浊  |
| 颜色      | 氮         | 硫化物  | 锌   |
| 铜       |           |      |     |
| 钢铁工业    |           |      |     |
| 氮       | 氰化物       | 酚    | 锡   |

续前表

|              |          |     |     |
|--------------|----------|-----|-----|
| 氯化物          | 铁        | 硫酸盐 | 锌   |
| 铬            | pH       |     |     |
| 有机化学工业       |          |     |     |
| COD          | pH       | TDS | 总氮  |
| 氰化物          | 酚        | TOC | 总磷  |
| 重金属          |          |     |     |
| 无机化学、碱和氯化物工业 |          |     |     |
| 酸度/          | 氯化苯型     | 氰化物 | 硫酸盐 |
| 碱度           | 多核-(环)芳烃 | 铁   | TDS |
| 铝            |          | 铅   | 钛   |
| 砷            |          | 汞   | TOC |
| 硼            | 铬        | 酚   | 总磷  |
| 氯化物          | 氰化物      |     |     |
|              | COD      |     |     |
| 塑料制品和化学合成物工业 |          |     |     |
| 氮            | COD      | 有机  | 磷   |
| 氯化苯型         | 氰化物      | 氮   | 硫酸盐 |
| 多核-(环)芳烃     | 硫醇       | pH  | TDS |
|              | 硝酸盐      | 酚   | 锌   |
| 氮肥工业         |          |     |     |
| 氮            | COD      | pH  | 硫酸盐 |
| 钙            | 铁, 总量    | 磷酸盐 | TDS |
| 氯化物          | 硝酸盐      | 钠   | 锌   |
| 铬            | 有机氮      |     |     |
| 磷肥工业         |          |     |     |
| 酸度           | 氰化物      | 氮   | 硫酸盐 |
| 铝            | 铁        | pH  | TDS |
| 砷            | 汞        | 磷   | 铀   |
| 钙            |          |     |     |

COD 碳需氧量

TOD 总有机碳

TDS 总溶解固体

摘自 U.S.Environmental Protection Agency (1973)

### 1.3.2 固体垃圾的地面处置

〔固体垃圾的处置有几种管理类型：地面堆放、地下填埋、卫生填埋和封闭填埋。〔U.S. Environmental Protection Agency, 1977〕。地面堆放即露天的废物和废液的处置点，如果这些垃圾定期的用土复盖时则称为地下填埋。卫生填埋是指固体垃圾在每天堆放之后加以压实和复盖，以减少对环境的危害。如果采取措施来防止由垃圾产生的污染质向周围环境（特别是地下水）迁移的话，就称之为封闭填埋。〔Farb, 1978〕。封闭填埋一般是为剧毒垃圾设计的，并要进行连续的监测。

很少使用真正的卫生填埋，而垃圾地面堆放和地下填埋则是很普遍的。〔U.S. Environmental Protection Agency, 1977.〕。封闭填埋目前还处于实验阶段。最近几年，五分之四的封闭填埋是在新泽西州建立的，并已取得了管理的经验。〔Montague, 1982〕。在美国估计有两万个垃圾处置点是专门收容城市垃圾的。其中大多数是属露天堆放类型。它们很少有固定点，管理也不妥善，而且多数是收容工业垃圾的。〔U.S. Environmental Protection Agency, 1977.〕一些私人的工业垃圾堆放点的准确数字还不清楚。据估计其数目超过了城市垃圾填埋数。

因固体垃圾的地面处置而产生的地下水污染的机理主要是通过淋滤和淋滤液向下迁移到地下水这一过程而发生的。淋滤液的产生主要是由于降雨经固体垃圾的渗入、溶解和从垃圾中带出可溶组份的结果。液体、废液和由垃圾分解而产生的其他液体混合组成了淋滤液。各时期的淋滤量取决于垃圾内部的湿度。由于降雨是形成淋滤液的主要因素，因此一般认为位于湿润地区的垃圾将会产生大量的淋滤液。此外，湿润地区的地下水位一般比干旱或半干旱地区的浅，这样，在湿润地区，无复盖的地面垃圾点就成了污染地下水的主要危害。除非这类垃圾设计和安放得很恰当，否则，它不仅可直接容纳全部的降雨，还可收容附近的地表迳流。由于湿润地区的蒸发量相对较低，所以淋滤液的量是非常大的。

另一方面可设计封闭填埋和卫生填埋，这样废液不会渗出，地表迳流也不能流入，填埋处有很好的衬砌，可把所产生的淋滤液收集到一起，从这里排除。这些特点使得地下水被污染的危险率减至最低程度。但是绝大多数的垃圾点在管理上并不是这样做的。例如，在197年，大约18,500个城市的垃圾点中，只有20个是经过铺衬的，仅有60个有淋滤处理设施。〔U.S. Environmental Protection Agency, 1977.〕。至于工业垃圾处置点的情况，由于接近现场和获取资料受到限制所以了解的很少。但可预料，它们跟城市垃圾处置点是有些不同的。

各个垃圾点上所产生的淋滤液的组份显然是和那个位置上所存在的废物类型有关。U.S. Environmental Protection Agency〔1974〕曾调查和报导了一些城市垃圾处置点的淋滤组份。从城市固体垃圾的20个淋滤液样品的分析中可以看出，某些主要组分的浓度相差3—5个数量级。根据这个事实，对每个垃圾点分别进行研究就显得十分必要。Anderson〔1982〕对纽约州工业垃圾填埋点做过一个典型柱状含量的分析。Robertson等〔1974〕证实，俄克拉何马州有一个被淋滤污染的含水层，其中的地下水含有40多种的有机化合物。

Apgar和Satherwaite〔1975〕曾对一个遭受严重污染并作为城市供水用的大型含水层中淋滤液迁移的情况进行过研究。Kimmel和Braids于1974年在纽约长岛曾对一个复盖砂砾的垃圾填埋点中的淋滤液做过描绘，该淋滤液有300多米长50多米深。

U.S. Environmental Protection Agency在表2中，列出了某些工业废物中可能有害的组份。

### 1.3.3 通过井的废物排放

向地下注入废液的井，一般有两种，即浅井和深井。暴雨和用过的冷却水和污水一般是通过较浅的井注入到地下。有时这些井打在非饱和带中，但多数是打到饱和带，这就导致注入液直接进入地下水中。像这样的浅井在美国有几万个。

因石油工业、地热开发及其它来源产生的大量咸水一般是经深井（深度大约在300—2000

米)注入到盐水含水层内。有害化合物,石油化合物以及药物也经深井注入。

在美国,禁止用井将污水或工业废水注入到淡水含水层中。但有些文献也曾报导过,由于非法的向井中排放有害废液而造成了严重的地下水污染的情况〔U.S. Environmental Protection Agency, 1977〕。少数地区,主要在石灰岩和玄武岩地区,由于岩石中的空隙能使大量的液体通过,因此把未处理的污水和工业废水排入浅层淡水含水层的作法是很普遍的。这种情况下注入地下的工业废液的数量虽然较之其它类型是很小的,但仍应要求对这些注入液的

工业废物的成份

表 2

|           | 金属采矿 | 原生金属 | 药品 | 电池 | 无机化学 | 有机化学 | 农药 | 炸药 | 颜料 | 炼油 | 电镀 |
|-----------|------|------|----|----|------|------|----|----|----|----|----|
| 铵盐        |      | ×    |    |    |      |      |    |    |    | ×  |    |
| 铋         | ×    |      |    |    | ×    |      |    |    | ×  |    |    |
| 砷         | ×    | ×    | ×  |    | ×    |      |    |    |    | ×  |    |
| 石棉        |      |      |    |    | ×    |      |    |    | ×  |    |    |
| 钡         |      |      |    |    |      |      |    |    | ×  |    |    |
| 铍         | ×    |      |    |    |      |      |    |    |    | ×  |    |
| 生物废物      |      |      | ×  |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 镉         | ×    | ×    |    | ×  | ×    |      |    |    | ×  | ×  | ×  |
| 氯化碳氢化合物   |      |      |    |    | ×    | ×    |    |    | ×  |    | ×  |
| 铬         |      | ×    | ×  | ×  | ×    |      |    |    | ×  | ×  | ×  |
| 钴         |      |      |    |    |      |      |    |    | ×  | ×  |    |
| 铜         | ×    | ×    | ×  | ×  |      |      |    |    | ×  | ×  | ×  |
| 氟化物       |      | ×    |    |    | ×    |      |    |    |    | ×  | ×  |
| 乙醇废液      |      |      | ×  |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 炸药(梯恩梯)   |      |      |    |    |      |      |    | ×  |    |    |    |
| 易燃溶剂      |      |      |    |    |      | ×    |    |    | ×  |    |    |
| 氟化物       |      | ×    |    |    | ×    |      |    |    |    |    |    |
| 卤化溶剂      |      |      | ×  |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 铅溶剂       | ×    | ×    |    | ×  | ×    |      |    |    | ×  | ×  | ×  |
| 镁         | ×    |      |    |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 锰         |      | ×    |    |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 汞         |      | ×    | ×  | ×  | ×    |      |    |    | ×  | ×  |    |
| 钼         |      |      |    |    |      |      |    |    |    | ×  |    |
| 镍         |      | ×    |    | ×  | ×    |      |    |    |    | ×  |    |
| 石油        |      | ×    |    |    |      |      |    |    |    | ×  | ×  |
| 有机物, 混杂物  |      |      |    |    |      | ×    |    |    |    |    |    |
| 农药(有机磷酸盐) |      |      |    |    |      |      | ×  |    |    |    |    |
| 砷         |      | ×    |    |    |      |      |    |    |    | ×  | ×  |
| 磷         |      |      |    |    | ×    |      |    |    |    |    | ×  |
| 硒         | ×    |      |    |    |      |      |    |    |    |    |    |
| 锶         | ×    | ×    | ×  |    |      |      |    |    |    | ×  |    |
| 银         |      |      |    | ×  |      |      |    |    |    | ×  | ×  |
| 钒         |      |      |    |    |      |      |    |    |    | ×  |    |
| 铀         | ×    | ×    | ×  | ×  | ×    |      |    |    | ×  | ×  | ×  |

摘自 U.S. Environmental Protection Agency, (1977.)

有害物质做严格的控制和监测。

以前认为,由于吸附和生物递减分解作用,注入的废液通过孔隙介质的短距离运移后,就可清除污染。但近来的事实证明一些有机化合物和病毒只有在含水层中作长距离的迁移之后才能完全被消除。由于深部注入而引起地下淡水的污染机理有以下几种:(1)由于注入液的增加引起深部含水层中压力增加,这样可促使有毒物质通过废井、和未被发现的断层和裂隙带向上运动,(2)污水和咸水层中沿着井的套管外围向上运动,(3)由于意外水力压裂而引起的承压层越流。

## 1.4 本手册的编排方式

本手册包括三个主要部分,对应于三个复杂级别。这些部份包含预测地下水污染范围的(1)解析法,(2)半解析法和(3)数值法。每部份又由基础知识概述,方法的基本理论和几种精选的数值模型解组成。在各部分的最后,讨论了每种方法的优点和缺点。为了计算解析解,在附录中列出了简单的计算机程序(包括用户指南)。还有各种参数的成果表。并用野外实例说明这些解的恰当应用。

半解析法这部分提出三种野外问题。第一种要研究的野外问题是在一个具均匀流场的含水层内打任意数量的补给井和抽水井。第二种,扩展了第一种问题的适用范围,包括对有限半径的圆形补给蓄水池的适用性。第三种问题则叙述了在一个含水层中用一口生产井来描绘一污染浓度的分布。为方便用户应用这些方法,本手册还提供了一整套的计算机程序和用户指南,并通过不同复杂程度的几个问题来论证这些方法的应用。

数值法这部分,讨论了各种不同的近似方法,提出一系列有效的模型,并对其中一个模型的应用做了论证。最后,重点讨论了如何针对特定问题选择恰当的模型。

## 第二章 解 析 法

处理孔隙介质中溶质运移的解析法较易于应用。但由于所使用方程的复杂性,使得解析解一般只适用于径向流问题或者只限于研究区具有均匀流速的情况。在稳定和均匀流的介质中,对依赖于时间的溶质运移来说,大多数解析解是存在的。在以下各节里将讨论这样问题的基本方程式(2.1节),将描述某些一维和二维解(2.2和2.3节),通过简单实例说明这些解的应用(2.4节),最后将讨论解析解的优点和缺陷。

### 2.1 基本方程式

描述溶质运移的偏微分方程式通常写作:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (C v_i) - \frac{C' W^*}{n} + \sum_{k=1}^N R_k = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (1)$$

$$\text{式中, } v_i = \frac{-K_{ij}}{n} \cdot \frac{\partial h}{\partial x_j} \quad (2)$$

$C$  溶质浓度;

$v_i$  在  $x$  方向上渗流或孔隙水的平均流速;

$D_{ij}$  弥散系数张量;

$C'$  在源或汇流中溶质的浓度;

$w^*$  源或汇的单位体积流量;

$n$  有效孔隙度;

$h$  水头;

$K_{ij}$  水力传导系数张量;

$R_k$  在  $N$  种不同反应中第  $k$  种反应的溶质生成量;

$x_i$  笛卡儿座标。

按照 Grove[1976]的意见,当考虑平衡控制的离子交换反应时,方程(1)中求和项可等于

$$\sum_{k=1}^N R_k = - \frac{\rho_b}{n} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} \quad (3)$$

式中,  $\rho_b$  为固体的容积密度,  $\bar{C}$  为吸附在固体表面的物质浓度。

将(3)式代入(1)式,可得到吸附浓度  $\bar{C}$  和溶质浓度  $C$  有关的表达式。考虑到运移平衡,并假定吸附等温线可用一个线性可逆的方程来描述,则,

$$\bar{C} = K_d C \quad (4)$$

式中  $K_d$  是分配系数。

将 (3) 和 (4) 式代入 (1) 式可得:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (C v_i) - \frac{C' w^*}{n} = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (5)$$

式中,

$$R = \left[ 1 + \frac{\rho_b K_d}{n} \right] \quad (6)$$

参数  $R$  称阻滞系数。假设污染质速度  $v_c$ , 地下水流速  $v$ ,  $\rho_b$  和  $n$  为已知, 水流近似于一维流, 并且  $K_d$  可由阻滞方程式求得和 [Davis 和 Dewiest, 1966],

$$R = \frac{v}{v_c} \quad (7)$$

$K_d$  值可在实验室和野外测得。例如, Patterson 和 Spoel [1981] 用修正分批方法和 Pickens 等 [1981] 用一个径向注入的双示踪剂试验法, 在一些特定含水层中求得锶的分配系数。

如果需要考虑放射性衰变时, 那么方程 (1) 中的反应项  $\Sigma R_k$  还应包含一个处理该过程的表达式。放射性衰变反应可表达为 [Anderson 1979],

$$- \lambda \left[ C + \frac{\rho_b \bar{C}}{n} \right]$$

式中,  $\lambda = \ln 2 / \text{半衰期}$ , 称放射性衰变常数。将 (4) 式代入, 上面的放射性衰变反应的表达式变为:

$$- \lambda C \left[ 1 + \frac{\rho_b K_d}{n} \right] = - \lambda C R \quad (8)$$

将该式加入 (5) 式, 可得:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - \frac{\partial}{\partial x_i} (C v_i) - \frac{C' W^*}{n} - \lambda C R = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (9)$$

(1), (2), (5) 和 (9) 式中的  $v_i$  一般是时间和空间的函数。 $v_i$  值可由 (2) 式计算而得。不同时间水头  $h$  的分布可由下式的解求得:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ K_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right] = S_s \frac{\partial h}{\partial t} + W^* \quad (10)$$

式中,  $S_s$  为单位储水率。

对于 (9) 式的解析解用一般形式是不容易处理的。事实上, 对于各向异性系统来说是没有解析解或数值解的。这是一个十分困难的问题。因为和水力传导系数有关的天然孔隙介质常是各向异性的。就裂隙介质来说, 除非破裂的情况可认为是等效孔隙介质外, 也都属于各向异性。除了一些径向流问题之外, 几乎所有得到的解析解, 都属于具有均匀和稳定流的系统。也就是说, 在整个系统内和时间与空间相关的速度大小和方向是不变的。这样, 就水力传导系数而论, 就要求一个系统应该是均质的和各向同性的系统。

对于均质和各向同性介质的稳定态、均匀流来说, 在不考虑补给和排泄时, 方程 (9),

(2) 和 (10) 可变为:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] - v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - \lambda C R = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (11)$$

式中,

$$v_i = - \frac{K}{n} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 h}{\partial x_i^2} = 0 \quad (13)$$

通常 (11) 式中的弥散系数张量可进一步的简化。弥散是分子扩散和机械混合两个过程的结果。扩散是离子或分子组份在其水动力作用的影响下, 沿浓度梯度方向运动的过程。

Fick 第一定律表达为:

$$F = - D^* \frac{dC}{dx} \quad (14)$$

它描述了分子扩散的过程, 式中  $F$  为溶质的质量通量,  $D^*$  为扩散系数。在各种水溶液中, 对电解质来说, 扩散系数是已知的。对主要离子来说,  $D^*$  值可按 Robinson 和 Stokes (1965) 取得。在孔隙介质中, 有效扩散系数一般是小的。如果有效扩散系数用  $\bar{D}$  表示的话, 那么,

$$\bar{D} = w D^* \quad (15)$$

式中,  $w$  为小于 1 并由经验来确定的数。Perkins 和 Johnston [1963] 建议  $w$  值可近似为 0.707。Bear [1972] 认为  $w$  相当于粒状介质的弯曲度, 其值约为 0.67。

弥散过程的机械混合部分是因孔隙介质中渗流速度变化的结果。Scheidegger [1961] 假定弥散系数分量正比于渗流速度:

$$D_{ij} = \alpha_{ijlm} \frac{v_l v_m}{v} \quad (16)$$

式中,  $\alpha_{ijlm}$  为四秩张量,  $v_l$  和  $v_m$  为速度分量,  $v$  为速度矢量。方程 (16) 说明在各向异性系统内, 溶质运移问题解的复杂原因。事实上 De Josselin De Jong 在 1972 年就认为, 对于一般各向异性的情况, 弥散系数是一个无限秩张量。在均质、各向同性孔隙介质中, 如果  $x_1$  是在速度矢量  $v$  的方向上, 那么,  $v_1 = v, v_2 = 0$ 。根据 Bachmat 和 Bear [1964] 的意见:

$$D_{11} = \alpha_L v \quad (17)$$

$$D_{22} = D_{33} = \alpha_T v \quad (18)$$

$$D_{ij} = 0, i \neq j \quad (19)$$

式中,  $\alpha_L$  和  $\alpha_T$  分别为纵向和横向弥散度。 $\alpha_T$  的值通常比  $\alpha_L$  小一个数量级。最后, 水动力弥散系数可写成:

$$D_L = \bar{D} + \alpha_L v \quad (20)$$

$$D_T = \bar{D} + \alpha_T v \quad (21)$$

式中,  $D_L$  和  $D_T$  分别为沿水流方向和垂直于水流方向的弥散系数。方程 (20) 和 (21) 是根据上述步骤导出的, 它只是速度的函数。近年来, De Marsily [1982] 经过野外试验证实  $D_L$  和  $D_T$  还和时间有关, 弥散系数也是空间的函数。

如果忽略弥散系数与时间和空间的相关性, 并假定  $x$  轴为速度矢量的方向时, 对二维问

题来说, 方程 (11) 可简化为:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda RC = R \frac{\partial C}{\partial t} \quad (22)$$

对于无反应的溶解组份, (22) 式简化为:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (23)$$

当流线为弧形, 沿流线的速度值保持常值时, 对二维问题的处理, 一般是限定两个曲线座标方向  $S_1$  和  $S_2$ ,  $S_1$  是沿水流方向,  $S_2$  是垂直水流方向。这时方程 (23) 变为:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial S_1^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial S_2^2} - v_1 \frac{\partial C}{\partial S_1} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (24)$$

最后在稳定态均匀流条件下, 关于饱水、均质、各向同性介质中的一维对流——弥散方程, 可写成:

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (25)$$

### 2.1.1 初始条件和边界条件

解上述给定的任何与时间相关的偏微分方程都需要有合适的初始条件和边界条件。一般形式的初始条件为:

$$C(x, y, z, t) = f(x, y, z) \quad t = 0 \quad (26)$$

式中,  $f(x, y, z, t)$  为已知函数。通常假定整个研究区的浓度为常量。

可以给定三种取决于天然约束条件的边界条件:

1. Dirichlet 边界条件, 规定沿边界部分的浓度:

$$C = C_0(x, y, z, t) \quad (27)$$

式中,  $C_0(x, y, z, t)$  为边界特定部分上时间和空间的给定函数。

2. Neumann 边界条件, 规定在边界的确定部分上浓度的法向梯度:

$$\left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right] n_i = q(x, y, z, t) \quad (28)$$

式中,  $q$  为已知函数,  $n_i$  是方向余弦, 对不透水边界,  $q$  为零。

3. Cauchy 边界条件, 规定浓度和它的梯度:

$$\left[ D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - v_i C \right] n_i = g(x, y, z, t) \quad (29)$$

式中,  $g$  为已知函数。左边第一项为弥散通量, 第二项为对流效应。

## 2.2 一维问题

近来, Van Genuchten 和 Alves[1982]发表了关于对流——弥散溶质运移方程的一组较完整的一维解析解。这里, 我们将对一些实际应用的情况进行评论。

首先, 我们考虑一个一维模型, 该模型由具有渗流速度为  $v$  的稳定态均匀流的无限长、均质和各向同性的孔隙介质组成。在时间为  $t_0$  时, 我们向模型的一端注入一特定的化学成