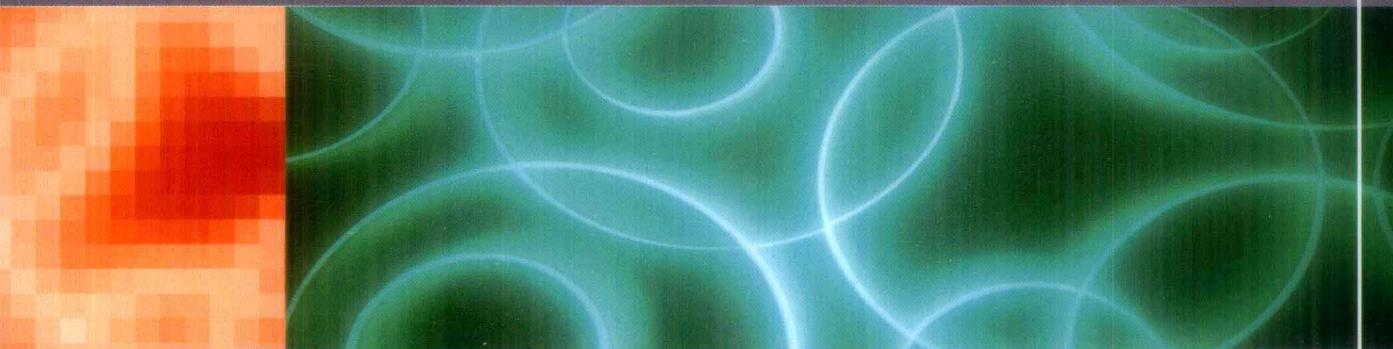


Mathematical Model of Flow and
Contaminant Transport in Porous Media



多孔介质渗流
与污染物迁移数学模型

仵彦卿 编著



科学出版社

多孔介质渗流 与污染物迁移数学模型

**Mathematical Model of Flow and Contaminant Transport
in Porous Media**

仵彦卿 编著

科学出版社
北京

内 容 简 介

多孔介质中水分、热量和物质迁移转化数学模型涉及诸多学科领域。本书系统地介绍了多孔介质渗流、传热、污染物迁移的基础理论，以及滨海地区含水层海水入侵规律的最新研究成果，包括基本概念和定律、数学模型及其解析解和数值解、有限元和有限差分 FORTRAN 程序，以及模型应用等。

本书可作为环境科学与工程、水文学及水资源、土木工程、力学、农学等学科的本科生、硕士和博士研究生的教材，以及科研人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

多孔介质渗流与污染物迁移数学模型 / 仵彦卿编著. —北京：科学出版社，2011

ISBN 978-7-03-032774-1

I. ①多… II. ①仵… III. ①多孔介质 – 污染物 – 迁移 – 数学模型
IV. ①X5

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2011)第 233037 号

责任编辑：罗 吉 尚 雁/责任校对：包志虹 张怡君

责任印制：赵 博/封面设计：王 浩

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮 政 编 码：100717

<http://www.sciencecp.com>

北京通州皇家印刷厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经 销

*

2012 年 1 月第 一 版 开本：787×1092 1/16

2012 年 1 月第一次印刷 印张：29 1/2

字数：700 000

定 价：88.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　　言

研究含水层(或含油气层)中流体(地下水、石油、天然气、CO₂ 储存)运动规律的一门学科称为渗流力学；研究生物体中流体流动规律的一门学科称为生物渗流力学；研究土壤中水分运动规律的科学称为土壤水动力学。运用连续介质方法研究多孔介质中的水分、热量以及物质迁移过程和数学模型是上述学科的基础，具有普遍意义。多孔介质渗流与污染物迁移数学模型广泛应用在土木、水利、力学、环境、交通、材料、化工、生命科学、纺织等诸多领域。该理论对于研究土壤-地下水污染物迁移转化规律和污染修复具有重要的科学指导和实际应用价值。

本书重点介绍多孔介质渗流与污染物迁移的基本概念、基本定律、基本方程、基本数学模型、简单数学模型的解析解、多孔介质渗流与污染物迁移的有限差分法和有限元法及其计算机源程序。全书共分 10 章。

第 1 章绪论，主要介绍为什么要学习这门课程，本课程的教学内容，如何学习这门课程，多孔介质渗流与污染物迁移数学模型在环境领域的应用，多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的研究进展与趋势。

第 2 章多孔介质环境系统的基本概念，从复杂的环境系统概念出发，介绍环境介质的多介质特性、多过程特性、多组分特性、多相流特性、多界面特性、多尺度特性以及多场耦合特性；土壤和含水层作为多孔介质的一种特例，介绍土壤和含水层的基本概念。地下水是土壤和含水层中的重要流体，介绍地下水的特性；土壤和含水层是一种复杂的多孔介质，具有非均质各向异性和非连续性，为了运用连续方法定量描述多孔介质流体和物质运动规律，引入多孔介质基本概念、流体连续介质与多孔连续介质的概念和方法，在宏观水平上定义多孔介质渗流和污染物迁移的物理量，这样就可以将复杂的非连续介质用多孔连续介质理论描述。

第 3 章多孔介质渗流的基本定律——达西定律，重点介绍多孔介质渗流的基本概念、多孔介质渗流的达西定律和达西原著、达西定律扩展、多孔介质渗透系数的确定方法、二维潜水含水层渗流分析与裘布依假设、二维承压含水层渗流分析，以及应用达西定律计算含水层中渗流量和水头等。

第 4 章饱和多孔介质渗流数学模型，介绍多孔介质体系中固体骨架的物理状态方程、流体的物理状态方程、流体在多孔介质中运动的连续方程(质量守恒原理)；依据多孔连续介质方法，以流体力学的控制体(即表征体元)为基本单元，推导多孔介质渗流基本微分方程和积分方程，依据含水层的特点，将多孔介质渗流基本微分方程进行推广，然后再介绍多孔介质渗流的定解条件和数学模型。

第 5 章非饱和多孔介质渗流数学模型，介绍毛细管压力和毛细管水头、给水度和持水度、含水率和饱和度等基本概念；以达西定律为基础，介绍非饱和多孔介质的渗流定

律、渗流基本微分方程以及数学模型等。

第 6 章多孔介质污染物迁移转化的数学模型。重点介绍污染物在多孔介质中迁移的物理过程，包括对流、弥散及吸附过程；化学过程，包括溶解与沉淀、酸碱过程、离子交换过程、氧化还原过程、络合作用、衰变作用等，以及生物降解过程及生物降解动力学方程等；介绍多孔介质污染物迁移基本微分方程、固-液相互作用发生链式衰减时的多孔介质污染物迁移方程、多孔介质多相多组分污染物迁移的一般方程、多孔介质中流体密度变化时的污染物迁移方程以及多孔介质污染物迁移数学模型等。

第 7 章多孔介质污染物迁移数学模型的解析解，主要介绍一些简单数学模型的解析解，包括一维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解、二维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解以及三维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解等。

第 8 章多孔介质传热过程与数学模型，在多孔介质污染物迁移过程中，往往伴随着热传输过程。多孔介质中的温度变化，不仅影响流体的流动速度，而且影响污染物的吸附性能、化学反应速率、生物的降解速率以及生物的繁衍。因此，多孔介质传热规律研究是研究多孔介质渗流和污染物迁移与转化数学模型的重要内容之一，事实上，在研究土壤与地下水问题时，由于土壤-含水层系统内存在复杂的生物地球化学过程，由地表向地下存在地温梯度，对于正常地温梯度的沉积盆地来说，地温梯度为 $30^{\circ}\text{C}/1000\text{m}$ 。在异常地温梯度的沉积盆地，地温梯度可以达到 $45^{\circ}\text{C}/1000\text{m}$ ，甚至更高，因此，土壤-含水层中温度变化，会影响岩土介质渗流和污染物的迁移与转化。近年来，在应对全球气候变化开展的 CO_2 地质储存研究中，地下热场会影响 CO_2 的迁移与储存。本书从多孔介质热量传输的基本定理出发，介绍多孔介质体系的热量传输连续方程、稳定渗流的热传输方程、运动坐标系下的热量传输方程；多孔介质内流体的热量传输方程包括对流作用引起流体的热量通量的变化量、热传导与热弥散作用引起流体的热量通量的变化量、固相与流体相的热交换作用引起流体热量通量的变化量、多孔介质中流体相的热传输方程、多孔介质内固相的热传输方程以及多孔介质热传输数学模型。最后介绍地源热泵系统中土层的热传输问题。

第 9 章滨海地区含水层海水入侵数学模型，滨海地区含水层海水入侵实质上是两种密度不同的流体在多孔介质中的运动，两种密度不同的流体相互作用的界面移动是这一问题研究的难点，本章重点介绍滨海地区含水层海水入侵的基本概念和数学模型。作为一种多孔介质渗流和污染物迁移的应用特例介绍，并附有 FORTRAN 计算机源程序。

第 10 章多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的数值解，重点介绍有限元方法、有限差分方法、有限差分法的 FORTRAN 计算机源程序、地下水中四氯乙烯(PCE)迁移有限元方法和 FORTRAN 计算机源程序。

本书的重点放在对多孔介质渗流和污染物迁移的物理现象描述、规律认识和数学模型的定量描述上，所以要求读者具有微积分、偏微分方程、向量等的基本知识。

本书是作者多年的教学实践和部分科研成果的总结，在上海交通大学环境科学与工程专业本科生教案和《多孔介质污染物迁移动力学》教材的基础上，修改和充实了大多数内容，并且增加了作者本人的部分研究成果。为了使学生更好地理解和学习这门课程，

并掌握这一领域国内外的研究状况，书中介绍了这一领域的研究历史、动态和研究展望；本书力求从基本概念、基本定律、基本方程和基本数学模型上，系统介绍多孔介质渗流、污染物迁移与转化、热量传输过程、数学模型及其应用；滨海含水层海水入侵数学模型和数值计算源程序；多孔介质渗流和污染物迁移的有限差分法和有限元法。为了使学生能够应用多孔介质渗流与污染物迁移数学模型解决实际问题，书中增加了一些研究实例和有限元和有限差分数值方法及其 FORTRAN 计算机源程序，读者可以应用这些程序进行实际问题的研究。

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其部分学生们的研究成果，形成了系统描述多孔介质渗流和污染物迁移理论的著作。

作者衷心感谢在这一领域作出贡献的学者，没有他们的研究和长期积累，很难形成这一领域理论和学科体系。作者也衷心感谢以各种方式对本书的编写提供过帮助的人，十分感谢我的学生们在许多部分提出了建设性的意见，感谢编辑同志对文字的润色和精心编辑。

感谢上海交通大学本科教材建设项目的部分资助、教育部博士点基金“多孔介质微生物淤堵与渗流关系试验研究(200802480049)”，以及国家环境保护公益性行业科研专项经费项目“区域地下水污染监测系统与风险管理关键技术研究——区域地下水污染监测系统构建技术方法和有效性评估(201009009-01)”的资助。

本书编写过程中疏漏之处在所难免，恳切读者批评指正。

仵彦卿

2011年9月于上海

目 录

前言

第1章 绪论	1
1.1 为什么要学习这门课程(Why do we study this course?)	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——揭示自然规律,重要的研究方法	1
1.1.3 工程实践的需要	2
1.1.4 环境健康与生态学研究的需要	2
1.1.5 水文及水资源研究的需要	2
1.1.6 地球科学的研究的需要	2
1.1.7 服装科学的研究的需要	3
1.1.8 岩土工程领域研究的需要	3
1.1.9 土壤水分与溶质迁移研究的需要	3
1.1.10 地下水科学与工程研究的需要	3
1.2 本课程的教学内容(What do we want to study?)	4
1.2.1 多孔介质环境系统的基本概念	4
1.2.2 多孔介质渗流的基本定律	4
1.2.3 饱和多孔介质渗流数学模型	4
1.2.4 非饱和多孔介质渗流数学模型	5
1.2.5 多孔介质污染物迁移转化的数学模型	5
1.2.6 多孔介质污染物迁移数学模型的解析解	5
1.2.7 多孔介质传热过程及数学模型	5
1.2.8 滨海地区含水层海水入侵数学模型	6
1.2.9 多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的数值解	6
1.3 如何学习这门课程(How to study this course?)	6
1.4 多孔介质渗流与污染物迁移数学模型在环境领域的应用	6
1.5 多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的研究进展与趋势	7
1.5.1 孔隙介质渗流研究进展	8
1.5.2 单裂隙渗流研究进展	11
1.5.3 裂隙系统渗流研究进展	11
1.5.4 岩溶介质渗流研究进展	14
1.5.5 多孔介质渗流与应力耦合研究进展	15
1.5.6 多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的研究趋势	21
第2章 多孔介质环境系统的基本概念	24
2.1 环境介质特点	24
2.1.1 多介质迁移与转化特点	25
2.1.2 多界面迁移的非线性特点	25

2.1.3 多组分特征.....	25
2.1.4 多过程特征.....	26
2.1.5 多相流特征.....	26
2.1.6 多尺度转化特征.....	26
2.1.7 多场耦合特征.....	27
2.2 土壤、含水层与地下水的基本概念.....	27
2.3 地下水的研究意义.....	32
2.3.1 地下水与水资源.....	32
2.3.2 地下水与地质过程.....	32
2.3.3 地下水与岩土力学.....	35
2.3.4 地下水与生态环境.....	37
2.4 土壤与地下水污染.....	37
2.5 土壤与地下水污染修复.....	41
2.6 多孔介质.....	42
2.6.1 多孔介质的定义.....	42
2.6.2 多孔介质的基本性质.....	43
2.7 连续介质方法.....	45
2.7.1 流体连续介质.....	45
2.7.2 多孔连续介质.....	47
2.8 有关渗流物理量的定义.....	49
习题.....	52
第3章 多孔介质渗流的基本定律.....	53
3.1 有关渗流的基本概念.....	53
3.1.1 渗透与渗流.....	53
3.1.2 渗透速度与渗流速度.....	53
3.1.3 渗透压强、测压高度、位置高度、测压水头及总水头.....	54
3.1.4 水力坡度和等水头线.....	55
3.1.5 流线与迹线.....	55
3.1.6 稳定流与非稳定流.....	56
3.1.7 有压流与无压流.....	58
3.1.8 缓变流与急变流.....	58
3.1.9 层流与紊流.....	59
3.1.10 一维流、二维流与三维流.....	59
3.1.11 流线折射定律.....	59
3.2 多孔介质渗流基本定律——达西定律.....	60
3.2.1 达西定律原著.....	60
3.2.2 达西试验数据分析(Glenn Brown, November 19, 1999).....	65
3.2.3 达西实验及其公式.....	69
3.2.4 变水头砂柱渗流试验.....	73
3.2.5 达西实验定律的适用范围.....	75
3.2.6 达西第二定律.....	75
3.3 达西定律的扩展.....	76

3.3.1 基本概念	76
3.3.2 均质各向同性多孔介质三维渗流定律	77
3.3.3 非均质各向同性多孔介质渗流定律	79
3.3.4 各向异性多孔介质渗流定律	83
3.3.5 均匀可压缩流体的渗透定律	85
3.3.6 达西定律在固-液两相流问题的扩展	86
3.4 多孔介质渗透系数的确定方法	87
3.5 二维潜水含水层渗流分析与裘布依假设	95
3.6 二维承压含水层渗流分析与导水系数	97
3.7 应用达西定律计算承压含水层的渗流量和水头	100
3.7.1 均质等厚承压含水层中地下水水流运动方程	100
3.7.2 均质变厚度承压含水层中地下水水流运动方程	101
3.7.3 非均质等厚度承压含水层中地下水水流运动方程	104
3.7.4 承压复杂含水层中地下水水流运动方程	110
3.8 应用达西定律计算潜水含水层的渗流量和水头	111
3.8.1 均质潜水含水层底板水平	111
3.8.2 均质潜水含水层底板倾斜	113
3.8.3 非均质层状潜水含水层	115
3.8.4 渗透性突变潜水含水层	116
3.8.5 渗透性渐变潜水含水层	117
3.8.6 复杂潜水含水层	119
习题	123
第4章 饱和多孔介质渗流数学模型	127
4.1 饱和多孔介质体系的物理状态方程	127
4.1.1 均质等温流体密度的状态方程	128
4.1.2 多孔介质骨架的物理状态方程	130
4.2 饱和多孔介质渗流连续性方程	131
4.3 饱和多孔介质渗流偏微分方程	134
4.4 考虑多孔介质颗粒运动的渗流方程	139
4.5 饱和多孔介质渗流方程的扩展	143
4.5.1 均质各向同性饱和多孔介质渗流方程	143
4.5.2 饱和多孔介质稳定渗流方程	143
4.5.3 非均质各向异性饱和多孔介质渗流方程	143
4.5.4 存在源或汇的饱和多孔介质渗流方程	144
4.5.5 各向同性饱和多孔介质的平面(xoy)二维渗流方程	144
4.5.6 饱和多孔介质中具有自由面的平面(xoy)二维渗流方程	146
4.6 饱和多孔介质渗流的积分方程	147
4.7 饱和多孔介质多组分渗流方程	148
4.8 饱和多孔介质渗流的定解条件	149
4.8.1 初始条件	150
4.8.2 边界条件	150

4.9 饱和多孔介质渗流数学模型	160
4.10 河间潜水含水层中地下水稳定渗流数学模型	163
4.11 地下水流向井的稳定渗流数学模型	167
4.11.1 地下水流向承压含水层中井的稳定流	167
4.11.2 地下水流向潜水含水层中井的稳定流	169
4.11.3 地下水流向越流含水层中井的稳定流	171
4.12 地下水流向井的非稳定渗流数学模型	175
习题	180
第5章 非饱和多孔介质渗流数学模型	183
5.1 非饱和多孔介质渗流的基本概念	184
5.1.1 含水量和饱和度	184
5.1.2 毛细管压力和测压水头	184
5.1.3 给水度和持水度	187
5.2 非饱和多孔介质渗流的基本方程	188
5.2.1 非饱和多孔介质渗流定律	188
5.2.2 非饱和多孔介质渗流的连续性方程	192
5.2.3 非饱和多孔介质渗流偏微分方程	192
5.2.4 以含水量为变量的非饱和多孔介质渗流偏微分方程	193
5.2.5 以毛细管压力水头为变量的非饱和多孔介质渗流偏微分方程	194
5.2.6 以水压强为变量的非饱和多孔介质渗流偏微分方程	195
5.2.7 考虑水和非饱和多孔介质压缩性的渗流方程	195
5.2.8 非饱和多孔介质渗透系数的确定	199
5.2.9 变饱和多孔介质中湿润相流体渗流方程	201
5.2.10 变饱和多孔介质中非湿润相气体的运动方程	202
5.3 非饱和多孔介质多组分渗流方程	204
5.4 非饱和多孔介质渗流的定解条件	205
5.4.1 初始条件	205
5.4.2 边界条件	205
5.5 非饱和多孔介质渗流数学模型	207
5.5.1 一维垂向非饱和多孔介质渗流问题	207
5.5.2 一维水平向非饱和多孔介质渗流问题	208
5.5.3 一维垂向饱和-非饱和多孔介质渗流问题	208
5.5.4 三维饱和-非饱和多孔介质渗流问题	209
习题	211
第6章 多孔介质污染物迁移转化的数学模型	213
6.1 概述	213
6.2 多孔介质污染物迁移过程分析	214
6.2.1 对流作用	215
6.2.2 污染物扩散的费克定律	216
6.2.3 分子扩散作用	218
6.2.4 机械弥散作用	219

6.2.5 沉淀与溶解.....	223
6.2.6 酸碱反应.....	224
6.2.7 络合作用.....	224
6.2.8 水解和置换作用.....	225
6.2.9 氧化还原反应.....	225
6.2.10 生物转化.....	226
6.3 多孔介质污染物迁移的对流-弥散方程.....	226
6.4 多孔介质的吸附与解吸附作用	233
6.4.1 等温线性吸附.....	233
6.4.2 等温非线性 Langmuir 吸附	235
6.4.3 等温非线性 Freundlich 吸附	236
6.4.4 动力学吸附(慢的、非平衡吸附).....	237
6.4.5 四氯乙烯(PCE)在砂质介质中的吸附过程.....	241
6.4.6 新型交联壳聚糖材料用于 Zn^{2+} 的吸附过程.....	248
6.5 多孔介质污染物的衰减与转化作用	250
6.5.1 发生在固体相中的源或汇项	250
6.5.2 发生在液体相中的源或汇项	251
6.5.3 存在点源污染时的点源或汇项	268
6.5.4 多孔介质中的非移动水效应	269
6.5.5 固-液相互作用发生链式衰减时的多孔介质污染物迁移方程	271
6.6 非饱和多孔介质污染物垂向一维迁移方程	271
6.7 多孔介质多相多组分污染物迁移方程	274
6.8 多孔介质中流体密度变化时的污染物迁移方程	275
6.9 多孔介质污染物迁移规律总结	276
6.10 多孔介质污染物迁移转化的定解条件	277
6.10.1 初始条件	277
6.10.2 边界条件	277
6.11 多孔介质污染物迁移转化的数学模型	285
6.11.1 一维半无限域含水层污染物迁移数学模型	285
6.11.2 一维半无限域含水层污染物迁移数学模型	286
习题	288
第 7 章 多孔介质污染物迁移数学模型的解析解.....	291
7.1 一维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解	291
7.1.1 半无限柱状多孔介质中污染物迁移数学模型的解析解	291
7.1.2 纵向弥散系数 D_L 的反演计算	298
7.1.3 无限域含水层中污染物迁移数学模型的解析解	304
7.1.4 含水层中污染物迁移稳态数学模型的解析解	306
7.2 二维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解	308
7.2.1 含水层中二维弥散问题的解析解	308
7.2.2 含水层中一维对流二维弥散问题的解析解	313
7.2.3 水平面二维渗流二维弥散问题的解析解	314

7.2.4 水平面一维渗流二维弥散问题的解析解	317
7.2.5 二维对流与二维弥散稳态问题的解析解	319
7.3 三维多孔介质污染物迁移数学模型的解析解	321
习题	323
第8章 多孔介质传热过程与数学模型	324
8.1 多孔介质热量传输的基本定理	324
8.2 多孔介质体系的热量传输方程	327
8.2.1 多孔介质热量传输的连续方程	327
8.2.2 多孔介质稳定渗流的热传输方程	330
8.2.3 运动坐标系下的多孔介质热量传输方程	330
8.3 多孔介质内流体的热量传输方程	331
8.3.1 对流作用引起流体的热量通量的变化量	331
8.3.2 热传导与热弥散作用引起流体的热量通量的变化量	332
8.3.3 固相与流体相热交换作用引起流体的热量通量的变化量	332
8.3.4 多孔介质中流体相的热传输方程	332
8.4 多孔介质内固相的热传输方程	334
8.5 多孔介质热传输数学模型	334
8.5.1 初始条件	334
8.5.2 边界条件	334
8.5.3 多孔介质热量传输数学模型及其解析解	335
8.6 多孔介质热量传输数学模型在地源热泵系统中的应用	336
8.6.1 土层中的热量传输数学模型	336
8.6.2 土层中热量传输有限元数值方法	336
8.6.3 土层中热传输数学模型校正	338
8.6.4 小型地源热泵工程短期运行地温场模拟	346
8.6.5 大型地源热泵系统中长期运行地温场模拟	350
8.6.6 结论	354
习题	356
第9章 滨海地区含水层海水入侵数学模型	357
9.1 滨海地区含水层海水入侵的基本概念	357
9.2 滨海地区含水层海水入侵的突变面数学模型	360
9.2.1 滨海地区含水层海水入侵的突变面数学模型的一般表述	360
9.2.2 Ghyben-Herzberg 近似解	363
9.2.3 滨海地区含水层海水入侵的剖面二维稳态突变面数学模型	364
9.3 滨海地区含水层海水入侵的对流-弥散方程	366
9.3.1 滨海地区含水层海水入侵的变密度渗流方程	366
9.3.2 滨海地区含水层海水入侵的盐分迁移方程	368
9.3.3 滨海地区含水层海水入侵的定解条件	368
9.4 滨海地区含水层海水入侵数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序	369
9.4.1 滨海地区含水层剖面二维海水入侵数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序 (在 MATLAB 平台上运行)	369

9.4.2 滨海地区含水层平面二维海水入侵数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序 (在 MATLAB 平台上运行).....	379
习题.....	388
第 10 章 多孔介质渗流与污染物迁移数学模型的数值解.....	389
10.1 多孔介质渗流数学模型.....	389
10.2 多孔介质渗流数学模型的有限差分解法.....	390
10.2.1 有限差分基本概念.....	391
10.2.2 二维稳定渗流数学模型的有限差分解法.....	391
10.2.3 二维非稳定渗流数学模型的有限差分解法.....	394
10.2.4 二维非稳定渗流数学模型的有限差交替迭代解法.....	399
10.2.5 非饱和土壤污染物迁移数学模型的有限差分解法.....	404
10.3 多孔介质渗流数学模型的有限元解法.....	407
10.4 多孔介质污染物迁移数学模型的有限元解法.....	422
10.4.1 多孔介质污染物迁移转化数学模型.....	422
10.4.2 多孔介质渗流数学模型的有限元解法.....	422
10.4.3 多孔介质污染物迁移数学模型的有限元解法.....	424
10.5 多孔介质污染物迁移数学模型的应用.....	426
10.5.1 有限元数值模型.....	426
10.5.2 有限元数值模拟结果.....	431
10.6 多孔介质污染物迁移数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序.....	443
10.6.1 二维饱和承压含水层稳定渗流数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序.....	443
10.6.2 二维地下水 PCE 迁移转化数学模型的有限元 FORTRAN 计算机源程序.....	446
主要参考文献	454

第1章 絮 论

1.1 为什么要学习这门课程(Why do we study this course?)

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：①科学问题的提出(new idea)，这是科学的研究的灵魂，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的研究积累。②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。③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)。④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。⑤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的研究的核心工具，它总结了前人大量的科学的研究成果，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，如达西定律的提出(Darcy, 1856)，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化的研究的基础，也标志着这门学科开始走向成熟。

1.1.2 学术研究的需要——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。数学模型作为科学的研究的重要工具，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、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。

1.1.4 环境健康与生态学研究的需要

生物体都是多孔介质，生物渗流力学就是研究生物体内的水分迁移、物质输运、人体血液压力分布等；人体水分迁移、病毒的迁移转化规律研究；人体内的热扩散与热分布及其与健康的关系研究；污染物进入人体的迁移转化过程及其与健康的关系；人体剂量模型和暴露模型的研究；污染物通过植物根系进入植物体内的迁移、转化、富积过程的研究；植物体中水分、养分和碳分迁移与转化。这门课程是研究这些问题的基础。

1.1.5 水文及水资源研究的需要

水文及水资源是水利工程中的基础学科，水文循环、水环境演化、水资源利用以及水利工程对水文循环的影响、水利工程的稳定性问题等，是水文及水资源学科研究的重要内容，而它的研究对象是流域水问题。国外将水科学研究描述为“from Hill to Ocean，简写为 H₂O”，意思是山区到海洋，即从流域角度系统研究水问题。在滨海地区过量开采地下水，导致海水入侵含水层，使得淡水资源减少；在陆地过量开采地下水，超出降水和地表水补给地下水的量，一方面导致地面沉降(我国 100 多个城市由于过量开采地下水而导致地面沉降，华北平原地下水过量开采严重)；另一方面抽出的地下水最终进入海洋，导致海平面上升，科尼科夫通过长期观测 46 个井地下水位变化，推算出全球从 1900 年到 2008 年间地下水开采量约为 4500km³，同期海平面上升 17cm，其中地下水开采导致海平面上升达 1.26cm。近十年来地下水开采量大幅度增加，2000 年到 2008 年间，全球地下水开采量约为 1300km³，在此期间海平面上升 2.79cm，其中地下水的贡献为 0.36cm。因此，研究地表水与地下水相互作用过程、机理与模拟，都涉及土壤、地下水、岩土介质，研究多孔介质渗流力学问题，是这一学科的重要方向。

1.1.6 地球科学的研究的需要

研究地质体内各种离子的迁移、矿产的形成(地质时期岩石中离子在水-热-力作用下的迁移与富积，形成各种矿产)、地震控制与预报(地下流体沿断层运动诱发地震、地应力变化使得地下流体压力发生异常改变，地下流体与岩体应力相互作用，可以进行地震控制与预报)、地球板块运动、石油天然气的开发以及各种地质过程，都涉及多孔介质渗流理论。

1.1.7 服装科学的研究需要

服装是人造材料，研究服装的舒适程度、高寒地区服装的保暖，需要研究服装材料的透气、湿度、温度分布和扩散过程，提供服装设计的理论基础，这里用的基础理论就是非饱和多孔介质渗流理论。

1.1.8 岩土工程领域研究的需要

岩土工程的研究对象就是岩土介质，岩土介质是典型的多孔介质。岩土工程是研究工程与岩土介质间的相互力学作用规律，提供工程稳定性评价和工程安全控制的一门应用学科。一门新的交叉学科——岩土水力学，是研究岩土介质渗流-应力应变-温度-生物化学耦合模型，分析岩土工程的稳定性问题，提出岩土工程设计方案。最近出现的生物岩土工程(*biogeotechnical engineering*)，是用快速淤堵多孔介质孔隙的微生物形成生物膜技术，用于岩土工程的防渗。在环境工程领域生物淤堵是有害的，需要去除生物淤堵物(如水处理中的膜污染)，而在岩土工程领域是要利用生物淤堵防渗。这里需要研究多孔介质微生物的淤堵机理、过程和定量化数值模拟。环境岩土工程是研究岩土工程对环境的影响和环境工程中的岩土工程问题，如垃圾填埋场的沉降-渗滤液(气)-热-生物化学作用过程；核废料深埋处置库中渗流-应力-热-化学过程耦合作用。地面沉降中变形-渗流耦合模型研究；天然坡体或人工边坡的变形破坏过程描述，需要建立岩土体渗流-变形耦合模型，以分析岩土体的变形破坏机理和过程。

1.1.9 土壤水分与溶质迁移研究的需要

土壤是典型的多孔介质，土壤是一种非饱和多孔介质，在非饱和土壤介质中存在水、气和土壤颗粒，即水、气、固三相，土壤中水分、养分、碳分迁移与转化规律的研究，是多孔介质渗流与污染物迁移数学模型研究重要内容。从环境角度研究土壤问题，我们关心的是污染物通过土壤的迁移与转化、土壤污染与植被、微生物的相互作用，提供土壤污染物的修复的理论基础，土壤污染与食品安全和生态风险，土壤污染对地下水的影响，土壤层中热能利用(地源热泵)，土壤中 CO_2 的储存与释放对气候变化的影响。这些问题的研究都涉及非饱和多孔介质渗流与物质迁移数学模型的基础理论。

1.1.10 地下水科学与工程研究的需要

狭义地下水是指潜水面以下饱和含水层的水，称为地下水(*groundwater*)；广义地下水是指地表以下土壤和含水层中的水，称为地下水(*subsurface water*)。大多数含水层属于多孔介质(除高度离散的裂隙和岩溶含水层外)。从水资源角度研究地下水时，涉及地下水在含水层中的运动(渗流)规律研究，地下水开采条件下含水层中水位变化、水质变化、地面沉降及其生态环境影响问题，地下水人工补给对含水层水位和水质的影响，地下水补给过程化学淤堵和生物淤堵对补给效率的影响等。从环境角度研究地下水，涉及天然条件下地下水与含水层相互生物地球化学过程研究，在人工开采条件下地下水与含水层相互

生物地球化学过程对水质的影响，污染物在含水层中的迁移与转化机理、过程及污染控制问题，地下水污染修复。这些问题的解决，需要多孔介质渗流和污染物迁移理论。

1.2 本课程的教学内容(What do we want to study?)

本书重点介绍多孔介质的渗流与污染物迁移的基本理论和部分应用问题，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进行有效的控制，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。

1.2.1 多孔介质环境系统的基本概念

介绍环境介质的定义和特点，包括多介质、多界面、多组分、多相流、多过程、多场耦合以及多尺度等特点。然而土壤、含水层与地下水是环境介质中的一部分，是最为复杂的环境介质，研究污染物在土壤-含水层中的迁移与转化，具有重要的科学意义和应用价值，因此，第2章介绍了土壤、含水层和地下水的有关概念。污染物在土壤-含水层中的迁移与介质的结构关系密切，用微观方法无法研究这一问题，必须从宏观平均化思想出发，将土壤、含水层概化为多孔介质，定义多孔介质的概念，运用连续介质方法来表述有关渗流的物理量。在此基础上，就可以运用连续介质思想研究污染物在多孔介质中的迁移与转化问题。

1.2.2 多孔介质渗流的基本定律

污染物在多孔介质中迁移的驱动力是渗流，渗流即流体在多孔介质的运动。多孔介质渗流定律是由法国科学家达西(1856)在室内进行砂柱水流试验，得出通过砂柱中水流规律的经验公式。第3章重点介绍达西定律(Darcy's law)、达西定律的适用范围、达西定律在不同性质的多孔介质中的渗流扩展；对于具有自由面的潜水含水层来说，渗流为三维流动，如果潜水流为缓变流，即潜水面曲面的曲率较小时，可以使用裘布依假设，将潜水流简化为平面二维渗流问题；第3章还介绍了二维承压含水层渗流问题及导水系数的概念；最后，介绍多孔介质渗流定律在含水层水头和单宽流量计算中的应用。

1.2.3 饱和多孔介质渗流数学模型

污染物在多孔介质中迁移模型的基础是渗流数学模型。第4章从介绍多孔介质体系中固体骨架的物理状态方程、流体的物理状态方程、流体在多孔介质中运动的连续方程(质量守恒原理)入手，依据多孔连续介质方法，以流体力学的控制体(即表征体元)为基本单元，推导多孔介质渗流基本微分方程和积分方程，依据含水层的特点，将多孔介质渗流基本微分方程进行推广；有了多孔介质渗流方程，然后介绍渗流数学模型中的定解条件，即初始条件和边界条件，再介绍多孔介质渗流数学模型、河间潜水含水层渗流数学模型的求解及渗流规律分析、地下水流向井的稳定流和非稳定渗流数学模型及其解析解。