

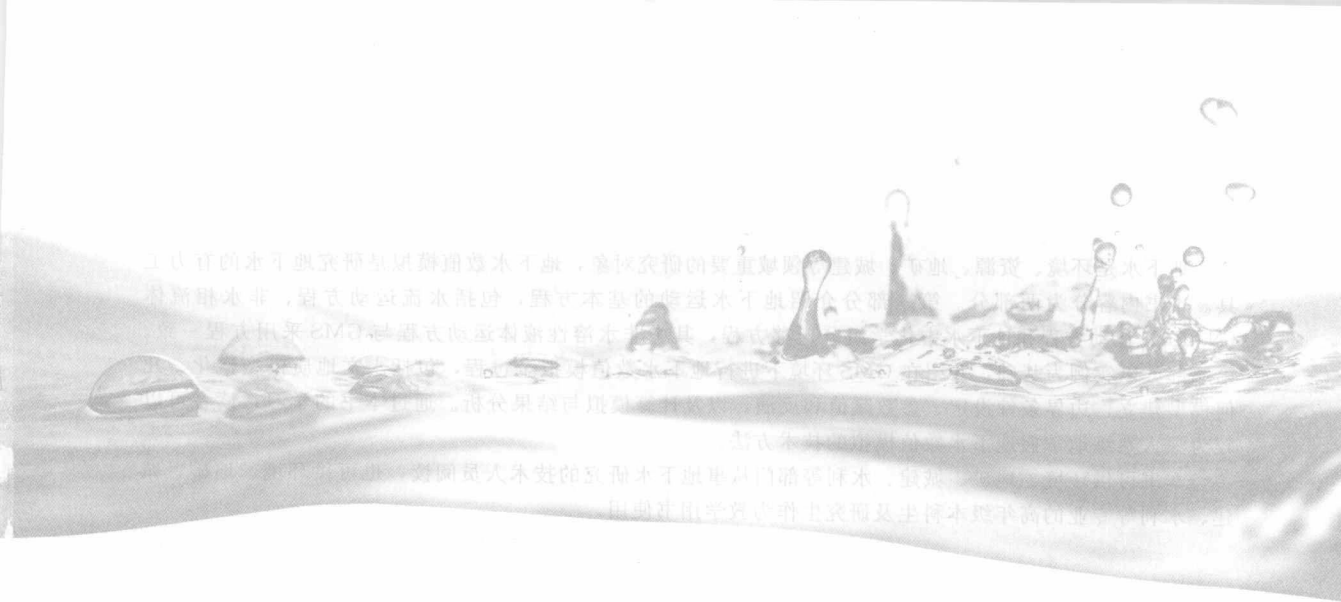


地下水数值模拟：
GMS 应用基础
与实例

易立新 徐鹤 编著



化学工业出版社



地下水数值模拟： GMS 应用基础 与实例

易立新 徐鹤 编著

ISBN 7-122-06912-9



化学工业出版社

元 10.00 价

· 北京 ·

地下水是环境、资源、地矿、城建等领域重要的研究对象，地下水数值模拟是研究地下水的有力工具。本书内容分为两部分。第一部分介绍地下水运动的基本方程，包括水流运动方程、非水相流体(NAPL)运动方程和地下水中化学组分迁移方程，其中非水溶性液体运动方程与GMS采用方程一致。第二部分以实例为基础，介绍在GMS环境下进行地下水数值模拟全过程，包括水文地质模型概化、几何模型建立、边界条件设定、参数赋值和反演，以及计算模拟与结果分析。通过本书的学习，读者可以较为深入熟练地掌握地下水数值模拟的技术方法。

本书可供环境、地矿、城建、水利等部门从事地下水研究的技术人员阅读，也可供环境、地矿、城建、水利等专业的高年级本科生及研究生作为教学用书使用。

图书在版编目(CIP)数据

地下水数值模拟：GMS应用基础与实例/易立新，
徐鹤编著. —北京：化学工业出版社，2009.9

ISBN 978-7-122-06312-0

I. 地… II. ①易…②徐… III. 地下水-数值模拟
IV. P641.2

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第122477号

责任编辑：满悦芝
责任校对：战河红

文字编辑：郑直
装帧设计：尹琳琳

出版发行：化学工业出版社（北京市东城区青年湖南街13号 邮政编码100011）

印装：北京市彩桥印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张11¼ 字数266千字 2009年8月北京第1版第1次印刷

购书咨询：010-64518888（传真：010-64519686） 售后服务：010-64518899

网 址：<http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有缺损质量问题，本社销售中心负责调换。

定 价：36.00元

版权所有 违者必究

前 言

地下水研究是较早使用数值模拟方法的领域之一，自 20 世纪 60 年代以来，有限差分法、有限单元法等数值计算方法相继在地下水资源评价和地下水化学组分迁移计算中得到应用，到目前，数值模拟已经成为地下水研究的重要工具，并成为一门独立的学科。

在地下水数值模拟的早期，研究者使用自己或别人开发的程序段进行计算，这些程序段虽然具有数值计算的核心功能，但繁琐冗长的数字准备和计算结果整理工作使得研究者把大量时间花费在计算辅助工作中，而诸如水文地质条件概化、边界条件确定等核心工作，反而被简化了。交互视窗式地下水数值模拟专门软件，可以方便地输入模型参数、分析计算结果，通过不断调试模型参数进行重复计算，真正使数值模拟工作成为“数值模拟实验”，以观测结果和计算结果拟合差为标准，不断校正模型，最后达到利用数值模拟实验方法研究地下水运动机理的目的。GMS (Groundwater Modeling System) 是一个地下水数值模拟软件的集成系统，系统把 MODFLOW、MODPATH、MT3DMS、FEMWATER、SEEP2D、UTCHEM、RT3D、MODAEM 等地下水数值模拟软件集成在同一环境下，辅以统一的模型构建、参数赋值、地质统计、结果分析等前、后处理功能，利于 GMS 使用者可以方便快捷地进行数值模拟计算。

本书的目的是给从事地下水数值模拟的技术人员提供一本软件学习的技术读本。要开展地下水数值模拟，必须对地下水运动和化学组分迁移的基本理论有一个明晰的掌握，对一些基本参数如渗透系数、储水系数、储水率等，更要清楚地知道其物理意义，因此，本书首先用单独一部分介绍地下水数值模拟的基本理论。在软件学习部分，大部分以本书编著者做过的数值模拟实际工程项目为案例，由浅入深，演示模型构建、参数输入、模型调试、结果分析各步骤的技术要点，使读者能够比较快捷地掌握地下水数值模拟技术。

在地下水石油污染修复计算中，非水相流体 (NAPL) 运动数值模拟是十分必要的，目前我国在此方面的工程应用案例很少，本书特意介绍了这一方面的内容，希望对 NAPL 迁移数值模拟感兴趣的读者有所帮助。GMS 功能强大，操作复杂，鉴于篇幅所限，书中介绍的软件使用技术，仅是要完成案例计算基本的和必需的计算过程和操作要点。系统中有关地质模型统计、块体模型生成、基于钻孔资料的三维模型生成、随机统计三维模型生成等模块和功能，本书没有专门章节介绍，感兴趣的读者可以查阅有关文献。

限于知识和水平所限，书中错误之处恳请读者批评指正。

编著者
2009 年 7 月

目 录

第一章 地下水运动的基本理论

第一节 地下水流运动基本方程	1
一、达西定律	1
二、基本微分方程	2
第二节 地下水化学组分运移基本方程	3
一、含水层中溶质运移的机制	3
二、污染物运移模型的控制方程	4
第三节 NAPL 迁移基本方程	9
一、土-水系统中石油污染物的化学过程	9
二、土壤非饱和带中油-水的驱替迁移	10
三、UTCHEM 模型方程	18
第四节 有限差分法简介	34
一、显式有限差分法	36
二、隐式有限差分法	37
三、交替方向隐式法 (ADI)	37
四、迭代方法	38

第二章 GMS 软件介绍

第一节 GMS 结构体系	39
第二节 GMS 功能特点	41
一、属性对象	41
二、工具	41
三、例题	44
第三节 GMS 界面介绍	45

第三章 MODFLOW 直接建模法

第一节 例题与几何模型建立	47
一、例题	47
二、软件初始化	48
三、网格的创建	48
第二节 变量的赋值	48
一、MODFLOW 模型的创建	48
二、全局变量的赋值	49
三、单元边界条件直接赋值	51
四、LPF 模块赋值	54
五、降雨入渗模块输入	54
六、排水模块输入	54
七、水井模块输入	56
第三节 检查、保存和运行模型	57
小结	58

第四章 MODFLOW 概念模型法

第一节 例题与几何模型建立	59
一、例题	59
二、输入模型底图	59
三、定义模拟范围界限	59
第二节 源汇项创建及参数输入	62
一、源汇项	62
二、定义分区面源抽水和大气降水补给	66
三、定义水文地质参数	67
第三节 网格剖分及高程	69
一、网格的剖分	69
二、网格高程插值	71
第四节 模型导入与运行	75
一、导入模型	75
二、定义各层类型	75
三、模拟运行与结果观察	75
小结	77

第五章 模型校核

第一节 例题	78
第二节 输入观测井	78
小结	82

第六章 模型参数反演

第一节 方法简介	83
第二节 参数区划法	83
一、定义区划带参数	83
二、指针值输入	84
三、启动参数估计引擎	86
四、输入初始水头	87
五、编辑参数	87
六、观察反演结果	88
第三节 试点法	89
一、调入 PEST 计算引擎	89
二、创建散点	89
三、输入散点集 HK 参数	89
四、运行和观察结果	90
五、观察渗透系数反演结果	93
小结	96

第七章 非稳定流模拟的数据管理

第一节 问题描述	97
一、例题描述	97
二、GMS 时间管理	97
第二节 模型参数的输入	98
一、大气降水入渗的输入	98
二、地下水开采数据	99
三、湖泊入渗的输入	102
四、输入给水率	102
第三节 MODFLOW 时间步长初始化	102
一、改变模拟类型	102

二、设置时间步长·····	102
第四节 模型运行与结果查看 ·····	103
一、模型导入与运行·····	103
二、非稳定流计算结果观察·····	104
小结 ·····	107

第八章 MODPATH

第一节 例题及模型创建 ·····	108
一、例题·····	108
二、定义孔隙度·····	108
第二节 井的粒子示踪 ·····	110
一、定义起始位置·····	110
二、流线和截获区的显示·····	111
三、观察粒子示踪随时间的变化·····	111
第三节 垃圾填埋场的粒子示踪 ·····	114
一、定义粒子束·····	114
二、设定显示颜色·····	116
三、流线长度和时间计算·····	117
四、通过区域代码设定截获区·····	117
小结 ·····	118

第九章 MT3DMS 直接建模法

第一节 例题描述及模型初建 ·····	119
一、例题描述·····	119
二、导入流场模型·····	119
第二节 创建溶质迁移模型 ·····	120
一、初始化 MT3DMS ·····	120
二、基础运移模块·····	120
三、对流和离散系数·····	122
四、源汇项组件·····	122
第三节 运行模型及查看结果 ·····	123
小结 ·····	124

第十章 MT3DMS 概念模型方法

第一节 立体描述及模型初建 ·····	125
----------------------------	-----

一、例题	125
二、模型基础参数的输入	125
第二节 模型参数的输入	127
一、定义含水层特征	127
二、入渗浓度的赋值	129
三、离散组件的输入	129
第三节 运行模型并观察结果	130
第四节 吸附和分解的模拟	131
一、模型参数的输入	131
二、保存和运行模型	131
三、观察计算结果	133
小结	134


第十一章 DNAPL 迁移模拟

第一节 问题描述及模型初建	136
一、问题描述	136
二、创建栅格	137
第二节 各个阶段的模拟	137
一、污染过程模拟	137
二、溶解过程	149
三、冲洗前的隔离井间示踪测试阶段	151
四、水冲洗处理阶段	156
五、表面活性剂冲洗处理阶段	157
六、水冲洗示踪测试 PITT (可选的)	162
小结	164

第十二章 GIS 模块介绍

第一节 未安装 ESRI ArcObjects	165
一、读取 shapefile 文件	165
二、查看 shapefile 文件	166
三、查看属性表	167
四、将 shapefile 转换为 2D 离散点	167
五、将 GIS 数据转化为 GMS 建立概念模型的属性对象	168
第二节 已安装 ESRI ArcObjects	170
一、创建概念模型和图层	170

二、启动 ArcObjects	171
三、读出数据.....	171
四、查看 shapefile 文件	171
五、图形文件转化为属性对象.....	172
小结.....	174



参考文献

第一章

地下水运动的基本理论

第一节 地下水流运动基本方程

一、达西定律

法国工程师达西于 1856 年通过实验获得达西定律关系式：

$$Q = K \frac{\Delta H}{l} \omega \quad (1.1)$$

或
$$v = \frac{Q}{\omega} = KJ \quad (1.2)$$

式中， Q 为渗流量， $L^3 T^{-1}$ ； ω 为过水断面面积，包括砂颗粒和孔隙所占面积， L^2 ； ΔH 为在渗流路径水头损失值， L ； l 为渗流路径长度， L ； J 为水力坡度， $J = \frac{\Delta H}{l}$ ，在实际

地下水流中，水力坡度往往各处不同，水力坡度表示为 $J = -\frac{dH}{dl}$ ； K 为渗透系数，当水力坡度为 1 时，渗透系数数值上等于渗透速度。在实际数值计算中， K 的单位往往取 m/d 或 cm/s 。 K 是有关含水层非常重要的水文地质参数，其数值随空间和方向变化。例如层状含水层这类各向异性含水层中，水平方向 K 值大于垂直方向。不同沉积类型含水层 K 值在空间上具有变化。

渗透系数不仅取决于岩石的性质，还与渗透液体的物理性质有关。同一种岩层，对水和油的渗透系数不同，热水和凉水的渗透系数也不同。对于地下水，渗透系数随温度变化很小，一般仅看作含水层的水文地质参数。在研究盐水、石油等液体渗透时，就需要考虑渗透系数随液体性质变化的情况。渗透率 k 表示介质通过液体或气体的能力，仅仅与岩层性质有关，渗透系数 K 与渗透率 k 具有如下关系：

$$K = \frac{\gamma k}{\mu} \quad (1.3)$$

式中， γ 为液体容重； μ 为液体动力黏滞系数。

式(1.2)中 v 表示渗透速度。渗透速度是一种假想速度。当流量不变时, 整个过水断面像水管一样全部为假想的水流充满时, 渗流就应以这种速度运动。渗透速度不等于含水层中实际的水流速度, 二者关系为 $v=nu$, 这里 n 为含水层孔隙度, u 为实际水流速度。

达西定律有一定的适用条件, 即当雷诺数在 $1\sim 10$ 时, 地下水运动服从达西定律。

二、基本微分方程

在达西定律和质量守恒定律基础上, 得到的地下水运动基本微分方程为:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(K_{xx}\frac{\partial h}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(K_{yy}\frac{\partial h}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(K_{zz}\frac{\partial h}{\partial z}\right)-w=S_s\frac{\partial h}{\partial t} \quad (1.4)$$

式中, K_{xx} 、 K_{yy} 、 K_{zz} 为 x 、 y 、 z 方向的渗透系数, LT^{-1} ; h 为水头, L ; w 为源汇项, 表示单位体积含水层在单位时间流出或者流入地下水的体积, T^{-1} ; S_s 为储水系数, 其物理意义为含水层地下水水头降低 (或者升高) 一个单位时, 由于含水层垂向压缩和地下水的弹性膨胀从单位体积含水层释放 (或者储存进去) 的水的体积。

(1) 初始条件 求解地下水稳定运动的微分方程时, 自变量不包括时间 t , 其定解条件只有边界条件, 不要求初始条件, 这一类问题称为边值问题。而当求解地下水非稳定运动时, 因变量和时间 t 有关, 因此不仅必须给出所有 $t\geq 0$ 时间内的边界条件, 还要给出开始时刻研究区域上所有点必须满足的初始条件, 这一类问题称为初值问题。方程(1.4)初始条件必须给出初始时刻区域内水头分布, 设水头 $H=H(x,y,z,t)$, 初始条件的表达式为:

$$H(x,y,z,t)=H_0(x,y,z,t) \quad (x,y,z)\in\Omega \quad (1.5)$$

式中, $H_0(x,y,z,t)$ 为某一已知函数; Ω 为渗流区域。

(2) 边界条件 第一类边界条件为已知水头的边界条件, 在边界的所有点上水头是给定的, 对于三维情况, 有

$$\begin{aligned} H(x,y,z) &= H_0(x,y,z) & (x,y,z)\in s \\ H(x,y,z,t) &= H_0(x,y,z,t) & (x,y,z)\in s \end{aligned} \quad (1.6)$$

式中, s 为三维区域的边界曲面。

含水层与河流、湖泊或者海洋之间直接接触的边界, 当有充分补给来源时, 可能满足第一类边界条件。第一类边界条件也称 Dirichlet 条件。

第二类边界条件为已知通量的边界条件, 即垂直于边界面的流量是给定的。表示为:

$$\begin{aligned} q_n &= qn = -q_b(x,y,z) & (x,y,z)\in s \\ \text{或} & & \\ q_n &= qn = -q_b(x,y,z,t) & (x,y,z)\in s \end{aligned} \quad (1.7)$$

式中, q 为边界面上沿法线方向的单位面积流入量; n 为边界外法线的单位矢量。第二类边界条件也称 Neumann 边界条件。在求解实际地下水问题时, 经常遇到一部分边界满足 Dirichlet 条件, 另一部分满足 Neumann 条件, 称为混合边值问题。

第三类边界条件为水头和水头的法向导数的组合在边界上为已知, 即

$$\frac{\partial h}{\partial n} + \lambda(x,y,z)h = f(x,y,z) \quad (x,y,z)\in s \quad (1.8)$$

式中, λ 和 f 均为已知函数, λ 称为交换系数。第三类边界条件也称为 Cauchy 条件。

第二节 地下水化学组分运移基本方程

一、含水层中溶质运移的机制

地下水中溶质的运移十分复杂,涉及多种因素,如温度、酸碱度、溶质浓度、微生物活动、植物的吸收等。因此,研究溶质在地下水中的迁移,应根据溶质特性和研究目的,选择主要因素,阐明溶质运移机制。溶质在地下水中运移的主要机制有对流、扩散、机械离散、吸附和解吸等。

1. 对流

地下水在含水层中运动,携带着溶质以地下水平均实际流速一起运动,这种溶质随着地下水的运动称为溶质的对流。溶质通过过水断面的对流量 J_c 正比于溶质浓度 C :

$$J_c = qC \quad (1.9)$$

式中, q 为单位时间法线方向通过过水断面的水量,称为水量通量。

根据达西定律:

$$J_c = -CK\text{grad}H \quad (1.10)$$

2. 分子扩散

分子扩散是物质在物理化学作用下,由浓度不一引起的物质运动现象,它是由不均一向均一发展的过程。不仅在液体静止时有分子扩散,在运动状态下同样也有分子扩散,既有沿运动方向的纵向扩散,也有垂直运动方向的横向扩散。因此,地下水与污水在不发生相对流动时,污水中的污染物亦会因为分子扩散作用而进入地下水中。由 Fick 定律,溶质的分子扩散通量 J_b 正比于浓度梯度,即:

$$J_b = -D_b\text{grad}C \quad (1.11)$$

式中, D_b 为分子扩散系数。

在含水层中,扩散作用进行得很慢。在研究地下水污染时,如果浓度梯度不是很大,这种扩散实际上是非常缓慢的。因此,如果迁移的距离大于数米或要求预测的期限小于100~200年,则在计算预测污染物的分布时,可以不考虑分子扩散作用。只有在研究过程的延续期很长(大于几百年)时,或在没有明显渗流的条件下研究很短距离的迁移时,或在研究放射性废物的污染问题时,才考虑分子扩散作用。

3. 离散作用

当溶质质点在孔隙介质中运动时,由于流体黏滞性和固体颗粒的存在,使得流场中各点运动速度的大小和方向都不相同。首先,单个孔隙通道中靠近颗粒表面处的流速为零,而通道中心处流速最大。其次,孔径大小不同的通道,其最大流速、平均流速各不相同。再次,流体在多孔介质中流动时,受到固体颗粒阻挡而发生绕行,流速有时也会出现其他方向的分支和分流,流线相对于平均流动方向产生起伏和偏离。人们把这种溶质质点在微观尺度上出于流速的变化而引起的相对于平均流速的离散运动,称为离散作用。离散作用的结果也是溶质浓度的平均化,但它是由于流速的大小和方向不同引起的,当流速适当大时,离散作用大大超过分子扩散作用。

由 Fick 定律,离散通量 J_a 为:

$$J_a = -nD_a \text{grad}C \quad (1.12)$$

式中, n 为孔隙度; D_a 为离散系数。

由于扩散和离散从效果上而言是类似的, 于是两个作用叠加, 合为一项称为水动力弥散系数, 记为 D , 即:

$$D = D_b + D_a$$

4. 过滤和吸附作用

MT3DMS 程序可以解决平衡控制的线性或非线性吸附、非平衡 (速度限制) 吸附, 以及反映放射衰减或近似表示生物降解的一阶反应。

溶质在含水层中运移时, 由于介质的吸附, 使某些组分数量减少。属于这方面的作用主要有如下几种。

(1) 机械过滤作用 由于介质孔隙大小不一, 在小孔隙或“盲孔”下, 地下水中的悬浮物、胶体物及乳状物被机械过滤而截留, 使水中这些物质的含量减少。

(2) 物理吸附作用 在孔隙介质中, 因为岩石颗粒具有表面能, 可以吸附水中的阳离子, 特别是高度分散的黏性土颗粒, 表面能很大, 可以吸附大量的离子。此外, 还会发生阳离子交换作用, 使水中某些离子减少, 而另一些离子增加。

(3) 化学吸附作用 污水中的某些离子被介质吸附进入其结晶格架中, 成为介质结晶格架的组成部分, 它不可能再返回溶液, 从而使水中这些离子浓度减小。

(4) 生物吸附作用 微生物在地下水中的运移情况, 一方面取决于微生物在地下水中生存时间的长短, 另一方面与岩石颗粒对其吸附性有关。由于岩石颗粒的表面能和静电力可以吸附大量的微生物, 因此, 生物 (尤其是细菌) 在地下水运移过程中浓度迅速降低, 其迁移的距离一般不超过数百米。

在对溶质运移进行数学描述时, 常将各种吸附作用综合在一起用一个系数来表示, 把它与水动力弥散区分开来。

5. 源和汇

源和汇可以分为面状分布的源汇和点状分布的源汇。面状源汇包括降水和蒸发。点状源汇包括井、渠和河流。取决于流体模型的边界的定水头和常水头也当作点状源汇处理, 因为它们在运移模型中的实际作用和井、渠或河流的作用是一样的。

对于源而言, 要给定源水的浓度。对于汇而言, 汇水中的浓度通常等于该点所处含水层中地下水的浓度, 不能被给定。但是有一种情况是特殊的, 即蒸发, 蒸发是假设仅有纯水从含水层中分离, 所以其浓度为零。

二、污染物运移模型的控制方程

1. 控制方程

控制方程用来描述污染物 k 在三维瞬态地下水流系统中的迁移和去向, 被写成:

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n \quad (1.13)$$

式中, θ 为地下介质的孔隙度, 无量纲; C^k 为物质 k 的溶解浓度, ML^{-3} ; t 为时间, T; x_i 、 x_j 分别为沿 x 、 y 坐标轴的距离, L; D_{ij} 为水动力弥散系数张量, $\text{L}^2 \text{T}^{-1}$; v_i 为渗流或线性孔隙水流速度, LT^{-1} , 它与单位流量或达西流量 q_i 有关, $v_i = q_i / \theta$; q_s 为单位体

积含水层源（正值）和汇（负值）的体积流量， T^{-1} ； C_s^k 为源汇流中物质 k 的浓度， ML^{-3} ； ΣR_n 为化学反应项， ML^{-1} 。

方程(1.13) 等号左边可以展开成两项，

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \theta \frac{\partial C^k}{\partial t} + C^k \frac{\partial \theta}{\partial t} = \theta \frac{\partial C^k}{\partial t} + q'_s C^k \quad (1.14)$$

式中， q'_s 为瞬态地下水量的改变速率， T^{-1} ， $q'_s = \partial \theta / \partial t$ 。

方程(1.13) 中的化学反应项包括了污染物消减和迁移过程中常规的生物化学和地球化学反应作用。考虑到化学反应只有两个基本类型，如液-固表面反应（吸附作用）和一阶速率反应，化学反应项可以描述为：

$$\Sigma R_n = -\rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - \lambda_1 \theta C^k - \lambda_2 \rho_b \bar{C}^k \quad (1.15)$$

式中， ρ_b 为地下介质的体积密度， ML^{-1} ； \bar{C}^k 为地下固相吸附物质 k 的浓度， MM^{-1} ； λ_1 为溶解项的第一反应速率， T^{-1} ； λ_2 为吸附项（固）的第一反应速率， T^{-1} 。

用方程(1.14) 和方程(1.15) 替换方程(1.13)，并为简单起见，去掉物质类别标注 k ，方程(1.13) 重新整理并改写成：

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s - q'_s C - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (1.16)$$

方程(1.16) 实质上是一个质量平衡的描述，也就是，任意给定时间的某一化学组分质量由于弥散、对流、源汇和化学反应等造成的流入和流出的质量差。

局部平衡通常被假定为不同吸附作用的过程（也就是，吸附作用对比于迁移时间足够快速）。当局部平衡假设（LEA）成立时，方程(1.16) 将被描述成如下形式：

$$R \theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s - q'_s C - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (1.17)$$

式中， R 为无量纲的延迟因子，定义为：

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \times \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \quad (1.18)$$

当局部平衡假设不适用时，吸附过程可以通过一阶动力学质量迁移方程来描述，如化学反应部分的讨论。

在上面描述的迁移控制方程中，仅有孔隙度是假设出来的。这里的孔隙度是指有效孔隙度，通常会比孔隙介质总的孔隙小，这反映了在孔隙中可能包含没有地下水渗流速度的非活动水的情况。有效孔隙度由于孔隙结构的复杂性，不能在野外容易地测出来。更合适的是，通常将孔隙度解释成集中参数，这在模型建立中给出了羽状迁移和观测的溶质积累效应最接近的描述。在一些案例中，像断裂的介质或极端不均匀孔隙介质，更适合使用双重孔隙度方法，即定义一个基本孔隙度，用于那些以对流为主要迁移方式的充满活动水的孔隙空间，再定义一个第二孔隙度，用于那些以分子弥散为主要迁移方式的充满非活动水的孔隙空间。在活动和非活动域的交流可以通过动力学质量迁移方程来定义，与用来描述非平衡吸附的方程相似。

迁移方程通过达西定律与流体方程相关：

$$v_i = \frac{q_i}{\theta} = -\frac{K_i}{\theta} \times \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (1.19)$$

式中, K_i 为渗透系数张量的主分量, LT^{-1} ; h 为水头, L 。

水头是通过求解三维地下水流动方程而得

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_i \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (1.20)$$

式中, S_s 为含水层储水系数, L^{-1} ; q_s 为方程(1.13)中定义的源汇项。

方程(1.19)和方程(1.20)中对水力渗透系数张量主分量的假定是, K_x 、 K_y 、 K_z 是沿着 x 、 y 、 z 轴的, 非主要部分(交叉项)即为零。这一假设与大多数常用的有限差分法地下水流动模型是相一致的, 包括 MODFLOW。

2. 对流

迁移方程中的对流项是 $\partial(\theta v_i C)/\partial x_i$, 描述了与地下水流速度相等的易混合的污染物的迁移。对于很多野外规模的污染物迁移问题, 对流形式占主要地位。为了测定对流, 使用一个无量纲的 Peclet 数, 定义为:

$$P_e = \frac{|v|L}{D} \quad (1.21)$$

式中, $|v|$ 为渗透速度矢量的绝对值, LT^{-1} ; L 为特征长度, 通常采用网格单元宽度, L ; D 为弥散系数, L^2T^{-1} 。

对流为主的问题中, 涉及浓度变化峰面问题, Peclet 数有一个很大的值。此时, Peclet 数取无限大。

对于对流为主的问题, 迁移方程的解通常受两种数值问题限制。第一种是数值离散, 其效果与物理离散相似, 但是是由截断误差造成的。当物理离散很小或是可以忽略时, 数值离散成为一个导致峰面外形消失的重要问题。第二种数值问题是人为振荡, 同样涉及到目标和超过目标。人为振荡是典型的高阶模式, 用来消除数值离散, 并使浓度锋面更明显。

MT3DMS 程序中包括几个解法的选择, 用以克服数值离散和人为振荡的问题。特征线方法对消除强对流为主的问题的数值离散方面是有效的。三阶 TVD 方法, 能使数值离散和人为振荡得到最小化。当数值离散不是明显问题时, 如在使用了精密模型网格, 或者物理离散较大的例子中, 标准有限差分法可以用来提高计算精度。

3. 离散作用

对于均质有孔介质, 根据 Bear 对水动力弥散系数张量 D_{ij} 的定义, 其各分量形式如下:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad [1.22(a)]$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad [1.22(b)]$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad [1.22(c)]$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad [1.22(d)]$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad [1.22(e)]$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad [1.22(f)]$$

式中, D_{xx} 、 D_{yy} 、 D_{zz} 为弥散系数张量的主分量, $L^2 T^{-1}$; D_{xx} 、 D_{yy} 、 D_{zz} 、 D_{yx} 、 D_{xy} 、 D_{zx} 、 D_{xz} 为弥散系数张量的交叉项, $L^2 T^{-1}$; α_L 为纵向弥散度, L ; α_T 为横向弥散度, L ; D^* 为有效分子扩散系数, $L^2 T^{-1}$; v_x 、 v_y 、 v_z 为流速矢量沿 x 、 y 、 z 轴的分量, LT^{-1} ; $|v|$ 为流速矢量的绝对值, LT^{-1} , $|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ 。

当速度矢量与任意一个坐标轴平行时, 所有的交叉项为零。

严格地讲, 对均质而言, 可以由两个独立的弥散度定义弥散张量, 方程[1.22(a)]~方程[1.22(f)]是适用的, 而对于非均质, 则需要五个独立的弥散度。在野外实地中, 通常很难获得五个独立弥散度。在实际操作中, 通常将运移模型假设为均质弥散系数也适用于非均质多孔介质。除了前面对均质弥散度的描述, MT3DMS 的运移模型还支持一种选择形式, 这种形式允许使用两个横向弥散度, 一个是水平横向弥散度 α_{TH} , 另一个是垂直横向弥散度 α_{TV} , 是由 Burnett 和 Frind 于 1987 年提出的:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad [1.23(a)]$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad [1.23(b)]$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad [1.23(c)]$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad [1.23(d)]$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad [1.23(e)]$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad [1.23(f)]$$

当两个横向弥散度相等时, 方程[1.23(a)]~方程[1.23(f)]等效于方程[1.22(a)]~方程[1.22(f)]。

在方程组(1.22)和方程组(1.23)中, 弥散系数张量的主分量以地下水渗透速度 v 的形式定义。当孔隙度呈空间变化时, 近似的弥散系数张量可以方便地定义为:

$$\hat{D}_{ij} = \theta D_{ij} \quad (1.24)$$

其中, 近似弥散系数 \hat{D}_{ij} 可以通过单位流量 q 的主分量获得, 而不是线性流速 v , 并且用 θD_{ij} 取代方程组(1.22)和方程组(1.23)中的 D_{ij} 。

4. 化学反应

用来模拟速率限制的吸附的一般方程式, 也可以用来模拟双重对流扩散模型中的动力学质量迁移。更多的复杂化学反应也可以通过加入反应程序包来模拟。平衡控制的线性或非线性吸附指的是溶解在地下水中的污染物(液相)和吸附在多孔介质上的污染物(固相)之间的传质过程。通常假定平衡存在于液相和固相浓度之间, 并且相对于地下水流速, 吸附反应足够快, 可以视为是瞬间的。在一定温度下, 溶解和吸附浓度之间的函数关系被称为吸附等温线。平衡控制的吸附等温线通常使用阻滞系数合并到运移模型。在