

地下水名著译丛



Applied Contaminant
Transport Modeling (Second Edition)

地下水污染物 迁移模拟 (第二版)

Chunmiao Zheng (郑春苗)
孙晋玉 卢国平 译

Gordon D. Bennett 著



高等教育出版社
Higher Education Press

地下水名著译丛

Applied Contaminant Transport Modeling

(Second Edition)

地下水污染物迁移模拟

(第二版)

Chunmiao Zheng(郑春苗) Gordon D. Bennett 著

孙晋玉 卢国平 译

高等教育出版社

图字:01-2009-0281号

Copyright ©2002 by John Wiley & Sons, Inc., New York.
All Rights Reserved. This translation published under license.

图书在版编目(CIP)数据

地下水污染物迁移模拟:第二版/郑春苗,贝聂特
(Bennett, G. D.)著;孙晋玉等译. —北京:高等教育出版社,2009.9

书名原文:Applied Contaminant Transport Modeling
ISBN 978-7-04-026363-3

I. 地… II. ①郑…②贝…③孙… III. 污染物-
迁移-数值模拟 IV. X5

中国版本图书馆CIP数据核字(2009)第094983号

策划编辑 陈正雄 责任编辑 谭燕 封面设计 张楠 责任绘图 尹莉
版式设计 范晓红 责任校对 胡晓琪 责任印制 韩刚

出版发行 高等教育出版社
社 址 北京市西城区德外大街4号
邮政编码 100120
总 机 010-58581000

经 销 蓝色畅想图书发行有限公司
印 刷 北京中科印刷有限公司

开 本 787×1092 1/16
印 张 27.25
字 数 600 000

购书热线 010-58581118
咨询电话 400-810-0598
网 址 <http://www.hep.edu.cn>
<http://www.hep.com.cn>
网上订购 <http://www.landraco.com>
<http://www.landraco.com.cn>
畅想教育 <http://www.widedu.com>

版 次 2009年9月第1版
印 次 2009年9月第1次印刷
定 价 58.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题,请到所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

物料号 26363-00

本译著获地质灾害防治与地质环境保护国家重点实验室开放基金
暨成都理工大学研究生教材建设基金资助

译者的话

Applied Contaminant Transport Modeling (2nd Edition) [《地下水污染物迁移模拟(第二版)》]是防治地下水污染、优化水质管理、研究水环境的理论上和实用上都很先进的一本专著。

原著第一作者郑春苗教授是当前国际水文地质界知名的学者。现任美国亚拉巴马大学地质科学系教授、北京大学工学院水资源研究中心讲座教授、主任。发表论文 100 多篇,内容涉及地下水模拟、含水层非均质性对溶质迁移的影响、地下水污染治理方案与监测网设计以及地下水可持续利用管理等。开发了地下水污染模拟标准软件 MT3D 和 MT3DMS,在 100 多个国家得到广泛使用。目前担任国际学术刊物 *Ground Water* 和 *Journal of Hydrology* 副主编,美国国家科研委员会(National Research Council)水文科学小组成员,国际水文科协(IAHS)国际地下水委员会主席(2009-2013)。荣誉包括美国地质学会 Fellow、美国地下水协会 1998 年度 John Hem 杰出贡献奖获得者、《纽约时报》中国环境与水问题专家、美国地质学会 2009 年度 Birdsall-Dreiss 杰出讲席奖获得者等。*Applied Contaminant Transport Modeling* 是郑春苗与美国水文地质专家 Bennett 教授合著的一本名著,一版再版,深得业界专家学者和广大读者的青睐。

众所周知,环境问题是目前全球人类最深切关注的热点问题之一,并竭力进行研究、探索以寻求改善途径。全球普遍发展工业,使我们的地球村面临着由此带来的一系列负面环境问题,例如:全球气候变暖,沙漠化和土地沙化面积日益扩大,冰川萎缩,以及环境负荷和污染日益加重,等等。水资源是人类赖以生存和可持续发展的必不可少的资源,水环境中尤以地下水水质最为脆弱,它一旦受到污染,不仅危害持续时间长,而且治理难度大,往往成为长期痼疾,因此,污染物在地下水中的迁移、时空分布规律以及有关的各种作用过程成为科学家们探索的主题。有鉴于此,*Applied Contaminant Transport Modeling* 全面系统地介绍了实用污染物迁移模拟的方法与技术,并辅以相关的案例以资印证,易读易学易用,适于读者研究野外实际情况及规模下污染物在地下水中的迁移。毫无疑问,原著的中文版对于我国起步不久而任重道远的地下水污染治理及资源管理工作具有很大的参考价值。

进入 21 世纪以来,我国面临的水资源的主要问题之一即为水环境持续恶化,全国污水排放量快速增加。大部分城郊的河湖已成为吸纳城市污秽的场所;乡镇企业的快速发展,也使被污染的水体不断向广大农村蔓延。严重的水质污染不仅使水资源无法

利用,且又使农产品受到污染,影响人民健康至巨。改善地下水污染现状、提高国民用水卫生安全已成为我国政府与民众迫切关注的问题。目前,我国正在逐步展开全国规模的地下水污染现状调查工作,原书的中文版正可为我国地下水污染防治工作提供方法和技术手段的支持。同时,也对推进我国生态环境保护事业的发展,提升水污染防治及管理工作水平有所裨益。

全书分三篇,共17章。第一篇的第2~4章主要阐述一些概念与迁移问题,如达西定律与对流迁移,弥散迁移与质量传输,化学反应与迁移。第5~8章系统地介绍了多种模型与模拟技术方法。第二篇共6章,着重论述各类模型的野外应用及其操作条件,行文既周详而又细致,并举实例印证,可以参考应用。第15~17三章为第三篇,作者探讨了变密度条件下的水流与迁移模拟、包气带水流与迁移模拟、地下水质量优化管理三项深进课题。综观全书,不仅注重概念模型建立,且清晰地阐述了与污染物迁移有关的物理学、化学及地质学的基本概念,文辞朴实,案例丰富实用,便于学习;并且不要求读者具有高深的数学知识背景,因此也适于作为相关工程技术人员的参考书。书中还介绍了目前国际上常用的污染物迁移模拟程序,并介绍了几处公开的模拟程序网站资源。

地质灾害防治与地质环境保护国家重点实验室与成都理工大学环境与土木工程学院为本书的翻译提供了必不可少的条件,成都理工大学研究生院也提供了多方面的支持。本书主要由孙晋玉、卢国平翻译,张强参加了第15~17章的翻译,吴礼舟参加了附录的翻译。衷心感谢郑春苗教授惠允将其再版原著由我们译成中文,以饕国内读者,并为本译著的出版惠予大力支持。本书得益于多位同行细致认真的评阅,衷心感谢万力、吴剑锋、熊豪品、文冬光、卢志明、许天福、张可霓、张颖琪、胡钦红、刘改胜、戴振学、郭卫星等同行。此外,成都理工大学环境与土木工程学院黄润秋教授、许模教授、许强教授、李天斌教授、杨立铮教授、卫迦教授、任天培教授、李行健教授对本书的翻译予以极大的鼓励、关心、支持与帮助。曾秀华完成了本书的图件植字。

在翻译过程中,为与原著保持一致,保留了原著大部分的物理量和单位符号。

污染物迁移模拟涉及的学科领域广泛,许多方面皆是当今的研究前沿,原著中有不少术语尚新,含义深奥,译文难免有欠缺典雅信达之处,恳请读者不吝指正。

孙晋玉 于成都理工大学

卢国平 于美国加州劳伦斯伯克利国家实验室

第 2 版前言

《地下水污染物迁移模拟(*Applied Contaminant Transport Modeling*)(第二版)》反映了污染物迁移理论与模拟技术的最新研究成果。第一篇“概念与技术”有以下几点显著变化。首先,我们深入讨论了含水层的非均质性对溶质迁移的影响,在此基础上加进双域质量传输法作为对传统对流-弥散模型的补充。其次,在化学反应迁移中增加了几种化学过程与反应的讨论。包括非平衡吸附作用以及有微生物参与的多组分动力学反应。另外,除第一版涉及的迁移模拟数值技术——欧拉法、拉格朗日法、混合欧拉-拉格朗日法之外,还增添有“TVD”(总变差减小, total-variation-diminishing)法,该法在许多问题中显示出其优点。最后,我们新加一章描述非平衡过程和多组分动力学反应问题及其求解策略,并提供一个研究例子说明自然稀化和生物降解过程。

在第二篇“野外应用”中,我们在讨论野外模型应用的几个重要课题时,加入了最新的成果,包括迁移求解技术、可视化与图像化用户软件、需要的数据、模型校准,以及不确定性分析。此外本篇还新添了一个例子,演示双域质量传输法模拟示踪剂在强非均质性含水层中的迁移。

本版另一个重大改变是新增了第三篇“深进课题”,它包括三章新的内容。前两章分别讨论变密度和变饱和度条件下水流与溶质迁移的基本概念和模拟方法。后一章介绍地下水质量优化管理,并讨论模拟-优化方法在治理系统设计中的应用。

本书大部分章末都列有深入阅读与思考题,以便作为研究生教材以及水文地质工作者、环境科学工作者及工程人员的参考书。与本书相配的模拟软件及辅助材料均可免费下载,读者可由此获得污染物迁移模拟的实践经验,并完成与实际问题相联系的课程项目。

致谢

在此我们对参与第二版中一章或数章评审工作的同事们深致谢意,他们是: Barbara Bekins, Prabhakar Clement, Rick Healy, Ken Kipp, Chris Langevin, Guoping Lu, Barbara Minsker, Roseanna Neupauer, Chris Neville, Henning Prommer, Claire Tiedeman, 以及 Patrick Wang 等。他们在迁移模拟不同领域的专业特长使本书受益匪浅。我们还要感谢 Diane Norris 和 Jim Donahoe 为本书第二版绘制并修订部分图件。最后,我们向亚拉巴马大学地质系与 S. S. Papadopoulos & Associates, Inc. 表示衷心的感谢,他们一贯的支持和所提供的专业工作环境对本书的编写来说是不可或缺的。

郑春苗(Chunmiao Zheng)

哥顿 D. 贝聂特(Gordon D. Bennett)

Tuscaloosa, Alabama

Bethesda, Maryland

第 1 版前言

我们在 20 世纪 90 年代初着手本书的编写工作,最初目的是想在一本书中融汇污染物迁移模拟理论与实践方面的内容。鉴于理论与实践存在显著的差距,往往要通过极大的努力才能在严密的理论与实用模型之间找到恰当的平衡。希望读者认同我们所选择的主题,以及优于教学形式的目标。

本书可以作为对污染物迁移模拟有兴趣的水文地质工作者、环境工作者,以及工程人员的一本自学指导书或参考书。书中尽力将概念与数值技术以平易、通俗的方式表达,因此使用本书不需要高深的数学知识。书中收入很多范例和研究实例,旨在帮助读者完成从理论学习到野外应用的过渡。

我们相信本书也适合作研究生阶段污染物迁移模拟课程的教科书或参考书。在美国,地下水相关专业的研究生教学大纲设有水流模拟课程;作为水流模拟课程的后续或扩展,可以开设污染物迁移模拟这门课程,并采用本书为教材。本书附有备选的软件光盘,学生可由此获得迁移模拟实践经验并完成涉及野外实际问题的课程项目。

最后,必须对本书所用的单位加以说明。书中从文献所引用的例子采用了英制与米制两种单位。我们一般采用原文的单位,而没有将单位统一为一种制式,因此书中有英制与米制两种单位。

致谢

我们非常感谢本书的评审人员:Daniel Feinstein, Mary Anderson, Charles Andrews, Mary Hill, Jiu Jiao, Christopher Neville, Eileen Poeter, Remy Hennem, 以及 Weixing Guo, 他们的评论及批评显著地提高了本书的水平。

我们衷心感谢亚拉巴马大学地质系的 Lewis Shumaker 为本书第三章至第十二章编制图件; S. S. Papadopoulos & Associates, Inc. 的 Pierre Bowins 为本书第一章和第二章编制图件;他们热情、耐心地绘制了大量图件,极大地帮助了本书内容的清晰表达。

我们感谢亚拉巴马大学地质系与 S. S. Papadopoulos & Associates, Inc. 多方面的帮助。我们与同事和学生们进行了多次热烈的讨论,本书从中获得很大裨益。

第一作者在此向自研究生时期就是其导师、顾问以及朋友的威斯康星(麦迪逊)大学的 Mary Anderson 表达感激之情,她对该作者持久的信任以及不懈的精神支持是本书得以出炉的主要动力。

郑春苗(Chunmiao Zheng)

哥顿 D. 贝聿特(Gordon D. Bennett)

Tuscaloosa, Alabama
Bethesda, Maryland

第 1 章 绪论	1
1.1 溶质迁移及模拟的作用	1
1.2 历程回顾	3
1.2.1 1960 年以前	3
1.2.2 1960 年以后	4
1.3 本书简介	6
1.4 关于计算机软件	7

第一篇 概念与技术

第 2 章 达西定律与对流迁移	11
2.1 粒子平均速度与运移时间	11
2.2 广义达西定律与地下水流方程	13
2.3 对流迁移	15
2.3.1 质量守恒定律与求解对流迁移的欧拉法	15
2.3.2 求解对流迁移的粒子追踪法	21
深入阅读与思考题	22
第 3 章 弥散迁移与质量传输	24
3.1 引言	24
3.2 微观弥散过程	24
3.2.1 水动力弥散机制	24
3.2.2 弥散迁移与分子扩散的类比	28
3.2.3 二维弥散通量与弥散系数	30
3.2.4 三维弥散通量与弥散系数	35
3.2.5 溶质迁移计算中的孔隙度	36
3.3 宏观弥散	37
3.4 建立对流-弥散方程	42
3.5 对流-扩散系统	46
深入阅读与思考题	48
第 4 章 化学反应与迁移	50

4.1	引言	50
4.2	平衡吸附	51
4.2.1	吸附等温线及迁移方程中的吸附项	52
4.2.2	有机化合物的吸附	56
4.2.3	离子交换	56
4.3	吸附动力学	58
4.4	一级不可逆反应	59
4.5	莫诺动力学反应	61
4.6	多组分动力学反应	62
4.6.1	快速反应	63
4.6.2	多元莫诺动力学反应	65
4.6.3	一级母-子连锁反应	65
4.7	双域系统中的化学反应	66
	深入阅读与思考题	68
第 5 章	数学模型及其解析解	70
5.1	溶质迁移的数学模型	70
5.1.1	控制方程	70
5.1.2	初始条件	72
5.1.3	边界条件	72
5.1.4	数学模型的解	74
5.2	解析解	74
	深入阅读与思考题	77
第 6 章	对流迁移模拟	80
6.1	引言	80
6.2	粒子追踪法	81
6.2.1	速度插值	81
6.2.2	追踪方案	89
6.2.3	空间离散的影响	95
6.3	捕获带刻画	99
6.3.1	二维稳定流	99
6.3.2	三维稳定流	101
6.3.3	非稳定流	102
6.4	运移时间的估算	102
6.4.1	污染物到达/穿透分布	103
6.4.2	清理时间	104
6.4.3	居留时间及地球化学演变	105
6.5	常用粒子追踪法计算程序	105
	深入阅读与思考题	106
第 7 章	对流-弥散迁移模拟	109

7.1	引言	109
7.2	欧拉法	110
7.2.1	有限差分法	110
7.2.2	有限元法	125
7.2.3	有限元法与有限差分法的比较	129
7.3	拉格朗日法	129
7.4	混合欧拉-拉格朗日法	131
7.4.1	特征法(MOC)	135
7.4.2	修正特征法(MMOC)	140
7.4.3	混合特征法	141
7.4.4	常用欧拉-拉格朗日法程序	111
7.5	总变差减小(TVD)法	142
	深入阅读与思考题	148
第8章	非平衡过程和化学迁移的模拟	150
8.1	引言	150
8.2	非平衡吸附	150
8.3	双城质量传输	152
8.4	多组分动力学反应	153
8.4.1	联立求解法	153
8.4.2	算子分离法	154
8.5	迁移与地球化学耦合模拟	155
8.6	常用化学迁移计算程序	157
8.7	实例:自然稀化的模拟	158
8.7.1	场地描述	158
8.7.2	模拟方法	160
8.7.3	数值模型	162
8.7.4	结果讨论	163
	深入阅读与思考题	164

第二篇 野外应用

第9章	模型应用的框架	169
9.1	模型应用的过程	169
9.2	确定目标	170
9.3	资料收集及概念模型的建立	170
9.4	计算程序的选择	171
9.5	建立污染物迁移模型	173
9.6	模型校准和敏感性分析	173
9.7	预测和不确定性	173
9.8	成功应用模型的关键	174

深入阅读与思考题	174
第 10 章 建立污染物迁移模型	176
10.1 起步工作	176
10.1.1 目前对水流系统的认识	176
10.1.2 模型的维度	176
10.1.3 模拟的范围	177
10.2 空间离散	177
10.2.1 水平节点间距	177
10.2.2 垂向离散	178
10.3 时间离散	181
10.4 初始条件	183
10.5 边界条件	184
10.5.1 指定浓度条件的使用	184
10.5.2 指定质量通量条件的使用	184
10.5.3 水流模型边界条件对溶质迁移的影响	184
10.5.4 水流与迁移边界条件的比较	185
10.5.5 水流与迁移模型的尺度效应	186
10.6 源和汇	186
10.6.1 源和汇的类型	186
10.6.2 源和汇的浓度	187
10.7 数据管理	188
10.7.1 预处理和后处理	188
10.7.2 地理信息系统(GIS)	190
深入阅读与思考题	190
第 11 章 模型的输入参数	191
11.1 迁移模拟需要的数据	191
11.2 水流参数	191
11.2.1 渗透系数	191
11.2.2 储水系数与给水度	194
11.3 溶质迁移参数	195
11.3.1 孔隙度	195
11.3.2 弥散度	196
11.4 化学参数	198
11.4.1 吸附常数	198
11.4.2 动力学反应速率	204
第 12 章 模型校准与敏感分析	207
12.1 模型校准的基本概念	207
12.1.1 校准过程	207
12.1.2 校准、验证和证实	207

12.1.3 非唯一性问题	208
12.2 模型校准的评估	208
12.2.1 拟合优度统计方法	208
12.2.2 评价模型校准应考虑的其他因素	210
12.2.3 校准结果的表达	210
12.3 试错法校准	213
12.3.1 规程及局限	213
12.3.2 案例研究	214
12.4 “自动”校准	216
12.4.1 校准能实现自动化吗?	216
12.4.2 自动参数识别技术	217
12.4.3 案例研究	221
12.5 敏感分析	224
12.5.1 敏感系数	224
12.5.2 敏感分析的规程	226
深入阅读与思考题	228
第 13 章 不确定性的处理	229
13.1 引言	229
13.2 不确定性的类型及来源	230
13.3 评价不确定性的方法	231
13.3.1 敏感分析	231
13.3.2 Monte Carlo 法	232
13.3.3 一阶误差分析	236
13.4 不确定性的管理	237
13.4.1 不确定性的缩减	237
13.4.2 在不确定条件下的决策	238
深入阅读与思考题	239
第 14 章 污染迁移模拟:实例	240
14.1 加拿大 Borden 地区某填埋场的污染迁移	240
14.1.1 场地描述	240
14.1.2 历史回顾	242
14.1.3 二维模拟	243
14.1.4 三维模拟	252
14.2 新泽西州某超级基金场地的治理方案评价	257
14.2.1 场地描述	257
14.2.2 治理目标	259
14.2.3 模拟办法	261
14.2.4 各种替代方案的评价	266
14.3 威斯康星州某农业场地含水层的污染承受性评估	270

14.3.1	场地描述	270
14.3.2	地下水流模型	272
14.3.3	粒子追踪与含水层承受性评估	273
14.3.4	迁移模拟及长期影响评估	273
14.4	双域质量传输法在密西西比州 MADE 场地的应用	280
14.4.1	场地描述	280
14.4.2	MADE-2 示踪实验	282
14.4.3	空间离散与边界条件	283
14.4.4	水力与迁移参数的确定	283
14.4.5	克里格水力渗透系数场的模拟结果	285
14.4.6	分形水力渗透系数场的模拟结果	287
14.4.7	两种方法的比较与讨论	289
14.4.8	双域质量传输模型中参数的敏感性	290

第三篇 深进课题

第 15 章	变密度条件下的水流与迁移模拟	295
15.1	引言	295
15.2	变密度条件下的水流方程	296
15.3	溶质浓度与水密度的关系	300
15.4	溶质迁移方程	300
15.5	序列求解过程	301
15.6	突变锋面法	303
15.7	常用变密度计算程序	304
15.8	研究实例:海水入侵模拟	305
15.8.1	背景资料	306
15.8.2	剖面模拟	306
15.8.3	三维模拟	309
	深入阅读与思考题	312
第 16 章	包气带水流与迁移模拟	313
16.1	引言	313
16.2	包气带水文学基础	313
16.3	不完全饱和状态下的水流方程	316
16.4	不完全饱和状态下的溶质迁移	318
16.4.1	基本迁移方程	318
16.4.2	不完全饱和条件对弥散迁移的影响	319
16.4.3	双域系统	319
16.5	扩展至气相	320
16.5.1	气-水分离	320
16.5.2	气相迁移	321

16.6	常用变饱和计算程序	323
16.7	示例	324
	深入阅读与思考题	326
第 17 章	地下水质量优化管理	328
17.1	引言	328
17.2	模拟-优化方法	328
17.3	优化技术	330
17.3.1	线性规划法	332
17.3.2	遗传算法	334
17.3.3	模拟退火法	337
17.3.4	禁忌搜索法	339
17.4	优化管理示例	341
17.4.1	一个假设的例子	341
17.4.2	野外实例	345
	深入阅读与思考题	351
附录 A	达西定律与变密度水流方程	352
A.1	达西定律	352
A.2	变密度水流方程	355
附录 B	地下水流流函数的应用	360
B.1	引言	360
B.2	流函数的基本概念	360
B.3	解析解	362
B.4	数值解	365
B.4.1	控制方程	366
B.4.2	边界条件	366
B.4.3	汇或源	367
B.4.4	例子	367
B.5	三维水流的流函数	368
B.6	总结	369
	致谢	369
附录 C	地下水模拟软件信息	370
C.1	如何获取并使用本书原著的配套软件	370
C.2	地下水模拟网站链接	370
	参考文献	372
	索引	412

第 1 章

绪论

万物皆数

毕达哥拉斯

1.1 溶质迁移及模拟的作用

本书旨在介绍地下水污染物迁移模拟的理论知识与实践,着重于野外实际问题的溶质迁移模拟和应用技术。虽然污染物在地下迁移时有不同的形式,但本书主要讨论溶质迁移问题:即在对流、弥散及化学反应等种种相互作用过程的影响下,污染物作为溶质在地下水中的运动及结果。

过去溶质迁移模型开发(solute transport modeling)和溶质迁移模拟(solute transport simulation)两个术语有着不同的含义。在本书中它们均指基于计算机并利用数值方法,获得溶质迁移偏微分方程或某些地下水流和溶质迁移耦合方程组的近似解的过程。虽然书中也讨论了溶质迁移方程的解析解,但重点是溶质迁移数值模型的理论及应用。

20 世纪 70 年代以来溶质迁移模拟领域进步很快。驱动其发展的原因有二:(1)对地下水水质的强烈关注(反映在日益严格的治理和保护标准上)引发的信息需求,迁移模拟能最好地满足这一需求;(2)飞速发展的计算机技术使得工程人员与水文地质工作者可以对野外项目进行模拟。功能强大的台式机的面世,数值求解技术软件的开发,数据处理以及图形显示等辅助软件的发展,都对该过程起到了推动作用。

进行地下水流模拟需要地质学与地下水动力学方面的知识,同时还需要掌握数值模拟方法。当加上溶质运动问题时,复杂程度会增加一个数量级。一些满足解决水力学问题的水流模型其分辨率往往不能满足迁移问题的需要;在溶质迁移控制方程中需要表示出化学、物理化学、生物化学机制,还需要建立量化这些机制的参数;此外,选择适用于野外迁移问题的计算方案也比单纯的水流模拟复杂得多。

对于几何形态简单、参数分布均匀的体系,研究其中诱发溶质迁移的独立作用过程已十分繁杂。而野外实际问题中这些过程的相互作用往往比单独作用更为重要;野外问题的模型通常是三维的,边界条件非常复杂;其中的关键参数往往会随空间变化,在

一些情况下甚至会随时间变化。随之相伴的复杂性时常被作为避开溶质迁移模拟的借口；实际上，这也意味着迁移模拟是获得有意义结论的唯一途径。已有的迁移方程解析解通常考虑迁移参数均匀的简单流场中一个或两个主要作用过程。相比之下，溶质迁移模拟至少可以近似地同时考虑若干个主要控制过程；对于复杂几何边界及复杂参数分布问题，模拟是唯一有效的计算方法。

溶质迁移模拟确实是一项费力耗时的的工作，在资料不足的情况下需要对相关作用过程及参数做出假定。但是溶质迁移问题的求解通常更为费力耗时，每次试算都包含假定条件；在计算一个或两个迁移过程时，实际上对所涉及的其他相关条件已进行了隐性的假定。

计算也同样是不能避免的。人们常常提出定量的溶质迁移问题。例如：某一点溶质的最终浓度是多少，某点的浓度在何时达到某一指定水平，治理方案能否在预定时间达到预期的浓度降低目标；又比如，重现某污染事件，并估计人群暴露于某污染物的浓度水平及时间。定性研究不能解决这些问题；只有通过计算才能够获得有意义的答案。在一些情况下，即便只要求定性的解，也需要通过计算认识迁移系统后，才能给出答案；模拟是最有现实意义的计算方法。正是因为以上这些原因，我们赞同 Bredehoeft 和 Hall(1995)的评论“我们无法理解那些很少进行模拟的顾问专家”。

溶质迁移问题的复杂性转化为分析过程中的不确定性，并最终传播到计算结果。描述主要过程的参数往往具有不确定性；在某些情况下这些主要过程本身，其相对重要性或数学公式化过程也包含不确定性。这些不确定性时常也被作为避开模拟工作的理由；但实际上模拟是认识这些难题的唯一现实手段。为了认识不同作用过程相对重要程度的不确定性，可以选择性地逐一弱化或排除这些作用过程，并在试模拟中比较计算结果与观测值。基于模拟的参数估计技术可以最为有效地控制参数的不确定性；不确定性对计算结果及工程决策的影响可以通过参数不确定范围内的一系列模拟结果来认识。

模拟工作最主要的作用不是进行预测计算，而在于更深入地认识调查过程。在理想情况下，溶质迁移研究应该被看做是识别各类主要作用过程的持续努力，并最终在概念模型中全面反映这些作用及其相互影响。模拟为定量表示概念模型提供了一个平台，由此可以检验假说是否与理论及实测数据吻合。在迁移的调查研究中，我们发现化学数据能指示水流状况，地质信息能揭示主要化学反应的内因，而水力数据能反映地质结构的线索。只有通过模拟才能把这些主要作用相结合，才能充分评价这些解释是否合理。最后需要指出，溶质迁移课题涉及的专业技能需要许多具有不同背景知识的人员。模拟提供了一个定量的框架全面而集中地发挥这些专长，但是应确保不同学科的概念与解释协调统一。

溶质迁移课题采用团队研究的方法，但如何最好地协调运用各种专长呢？能否仅由擅长数值计算、精通软件、数据处理等诸如此类工作的人员组成研究团队？或者，水力学、地质学、化学等各个方面的专业人员是否也需要掌握模拟工作需要的数学和计算机技能？后者似乎更为理想，因为模拟不仅仅涉及数值分析与计算机技术，更需要的是融合各个学科的知识来认识物理现实。实际工作中折衷的做法是常由团队中数学知识丰富、计算机技术娴熟的成员负责主要模拟工作。“模拟者”必须对各个分支学科有深入理解，各个学科的专家完全了解模型、熟知模型是如何表示相关过程的，而且团队成