

地下水污染模拟预测评估 工作指南

2019年9月

目 次

第一章 总 则	1
1.1 编制目的	1
1.2 适用范围	1
1.3 编制依据	1
1.4 术语与定义	1
1.5 指导原则	2
1.6 组织编制单位	3
第二章 工作内容和流程	4
2.1 工作内容	4
2.2 工作流程	5
第三章 地下水污染概念模型构建	6
3.1 工作目标确定	6
3.2 资料收集	6
3.3 水文地质条件概化	6
3.4 污染特征概化	8
第四章 地下水污染现状模拟	13
4.1 模型选择	13
4.2 解析解模型应用	15
4.3 数值模型构建与校验	15
第五章 地下水污染趋势预测	24
5.1 预测场景设计与评估结果分析	24
5.2 不确定性分析	27
5.3 模型完善	27
第六章 地下水污染模拟预测评估技术成果	28
6.1 报告文字	28
6.2 报告图件	29
6.3 模型文件	30
附录 A(资料性附录) 资料需求与技术方法	31

附录 B (资料性附录) 地下水数学模型	41
附录 C (资料性附录) 地下水模型参数	49
附录 D (规范性附录) 评估成果表达示例	59

地下水污染模拟预测评估工作指南

第一章 总 则

1.1 编制目的

为贯彻落实《水污染防治行动计划》《全国地下水污染防治规划（2011-2020年）》《地下水污染防治实施方案》（环土壤〔2019〕25号），推进我国地下水污染防治工作，增强地下水污染模拟预测评估工作的科学性和规范性，根据《中华人民共和国环境保护法》《中华人民共和国水污染防治法》《中华人民共和国土壤污染防治法》及相关法律、法规、标准，编制《地下水污染模拟预测评估工作指南》（以下简称指南）。

1.2 适用范围

本指南适用于地下水污染概念模型构建、地下水污染现状模拟以及地下水污染趋势预测评估等。

1.3 编制依据

本指南引用了下列文件或其中的条款。凡是未注明日期的引用文件，其最新版本适用于本指南。

HJ 338 饮用水水源保护区划分技术规范

1.4 术语与定义

下列术语与定义适用于本指南。

地下水污染源：人类活动影响下，能够引起地下水污染的污染物来源或活动场所。

地下水污染受体：地下水污染潜在影响的功能水体、人群或生物类群。

地下水污染途径：污染物由污染源进入地下水系统，向污染受体迁移的路线或通道。

地下水污染物迁移转化过程：污染物在地下水中的物理迁移过程和生物地球化学转化过程的总和。

地下水污染概念模型：对评估区域的水文地质条件及地下水污染特征进行识别、定性判定、以及适度简化和概括，用文字、图、表等方式加以描述的形式。

地下水数学模型：用数学关系式来刻画一定的物理规律和表征系统内变量间的数量关系。根据模拟主体不同，分为地下水水流运动模型和地下水溶质运移模型两种类型。

解析法：用解析式对地下水运动方程和溶质运移控制方程进行求解的方法。

数值法：用离散化方法对数学模型微分方程求取近似解的方法。主要包括有限差分法和有限单元法等。

1.5 指导原则

(1) 科学性原则：地下水污染模拟预测评估工作应建立在对地下水运动条件和地下水污染特征的全面系统分析之上，兼顾土壤、地表水、地下水等相关环境介质，合理构建概念模型，准确反映地下水污染源汇特征和污染物迁移转化规律，保证模拟预测评估结果科学可靠。

(2) 针对性原则：针对评估工作目标、具体水文地质条件、评估区地下水污染特征，选择适当的模拟预测评估技术方法，构建以目标为导向的地下水污染模拟预测评估模型。

(3) 渐进性原则：地下水污染模拟预测评估工作应采取逐

级推进的工作方式，由简单模型应用过渡到复杂模型，随着地下水环境信息资料完备程度的提高，不断完善和更新地下水污染模拟预测评估成果，以便更有效地指导地下水污染防治工作。

1.6 组织编制单位

本指南由生态环境部土壤生态环境司、水生态环境司组织，生态环境部环境规划院、生态环境部土壤与农业农村生态环境监管技术中心和南方科技大学等单位起草编制。

第二章 工作内容和流程

2.1 工作内容

地下水污染模拟预测评估工作基于地下水环境调查与评价工作成果，开展地下水污染概念模型构建、地下水污染现状模拟以及地下水污染趋势预测工作。

2.1.1 地下水污染概念模型构建

地下水污染概念模型构建工作旨在通过收集相关资料，分析地下水环境调查与评价结果，概化评估区水文地质条件，明确评估区含水介质及地下水流特征；概化评估区地下水污染特征，明确污染源、污染途径、污染受体之间的关系，识别污染物迁移转化所包含的过程和代表因子，形成地下水污染概念模型。

2.1.2 地下水污染现状模拟

依据地下水污染概念模型，确定模拟预测评估工作重点和定量分析方法，依据渐进式工作原则，选择合适的数学模型工具进行地下水水流特征模拟和污染物迁移转化过程模拟，并校验模型的可靠程度。具体工作内容包括：模型工具选择、模型解析法应用、数值模型创建及校准验证。

2.1.3 地下水污染趋势预测

根据评估目标，合理设计模拟场景，利用校验可靠的模型开展地下水污染趋势预测，定量表达地下水污染发生发展的趋势，进而评估污染扩散的速率和范围、污染受体的受影响程度、不同

污染防治手段的环境效益等。具体工作内容包括：场景设计及预测结果分析、不确定性分析、模型完善计划等。

2.2 工作流程

地下水污染模拟预测评估工作主要包括地下水污染概念模型构建、地下水污染现状模拟、地下水污染趋势预测、技术报告编写等步骤。具体工作流程见图 1。

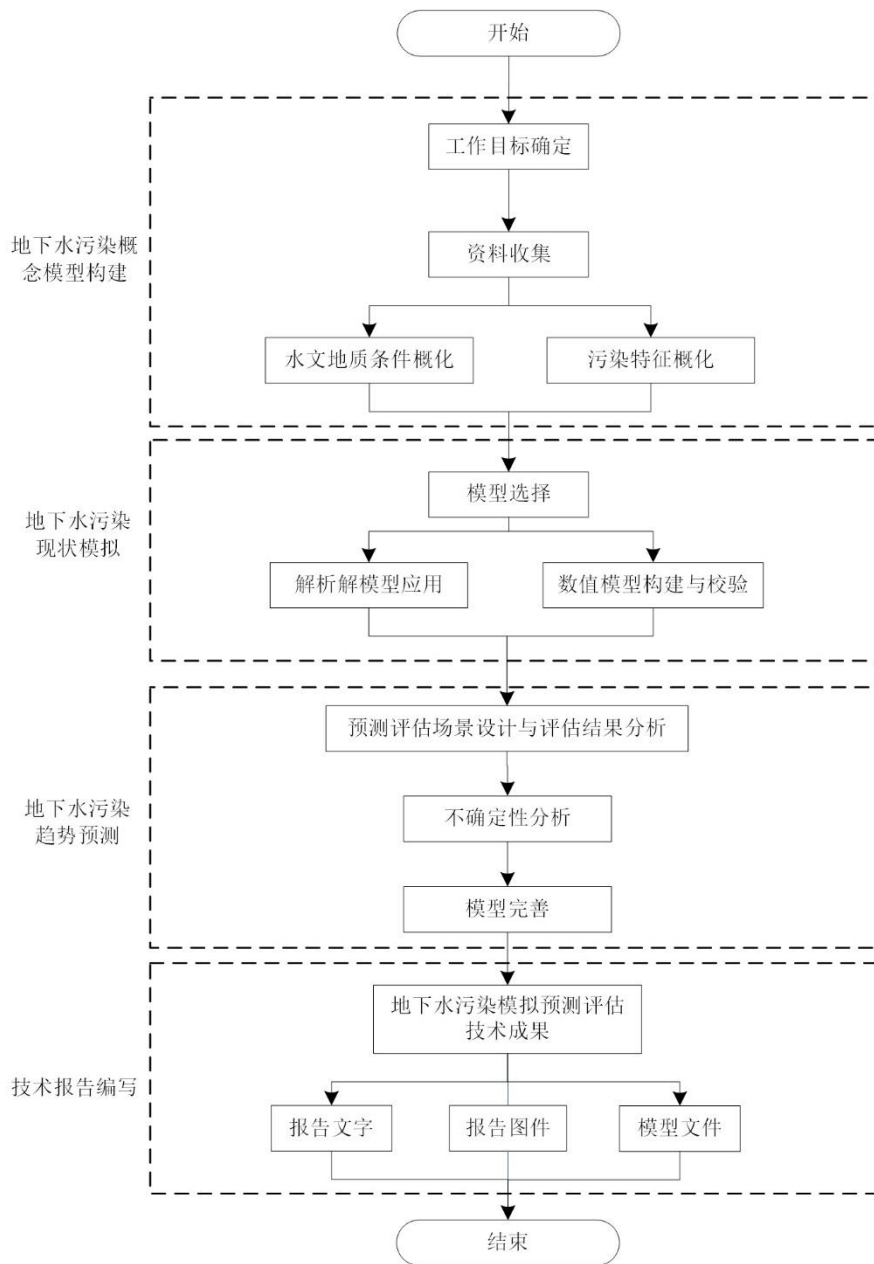


图 1 地下水污染模拟预测评估工作流程

第三章 地下水污染概念模型构建

3.1 工作目标确定

地下水污染模拟预测旨在预测评估区地下水污染分布特征在时间和空间上的变化趋势，推断污染扩散的范围，量化污染扩散的速率，分析污染受体受影响程度等。本项工作启动条件如下：

(1) 在开展地下水环境状况调查工作的基础上，需要对调查区进一步开展污染模拟预测分析时，需启动模拟预测评估工作，模拟污染发生历程，确定污染羽到达环境敏感目标的时间。

(2) 在开展地下水修复与风险管控工程的技术可行性分析时，需启动模拟预测评估工作。

3.2 资料收集

地下水污染概念模型构建所需资料除了地下水环境状况初步调查和详细调查阶段已经收集的评估区概况、地质及水文地质条件、污染源情况、地下水质量评价和污染评价结果等相关资料，必要时在补充调查阶段，收集更为详尽的资料与数据。资料的详实程度应能详细说明地下水污染源的属性及污染排放特征、污染途径、污染源与潜在受体间关系、污染物迁移转化相关参数等内容。资料的具体要求和来源详见附表 A.1 和附表 A.2。

3.3 水文地质条件概化

分析评估区及周边地下水系统的内部结构与动态特征，通过适当简化和合理假设，对系统内外地下水的补径排条件，地下水系统的含水岩组类型、结构、空间延展形态，系统边界条件、源汇项，内部地下水运动状态、参数分布特征等进行定性表达。

3.3.1 评估区范围

评估区范围划定应能准确反映地下水水流系统的边界和源汇项影响特征，并涵盖已知地下水环境问题影响的范围，包括污染源、当前污染分布范围、污染受体、地下水环境敏感区域等，需满足后期开展地下水污染模拟预测评估工作所涉及的空间和时间尺度需要。

3.3.2 地层结构及属性

对评估区含水岩组进行概化，分析含水岩组的结构与岩性特征，确定含水岩组类型，含水介质的均质或非均质性、各向同性或各向异性。查明含水介质的空间分布情况，含水层渗透系数的空间变异规律，含水层和隔水层的接触关系，确认是否存在“天窗”、断层等连通情形。概念模型需要对含水层非均质性作出分析。

3.3.3 边界条件与源汇项

根据含水岩组的分布、评估区边界上的地下水流特征、地下水与地表水的水力联系等，将评估区边界概化为给定地下水水头的一类边界、给定侧向径流量的二类边界或给定地下水侧向流量与水位关系的三类边界。明确评估区地下水的源汇项构成及类型，并概算各源汇项流量。

3.3.4 地下水水流特征

对评估区地下水的流场特征（流速与流向）进行概化，根据地下水水流的时空分布特征，确定评估区水流为稳定流或非稳定流、是否存在越流补给等情况。

裂隙、岩溶含水介质中水流运动概化需分析水流特征是否符合达西定律，对于发育较密集、导水性较好的裂隙、岩溶含水层中的地下水运动，可视作达西流，概化为等效孔隙介质开展模拟。

3.3.5 水文地质参数概化

水文地质参数的概化包括参数的初始取值范围和初步分区方案等。概化依据如下：

- （1）评估区水文地质试验所获参数计算结果；
- （2）含水岩组空间分布特征，包括埋深、厚度、岩性等；
- （3）地下水流场、水化学场的空间分布特征；
- （4）构造条件、裂隙及岩溶发育规律等。

3.4 污染特征概化

基于水文地质条件概化结果对地下水污染特征进行概化，对污染源、污染途径、污染受体之间的关系进行确认，并识别污染物迁移转化所涉及的主要过程。概化成果应当尽量反映实际环境特征，充分考虑模拟工具的实现途径，兼顾复杂度和实用性。污染特征概化需与水文地质条件概化结果相结合，通过定性文字描

述、水流特征和污染物的空间分布图以及污染物主要迁移转化过程的初步定量分析结果等方式表达。

3.4.1 地下水污染源

3.4.1.1 污染来源识别

根据地下水环境调查成果，综合分析评估区土地利用类型演化过程、地下水水流特征、主要污染指标空间分布特征、水文地球化学特征、行业特征污染指标等，识别污染来源。污染源识别过程结合评估区域的地下水功能属性。常见的地下水污染源解析方法见附表 A.3。

3.4.1.2 污染排放规律

分析污染发生历史、污染源特征和污染物属性，污染排放规律可简化为连续恒定释放或非连续恒定释放。

3.4.1.3 污染源的定量化表达

根据污染源概化要点，对污染源的定量化表达包括以下内容：

(1) 污染源的空间分布范围；

(2) 污染源强的取值参考监测结果，并根据评估目的取平均值或最高值。对于污染连续恒定释放模式，源强可设置为定浓度，对于非连续恒定释放，通过设置源函数来定义，如连续衰减的污染源可采用一阶反应过程来概化。

3.4.2 地下水污染途径

根据评估区水文地质条件、污染源空间分布、污染物迁移转化特征，分析污染物进入地下水的途径，常见地下水污染途径分类见附录 A.4。污染途径概化需重点分析以下方面：

3.4.2.1 水流特征与迁移途径

根据区域与场地的关系，结合区域流场信息分析场地水流特征，流场分析尺度必须大于污染迁移尺度。

在开采井周边、补给区、排泄区需着重考虑水力梯度对污染物迁移途径的影响，分析污染羽在此类地区是否存在显著改变。

3.4.2.2 包气带迁移过程

通过计算获得污染物在包气带中的迁移时间与通量，并结合实际调查数据进行调整，用于估算地下水系统的污染源强。并调查是否存在污染迁移的优先通道，如裂隙、根系、地下构筑物等，对源强估算结果进行修正。

3.4.2.3 人为影响途径

人工构筑物，例如排水沟渠、矿井结构、隔渗墙体、基础结构等，可能形成污染物迁移的优先通道或改变污染途径，特别是当低渗透性含水层被人工构筑物贯通，或者回填高渗透性材料时容易形成垂向污染途径。同时，还需要考虑旧构筑物移除后新构筑物建设对污染途径的改变，以及由于入渗条件、流场等其他扰动因素的季节性变化对迁移途径的影响。

3.4.3 地下水污染受体

依据评估区水文地质条件、源解析结果、污染物迁移转化机制分析结果，确认地下水污染潜在影响的敏感目标，如水源井、地表水、敏感人群等。

3.4.4 地下水污染物迁移转化过程

根据不同工作目标确定模拟因子，对其在地下水中的物理迁移过程和生物地球化学转化过程进行定性分析，识别其涉及的主要迁移转化过程，并进行初步定量估算。

3.4.4.1 模拟因子的确定

模拟因子根据工作目标和评估区污染特征选择，包括：代表污染迁移转化特征的指示性指标、特征污染因子、修复工程的目标污染物、污染场地主要污染物（优先考虑《有毒有害水污染物名录（第一批）》）等。当评估区地下水污染特征复杂，污染物迁移转化机制不够明确时，遵循保护优先、预防为主的原则，选择代表迁移转化过程的保守性模拟因子。

3.4.4.2 污染物迁移转化过程的定量化表达

地下水污染物的迁移转化过程包括物理过程和生物地球化学过程，根据污染物属性和水文地质条件，可涉及单个或多个过程。物理过程有对流、弥散，生物地球化学过程有吸附、衰变、降解、反应、溶解、挥发等，更为复杂的溶质运移过程如变密度

流和多相流等，各迁移转化过程的概算公式参考附录 A.5。对污染物迁移转化过程进行定量化表达包含以下工作内容：

- （1）根据污染物属性，分析可能的迁移转化过程；
- （2）根据调查数据，定性识别实际发生的迁移转化过程；
- （3）分析影响迁移转化过程的控制因素和限定因素；
- （4）提出迁移转化过程的数学表达、假设和简化的依据、所涉及参数的初步估算；
- （5）将观测数据与不同估算方法的计算值进行比对，根据最佳吻合结果确定所发生的迁移转化过程、污染羽的空间尺度、迁移转化过程的参数取值等，并将此作为进一步定量化评估的依据。

第四章 地下水污染现状模拟

4.1 模型选择

4.1.1 地下水数学模型的类型

地下水水流模型的控制方程及定解条件见附录 B.1.1。

地下水溶质运移模型的控制方程及定解条件见附录 B.1.2。

针对简单情景，可将污染物视同随水运动的质点，通过追踪质点的轨迹来模拟污染物的运移规律。针对复杂情景，需基于已有流场，考虑污染物在对流、弥散、吸附、反应等过程共同作用下的迁移与转化规律开展模拟预测。

4.1.1.1 解析解模型与数值模型

根据求解方式的不同，分为解析解和数值解模型。解析解模型操作简单但需满足严格的假设条件，适用于结构简单的系统；数值模型可模拟非均质性程度较高、源汇项和迁移转化过程较为复杂的系统，可以更为准确地反映实际含水层组，但应用难度较高，本指南所规范的技术要点主要针对数值模型。

4.1.1.2 稳定流模型与非稳定流模型

根据长时间序列水位监测数据判断在模拟时间尺度上流场是否变化显著，决定水流模型选择稳定流或非稳定流模型。

4.1.1.3 确定性模型与随机模型

当系统特征和参数取值的确定性程度较高时，可选择确定性模型；当监测数据较为缺乏，系统不确定程度较高时，可选择随

机模型，采用一定区间范围的参数取值，获得反映一定波动尺度的模拟结果。

4.1.1.4 模型维度

根据工作开展阶段、系统复杂性、模拟精度要求可选择对空间特征的刻画逐步精细的一维模型、二维模型和三维模型。通常情况下，水流模型对于空间剖分的要求低于污染物迁移模型，因此在模型选择及模型规划阶段需充分考虑污染物在系统中的迁移转化特征，并以污染物迁移对模拟维度的要求进行模型创建。

4.1.2 模型选择过程

采用渐进式工作方式开展模拟预测评估工作，模型工具的选择也逐级从简单向复杂过渡。初始阶段应用简单的理论计算公式估算出污染物在包气带和含水层的分配量，进而采用解析解模型对高度概化的水流系统及污染物迁移转化过程进行概算，最后，根据需要选择简单剖分的数值模型到分布式数值模型进行模拟预测评估。对于相对简单的系统或资料尚不完备的初级工作阶段，理论计算公式概算和解析解模型足以达成工作目标。

根据不同工作阶段数据和资料的掌握程度，预测工具的选择需要合理简化系统及提出假设，确保评估系统主要的水流特征和迁移转化过程可以应用数学方法进行表达。

模型选择的决策依据需要在成果报告中说明，通常包括以下内容：评估工作目标；解释所选模型工具对实现工作目标的合理

性；描述所选模型的功能，包括建模所依据的数学公式，以及实现模拟功能的软件；阐述概念模型向数学模型转化的过程，说明概化过程中进行假设和简化的依据；对所选模型的局限性和不确定因素加以说明。

4.2 解析解模型应用

在工作阶段初期，将系统概化为简单系统，应用解析解模型进行水流和溶质运移过程的初步计算，支持系统分析及工作决策，为数值模型调试和检验提供依据。将系统简化为均质、一维线性的简单系统时，污染物运移时间和运移距离的计算参照 HJ 338，将系统概化为考虑污染物排放的时间特征、污染源的分布特征的二维复杂系统时，污染物运移时间和运移距离的计算见附录 B.2。

根据污染物迁移的空间特征可划分为一维和二维，根据污染物排放特征可分为瞬时释放和持续注入，根据迁移转化过程的不同，可划分为对流、对流-弥散、对流-弥散-生物地球化学反应（吸附、降解等）。

4.3 数值模型构建与校验

为减少模型工具的不规范应用，降低不确定因素对模拟结果的影响，应用数值法构建模型需遵循一定的工作步骤，加强每个阶段工作的质量控制，贯彻系统分析方法和渐进式工作思路。

4.3.1 模型设计

污染物迁移转化过程的模拟要基于可靠的流速分布，如果已有现成的水流模型并且水流模型的尺度适宜，可将流速分布直接用于迁移模拟，否则需首先构建地下水水流模型，且模型尺度设计需以后期迁移模拟的尺度要求为依据。

模型维度的选择应当以概念模型阶段对污染羽分布的推算结果和含水层参数分布特征为依据，如果污染物垂向分布差异明显、含水层垂向参数变异较大，需构建三维模型。

模型范围的确定主要以涵盖水流模型的控制因素为依据，并确保污染源-污染途径-污染受体均包含在内。为了充分反映水文地质条件和降低区域边界条件对场地的影响，水流模型的范围往往会大于迁移模型，因此可将迁移模型的范围局限于污染羽影响的区域，将此范围对应的流速用于迁移模拟的输入。

4.3.2 空间剖分

构建地下水数值模型首先需要对模拟空间进行网格剖分。网格尺寸的设计需根据经验进行初始设定，后期根据模拟效果，结合工作目标进行调整。此外，满足水流模拟需要的模型可以不考虑地层在垂向的精细划分，而对于污染物的垂向分布有差异的模拟对象，需加密网格剖分，体现污染物的垂向迁移分布特征。

4.3.3 时间剖分

水流模型可根据情况选择稳定流模型或非稳定流模型。非稳定流模型的外部应力设置需综合反映流场或溶质运移过程中多种应力各自的时间分布特征，需叠加二者的时间剖分方案。

4.3.4 初始条件

所有的非稳定水流模型和污染物迁移模型都需要初始条件。对于非稳定水流模型，初始条件就是在某一个选定的初始时刻（ $t=0$ 时刻）含水层中的水头分布，通常取自代表该系统的稳定流模拟结果。对于非稳定迁移模型，初始条件用来描述给定初始时刻评估区内各点（ x, y, z ）的浓度分布状态，通常根据模拟目标确定。如果模拟目标为增加对系统行为的认识或呈现现有污染源从初始到当前的演变过程，则可以将初始浓度设置为零或该区的背景值；如果模拟目标为评估现有污染羽对环境管理手段或修复措施的响应，则可以用现有污染羽的浓度分布作为初始条件。

4.3.5 边界条件

地下水流模型的边界条件包括三类，根据含（隔）水层的分布、地质构造边界上的地下水流特征、地下水与地表水的水力联系，将评估区边界概化为给定地下水水头的一类边界、给定侧向径流量的二类边界或给定地下水侧向流量与水位关系的三类边界。

迁移模型的边界条件也包括三类：指定浓度边界（Dirichlet 条件）、指定浓度梯度或弥散通量（Neumann 条件）、同时指定浓度及浓度梯度或总通量（Cauchy 条件）。溶质运移受水流边界和迁移边界共同作用，控制模型边界单元溶质的流入量和流出量。

4.3.6 源汇项

源汇项分为内部和外部两类，外部源汇项代表边界条件（如前所述），内部源汇项代表位于有效水流模拟区域内的源和汇（如下所述）。

水流模拟的内部源汇项包括井（抽水或注水）、掩埋式排水沟、补给、蒸腾，以及地表水体，可通过二类和三类边界条件的设置方式进行定义。

迁移模拟的内部源汇项通过不同的源浓度设置方式（源函数）代表溶质进入含水层的过程和溶质浓度随时间变化的特征。常见的源函数形式包括以下四种：连续源载入，浓度为常数；连续源载入，浓度随时间变化（阶梯函数）；连续源载入，浓度衰减；脉冲载入（短期）。在实际应用中可通过以下方式进行设置：

（1）定浓度污染源：对应连续源载入，浓度为常数的情况，一般用于渗漏结构模拟，如垃圾填埋场、矿山废料堆场、渗坑、渗滤床、排水沟、残留的非水相污染物等持续产生沥出物/液的污染源，并且污染物浓度存在上限的情况。污染物浓度即为溶质的

溶解度，由定浓度方式所定义的源项进入系统的溶质质量由水流模型决定。

(2) 补给浓度污染源：对应连续源载入，浓度随时间变化的情况，由于源汇项的水流入渗条件或污染物排放浓度存在时空差异，可将上述定浓度边界条件与水流模型中的水力边界（通常为水流补给强度）耦合，通过调整补给浓度、补给强度、持续时间，定义可确定输入量和输入时长的污染源。

(3) 初始浓度：浓度逐渐衰减的情况，用于受污染地下水体本身为污染源的情况，可在污染源项的单元格设置初始浓度的方式来实现现状污染源的定义。

(4) 定质量污染源：对应脉冲载入式的短期污染源，可用于模拟短时污染事故发生造成的后果。由于瞬时排放，之后不再有污染物进入系统，可在指定为源项的单元格设置一定的溶质总量，具体数值根据模型单元格的物理特征（长宽高、孔隙度、容重等）仔细核算事故排放时段内进入含水层的溶质总量，需尽量贴近实际情况。此外，根据污染物属性分析是否存在土壤对污染物的吸附作用，如存在需估算事故排放物质总量分布在溶解相和固相上的分配比例，计算方法见附录 A.5。

4.3.7 模型参数

地下水污染模型的数据需求包括两部分。

第一部分为水流和溶质运移模型需要输入的基本数据。

(1) 模型空间信息参数：如模型边界的位置、地质单元的厚度以及现有污染羽的范围等。

(2) 模型动力学参数：如渗透参数、储水系数、给水度、孔隙度、弥散度以及化学反应参数等。

(3) 与源汇项有关的各种参数：如污染物进入量和排出量或注水和抽水量。常见的地下水模型参数确定方法见附表 C.1 至 C.7。

第二部分数据包括监测点的观测水头、流量、污染物运动时间、溶质浓度等。这部分数据将应用于模型校准阶段。

4.3.8 模型校准与验证

应用初步确认的输入条件及参数设置完成模型构建工作后，需开展模型校准，通过调整模型输入参数的取值或参数结构，使模型输出变量与野外观测值的误差达到一定的精度要求，表征模型可以基本准确地反映客观实际。模型输出变量可以为水头、流量、浓度、污染物运移时间、污染物去除率等指标。校准依据为：实现模拟的地下水流场或污染羽形态、范围、方向等主要特征与实际情形基本一致；校准后的水文地质参数要符合实际水文地质条件；迁移模型参数符合溶质运移特征或污染物属性。校准数据的选用需遵循数据代表地下水水文特征和地下水环境污染特征的基本原则。对于一般稳定流模型的校准，至少需要水文年内的平水期一期水位数据或者一个完整水文年多期水位数据的有效

平均值。对于非稳定流模拟，需要连续三个水文年反映水位季节波动的连续监测数据。原则上，随着模型工作深度的逐级递进，对数据要求逐渐增加，但用于校准的数据需要在时序上保持“一致性”。

当数据资料较丰富时可开展模型验证，即使用校准后的模型以稳定流或非稳定流的形式运行，使用与模型校准无关的一组观测值同运行结果进行对比，如误差达到精度要求，则通过验证，否则需对模型进一步校准。

模型校准过程需避免“非唯一性”问题，即多种参数组合均可实现观测值与计算值合理匹配的结果。因此，尽量收集充足的数据支持校准，对稳定流水流模型校准时，不仅需要匹配水位值，还需要分析水均衡信息，从均衡的角度出发，模拟的地下水均衡变化要与实际要素基本相符，有条件的情况下进行流量校准；对于非稳定流模型，需要匹配动态过程，比较计算结果和观测数据的水位时间序列和（或）浓度穿透曲线；水流模型与迁移模型相互校准，以保证流场和迁移数据的匹配。

4.3.8.1 校准方法

（1）试错法校准

应用试错法人为调整待校准的输入参数，重复执行正演模拟来达到校准目标。实际应用中，通常首先校准水流模型，调整控制水流过程的模型输入参数，如渗透系数和源汇项，减少水头残差并与观测流场进行匹配。进展到一定程度后，调整迁移模型参

数，如孔隙度、弥散度和源汇项浓度，与观测到的污染迁移特征进行匹配。然后，通常再次校准水流模型，使得之前水流校准中没能够反映出的迁移时间、迁移方向、污染羽形态等进一步匹配。重复迭代此过程，直至有关水流和迁移过程的观测值与模拟值均达到校准目标要求。

(2) “自动”校准

相对于试错法校准的正演模拟，“自动”校准为反演模拟，应用程序化的数学技术求取最优模型参数值，并在较低程度上确定最优参数结构。“自动”校准可系统地评价模拟结果与观测数据之间的拟合度，定量分析所估算参数的敏感性与不确定性，一定程度较试错法更为客观。但是，试错法简单灵活，推荐在开展“自动”校准之前使用试错法检验模型的总体反应和可靠性，以利于充分理解模型，发现系统概化、模型设置、以及输入条件中的错误与不足。

4.3.8.2 模型校准评估

开展模型校准工作初期，采用目视比较法定性分析计算值与观测水头或浓度之间的匹配情况，完成初步校准后，采用一些拟合优度统计指标进行定量比较和评价，可选指标如残差平均值、残差方差、均方根差、线性相关系数等。原则上，流场模拟结果应与实测流场形态近似，地下水流向一致，对于稳定水流模型，要求观测井地下水水位的实际观测值与模拟计算值的拟合误差应小于拟合计算期间内水位变化值的 10%，模拟范围内水位变化

值较小 ($<5\text{ m}$) 的情况下, 水位拟合误差一般应小于 0.5m ; 对于非稳定水流模型, 要求地下水位计算曲线与实际观测值曲线的年际、年内变化趋势一致; 对于迁移模型, 要求模拟出的污染羽分布与实际观测形态近似, 运移方向一致, 地下水中污染物浓度计算值与观测值的穿透曲线吻合, 变化趋势一致, 一般情况下, 计算值与观测值进行拟合, 相关系数大于 0.85 。但是, 具体精度要求应当基于预测目标, 对于作为管理或决策工具的模型, 预测结果影响到治理方案的投资或重要环境管理决策时, 需提高模型校准的精度, 减小残差, 以及必要时收集更丰富的数据。如果模型为分析工具, 用于检验假设或情景分析对比, 则可适当降低校准目标。

4.3.9 敏感性分析

为提高模型校准工作的方向性, 推荐在校准过程中开展敏感性分析, 即在合理的范围内改变模型输入参数, 并观察模型结果的响应程度, 筛选出对模拟结果影响相对显著的因子。分析模型响应程度的指标主要包括水头、流速、污染物浓度等。敏感性分析同时也用于识别地下水模拟预测中的不确定因素。

第五章 地下水污染趋势预测

5.1 预测场景设计与评估结果分析

校准和验证完善的模型可用于预测地下水污染在时间和空间上的变化趋势和分布特征，以及推测可能的污染途径。

根据工作目标设计预测场景。当模型用于评估地下水污染发展趋势对环境敏感目标的影响程度（空间和时间尺度）时，需全面合理地推测在所关注空间和时间尺度上，由于人为或自然条件的改变所引起的模型输入信息的变化，进而将这些变化在模型输入条件中加以体现；当模型用于开展地下水污染修复和风险管控措施的技术方案比选时，将不同技术手段概化后在模型输入条件中反映，预测工程实施情况下污染物未来的分布状态，从而评估地下水污染修复和风险管控措施的有效性、时效性、以及对应的工程成本等决策指标。以上两类预测场景对应不同的评估内容和评估目的，根据其工作属性，评估原则分别对应保守性原则和精确性原则。

以保守性原则开展的预测与评估工作中，模型设置要点如下：

（1）模型参数取最保守的值，用于反映最不利状态下的污染迁移趋势；

（2）模拟因子选择保守性因子，即污染物迁移过程以物理迁移为主，不易发生吸附、降解等可导致污染物总量消减的生物地球化学过程，代表污染可能影响的最大空间尺度和最短迁移时间；

(3) 模拟过程可选择仅模拟对流过程，或模拟对流-弥散过程，选择依据为含水层水文地质条件对弥散过程的影响程度，注意低渗透性含水层对弥散过程的显著影响；

(4) 污染源强的设置同样遵守保守性原则，忽略不能明确的污染减量过程，污染源强设置为最大可能的污染物总量；

(5) 模拟时段以污染迁移到环境敏感目标所需时间作为参考尺度，或者根据评估区域的地下水功能属性、污染事件的发生特征等设置评估的时间节点。

以精确性原则开展的预测与评估工作中，模型设置要点如下：

(1) 模型参数取值需反映模拟区的真实情况；

(2) 模拟因子选择目标污染物或特征污染因子；

(3) 模拟过程考虑目标污染物属性，除了模拟对流-弥散的物理迁移过程，选择合适参数模拟污染物的生物地球化学过程，必要时通过在场地开展中试获取更为准确的参数；

(4) 污染源强设置基于污染调查所确定的尽量准确的污染物总量估算值。采用不同预测情景评估技术方案时，需要对不同迁移转化过程引起的源汇项增加量进行质量守恒核算，从而明确技术方案的有效性；

(5) 污染时段以所制定的修复或污染防控目标为参考进行设置；

(6) 针对当前常用的地下水修复和风险管控技术手段，可在水流模型和运移模型中设置相应输入参数，详细设置如表 1 所示。

表 1 地下水修复和风险管控技术方案与模型设置

备选修复方案	水流模型的相关设置	运移模型的相关设置
封顶防渗阻隔	减小入渗强度，即减小入渗率	设置初始浓度
地下水抽出处理 (P&T)	增加用于模拟的井节点或网格，并赋值设计的抽水量	设置初始浓度
垂直防渗阻隔墙	将代表阻隔墙的网格单元处的渗透系数减小 (例如地下水模型 MODFLOW 已包含专门模仿阻隔墙模块)	设置初始浓度
渗透反应格栅 (PRB)	如渗透反应格栅为漏斗-门式或连续墙式，需要模拟部分墙体；如果墙体中的反应介质属性与含水层介质属性有明显差异，需调整墙体渗透系数	应用地球化学模型模拟溶质与渗透反应格栅介质的反应过程；或者概化该过程，依据实验室观测所得的反应后浓度，设置为介质单元格在溶质运移模型中的定浓度
增强生物修复法 (针对有机污染物)	无	基于实验室或场地中试结果，增加生物降解率 (化学反应参数)
原位注入法	如果实验室或场地中试证明由于注入溶液导致井管阻塞，则需要减小井周边区域渗透系数	应用地球化学模型模拟溶质反应过程；或概化该过程，将实验室观测所得的反应后浓度，设置为介质单元格在溶质运移模型中的定浓度
潜水面以上原位固化-稳定化 (ISS)	减小代表实施固化-稳定化区域网格的入渗强度	减小实施固化-稳定化区域网格的入渗浓度；或者依据实验室观测所得的处置后入渗浓度，设置实施处置的单元格在溶质运移模型中的定浓度
潜水面以下原位固化-稳定化 (ISS)	减小代表实施固化-稳定化区域网格的渗透强度	减小实施固化-稳定化区域网格的给定浓度；或依据实验室观测所得的处置后浓度降低程度，设置实施措施的单元格在溶质运移模型中的定浓度
污染土方移除	调整入渗强度，用于代表被移除土方回填后由于岩性差异对入渗过程的影响；如果回填层	将入渗浓度设置为零或背景值；如果回填层低于潜水面，调整该部分空间的定浓度

	低于潜水面，调整该部分空间的渗透系数	
--	--------------------	--

5.2 不确定性分析

模型建立在一定的假设和系统简化的基础上，由于数据的不充足和对模拟过程的过度简化或过度复杂化，地下水水流或者溶质运移模型的运算结果会存在一定的误差或者不确定性，需对模型的不确定性予以分析，从而评估模型预测结果的可靠性。常用的评价不确定性的方法有：敏感性分析、蒙特卡洛方法、一阶误差分析等。通过对参数不确定的分析，模拟结果可以表达为可能结果的区间，从而反映模拟参数的不确定性。

5.3 模型完善

如根据下一步工作目的需要进一步完善模型，提高模型精度，需要开展长期监测或补充调查。如果系统性能出现明显变化，则需要对概念模型和模型参数进行修改，升级完善模型。

第六章 地下水污染模拟预测评估技术成果

6.1 报告文字

6.1.1 报告编写要求

地下水污染模拟预测评估成果报告应当完整地体现地下水污染模拟预测评估的全部工作。

地下水污染特征概化部分应描述评估区地下水环境基本状况、地下水污染程度和范围，识别评估区地下水污染问题和可能成因，总结污染源解析结果，分析污染物迁移转化机制和污染受体特征。

地下水污染趋势预测部分应说明评估工具的确定依据，对预测结果的分析 and 讨论进行文字表达，说明评估区污染未来发展趋势。同时，对各评估阶段的主要结论辅以公式、表格、图件等形式的说明。对于应用数值模型进行模拟预测的项目，需说明模型使用条件，包括模型的选择依据、适用情况、模型建立过程及应用过程。

6.1.2 报告编制大纲

1 总论

包括项目背景、目的的原则、评估范围、评估依据、评估方法等。

2 评估区概况

包括自然地理概述、评估区土地利用及污染历史、主要污染源概况、评估区以往工作基础。

- 3 地下水污染概念模型构建
 - 3.1 评估目标
 - 3.2 资料收集
 - 3.3 水文地质条件概化
 - 3.4 地下水污染特征概化
- 4 地下水污染现状模拟
 - 4.1 地下水数学模型选择
 - 4.2 数学模型构建过程
 - 4.3 模型校准与敏感性分析
- 5 地下水污染趋势预测
 - 5.1 趋势预测结果
 - 5.2 不确定性分析
 - 5.3 模型完善计划
- 6 地下水污染模拟预测评估结论与建议
 - 6.1 主要结论
 - 6.2 对策与建议
- 7 附件

6.2 报告图件

地下水污染模拟预测评估技术报告的图件应能反映地下水污染概念模型和地下水污染趋势预测的成果。

水文地质条件概化成果图包括平面图和剖面图，示例见附图 D.1，图件中所涉及的要素见附表 D.1。地下水污染特征概化成果图采用剖面图、平面图或者三维立体图表示，示例见附图 D.2，

图件中所涉及的要素见附表 D.1。图中应包括最大污染深度以上岩性结构及水文地质特征、主要污染源及主要污染物特征、主要污染物在水土介质中的分布特征等。单层地下水污染浓度垂向变化显著或存在多个受污染含水层时，需结合水文地质条件对污染分布进行三维展示。

污染趋势预测成果图是在概念模型建立的平面图、剖面图的基础上添加预测结果，表征地下水水流和污染物迁移的趋势。如进行数值运算，需包括模型计算区网格剖分图、水文地质参数分区图、初始流场和拟合流场图、初始浓度场和拟合浓度场图、观测点水头和污染物浓度拟合曲线图及误差情况图，预测流场和浓度场图，预测水头和浓度的时间变化曲线等。最终成果中还可包括可视化视频。具体要求见附表 D.2 和 D.3。

6.3 模型文件

应提供模拟最终结果所依托的原始模型项目文件和模型使用说明。

附录 A
(资料性附录)
资料需求与技术方法

表 A.1 地下水污染模拟预测评估数据及资料需求表

评估区基础背景资料	
主题	具体信息
评估区背景资料	评估区及周边土地利用历史及潜在产生污染的活动
	当前土地利用状况（包括评估区平面布局图）
	评估区的未来利用（包括评估区开发）规划
	评估区相关记录：产品、原辅材料和中间体清单、平面布置图、工艺流程图、地下管线图、化学品储存和使用清单、泄漏记录、废物管理记录、地上和地下储罐清单、环境监测数据
	污染事件发生的历史信息
水流特征概化所需资料	
主题	具体信息
评估区地质及水文地质特征	主要岩性的空间展布特征（厚度和侧向延伸）
	地质图，地质剖面图
	地质构造（包括断层、裂隙）及其对水流的影响
	含水层厚度和有效厚度，以及横向和垂向变化
	单层或多层含水层，弱透水层的重要性
	地下水水流方向及水位波动（季节和长期性）
	水力梯度变化特征（水平向和垂直向）
	水文地质参数（孔隙度、渗透系数、导水系数、给水度、储水系数等）
	地下水与地表水体（河流、湖泊、水渠等）间相互作用
	过去、当前与未来地下水开采情况对含水层的影响
	非饱和带厚度与水流特征
污染特征概化所需资料	
主题	具体信息
污染源项	污染历史（排放体积、排放量、排放方式、地点、日期、频率、持续时间）
	出现/确认的污染物类型
	污染物相态（固相、吸附相、自由相、溶解相与气相）
	污染物浓度分布特征（土壤、非饱和带、饱和带）
	污染物性质（溶解性、分配系数、密度、持久性）
	污染物排放方式（连续排放、一次性排放、或逐渐减少的污染源）
污染途径	非饱和带和饱和带空间分布及属性
	地质构造和地形控制对迁移途径的影响
	优先通道的影响：裂隙、排水系统、渗坑、建筑物、地基、废矿、钻孔等
污染物迁移转化机	孔隙流、裂隙流、岩溶管道流

制	弥散过程
	降解动力学
	吸附特征
	化学反应
	单相流或多相流
	密度控制流
污染受体	评估区及周边区域的地下水
	当前或潜在的地下水使用者
	地表水体（泉水、溪流、水池、湿地）
	估算污染源到潜在污染受体之间的距离
与污染物迁移相关的土壤/岩石特征	有机碳含量
	阳离子交换能力
	矿物成分（如粘土含量，Fe/Mn 氧化物等）
	粒径分布
	含水率
污染物运移特征的观测结果	污染分布图或等值线图、剖面图、时间序列图
	污染羽稳定、缩小、扩大、下潜（由于密度效应、补给或垂向水力梯度）
	污染物浓度变化特征（季节性或长期趋势）
	影响污染迁移的过程认定（如对流、弥散、吸附、降解等）
	污染物之间的反应竞争影响
	生物化学环境对污染过程的影响（如 pH 影响金属的迁移）
	自然降解过程，及支持自然降解的证据
生物地球化学环境	背景值和（或）对照值
	好氧/厌氧环境
	pH、温度、盐度、氧化还原电位、溶解氧、碱度等

表 A.2 数据资料来源一览表

所需资料类型	数据来源	资料信息要求与说明
<p>水文地质条件资料</p> <p>1) 含水层物理系统 包括地质、构造、地层、地形坡度、地表水体等方面的资料</p> <p>2) 含水层结构 包括含水层的水平延伸、边界类型、顶底板埋深、含水层厚度、基岩结构等</p> <p>3) 含水层水文地质参数及空间变异 包括渗透系数、给水度、储水系数、弥散系数及孔隙度等</p> <p>4) 钻孔 包括钻孔位置、孔口标高、岩性描述及成井结构等</p>	<p>1) 地质图与水文地质图</p> <p>2) 地形图</p> <p>3) 前人所作的有关钻探、抽水试验及分析、地球物理勘探、水力学等方面的研究报告</p> <p>4) 钻孔结构、地层岩性、柱状图、剖面图及成井报告等</p> <p>5) 有关学术刊物上及会议上发表的学术论文、学生的毕业论文等</p> <p>6) 行政部门及私人企业的有关数据</p>	<p>1) 应有一定数量的控制点</p> <p>2) 地质单元的厚度、延伸以及含水层的识别</p> <p>3) 地形标高等值线、含水层厚度等值线</p> <p>4) 含水层立体结构图、水文地质参数分布图</p> <p>5) 地表水与地下水以及不同含水层之间的水力联系程度</p> <p>6) 地下水对生态环境的支撑作用</p>
<p>水资源及其开发利用资料</p> <p>1) 各种汇源项及其对地下水动力场的作用</p> <p>2) 天然排泄区及人工开采区地理位置、排泄速率、排泄方式及延续时间</p> <p>3) 地表水体与地下水的相互作用</p> <p>4) 地下水人工开采、回灌及其过程</p> <p>5) 土地利用模式、灌溉方式、蒸发、降雨情况等</p>	<p>1) 降雨量及蒸发量</p> <p>2) 地表水体流量及现状</p> <p>3) 抽水试验及长期观测井的地下水水位监测数据</p> <p>4) 地下水及地表水体的开发利用量，包括政府部门的统计数据 and 可估计到的未进行统计的开发利用量</p> <p>5) 灌溉区域、作物类型及分布情况</p> <p>6) 水资源需求量及污水排放量预测分析</p> <p>7) 其他政府、企业等有关部分的水资源开发利用数据</p>	<p>1) 降雨量、蒸发量通常为时间序列数据，最小时间单元应到月，有些时候需到天</p> <p>2) 数据采集的时间、地点、数值及测量单位应准确</p> <p>3) 对于地下水数据，应注明是否为动水位</p> <p>4) 不同时期地下水位等水位线图及地下水位过程线的说明</p>
<p>水质监测资料</p> <p>1) 常规水质指标数据</p> <p>2) 非常规水质指标数据</p>	<p>1) 评估区所在地建设项目环境影响评价报告</p> <p>2) 评估区相关取水单位或饮用水监测管理部门水质分析报告</p> <p>3) 地下水环境调查报告</p>	<p>1) 不同时期不同点位的水质数据</p> <p>2) 不同含水层位的水质数据</p> <p>3) 不同监测指标数据</p>
<p>污染源资料</p> <p>1) 污染源空间分布特征</p> <p>2) 污染排放特征</p> <p>3) 特征污染因子</p>	<p>1) 企业建设及生产记录与生产报告</p> <p>2) 土地利用资料及图像解译</p> <p>3) 污染普查资料</p> <p>4) 地下水环境调查报告</p>	<p>1) 追溯污染主体变迁历史</p> <p>2) 污染源解析</p> <p>3) 生产工艺分析</p>

表 A.3 常用污染源解析方法

源解析技术	原理	优点	缺点/局限
空间叠图法	<p>(1) 分析主要污染物浓度现状分布图，确定地下水污染高浓度区；</p> <p>(2) 根据识别的污染高浓度区，在其附近核查潜在污染源具体位置，并在图件中标出；</p> <p>(3) 采用 GIS 手段将主要污染物浓度现状分布图、潜在污染源位置分布图与地下水流场图叠加，推断污染物扩散途径，定位污染源空间分布。</p>	<p>适用范围广，可准确分析各地下水污染源对污染现状的贡献程度；</p> <p>可在短时间内得出较为精确的溯源结果。</p>	<p>在水文地质条件较复杂或地下水流场不明确的情况下，无法精确溯源。</p>
捕获区法	<p>利用溶质迁移软件模拟示踪粒子在指定的位置和时间随地下水流运移的路径，将其与评估区污染物现状空间分布相比较，以判断和验证地下水中污染物来源位置。</p>	<p>在水文地质条件复杂的条件下亦能刻画污染物的空间分布，模拟结果直观、可反映污染物的三维空间运移情况。</p>	<p>要求水文地质资料完备，可支持模型创建工作，若资料不全需补充野外勘测工作获取，成本较高。</p>
稳定同位素法	<p>利用稳定同位素（如碳-13、汞、铅、硫、氮等）推测地下水中污染物的来源，并分析污染物随时间的迁移变化。</p>	<p>稳定同位素在特定污染源中组成特定，在迁移与反应过程中组成稳定，分析结果精确稳定。</p>	<p>同位素对生物的放射性风险尚未明确，因此该方法环境风险较高。</p>
化学指纹法	<p>通过特定离子或化合物的比值、或分子标志物特征识别地下水污染源。</p>	<p>适用范围较广，具有特征性，识别结果准确快速。</p>	<p>化学组成易因挥发、淋滤和生物降解等环境过程而改变，仅适用于突发性或短时间事件。</p>
化学质量平衡法	<p>设采样分析测得受体中物质 i 的浓度为 d_i，该区域排放物质 i 的源有 p 种，若已知某排放源 j 所排放污染物中物质 i 的含量为 x_{ij}，则源 j 对受体的贡献 g_j 应满足：</p> $d_i = \sum_{j=1}^p x_{ij} g_j \quad (i=1,2,\dots,n)$ <p>源 j 的贡献率为：</p> $\eta_j = g_j / \sum_{j=1}^p g_j$ <p>测定 n 种物质可建立 n 个方程，只要测定项目数量大于或等于排放源数目，就可解出一组 g_j，即</p>	<p>该方法原理清楚，易理解；</p> <p>从一个受体样品的分析项目出发就可以得到结果，可以避免大量的样品采集所带来的资金等方面的压力；</p> <p>能够检测出是否遗漏了某重要源，可以检验其他方法的</p>	<p>要求对污染源和受体地下水长期采样监测，列出排放清单，不断更新本地区排放源成分谱，工作量大，技术难度高；</p> <p>从排放源到受体之间排放的物质组成没有发生变化的假设条件难以满足；</p> <p>排放源的选择上存在主观性和经验性；</p> <p>要求排放源物质成分线性独立很难满</p>

源解析技术	原理	优点	缺点/局限
	各排放源的贡献率。	适用性。	足； 未区分同一类排放源排放的成分差别和同一排放源在不同的时间排放物质的差别。
多元统计法	<p>多元统计方法是利用观测信息中物质间的相互关系来产生源成分谱或产生暗示重要排放源类型的指标，主要包括指标分析（FA）、主成分分析（PCA）等。指标分析能将具有复杂关系的变量归结为数量较少的几个综合指标。</p> <p>在污染物来源研究中，通常采集大量（设为 N 个）样品，从每一个样品中分析出若干种（设为 M）化学成分的浓度，这样就构成了一个包含 N×M 个数据的集合。由于同一环境样品的组成成分并不相互独立，来自于同一类源的那些成分间存在较强的相关性，因此，可以用 P 个指标（P<M）来描述原来的样品集合。</p>	<p>应用简单且不需要事先对评估区域污染源进行监测，只需对排放源组成有大致地了解，并不需要准确的源成分谱数据；</p> <p>利用一般的统计软件便可计算；</p> <p>不用事先假设排放源的数目和类型，排放源的判定比较客观；</p> <p>能够解决次生或易变化物质的来源，能利用除浓度以外的一些参数。</p>	<p>本方法不是对具体数值进行分析而是对偏差进行处理，如果某重要排放源比较恒定，而其他非重要源具有较大的排放强度变异，可能会忽略排放强度较大的排放源，在实际中一般鉴别出 5 个~8 个因子，如果重要排放源类型大于 10，这种方法不能提供较好的结果。</p>

表 A.4 地下水污染途径分类

类型		污染途径	污染源	被污染含水层
I	间歇入渗型	降雨对固体废弃物的淋滤	工业和生活固体废物	潜水
		矿区疏干地带的淋滤和溶解	疏干地带的易溶矿物	潜水
		灌溉水及降水对农田的淋滤	主要农田表层土壤残留的农药、化肥及易溶盐类	潜水
II	连续入渗型	渠、坑等污水的渗漏	各种污水及化学液体	潜水
		受污染地表水的渗漏	受污染的地表污水体	潜水
		地下排污管道的渗漏	各种污水	潜水
III	越流型	地下水开采引起的层间越流	受污染的含水层或天然咸水等	潜水或承压水
		水文地质天窗的越流	受污染的含水层或天然咸水等	潜水或承压水
		经井管的越流	受污染的含水层或天然咸水等	潜水或承压水
IV	径流型	通过岩溶发育通道的径流	各种污水或被污染的地表水	主要是潜水
		通过废水处理井的径流	各种污水	潜水或承压水
		盐水入侵	海水或地下咸水	潜水或承压水

摘自《地下水污染与防治》（王焰新，2007）

表 A.5 地下水污染物迁移转化过程概算方法

A.5.1 对流

溶解物质随着由水力梯度或压力梯度产生的水流运动的过程为对流迁移过程。污染物的对流迁移过程取决于含水层性质，主要是导水系数、有效孔隙度及水力梯度，与污染物本身属性无关。概念模型阶段可将系统含水介质简化为均质，估算保守条件下溶于水的污染物速度，通过与观测数据对比分析，判读污染羽的空间尺度，估算对污染受体产生影响的迁移时间。估算过程需参考水文地质概念模型成果，充分考虑含水介质渗透性的差异、水力梯度（水平向和垂向）的时空变化、裂隙介质中总孔隙度和有效孔隙度的差异、紊流系统的不适用性等对对流迁移的影响。

污染物在地下水中的对流迁移可用达西定律刻画。污染物在各向同性孔隙介质中的迁移可表达为：

$$v = \frac{Ki}{n} \quad (\text{A.1})$$

式中： v —平均水流速度，m/d；

K —渗透系数，m/d；

i —水力梯度，无量纲；

n —孔隙度，无量纲。

A.5.2 弥散

弥散过程（又称水动力弥散）包括机械弥散与分子扩散。机械弥散是由含水层异质性引起，由于实际流速与平均流速的差异，导致实际污染羽范围大于仅仅依靠对流计算得到的结果。机械弥散取决于含水层非均质特征与观测尺度，与污染物本身属性无关。分子扩散由分子运动引起，弥散取决于污染物性质及浓度梯度。弥散过程中污染羽发展的方向与水流方向平行（纵向弥散）或者垂直于水流方向（横向弥散）。在含水介质渗透性弱，流速低的情况下，分子扩散的重要性高于机械弥散，概念模型需要对机械弥散和分子扩散对弥散过程的贡献程度加以说明。弥散迁移可以用菲克定律进行估算。

水动力弥散过程包括机械弥散与分子扩散。

$$D_h = D^* + \alpha v \quad (\text{A.2})$$

式中： D_h —水动力弥散系数，m²/s；

D^* —有效扩散系数，m²/s；

α —介质弥散度，m；

v —流速，m/s；

并且：

$$D^* = DT \quad (\text{A.3})$$

式中： D —扩散系数，m²/s；

T —与弯曲度相关的系数，无量纲。

A.5.3 吸附

吸附过程存在溶解相污染物在迁移路径上的多孔介质固体骨架上留存。影响吸附过程的因素包括地球化学环境、溶解相属性、地下水流速、多孔介质属性、溶质浓度等。常见的经典吸附模型吸附过程可分为线性 Henry 等温式（适用于溶解相浓度较低）、Freundlich 等温式（适用于溶解相浓度中等）及 Langmuir 等温式（适用于气相物质吸附）。概念模型需根据上述影响因素确定吸附类型，进而估算溶质在水相和固相的分配比率，用于后续数学模型参数设置。不同类型吸附过程的分配系数估算方式参见附表。

分配系数的计算公式如下：

(1) 线性吸附等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C} \quad (\text{A.4})$$

(2) Freundlich 等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C^{1/N}} \quad (\text{A.5})$$

(3) Langmuir 等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C(b - C_s)} \quad (\text{A.6})$$

式中： K_d —分配系数，1/kg；

C —液相中污染物浓度，mg/L；

C_s —固相中污染物浓度，mg/kg；

b —污染物最大吸附量，mg/kg；

N —特定化学系数（ $1/N$ 范围为 0.7-1.1）。

以上求得的分配系数用于计算吸附条件下，污染物在地下水中迁移速率：

$$V = u / R_f \quad (\text{A.7})$$

式中：

$$R_f = 1 + \rho K_d / n \quad (\text{A.8})$$

式中： u —地下水流速，m/s；

R_f —迟滞因子，无量纲；

K_d —分布系数，1/kg；

ρ —容重，kg/L；

n —有效孔隙度，无量纲。

A.5.4 物理衰变或生物降解

放射性污染物和有机物在地下水中迁移时，放射性物质的物理衰变和有机物的生物降解会导致污染物在地下水中的质量逐渐减少。此类过程与污染物类型、微生物环境、氧化还原条件、温度、地下水中离子组成等因素有关。模型概化阶段需识别是否存在衰变或降解过程，并定性说明该过程是否存在高浓度限值机制（即高浓度污染物对微生物存在毒性）、降解过

程在污染羽不同部位的差异、其他反应条件（如氧气、食物源等）的约束、降解产物是否具有毒性等。

污染物的物理衰变和生物降解在数学模型上可用一级反应式（即指数衰减）刻画，表达式如下：

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \quad (\text{A.9})$$

式中： C — t 时刻后污染物浓度，mg/L；

C_0 —污染物初始浓度，mg/L；

λ —衰减速率，1/d。

A.5.5 化学反应

地下水中两种或两种以上溶质间发生相互作用，原有溶质质量减少，产物质量增加的过程，常见过程包括：溶解与沉淀作用；氧化还原作用。溶解和沉淀是无机污染物在地下水环境中迁移的重要方式。溶解度与其在地下水环境中的迁移能力相关，溶解度高者迁移能力强，反之迁移能力弱。地下水中发生氧化还原作用的主要元素包括铁、氮、硫、锰、铬、砷及有机物等，这些元素的离子或化合物在氧化还原条件下发生变化，至达到平衡状态。模型概化阶段需根据不同时期和空间分布的水质监测数据判断氧化还原过程的存在情况。

A.5.6 挥发

对于挥发性污染物，需要考虑挥发过程对污染物总量的减少作用，在模型概化阶段考虑挥发态和溶解态的分配量，估算进入含水层的污染物质量，挥发性污染物在溶解相和蒸汽相分配的比例可以表达为：

$$C_v = HC \quad (\text{A.10})$$

式中： C_v —蒸发相污染物浓度，mg/L；

C —水相污染物浓度，mg/L；

H —亨利定律常数，无量纲。

A.5.7 变密度流

当进入地下水环境的污染物浓度高至一定程度时（例如污染物浓度大于数千 mg/L 时），会改变水体的物理属性，特别是密度和粘滞性，此时，污染物迁移过程的数学解法需要将水流运动和溶质迁移过程联合求解，模型概化阶段需对此加以定性说明。

A.5.8 多相流

当地下水污染物包含非水相污染物（Nonaqueous Phase Liquids, NAPLs），即与水不相混溶的有机污染物时，污染过程较常规污染过程复杂并多元，需开展针对性分析。根据 NAPLs 比重与水的差别可分为轻非水相液体（LNAPL）和重非水相液体（DNAPL）。轻质非水相液体（LNAPL），如大多数石油产品、煤油、对二甲苯（p-ylene）等；重非水相液体（DNAPL），如杂酚油、柏油、氯化烃等。

NAPLs 在迁移过程中存在多重相态，包括液态相、残留相、蒸气相及溶解相。其中，对于液态相中的 LNAPLs 通过非饱和土层后，以自由态在潜水面游移，DNAPLs 密度大于水，可在重力作用下穿透含水层，滞留在含水层底部，并有可能在地层走势影响下沿着与水流不

同的方向迁移；残留相是指 NAPLs 在迁移路径上必然留有残留物，一旦形成不在移动；溶解相的 NAPLs 随地下水流场运移；蒸气相的 NAPLs 在不饱和带具有挥发过程。

在概念模型阶段，通常先假设 NAPLs 不可移动，仅考虑溶解于水体的部分在地下水中的迁移，溶解态浓度通常使用有机物的溶解度为污染物浓度。混合的有机化合物的溶解浓度可以用下式估算，即拉乌尔定律（Raoult's Law）：

$$C_d = SX \quad (\text{A.11})$$

式中： C_d —地下水中的溶解相污染物浓度，mg/L；

S —有机化合物在纯液体中的溶解度，mg/L；

X —有机污染物在自由体中的质量分配比例，无量纲。

附录 B
(资料性附录)
地下水数学模型

B.1 数学模型

B.1.1 地下水水流模型

对于非均质、各向异性、空间三维结构、非稳定地下水流系统：

1. 控制方程

$$\mu_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W \quad (\text{B.1})$$

式中：

μ_s —贮水率，1/m；

h —水位，m；

K_x, K_y, K_z —分别为 x, y, z 方向上的渗透系数，m/d；

t —时间，d；

W —源汇项，1/d。

其中，对于等厚的承压含水层，若属于平面二维流，控制方程可写为：

$$\mu_s \frac{\partial h}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 h}{\partial y^2} + W \quad (\text{B.2})$$

式中：

h —水位，m；

对于非均质含水层，潜水 Boussinesq 水流控制方程写为：

$$\mu_s \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial H}{\partial y} \right) + W \quad (\text{B.3})$$

式中：

h —潜水含水层厚度，m；

H —水位，m。

2. 初始条件

$$h(x, y, z, t) = h_0(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \Omega, t = 0 \quad (\text{B.4})$$

式中：

$h_0(x, y, z)$ —已知水位分布；

Ω —模型模拟区。

3. 边界条件

1) 第一类边界

$$h(x, y, z, t) \Big|_{\Gamma_1} = h(x, y, z, t) \quad (x, y, z) \in \Gamma_1, t \geq 0 \quad (\text{B.5})$$

式中:

Γ_1 —一类边界;

$h(x,y,z,t)$ —一类边界上的已知水位函数。

2) 第二类边界

$$K \frac{\partial h}{\partial \bar{n}} \Big|_{\Gamma_2} = q(x, y, z, t) \quad (x, y, z) \in \Gamma_2, t > 0 \quad (\text{B.6})$$

式中:

Γ_2 —二类边界;

K —三维空间上的渗透系数张量;

\bar{n} —边界 Γ_2 的外法线方向;

$q(x,y,z,t)$ —二类边界上已知流量函数。

3) 第三类边界

$$(K(h-z) \frac{\partial h}{\partial \bar{n}} + \alpha h) \Big|_{\Gamma_3} = q(x, y, z) \quad (\text{B.7})$$

式中:

α —已知函数;

Γ_3 —三类边界;

K —三维空间上的渗透系数张量;

\bar{n} —边界 Γ_3 的外法线方向;

$q(x,y,z)$ —三类边界上已知流量函数。

B.1.2 地下水溶质运移模型

水是溶质运移的载体, 地下水溶质运移数值模拟应在地下水流场模拟基础上进行。因此, 地下水溶质运移数值模型包括水流模型(见附录B1.1)和溶质运移模型两部分。

1. 控制方程

$$R\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i c) - Wc_s - Wc - \lambda_1 \theta c - \lambda_2 \rho_b \bar{c} \quad (\text{B.8})$$

式中:

R —迟滞系数, 无量纲, $R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{c}}{\partial c}$;

ρ_b —介质密度, $\text{mg}/(\text{dm})^3$;

θ —介质孔隙度, 无量纲;

c —组分的浓度, mg/L ;

\bar{c} —介质骨架吸附的溶质浓度, mg/L ;

t —时间, d ;

x, y, z —空间位置坐标, m ;

D_{ij} —水动力弥散系数张量, m^2/d ;

V_i —地下水渗流速度张量, m/d ;

W —水流的源和汇, $1/d$;

c_s —组分的浓度, mg/L ;

λ_1 —溶解相一级反应速率, $1/d$;

λ_2 —吸附相反应速率, $L/(mg \cdot d)$ 。

2. 初始条件

$$c(x, y, z, t) = c_0(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \Omega, t = 0 \quad (B.9)$$

式中:

$c_0(x, y, z)$ —已知浓度分布;

Ω —模型模拟区域。

3. 边界条件

1) 第一类边界—给定浓度边界

$$c(x, y, z, t)|_{\Gamma_1} = c(x, y, z, t) \quad (x, y, z) \in \Gamma_1, t \geq 0 \quad (B.10)$$

式中:

Γ_1 —表示定浓度边界;

$c(x, y, z, t)$ —定浓度边界上的浓度分布。

2) 第二类边界—给定弥散通量边界

$$\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \Big|_{\Gamma_2} = f_i(x, y, z, t) \quad (x, y, z) \in \Gamma_2, t \geq 0 \quad (B.11)$$

式中:

Γ_2 —通量边界;

$f_i(x, y, z, t)$ —边界 Γ_2 上已知的弥散通量函数。

3) 第三类边界—给定溶质通量边界

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i c \Big|_{\Gamma_3} = g_i(x, y, z, t) \quad (x, y, z) \in \Gamma_3, t \geq 0 \quad (B.12)$$

式中:

Γ_3 —混合边界;

$g_i(x, y, z, t)$ — Γ_3 上已知的对流—弥散总的通量函数。

B.2 解析法

B.2.1 一维无限区域瞬时注入点源和连续注入点源

假设含水层为一维无限长度，在 $x = 0$ 处有一个瞬时注入或连续注入点源。

1. 假设条件:

- 1) 流体的密度和黏度为常数;
- 2) 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- 3) 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数 (无径向流动);
- 4) 纵向和横向扩散系数 (D_x, D_T) 为常数。

2. 控制方程 (瞬时注入点源):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C + \frac{Qdt}{nA} C_0 \delta(x - X_c) \delta(t - t'), \quad (\text{B.13})$$

3. 边界条件:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \pm\infty \quad (\text{B.14})$$

4. 初始条件:

$$C = 0, \quad -\infty < x < +\infty, \quad t = 0 \quad (\text{B.15})$$

5. 解析解:

1) 瞬时注入点源:

$$C(x, t) = \frac{C_0 Q dt}{2nA\sqrt{\pi t D_x}} \exp\left[-\frac{(x - X_c - Vt)^2}{4D_x t} - \lambda t\right] \quad (\text{B.16})$$

2) 连续注入点源:

$$C(x, t) = \frac{C_0 Q}{2nA\sqrt{\pi D_x}} \exp\left[\frac{V(x - X_c)}{2D_x}\right] \cdot \int_{\tau=0}^{\tau=t} \frac{1}{\tau^{\frac{1}{2}}} \exp\left[-\left(\frac{V^2}{4D_x} + \lambda\right)\tau - \frac{(x - X_c)^2}{4D_x \tau}\right] d\tau \quad (\text{B.17})$$

式中:

C —单位体积溶液的溶质质量 $[\text{M/L}^3]$;

C_0 —已知溶质浓度;

Q —溶质注入流量;

A —垂直于流动方向的注入截面的面积;

τ —时间积分的虚拟变量;

n —孔隙度;

V — x 方向的匀速流动速度 $[\text{L/T}]$;

λ —反应速率 $[\text{1/T}]$;

D_x —溶质扩散系数 $[\text{L}^2/\text{T}]$;

dt —无穷小的时间间隔;

X_c —点源的 x 坐标;

t' —瞬时注入溶质的时间。

B.2.2 第一类边界条件的半无限系统

1.假设条件:

- 1) 流体的密度和黏度为常数;
- 2) 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- 3) 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数;
- 4) 纵向扩散系数 (D) 和 D_x 相等 (D_x 为常数)。

2.控制方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C, \quad (\text{B.18})$$

3.边界条件:

$$C = C_0, \quad x = 0 \quad (\text{B.19a})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \infty \quad (\text{B.19b})$$

4.初始条件:

$$C = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad t = 0 \quad (\text{B.20})$$

5.解析解:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \exp \left[\frac{x}{2D} (V - U) \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x - Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left[\frac{x}{2D} (V + U) \right] \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x + Ut}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\} \quad (\text{B.21})$$

式中:

$$U = \sqrt{V^2 + 4\lambda D}.$$

$\operatorname{erfc}()$ —余误差函数。

B.2.3 第三类边界条件的半无限系统

1.假设条件:

- a. 流体的密度和黏度为常数;
- b. 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- c. 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数;
- d. 纵向扩散系数 (D) 和 D_x 相等 (D_x 为常数)。

2.控制方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C, \quad (\text{B.22})$$

3.边界条件:

$$VC_0 = VC + D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad x = 0 \quad (\text{B.23a})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \infty \quad (\text{B.23b})$$

4.初始条件:

$$C = 0, 0 < x < \infty \quad \text{在 } t = 0 \quad (\text{B.24})$$

5.解析解:

$$C(x,t) = \frac{C_0 V^2}{4\lambda D} \left\{ 2 \exp\left(\frac{xV}{D} - \lambda t\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Vt}{2\sqrt{Dt}}\right) + \left(\frac{U}{V} - 1\right) \exp\left[\frac{x}{2D}(V-U)\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x-Ut}{2\sqrt{Dt}}\right) - \left(\frac{U}{V} + 1\right) \exp\left[\frac{x}{2D}(V+U)\right] \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Ut}{2\sqrt{Dt}}\right) \right\} \quad (\text{B.25})$$

对于不发生一级化学反应 ($\lambda=0$) 的溶质运移问题, 其解析解为:

$$C(x,t) = C_0 \left\{ \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\frac{x-Vt}{2\sqrt{Dt}}\right) + \sqrt{\frac{V^2 t}{\pi D}} \exp\left[-\frac{(x-Vt)^2}{4Dt}\right] - \frac{1}{2} \left(1 + \frac{Vx}{D} + \frac{V^2 t}{D}\right) \exp\left(\frac{Vx}{D}\right) \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x+Vt}{2\sqrt{Dt}}\right) \right\} \quad (\text{B.26})$$

B.2.4 二维无限平面瞬时注入点源和连续注入点源

假设含水层为无限区域面积, 并且在 x, y 平面上有一个瞬时或连续点源。

1.假设条件:

- 1) 流体的密度和黏度为常数;
- 2) 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- 3) 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数 (无径向流动);
- 4) 纵向和横向扩散系数 (D_x, D_y) 为常数。

2.控制方程 (瞬时注入点源):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C + \frac{Q dt}{nL} C_0 \delta(x - X_c) \delta(y - Y_c) \delta(t - t'), \quad (\text{B.27})$$

3.边界条件:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, x = \pm\infty \quad (\text{B.28a})$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0, y = \pm\infty \quad (\text{B.28b})$$

4.初始条件:

$$C = 0, -\infty < x < +\infty, -\infty < y < +\infty, t = 0 \quad (\text{B.29})$$

5.解析解:

1) 瞬时注入点源:

$$C(x,y,t) = \frac{C_0 Q dt}{4n\pi L t \sqrt{D_x D_y}} \exp\left[-\frac{(x-X_c-Vt)^2}{4D_x t} - \frac{(y-Y_c)^2}{4D_y t} - \lambda t\right] \quad (\text{B.30})$$

2) 连续注入点源:

$$C(x,y,t) = \frac{C_0 Q}{4n\pi L \sqrt{D_x D_y}} \exp\left[\frac{V(x-X_c)}{2D_x}\right] \cdot \int_{\tau=0}^{\tau=t} \frac{1}{\tau} \exp\left[-\left(\frac{V^2}{4D_x} + \lambda\right)\tau - \frac{(x-X_c)^2}{4D_x \tau} - \frac{(y-Y_c)^2}{4D_y \tau}\right] d\tau \quad (\text{B.31})$$

令 t 趋于 $+\infty$, 得到稳态解:

$$C(x,t) = \frac{C_0 Q}{2n\pi L \sqrt{D_x D_y}} \exp\left[\frac{V(x-X_c)}{2D_x}\right] \cdot K_0 \left\{ \sqrt{\left(\frac{V^2}{4D_x} + \lambda\right) \left[\frac{(x-X_c)^2}{D_x} + \frac{(y-Y_c)^2}{D_y}\right]} \right\} \quad (\text{B.32})$$

式中:

K_0 —修正的二阶和零阶贝塞尔函数;

L —垂直于 x - y 平面的注入长度;

X_c, Y_c —点源的 x, y, z 坐标;

B.2.5 含有有限宽度溶质源的无限宽度含水层

假设含水层为半无限长度并且在入流边界处 ($x=0$) 含有溶质源。含水层的宽度可以看作有限或者无限的。在无限宽度系统中, 含水层边缘的隔水边界离得足够远, 不对研究区域溶质的分布产生影响。

1. 假设条件:

- 1) 流体的密度和黏度为常数;
- 2) 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- 3) 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数;
- 4) 纵向和横向扩散系数 (D_x, D_y) 为常数。

2. 控制方程:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C, \quad (\text{B.33})$$

3. 边界条件:

$$C = C_0, \quad x = 0, \quad Y_1 < y < Y_2 \quad (\text{B.34a})$$

$$C = 0, \quad x = 0, \quad y < Y_1 \text{ 或 } y > Y_2 \quad (\text{B.34b})$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad y = \pm\infty \quad (\text{B.34c})$$

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \infty \quad (\text{B.34d})$$

4. 初始条件:

$$C = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad -\infty < y < +\infty, \quad t = 0 \quad (\text{B.35})$$

5. 解析解:

$$C(x, y, t) = \frac{C_0 x}{4\sqrt{\pi D_x}} \exp\left(\frac{Vx}{2D_x}\right) \cdot \int_{\tau=0}^{\tau=t} \tau^{-\frac{3}{2}} \exp\left[-\left(\frac{V^2}{2D_x} + \lambda\right)\tau - \frac{x^2}{4D_x\tau}\right] \left\{ \operatorname{erfc}\left[\frac{(Y_1-y)}{2\sqrt{D_y\tau}}\right] - \operatorname{erfc}\left[\frac{(Y_2-y)}{\sqrt{D_y\tau}}\right] \right\} d\tau \quad (\text{B.36})$$

式中:

Y_1 —溶质源宽度的下限值 ($x=0$ 处溶质源 y 坐标的较小值);

Y_2 —溶质源宽度的上限值 ($x=0$ 处溶质源 y 坐标的较大值)。

B.2.6 含有瞬时注入点源或连续注入点源的无限长度含水层

假设含水层沿三个坐标轴方向都为无限长度。溶液以固定的速率和浓度(C_0)从点源进入含水层。

1.假设条件:

- 1) 流体的密度和黏度为常数;
- 2) 溶质可能发生一级化学反应 (对于不反应的溶质, $\lambda=0$);
- 3) 流动只发生在 x 方向, 且速度为常数;
- 4) 纵向扩散系数 (D_x) 和横向扩散系数 (D_y, D_z) 为常数。

2.控制方程 (瞬时注入点源):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda C + \frac{Qdt}{n} C_0 \cdot \delta(x - X_c) \delta(y - Y_c) \delta(z - Z_c) \delta(t - t') \quad (\text{B.37})$$

3.边界条件:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x = \pm\infty \quad (\text{B.38a})$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad y = \pm\infty \quad (\text{B.38b})$$

$$\frac{\partial C}{\partial z} = 0, \quad z = \pm\infty \quad (\text{B.38c})$$

4.初始条件:

$$C = 0, \quad -\infty < x < \infty, \quad -\infty < y < \infty, \quad -\infty < z < \infty \quad \text{在 } t' = 0 \quad (\text{B.39})$$

5.解析解:

1) 瞬时注入点源:

$$C(x,y,z,t) = \frac{C_0 Q dt \exp\left[\frac{V(x-X_c)}{2D_x} - \left(\frac{V^2}{4D_x} + \lambda\right)(t-t')\right]}{8n\pi^{\frac{3}{2}}(t-t')^{\frac{3}{2}} \sqrt{D_x D_y D_z}} \cdot \exp\left[-\frac{(x-X_c)^2}{4D_x(t-t')} - \frac{(y-Y_c)^2}{4D_y(t-t')} - \frac{(z-Z_c)^2}{4D_z(t-t')}\right] \quad (\text{B.40})$$

2) 连续注入点源:

$$C(x,y,z,t) = \frac{C_0 Q \exp\left[\frac{V(x-X_0)}{2D_x}\right]}{8n\pi\gamma\sqrt{D_y D_z}} \left\{ \exp\left(\frac{\gamma\beta}{2D_x}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{(\gamma+\beta t)}{2\sqrt{D_x t}}\right] + \exp\left(\frac{-\gamma\beta}{2D_x}\right) \operatorname{erfc}\left[\frac{(\gamma-\beta t)}{2\sqrt{D_x t}}\right] \right\} \quad (\text{B.41})$$

式中:

X_c, Y_c, Z_c —点源的 x, y, z 坐标;

$$\gamma = \left[(x - X_c)^2 + \frac{D_x(y - Y_c)^2}{D_y} + \frac{D_x(z - Z_c)^2}{D_z} \right]^{1/2};$$

$$\beta = [V^2 + 4D_x\lambda]^{1/2}.$$

附录 C
(资料性附录)
地下水模型参数

表 C.1 常用地下水模型参数确定方法

参数	参数用途	确定方法	方法描述	辅助分析软件	备注
渗透系数	水流模型	1.野外抽水试验	在选定的钻孔中或竖井中，对选定含水层(组)抽取地下水，形成人工降深场，利用涌水量与水位下降的历时变化关系，测定含水层(组)富水程度和水文地质参数。通过抽水试验可以确定含水层介质透水能力大小。	AquiferTest Aqtesolv MODFLOW PUMPTST SLUGC SLUGT2 TIMELAG TGUESS WELLTEST	试验方法说明参照《水文地质手册（第二版）》（2012），或《供水水文地质勘查规范》(GB50027-2001)。
		2.室内土柱试验			室内试验结果运用在野外现场，通常有尺度效应。
		3.经验数值			经验数值见附表 C.2 和 C.3。
潜水给水度	水流模型	1.实验室法	在器皿中填充地层介质，注水后，测定流出水的量，进而分析得出给水度值。		野外试验详细方法说明参见《水文地质手册（第二版）》（2012）。
		2.单孔抽水资料	根据潜水含水层单井抽水试验中流量，降深，随时间的变化关系，用曲线法分析求解给水度。		
		3.指示剂法	通过在主孔抽水，观测孔投入指示剂的方法，确定指示剂在抽水孔中出现的时间，进而计算给水度。		
		4.非稳定流有限差分方法	利用观测孔的水位长期变化数据，通过求解非稳定流有限差分方程，得出给水度。		
		5.非稳定流抽水试验法	在选定的钻孔中或竖井中，对选定含水层(组)抽取地下水形成人工降深场，利用涌水量与水位下降的历时变化关系，测定含水层(组)富水程度和水文地质参数。	AquiferTest Aqtesolv MODFLOW WELLTEST	
		6.经验数值			经验数值见附表 C.2。
承压	非稳定流水流	1.抽水试	在选定的钻孔中或竖井中，对选定含水层(组)抽取地下	AquiferTest Aqtesolv	也可用野外试验和室内试验

参数	参数用途	确定方法	方法描述	辅助分析软件	备注
水单位释水系数	模型	1. 经验数值	水, 形成人工降深场, 利用涌水量与水位下降的历时变化关系, 测定含水层(组)富水程度和水文地质参数。	MODFLOW THCVFIT THEISFIT TSSLEAK	的方法。
		2. 经验数值			经验数值见附表 C.4。
弥散度	溶质运移模型	1. 弥散试验	研究污染物在地下水中运移时其浓度的变化规律, 并通过试验获得进行地下水环境质量定量评估的弥散参数。		弥散试验通常使用污染物的天然状态法、附加水头法、连续注水法、脉冲注入法等进行。详见《城市环境水文地质工作规范(DZ 55-87)》。
		2. 经验数值			经验数值见附表 C.11。
孔隙度	溶质运移模型	1. 实验室分析法	孔隙度的测定是在实验室中进行的, 用的是小块的岩芯或岩屑。		
		2. 定性估计方法	包括: 电测, 钻井岩屑的显微镜检查, 钻井时间录井, 岩心的短缺, 放射性测井, 其他测井方法。		
		3. 经验数值			经验数值见附表 C.5。
地下水流速	水流流场	1. 流速试验	一般在地下水的水平运动为主的裂隙、岩溶含水层中进行, 通过按照地下水流向布设试验井, 运用投放试剂的方法, 观测并计算地下水流速。		参见《城市环境水文地质工作规范(DZ 55-87)》, 《水文地质手册(第二版)》(2012)或相关文献。
		2. 水头分析法	利用水头数据从三个空间方向估算流速分量。每 4 观测点组成一个小组, 连接在一起形成四面体, 然后使用线性插值计算每个四面体的头部梯度。运用达西定律, 最后生成速度分量。	TETRA	该程序可用于承压和非承压, 各向异性或均质含水层。

参数	参数用途	确定方法	方法描述	辅助分析软件	备注
地下水流向	水流流场	1.静水位分析法	根据多点静水位手动描绘地下水流线；或者插值软件插值计算地下水流场分布。	Surfer GIS	
		2.三角形法	沿等边三角形顶点布置三个钻孔，测得各孔水位高程后，编制等水位线图。		详见《水文地质手册（第二版）》（2012）。
降水入渗系数	含水层参数	1.基本计算法	通过全年降水入渗补给量与全年降水量 的比值计算入渗系数。		详见《水文地质手册（第二版）》（2012）。
		2.地下水均衡场计算	在某均衡区的均衡时段内，地下水补给量与消耗量之差等于地下水储存量的变化量。利用均衡关系，求得降雨入渗补给系数。		
		3.地下水动态资料分析法	根据地下水动态长期观测资料及降雨数据，分析求得入渗系数。		
		4.数理统计法	建立次降雨入渗系数，雨前地下水位埋深，降雨量大小之间关系式的统计模拟分析。得出降雨入渗系数随其他参数的变化曲线。		
		5.数值法反求	利用数学模型，运用数值模拟方法推求入渗系数。		
		6.经验数值			
分配系数	溶质运移参数	经验数值	由实验室控制下土柱试验所得，一般可通过文献检索确定取值范围；项目支持充分情况下可取原状土进行室内试验。		室内试验结果运用在野外现场，通常有尺度效应。
降解系数	溶质运移参数	经验数值	由实验室控制下土柱试验所得，一般可通过文献检索确定取值范围；项目支持充分情况下可取原状土进行室内试验。		

表 C.2 松散岩层水平渗透系数经验取值范围

岩性	岩层颗粒		渗透系数 K/ (m·d ⁻¹)	岩性	岩层颗粒		渗透系数 K/ (m·d ⁻¹)
	粒径/mm	所占比重 /%			粒径 /mm	所占比重 /%	
轻亚粘土			0.05~0.1	粗砂	0.5~1.0	>50	25~50
亚粘土			0.10~0.25	砾砂	1.0~2.0	>50	50~100
黄土			0.25~0.50	圆砾			75~150
粉土质砂			0.50~1.0	卵石			100~200
粉砂	0.05~0.1	<70	1.0~1.5	块石			200~500
细砂	0.1~0.25	>70	5.0~10.0	漂石			500~1000
中砂	0.25~0.5	>50	10.0~25				

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.3 松散岩层给水度经验取值

岩性	给水度 μ	岩性	给水度 μ
亚粘土	0.04~0.07	中砂	0.15~0.30
亚砂土	0.07~0.10	粗砂及砂砾石	0.20~0.35
粉砂	0.10~0.15	粘土胶结的砂岩	0.02~0.03
细砂	0.10~0.20	裂隙灰岩	0.008~0.10

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)及《水文地质学基础(第六版)》(2010)

表 C.4 承压含水层释水(贮水)系数经验取值

岩性	释水系数 (1/m)	岩性	释水系数 (1/m)
塑性粘土	$(2.6 \sim 20) \times 10^{-3}$	基岩裂隙层	$(3.3 \sim 69) \times 10^{-6}$
硬质粘土	$(1.3 \sim 2.6) \times 10^{-3}$	致密基岩	$<3.3 \times 10^{-6}$
中硬度粘土	$(9.2 \sim 13) \times 10^{-4}$	松散砂层	$(4.9 \sim 10) \times 10^{-4}$
致密砂砾石	$(4.9 \sim 10) \times 10^{-5}$	致密砂层	$(1.3 \sim 2.0) \times 10^{-4}$

注：资料源自 Domenico (1996)

表 C.5 各种岩石的渗透系数、孔隙度、给水度及干容重经验值

岩土类别	渗透系数 $K/$ ($\text{cm}\cdot\text{s}^{-1}$)	孔隙率 n	给水度 μ	干容重	试验资料来源
砾	2.4×10^2	0.371	0.354	1.71	J.Zollor 瑞士工 学研 究所
粗砂	1.6×10^2	0.431	0.338	1.53	
砂砾	7.6×10^{-1}	0.327	0.251	1.83	
砂砾	1.7×10^{-1}	0.265	0.182	2	
砂砾	7.2×10^{-2}	0.335	0.161	1.75	
中粗砂	4.8×10^{-2}	0.394	0.18	1.65	
砂砾 (粘土含量 1%)	2.3×10^{-5}	0.394	0.0036	1.65	
砂砾 (粘土含量 16%)	2.5×10^{-6}	0.342	0.0021	1.79	
重粉质壤土 $d_{50}=0.02\text{mm}$	2×10^{-4}	0.442	0.007	1.48	南京水 利科学 研究院
中细砂 $d_{50}=0.2\text{mm}$	$1.7\times 10^{-3}\sim 6.1\times 10^{-4}$	0.438~ 0.392	0.074~ 0.039	1.49~1.61	
粗砾 $d_{50}=5\text{mm}$	6.13×10^2	0.932	0.36	1.61	
砂砾石料	2.4×10^{-3}	0.302	0.078	1.85	
砂砾石料	1.1×10^{-1}	0.264	0.096	1.95	
砂砾石料	1.15×10^2	0.306	0.22	1.84	
砂砾石料	2.5×10^{-1}	0.442	0.3	1.48	
砂砾石料	6.72×10^{-2}	0.358	0.21	1.7	

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.6 我国部分地区降水入渗系数

省别	岩性			
	粘土	亚粘土	亚砂土	粉细砂
河南	0.08	0.15~0.20	0.20~0.25	0.30~0.35
山东	0.125	0.15~0.20	0.20~0.25	0.25~0.30
安徽	0.13	0.10~0.15	0.25~0.30	—
江苏	—	0.15~0.20	0.25~0.30	—
河北	0.1	0.15~0.20	0.20~0.30	0.30~0.40

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.7 不同气候条件下降水入渗系数

年降水型	埋深/m		1.0~2.0		2.0~4.0		4.0~6.0	
	亚砂土	亚粘土	亚砂土	亚粘土	亚砂土	亚粘土	亚砂土	亚粘土
丰水年	-	0.26	0.26	0.22	0.21	0.19		
平水年	-	0.21	0.2	0.18	0.11	0.15		
枯水年	-	0.16	0.14	0.13	0.12	0.11		

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.8 不同潜水埋深条件下的潜水蒸发系数

岩性	潜水埋深/m				
	0.5	1.0	1.5	2.0	3.0
亚粘土	0.529	0.298	0.147	0.082	0.046
黄土质砂土	0.801	0.431	0.194	0.087	0.028
亚砂土	0.743	0.255	0.032	0.017	—
粉细砂	0.826	0.472	0.168	0.044	—
砂砾石	0.486	0.41	0.014	0.004	0.001

注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.9 不同植被条件下的年潜水蒸发系数

植被	潜水埋深/m							
	0.5	1.0	1.5	2.0	2.5	3.0	3.5	4.0
无作物	0.330	0.145	0.053	0.034	0.029	0.021	0.019	0.017
有作物	0.634	0.385	0.139	0.070	0.043	0.029	0.020	0.017

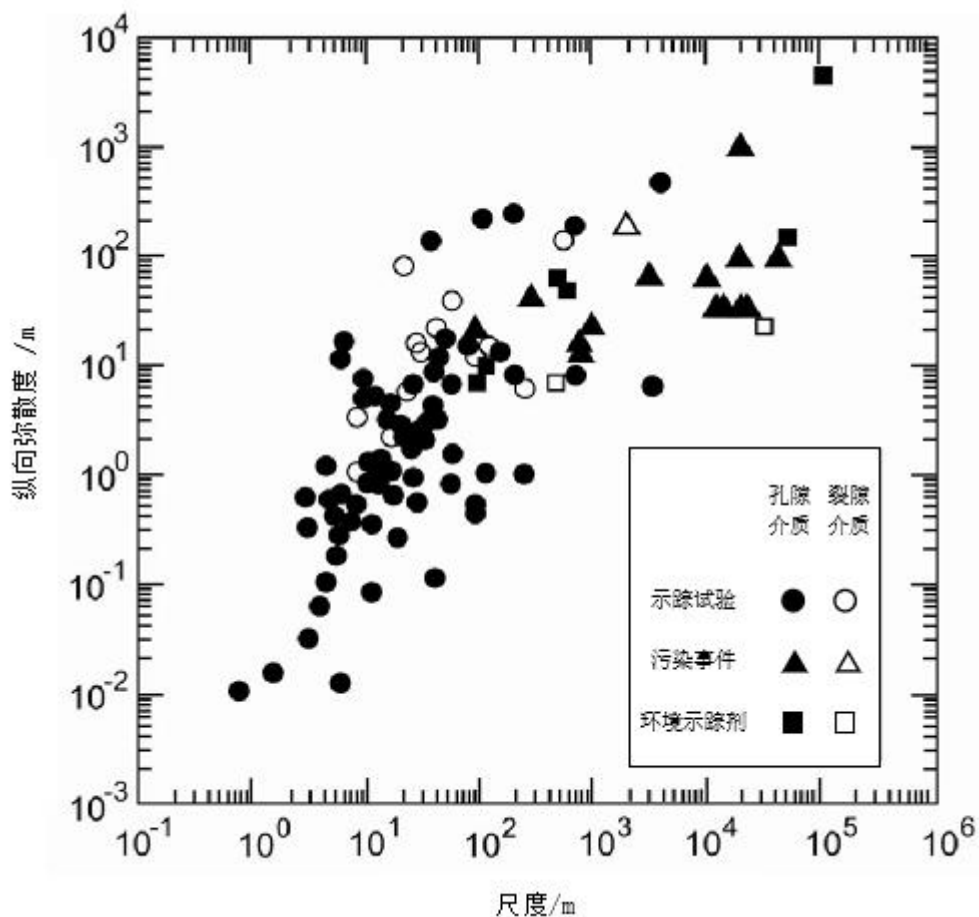
注：资料源自《水文地质手册(第二版)》(2012)

表 C.10 孔隙度经验取值

松散沉积物		沉积岩		结晶岩	
粘土	40 ~ 70	砂岩	5 ~ 30	有裂隙结晶岩	0 ~ 10
粉砂	35 ~ 50	泥岩	21 ~ 41	致密结晶岩	0 ~ 5
细砂	26 ~ 53	灰岩, 白云岩	0 ~ 20	玄武岩	3 ~ 35
粗砂	31 ~ 46	岩溶灰岩	5 ~ 50	风化花岗岩	34 ~ 57
细砂砾石	25 ~ 38	页岩	0 ~ 10	风化辉长岩	42 ~ 45
粗砂砾石	24 ~ 36				

注：资料源自《水文地质学基础（第六版）》（2010）及 Johnson 和 Morris（1962）

表 C.11 纵向弥散度与观测尺度之间的关系



注：资料源自 Gelhar 等（1992）

表 C.12 沉积物中有机碳质量分数 f_{oc}

岩性	有机碳质量分数 f_{oc} (g/g)
中砂 (冰河期, North Bay)	0.00017
细至中粒砂 (冰河期, Woolwich)	0.00023
细砂 (冰河期, Chalk River)	0.00026
中细砂 (冰河期, Borden)	0.00028
中细砂 (Ottawa-Gloucester)	0.00060
中砂 (Cambridge)	0.00065
细砂 (冰湖期)	0.00102
湖淤泥 (冰湖期 Wildwood)	0.00108
砂砾石 (Glatt Valley)	0.0004~0.0073
砂砾石 (Aare Valley)	0.0023
富营养化湖的沉积物	0.019~0.058

注: 资料源自 Domenico 和 Schwartz (1998)

表 C.13 估算有机碳分离常数(K_{oc})的经验关系式

由 K_{ow} 估算 K_{oc} 的经验公式	代表的化学物类型	参考文献
$\log(K_{oc}) = 1.000 \log K_{ow} - 0.21$	大部分为芳香或多环芳香物质, 二氯化物	Karickhoff 等 (1979)
$\log(K_{oc}) = 0.544 \log K_{ow} - 1.377$	多种类型, 大部分为杀虫剂	Kenaga 和 Goring (1980)
$\log(K_{oc}) = 1.029 \log K_{ow} - 0.18$	各种杀虫剂、除草剂、杀真菌剂	Roa 和 Davidson (1980)
$\log(K_{oc}) = 0.937 \log K_{ow} - 0.006$	芳香物质、多环芳香物质、二硝基甲苯除草剂等	Brown 和 Flagg (1981)
$\log(K_{oc}) = 0.524 \log K_{ow} - 0.618$	取代的苯基脲类和烃基-N-苯胺基甲酸盐	Briggs (1973)
由 S 估算 K_{oc} 的经验公式	代表的化学物类型	参考文献
$\log(K_{oc}) = 4.277 - 0.557 \log (S_1)$	氯代烃类物质	Chiou 等 (1979)
$\log(K_{oc}) = 0.440 - 0.540 \log (S_2)$	大部分为芳香或多环芳香物质, 二氯化物	Karickhoff 等 (1979)
$\log(K_{oc}) = 3.640 - 0.550 \log (S_3)$	多种类型, 大部分为杀虫剂	Kenaga.和 Goring (1980)
由 K_{oc} 估算 K_d 的经验公式		
$K_d = K_{oc} f_{oc}$		

注: 资料源自 Lyman 等 (1990)

注释:

K_{oc} : 化合物的有机碳-水分离系数 (ml/g), 物理意义为每克有机碳所对应的水体积

K_{ow} : 化合物的辛醇-水分配系数

S_1 : 水中溶性度 ($\mu\text{mol/L}$)

S_2 : 水中溶性度 ($\mu\text{mol/mol}$)

S_3 : 水中溶性度 (mg/L)

K_d : 有机物线性等温吸附分配系数 (mL/g)

f_{oc} : 含水介质中的有机碳质量分数 (g/g), 物理意义为每克含水介质中有机碳的质量

应用步骤:

当含水层中的有机物吸附过程可假设为服从线性等温线时, 有机物在水和含水介质之间的分配系数 K_d 同含水介质中有机碳含量 f_{oc} 之间的关系为: $K_d = K_{oc} f_{oc}$ 。当 $f_{oc} > 0.1\%$ 时, 方程可用。分配系数 K_d 估算过程如下:

(1) 从相关文献中找出化合物的辛醇-水分配系数 K_{ow} 或它的水中溶解度 S_w , 结合实际情况及有机物属性, 选择表 C13 中的经验公式, 利用 K_{ow} 或 S_w 求得化合物的有机碳-水分离系数 K_{oc}

(2) 由实验测得或取经验值得到含水介质有机碳质量分数 f_{oc}

(3) 由上式 $K_d = K_{oc} f_{oc}$ 求得 K_d

表 C.14 常见放射性核素半衰期

核元素	$t_{1/2}$ 年	核元素	$t_{1/2}$ 年
^3H	12.3	^{230}Th	8×10^4
^{14}C	5×10^3	^{232}Th	1.4×10^{10}
^{36}Cl	3.1×10^5	^{231}Pa	3×10^4
^{63}Ni	100	^{241}Am	432
^{90}Sr	29	^{243}Am	7×10^3
^{93}Zr	1.5×10^6	^{79}Se	6.5×10^4
^{94}Nb	2×10^4	^{93}Mo	3.5×10^3
^{107}Pd	7×10^6	^{99}Tc	2×10^5
^{129}I	2×10^7	^{126}Sn	1×10^5
^{135}Cs	3×10^6	^{151}Sm	90
^{137}Cs	30	^{147}Sm	1.3×10^{11}
^{154}Eu	8.2	^{106}Ru	1
^{210}Pb	22	^{235}U	7×10^8
^{226}Ra	1.6×10^3	^{238}U	4.5×10^9
^{227}Ac	22	^{237}Np	2×10^6

注：资料源自 Moody(1982)

附录 D
(规范性附录)
评估成果表达示例

表 D.1 地下水污染模拟预测评估图件要求

成果图件名称	包含要素
评估区地下水污染现状分析成果图	水系、取水口、监测点、行政边界、评估区边界、水文地质边界、单点污染综合评价级别、区域综合污染评估结果
评估区目标含水层主要污染物浓度分布等值线图	水系、取水口、监测点、行政边界、评估区边界、水文地质边界、各目标层位地下水中主要污染物浓度值及等值线
评估区地理位置详图	评估区范围、主要居民点及标志性的地形、地貌等
评估区水文地质图	地表主要地理地貌，如城市、城镇、河流、湖泊等，岩性，各类地质水文构造（如断层）的空间位置，各源汇项及其性质
地下水流场图	地下水位统测点位置、水位、等值线
评估区地表高程等值线图	地表高程控制点、等高线
对于承压含水层，顶底板等值线图或含水层等厚度图；对于潜水含水层，底板标高等值线图	顶底板控制点高程及等值线
评估区水文地质剖面图（包括 1 条平行于地下水水流方向的剖面图和 1 条与水流方向垂直的剖面图）	地表地理要素：包括剖面所切割过的对应地表主要地理地貌，如城市、城镇、河流、湖泊等；含水层结构：包括各类地质构造（如断层）的地理位置；地下水水位：各类源汇项及其性质
评估区潜在污染源空间位置图	潜在污染源空间位置、几何形体
污染物进入地下水断面概念图	断面岩性、地下水水位、污染源位置
潜在污染源空间位置图、主要污染物现状空间分布图与地下水流场三者叠加图	污染源空间位置、污染物采样点与浓度、污染物等值线、水位等值线图
模型计算区网格图	评估区基本底图，包括行政边界、水系、取水口、观测站等基本要素；基本底图上叠加数值计算区离散网格图
初始流场图	初始流场的分布图，用箭头标明地下水流向
初始浓度场图	在初始流场图上叠加初始浓度场的分布图，用特征图标标明主要污染源的位置
观测站点水头拟合曲线图	基本观测站点信息（名称、位置），观测数据时间区间，水头观测数据和模拟结果以不同线型和颜色表达
观测站点溶质浓度拟合曲线图	基本观测站点信息（名称、位置），观测数据时间区间，溶质浓度观测数据和模拟结果以不同线型和颜色表达
预测流场图	预测流场的分布图，用箭头标明水流的流向

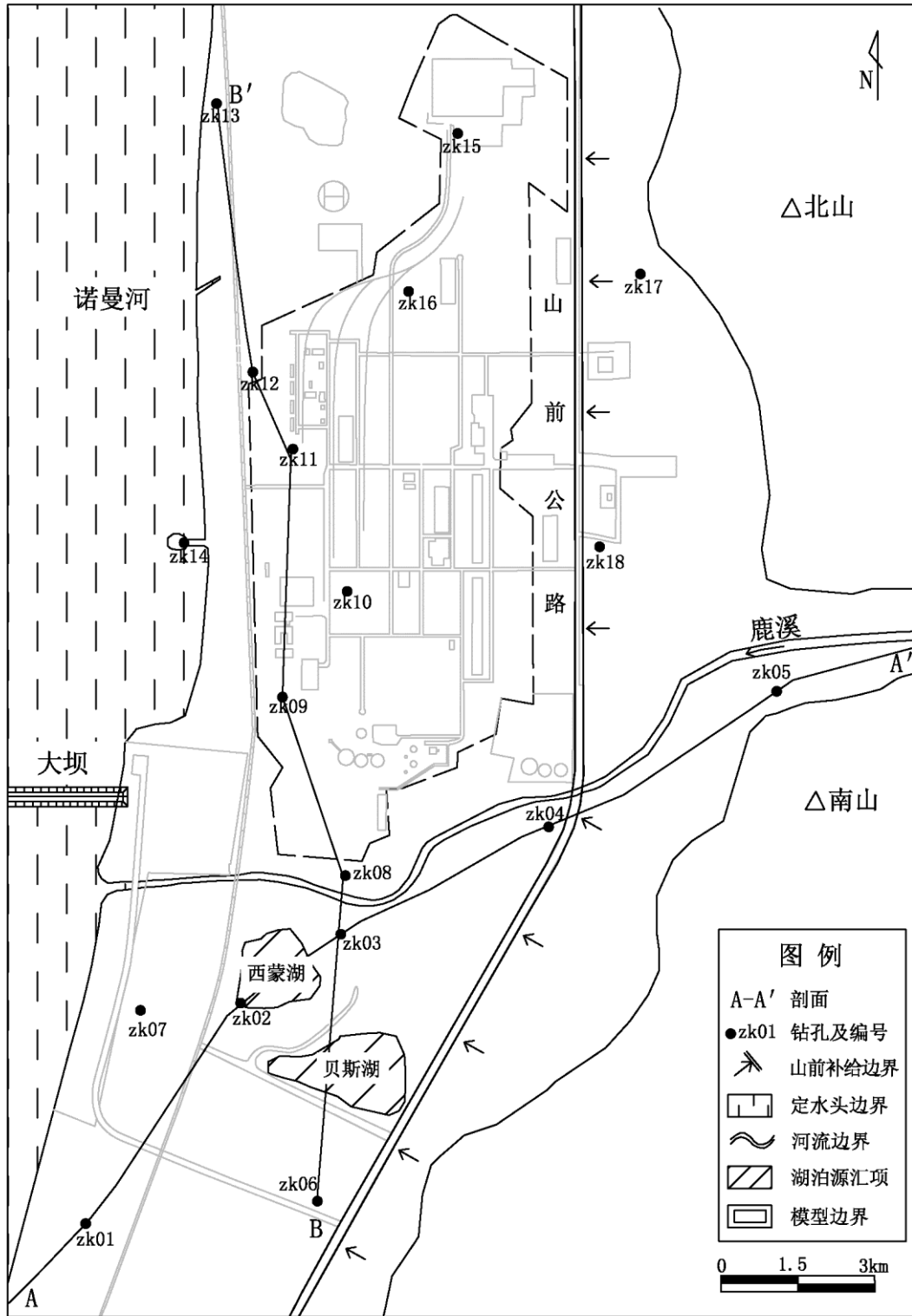
预测浓度场图	在预测流场的基础上叠加预测浓度场的分布图，用箭头标明污染溶质迁移的方向
预测水头的时间变化曲线	基本预测站点信息（名称、位置），预测时间区间，预测的水头随时间变化的曲线
预测浓度的时间变化曲线	基本预测站点信息（名称、位置），预测时间区间，预测的浓度随时间变化的曲线

表 D.2 水文地质条件概化成果要求

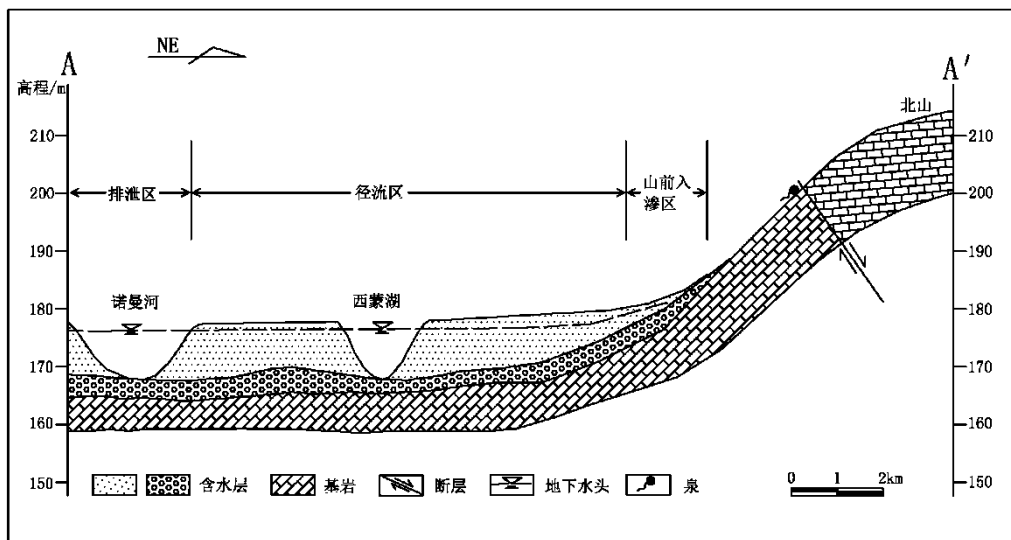
成果要求	平面图	剖面图
图件类型	<ol style="list-style-type: none"> 1.评估区地理位置图； 2.评估区水文地质图； 3.地下水流场图； 4.评估区地表高程等值线图； 5.对于承压含水层，顶底板等值线图或含水层等厚度图；对于潜水含水层，底板标高等值线图； 6.目标含水层（或弱透水层）及其相邻含水层（或弱透水层）在平面上的岩性分布图。 	<ol style="list-style-type: none"> 1.评估区水文地质剖面详图（至少包括1条平行于地下水水流方向的剖面图和1条与水流方向垂直的剖面图）； 2.评估区内监测井或水文地质钻孔成井剖面图。
说明	<ol style="list-style-type: none"> 1.评估区基本情况：包括评估区范围、主要居民点及标志性的地形、地貌等； 2.水文地质控制点：包括地表河流、湖泊、开采井及地下水的天然露头； 3.地下水含水层控制点：主要包括控制含水层的各类钻孔。 	<ol style="list-style-type: none"> 1.地表地理要素：包括剖面线所经过的对应地表主要地理地貌单元，如城市、城镇、河流、湖泊等； 2.含水层结构：包括各类地质构造（如断层）的地理位置； 3.地下水水位：评估区初始地下水位，用虚线描绘； 4.各类源汇项及其性质。

表 D.3 地下水污染特征概化成果要求

污染源解析	污染物迁移转化机制分析	污染受体分析
<ol style="list-style-type: none"> 1.评估区潜在污染源空间位置图； 2.主要污染物污染现状空间分布图（包括污染物采样点）； 3.潜在污染源空间位置图与主要污染物污染现状空间分布、地下水流场三者叠加图； 4.污染物进入地下水断面概图； 5.结合图形概要解释污染源与污染途径。 	<ol style="list-style-type: none"> 1.分析主要污染物物理、化学及生物特征； 2.定性分析污染物在地下水迁移过程发生的反应； 3.评估污染物纵向、横向迁移途径； 4.结合图形概要解释污染物迁移转化机制与污染途径。 	<p>调查污染源附近潜在的污染受体，确定其与污染源之间距离，定性分析污染受体可能存在的风险。</p>



(a) 平面图



(b) 剖面图

图 D.1 地下水水文地质条件概化图

<p>数据源 (示例)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 向现场人员了解 2. 历史记录 3. 现场调查: 探井、钻孔、土壤及地下水样品分析 4. 数据缺口 (实例) 漏油数据、漏油量等。 	<p>剖面图</p>	<p>平面图</p>
<p>不确定性分析</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 漏油时间与漏油量 2. 轻质油与溶解性油污染羽范围 轻质油污染羽是否迁移 3. 挥发与降解量 	<p>问题描述 根据历史记录分析燃油泄漏量, 现场调查发现土壤被污染、潜水面出现轻质油、地下水含溶解性污染物。</p> <p>概念模型</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 确定的三个潜在污染源 (土壤、地下水、轻质油); 2. 场址记录漏油污染发生的时间及漏油量; 3. 化学分析确定主要关注的污染物成分; 通过钻孔确定轻质油浓度及下游地下水中溶解性污染物浓度; 4. 初步计算表明溶液中自由相是污染物迁移主要过程; 5. 现场测定提供了一些挥发与降解证据, 但非定量。 	<p>概念模型转换为数学模型</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 污染源作为恒定源, 污染物浓度由溶液自由相和溶解相计算而得 (根据 Raolts 定理); 2. 源项的估算采用保守估计方法, 但是对污染负荷的计算分析应当注意合理性。

(a) 污染概念模型——源项

<p>数据源 (示例)</p> <p>附近场址地质调查结果</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.场址调查: 钻孔 2.日常监测: 水位、水质 3.实验室分析 4.野外试验: 计算导水系数的水头降深测试等 	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;"> <p>剖面图</p> <p>砾石透镜体—根据附近砂土和砾石采石场的调查, 确认砾石透镜体为横向不连续体</p> </div> <div style="text-align: center;"> <p>平面图</p> </div> </div>	
<p>不确定性分析</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.透镜体连续性 2.含水介质各向异性范围 3.污染羽几何尺寸 	<p>概念模型描述</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.在包气带运移视为垂直迁移到地下水水位, 轻质油在潜水面, 分析表明人为污染途径(如排水)可忽略; 2.地下水径流、排泄至地表河道。场址之下为砂土和砾石含水层, 含水层透镜体的存在将产生更多可渗透途径; 3.场址下游的地下水和河道视为污染受体。在观测范围内确定没有风险的抽水孔需要继续观测。 	<p>概念模型转换为数学模型</p> <p>使用砾石透镜体的导水系数数值进行的初步评估结果与观测结果对比显示, 地下水水流和溶质运移速率被过度评估, 须做进一步调整。</p>

(b) 污染概念模型—污染途径与污染受体

<p>数据源 (示例)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1.不同时间的水质监测结果, 指标包括有机物污染指标, 硝酸根, 硫酸根, 铁离子, 碱度, 氯化物等; 2.实验室分析 f_{oc}; 3.土壤气监测; 4.野外监测: pH, Eh, 溶解氧, 温度等。 	<div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 45%;"> <p>土壤中气体的挥发</p> <p>有机物的吸附</p> <p>非水相液体在地下水中溶解</p> </div> <div style="width: 45%;"> <p>样品分析表明, 钻孔中溶解性有机物的突破, 其随时间而增加, 但是, 包括上次监测结果在内, 数据不足以确定长期的变化趋势。</p> <p>浓度</p> <p>时间</p> <p>河道稀释</p> <p>水质分析表明存在降解, 但是没有足够数据定量描述其过程</p> </div> </div>	
--	--	--

<p>不确定性分析</p> <p>1.污染羽的计算范围与观测范围是否存在显著差异；</p> <p>2.计算中使用的衰减方程或导水系数值。</p>	<p>概念模型描述</p> <p>1.影响污染物迁移的过程；非水相液体在地下水中溶解；对流与弥散；污染物的吸附；污染物的生物降解；</p> <p>2.初步计算时仅假设对流、弥散、吸附过程，保守估计污染羽迁移可达范围比实际观测的污染物分布要远。</p>	<p>概念模型转化为数学模型</p> <p>有机物吸附通过线性等温线表征，其阻滞因子计算如下：</p> $R = 1 + \frac{f_{oc} * k_{oc} * \rho}{n}$ <p>参数来源： 有机物部分（f_{oc}）来自于土壤样品分析； 密度(ρ)来自土壤分析； 孔隙度(n)取自经验值，但是，需要与土壤水分含量比较； 分配系数（K_{oc}）来自参考文献值。</p> <p>基于样品算数平均值所得的值需要进行灵敏度分析，以确认关键参数。因为尚无足够信息证实生物降解存在，当前评估为保守型计算，即忽略污染物降解的过程。</p>
---	--	--

(c) 污染概念模型——污染过程

图 D.2 地下水污染概念模型示例