

非均质渗透介质纵向弥散度数值模拟 估算法适宜性探析^{*}

张 嘉,王明玉[†]

(中国科学院研究生院资源与环境学院,水系统安全研究中心,北京 100049)

(2010 年 4 月 7 日收稿;2010 年 5 月 21 日收修改稿)

Zhang J, Wang M Y. Suitability of the numerical simulation approach for estimation of longitudinal dispersivity in heterogeneous media[J]. Journal of the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, 2011, 28(1): 35-42.

摘 要 介绍了地下水溶质迁移转化模拟软件 MT3DMS 中的数值解法 MOC、MMOC、HMOC 和高阶 TVD 等的基本原理,分析比较了不同解法所获得的地下水污染时空分布模拟结果的质量误差以及纵向弥散度模拟计算结果异同,并进一步探讨了网格大小与污染源质量浓度对模拟结果的影响等.展现了通过数值模拟估算纵向弥散度的基本过程及其适宜性,重点探析了不同数值解法模拟估算弥散度的适用性.

关键词 地下水污染,模型,非均质,弥散度,数值模拟

中图分类号 TP79

随着地下水污染问题受到越来越广泛的重视,地下水污染预报成为地下水科学与工程领域理论研究和与工程实践的热点与重点之一.但在实际应用中存在着一个极为困难的问题,那就是模型中弥散参数的测定.由于尺度效应,野外弥散试验确定的弥散度值比室内土柱弥散试验确定的大得多,小尺度微观水动力弥散规律不能用于大尺度宏观弥散过程^[1-3],因而弥散度室内测定值不宜用于大尺度污染物弥散迁移模拟评价模型参数.实际上在具有一定流速渗流场中控制溶质弥散迁移的是由渗透介质非均质性导致的机械弥散与分子扩散 2 部分组成.然而,确定大尺度弥散度的野外示踪试验则需要较长时间与较大规模的水质监测与分析,耗资大费时长,其实用性受到限制.周义朋等^[4]通过算例研究介绍了基于粒子示踪的混合欧拉-格朗日法—MOC、MMOC 和 HMOC 在均质场中不同条件下对污染物浓度数值计算的精度,但没有涉及非均质场数值模拟估算弥散度的问题.已有一些随机非均质渗透场相关研究成果^[5-7],但直接涉及弥散度的研究还显不足.鉴于实用可行的地下水污染模拟预报需要,通过代表性地构建适宜尺度的非均质渗流场,应用数值模拟方法研究非均质场特征参数对弥散度的影响及尺度效应,进而根据非均质场特征参数及污染物迁移距离即可估算弥散度大小成为人们寻求达到的目标.通过这样的研究,在实际模拟预报等工作中,可由一个简单实用的均质渗透场叠加一个等效的弥散度模型来取代复杂的随机分布非均质渗透场模型.然而,在此之前,需要确证数值模拟手段的适宜性与具体实施方法.因此,本文针对非均质渗透场中等效弥散度模拟计算过程,与影响计算结果可靠性的主要因素如数值解法与网格大小等进行定量研究;进而探讨等效弥散度模拟估算的适宜流程与具体方法,为通过数值模拟建立不同非均质状况下的弥散度与介质非均质性之间的相互关系,进而为确定等效弥散度奠

^{*} 国家 973 项目(2010CB428801、2010CB428804)、国家科技重大专项(2009ZX05039-003、2009ZX07212-003)和中国科学院“百人计划”择优项目资助

[†] 通讯联系人, E-mail: mwang@gucas.ac.cn

定方法基础. 需要说明的是, 通常人们更关注纵向污染羽的移动扩展, 而实用中横向弥散度可通过纵向弥散度来估算, 它大约为纵向弥散度的 0.1 倍^[8]. 本文集中探讨纵向弥散度, 如无特别说明, 下文中弥散度即为纵向弥散度.

1 溶质运移数值模拟系统与数值解法

1.1 模拟系统

本研究应用由美国 Brigham Young 大学环境模拟研究实验室 (EMRL) 开发的基于 GIS 的专业地下水模拟软件系统——GMS (groundwater modeling system). GMS 是在综合集成 MODFLOW、FEMWATER、MT3DMS、RT3D、SEAM3D、MODPATH、SEEP2D、NUFT、UTCHEM 等已有地下水模型的基础上开发的一个综合性的、用于地下水模拟的图形界面软件. GMS 支持二维和三维的有限元和有限差模型, 能综合模拟各种不同复杂边界条件下点污染源导致污染物在地下水中的运移、扩散、吸附、降解. GMS 支持 TINs (triangulated irregular networks solids)、利用钻孔数据进行地质建模、具有 2D 与 3D 地质统计与随机场产生等功能.

本研究应用其中的 MT3DMS 模型, 它是地下水溶质迁移数值模拟中常用的模型之一. MT3DMS 包含基于粒子示踪的欧拉-拉格朗日法 (包括 MOC、MMOC 和 HMOC 法) 和高阶有限差分法 TVD 等几类主要的溶质迁移数值解法, 这些数值解法具有较好的代表性与广泛应用性.

1.2 几种常用溶质运移数值解法简介

1.2.1 混合欧拉-拉格朗日法

1.2.1.1 基本原理

欧拉法是利用固定单元网格求解迁移方程的方法, 其优点是在求解固定网格及处理弥散反应占优问题方面求解效率很高, 但是在常见的对流作用占优势问题的研究中, 会产生数值弥散或数值振荡, 必须通过加密的网格和很小的时间步长来消除其影响^[9-10]. 拉格朗日方法则把质点作为研究对象, 描述每一个流体质点的位置随时间变化的规律. 该方法即使对于对流占绝对优势的运移问题也可以得到精确的解. 不过, 由于没有固定的网格, 对具有多个源汇项和复杂边界条件的非均质问题, 拉格朗日方法可能会导致求解不稳定和其他数值困难. 混合欧拉-拉格朗日法则综合了上述 2 种方法的长处, 即分别利用了拉格朗日法 (粒子示踪) 在求解对流项方面的优势和欧拉方法 (有限差分法或有限元法) 在求解弥散项和反应项上的优势, 从而在一定程度上消除了单独采用上述某一种方法时遇到的数值困难^[10]. 然而这些方法可能会出现一定质量不守恒问题. 在 MT3DMS 模型中, 混合欧拉-拉格朗日方法包括特征线法 (forward-tracking method of characteristics, MOC)、改进的特征线法 (backward-tracking modified method of characteristics, MMOC) 和混合特征线法 (hybrid method of characteristics, HMOC) 等.

1.2.1.2 MOC 原理

MOC 运用传统的粒子示踪技术来解决对流问题^[10]. 在模拟开始时, 粒子以随机或某种固定方式分配于流场, 浓度及笛卡尔坐标位置与这些粒子相联系, 粒子以小时间段示踪, 在每个时间段末, 独立由对流形成的 m 单元浓度 c_m^* 通过该单元内的粒子浓度来估算, 对于规则网格的模型则取算术平均值, 对于不规则网格模型, 应用其他的平均算法更为准确, 如基于体积平均的算法.

MOC 的优点在于没有因空间截断误差导致的数值弥散^[10], 缺点是运行慢, 且需大量内存来示踪粒子, 在某些情况下还可能会导致质量均衡误差. 在 MT3DMS 中, 通过在粒子分配过程中引入动态法 (通过求解各单元的相对浓度梯度来决定所投放的粒子数) 可大大降低内存需求; 同时, 通过使用调和速度插值法及高阶粒子示踪算法使得质量均衡误差降低到一定程度, 但尽管如此, 在网格高度不规则时, 仍会引起较大的质量均衡误差. 在这种情况下, 运用三阶 TVD 法或标准有限差分法更为合适.

1.2.1.3 MMOC 原理

MMOC 是改进的 MOC, 其改进的目的在于提高对流求解精度时不以牺牲大量的运算效率为代价^[10]. 它们的不同之处在于 MOC 需投放大量的粒子并前向示踪它们的浓度和位置, 而 MMOC 是在每

个新时阶($n+1$ 时阶)在固定网格的结点上投放一个假想粒子,后向示踪其 n 时阶的位置,并取该位置的浓度来近似 c_m^{n*} . MMOC 在每个单元只用一个粒子(而 MOC 却需多个),并且是在新时阶投放,无需像 MOC 那样存储旧时阶粒子的浓度及位置,大大降低了内存需求;同时采用简单的低阶插值方法,比 MOC 运算更快.

MMOC 通过使用低阶插值法,如线性插值法来避免浓度曲线出现虚假波动,但是使用低阶插值法也会带来数值弥散问题,特别是对于陡的浓度峰面情况,该问题尤为突出^[10]. 高阶线性插值法能减轻数值弥散,但这又会降低运算效率和导致严重的虚假波动. 在 MT3DMS 中,MMOC 仅使用低阶插值法,因此需特别注意它只能应用在不出现陡的浓度峰面的问题中.

1.2.1.4 HMOC 原理

MOC 和 MMOC 的选择取决于野外条件浓度峰面的陡峭程度(陡峭时选 MOC,平缓选 MMOC)和计算机资源这 2 个方面;当然还有第 3 种选择,即综合运用上述 2 种方法——HMOC^[10]. HMOC 通过一个自动调节方案综合了 MOC 和 MMOC 的优点,其基本原理是运用一个能根据浓度场的特征进行自动调节的程序,当陡峭的浓度峰面出现时,对流项自动由 MOC 方案在峰面附近分配前向示踪粒子,在远离峰面处对流由 MMOC 在每一个结点上放置一个假想粒子后向示踪,当峰面由于弥散和化学反应而逐渐消失时,前向示踪自动停止,相应的粒子取消;这样的自动调节程序能够解决值覆盖 ≥ 0 整个范围的问题而无数值弥散现象,同时所需的粒子较少^[10].

1.2.2 欧拉法的总变差减小法(TVD)原理

TVD 法是高阶有限差分方法,它属于欧拉家族,能够保证质量守恒、无过大的数值弥散且无数值振荡. TVD 法在连续的运移步长相邻节点间的浓度差降低,这是模拟溶质运移中避免数值振荡的必要条件. TVD 法中,浓度由节点浓度的三阶多项式内插得到,当对流为主问题中出现陡峭的浓度锋面时, TVD 法应用一个通用限制器以控制或消除数值振荡并维持急变浓度锋面. TVD 法是具有极大吸引力的替代混合特征法和其他粒子类方法的方法之一,对于以对流为主的问题,以及模型网格的分辨率不高的情况下,该方法特别适用^[10].

2 模型构建与弥散度计算方法

2.1 模型结构

模拟研究区假设为平面二维承压非均质各向同性含水层;垂向等厚,厚度为 10m;平面为矩形,面积为 $500\text{m} \times 400\text{m}$ (图 1),可划分为具有一定尺寸的正方形网格,网格边长从 2.5m(200×160 个)到 30m. 含水层上下面为隔水边界,四周边界类型如图 1 所示,左右定水头边界水头值分别为 $H_1 = 40\text{m}$ 和 $H_2 = 15\text{m}$. 含水层有效孔隙度为 0.3. 假定渗透系数在平面上其变异函数符合对数正态分布,均值和方差分别为 2.303(10m/d) 与 0.1,相关长度为 10m. 同时考虑分子弥散作用,分子弥散系数为 $0.00086\text{m}^2/\text{d}$. 图 2 为在 GMS 软件中产生的随机渗透系数场的一次实现. 假设整个研究区没有其他源汇项,仅在含水层

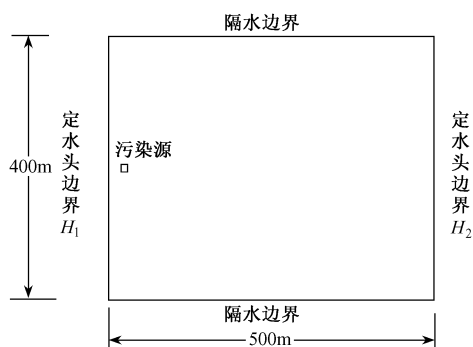


图 1 研究区域示意图

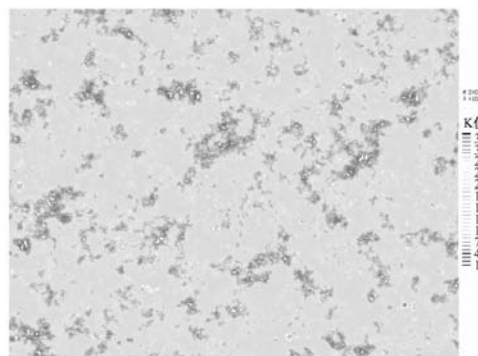


图 2 随机渗透系数场的一次实现

内靠近上边界处有一个瞬时释放的污染源造成地下水污染(图 1), 污染源的初始质量浓度为 10g/L. 利用 GMS 模拟系统中的 MODFLOW 和 MT3DMS 模型模拟地下水系统中水流和污染物运移. 为突出水动力弥散过程, 在 MT3DMS 模型模拟中不考虑吸附和化学反应过程. 根据给定模型参数(渗透系数均值 10m/d 与平均水力梯度 0.05), 地下水渗透速度均值估算约 0.5m/d, 说明其地下水流速并不太低, 但也不是很高, 具有一定的代表性. 地下水流动与溶质弥散控制方程分别由式(1)和式(2)给出:

$$\frac{\partial}{\partial x}(K \frac{\partial H}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(K \frac{\partial H}{\partial y}) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}(\theta D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\theta D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial(\theta v_x c)}{\partial x} - \frac{\partial(\theta v_y c)}{\partial y} + q_s c_s, \quad (2)$$

(1)、(2)式中, c 表示溶质质量浓度, θ 表示孔隙度, K 表示渗透系数, H 表示水头, t 表示运移时间, D_{xx} 表示纵向水动力弥散系数, D_{yy} 表示横向水动力弥散系数, v_x 、 v_y 分别为达西速度分量, q_s 为单位含水层体积内源/汇的体积流量, c_s 表示源汇项的溶质质量浓度^[10].

2.2 弥散度的计算方法

本研究仅讨论纵向弥散度, 计算方法采用线性图解法^[11]. 根据数值模拟结果获得指定观测点浓度-时间数据, 然后绘制浓度-时间($c-t$)曲线, 确定出质量浓度最大值 c_m 及其所对应的时间 t_m . 若令

$$X = (t - t_m)^2 / t, \quad (3)$$

$$Y = \ln(c_m t_m / ct) + (t - t_m) / t. \quad (4)$$

则理论上 Y 与 X 具有线性关系. 由 $c-t$ 模拟值通过回归分析可获得直线斜率 k , 根据式(5)、式(6)分别计算出纵向弥散系数 D_L 与地下水渗流速度 u , 再依据式(7)最终可求出纵向弥散度值 α_L . 其中 x 为溶质运移距离.

$$D_L = \frac{x^2}{4t_m(kt_m + 1)}, \quad (5)$$

$$u = 2(D_L k)^{1/2}, \quad (6)$$

$$\alpha_L = D_L / u. \quad (7)$$

3 模拟结果与讨论

以前面所构建的模型结构为基础, 应用 GMS 模拟系统, 经模拟计算可得出在不同的情景条件下污染物质量浓度时空分布. 下面给出相关的模拟结果并加以讨论.

3.1 不同方法质量误差比较

图 3 为质量均衡误差图, 计算网格边长为 2.5m. 从图 3 中可以看出, 混合欧拉-拉格朗日解法存在不同程度的质量均衡误差, 其中 MMOC 误差模拟初期较小, 随时间增大; 而 MOC 和 HMOC 模拟误差初期较大, 随着时间而降低; TVD 几乎没有质量均衡误差,

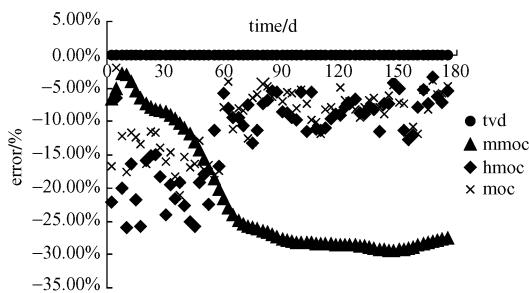


图 3 质量均衡误差图

能够满足模拟过程中的质量守恒. 质量均衡误差可能会在一定程度上影响不同弥散度的计算结果, 因此如果仅依据此点(不考虑数值弥散影响)而选择混合欧拉-拉格朗日解法中的不同算法时, 应在模拟时间较短时可考虑选择 MMOC 法, 在模拟时间较长时可应用 MOC 或 HMOC 法. 而无论模拟时间长短, TVD 都可保持较好的质量守恒, 如仅考虑此因素, 它适用于不同的模拟时间尺度.

3.2 弥散度模拟计算结果的可靠性

应用前面所构建的模型, 选取小网格尺寸(边长 2.5m)以减少数值弥散与质量误差对弥散度计算的影响. 通过几种数值算法进行非均质渗透系数场中的地下水污染物运移数值模拟, 再根据模拟结果利

用线性图解法计算得出污染物运移 150d 时的纵向弥散度 α_L^0 . 然后将几种数值算法模拟计算得出的等效纵向弥散度分别赋予均质渗透系数场模型中(K 为常数,数值等于随机渗透系数场的均值),选择相对应的数值方法并运行 MODFLOW 和 MT3DMS 模块,再次利用线性图解法计算纵向弥散度 α_L^1 (见表 1). 需要进一步说明的是, α_L^0 对应于渗透性随机分布非均质场条件但未直接赋予宏观弥散度,通过模拟计算非均质的宏观弥散效应并利用线性图解法而得出其值;而 α_L^1 则是对应于介质均质条件但赋予一宏观弥散度值 α_L^0 ,通过模拟污染物时空分布而利用线性图解法得出的相应模拟估算值. 从表 1 可以看到,在非均质渗流场中,MMOC 算法模拟计算给出明显大于其他算法的弥散度值(α_L^0),这可能是由该算法的数值弥散与质量误差造成. 其他 3 种算法得到了相似的结果,而我们已知 TVD 在给定条件下数值弥散与质量误差并不显著,这说明 MOC 与 HMOC 2 种算法其数值弥散与质量误差,在此模拟条件下对弥散度的模拟估算影响不大. 同时,对于数值弥散与质量误差影响较小的 MOC、HMOC 及 TVD 算法,均质渗透场模型纵向弥散度输入值(α_L^0)与应用其模拟结果经线性图解法计算出的纵向弥散度(α_L^1)非常接近,这进一步说明线性图解法可用来确定纵向弥散度的适宜性及其准确性;同时表明一定程度的非均质性可模拟计算出一定量级的等效弥散度. 在一定流速渗流场下,可产生不可忽视的机械弥散效果,这在下节给出的模拟结果中将得到进一步支持.

表 1 非均质场弥散度与相应均质场弥散度模拟计算结果

弥散度(150d)	MOC	MMOC	HMOC	TVD
α_L^0	0.393	0.866	0.415	0.433
α_L^1	0.413	0.88	0.45	0.445

3.3 污染羽的特征

图 4 为 4 种算法模拟出的污染羽质心运移到观测点时(150d)的污染羽形态图,对应表 1 的弥散度值 α_L^0 可以看出,MMOC 方法得出的污染羽的中心质量浓度明显低于其他 3 种算法,并且形态也与其他算法有很大的差别,弥散度值增大约 1 倍,这可能主要是由于 MMOC 方法对于本研究的陡浓度锋面问题会产生较大的数值弥散并且在 150d 时的质量误差过大(达 30%);而 MOC 与 HMOC 的污染羽形态几乎相同,MOC 与 HMOC 在 150d 时的质量误差相近,弥散度值也相差很小. 需要说明的是,HMOC 通过一个根据质量浓度场特征进行自动调节的程序,综合了 MOC 和 MMOC 的优点. 在本研究中污染物经弥散作用实际产生的是陡浓度锋面,较适合应用 MOC 方法;而 HMOC 经自动调整后的优化计算结果也与 MOC 十分相似. TVD 方法得出的污染羽形态、质量浓度分布、弥散度值与 MOC 及 HMOC 均相似,这是因为对于陡的浓度锋面问题,TVD 方法也比较适用. 相对于能够保证质量守恒的 TVD 方法,MOC 和 HMOC 在 150d 时的质量误差并不太大(7% 以内),因此得到的结果也比较相近. 值得注意的是对于不同的数值解法,模拟获得的污染羽分布形态虽然有些不规则,但基本上可近似为一椭圆. 这为随机分布非均质渗流场模拟产生的水动力弥散,可被一个均质渗流场叠加一个等效弥散度所刻画提供了基础.

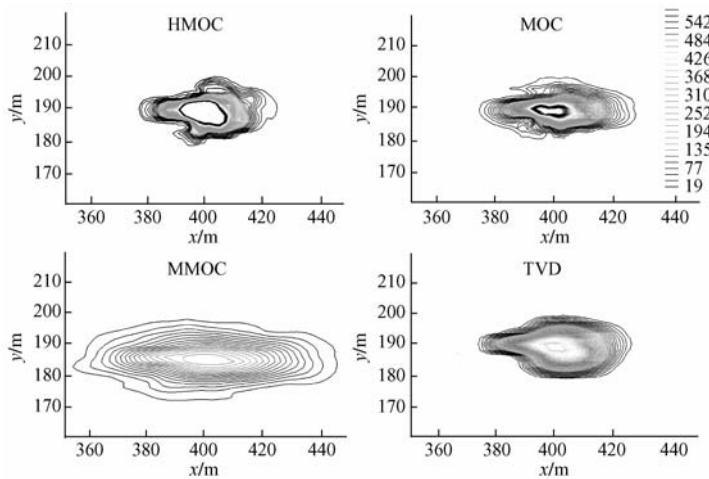


图 4 不同算法在第 150d 时污染羽形态图

3.4 网格大小的影响

将研究区域分别划分成不同大小的网格进行水流和溶质运移模拟后计算出的弥散度值,划分网格的大小分别为 $2.5\text{m} \times 2.5\text{m}$, $5\text{m} \times 5\text{m}$, $10\text{m} \times 10\text{m}$, $15\text{m} \times 15\text{m}$, $20\text{m} \times 20\text{m}$ 和 $25\text{m} \times 25\text{m}$. 图 5 为溶质运移 150d 时弥散度随网格边长的变化图,其中图 5(a)的研究区域为上述研究所应用的非均质场;图 5(b)为

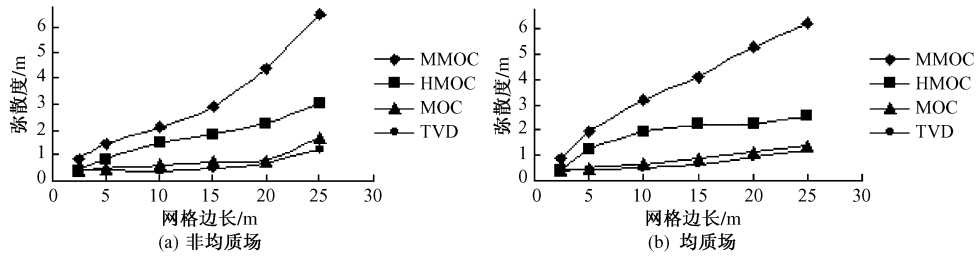


图 5 150d 时不同算法得到的弥散度随网格大小的变化

渗透系数 K 等于非均质场 K 均值的均质场,不同数值方法分别赋予表 1 中的 α_L^0 所对应的值作为等效弥散度值. 从图 5(a) 可以看出,几种算法得到的弥散度均随网格的增大而呈现不同程度的增加,其中 MMOC 方法得出的弥散度对网格大小最为敏感,网格 25m 时的弥散度数值大约是 2.5m 的 6 倍,而 MOC 和 TVD 法得出的纵向弥散度对网格大小的敏感性相对较弱. 图 5(b) 反映了几种方法在均质场赋予各自等效弥散度情况下模拟得到的弥散度随网格大小的变化. 因是均质场而无流速变化,模拟计算的弥散度随网格增大应是源自于数值弥散或质量均衡误差,或二者共同作用. 比较图 5(a) 与图 5(b),可以看出,2 图中各算法模拟计算的弥散度随网格增大的变化规律与幅度基本吻合. 这说明图 5(a) 中弥散度随网格增大而增加,也是不同方法由于网格增大产生不同程度的数值弥散或质量均衡误差,或二者共同作用. 图 6 给出了应用 TVD 算法模拟计算的弥散度随网格大小变化的结果,目的是进一步说明上述看法的合理性. 图 6(a) 为在均质场和非均质场(方差 0.1, 相关长度 10m) 中用 TVD 法模拟溶质运移 50d 时弥散度随网格大小变化的情况,其中均质场赋予一个由小网格(2.5m × 2.5m) 模拟非均质场产生的弥散度作为等效弥散度. 由于 2 条曲线基本重合,因而 50d 时 TVD 法模拟得到的弥散度随网格的增大而增大的现象,也是由网格增大产生的数值弥散造成的. 图 6(b) 表示 TVD 法模拟 150d 时,在不同方差的非均质场和赋予等效弥散度的均质场中的弥散度随网格大小的变化情况. 可以看出,方差为 0.3 的非均质场中弥散度随网格大小的变化与方差为 0.1 的非均质场的变化情况基本相同,弥散度随网格增大而增大主要是由网格变大产生的数值弥散作用所导致.

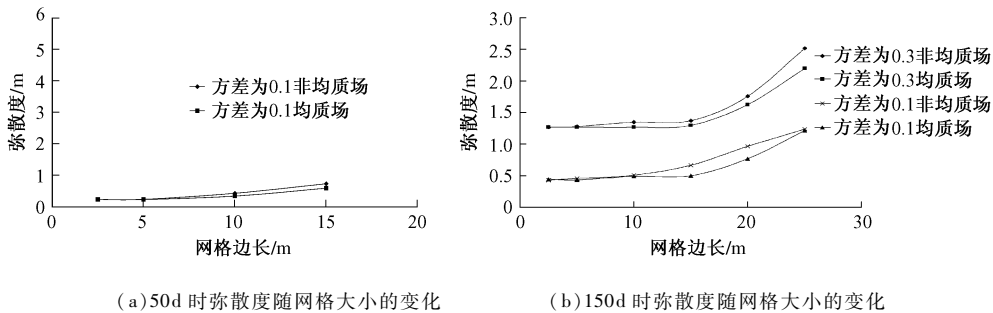


图 6 TVD 法得到的 50d 和 150d 的弥散度随网格大小的变化

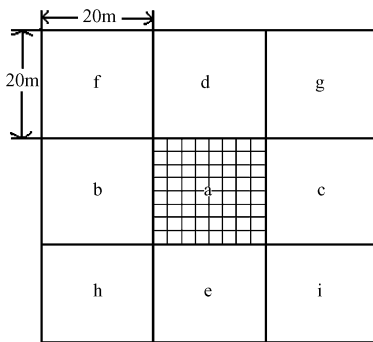


图 7 划分网格示意图

现考察流速大小与分布是否受到网格大小的明显影响. 这可从另一不同角度说明非均质场模拟计算的弥散度随网格增大是来自流速误差,还是源自于其他原因如数值弥散和质量均衡误差. 将一个 60m × 60m 的区域划分成 9 个 20m × 20m 的网格,见图 7. 其中, a 网格的渗透系数为 0.3,其余 8 个网格的渗透系数均为 10,水流方向由 b 到 c,区域的边界条件与上述模型 150d 时以污染羽所在区为中心 60m × 60m 区域的边界条件相同. 运行 MODFLOW 进行水流模拟,分别得到网格 a、b、c、d、e、f、g、h 和 i 中的渗流速度. 然后将上述区域划分成 2.5m × 2.5m 的网格,也就是将原来每个 20m × 20m 的网格再划分成 8 个大小相同的 2.5m × 2.5m 网格(图 7 中只画出了 a 网格的划分,其

他网格未画出),渗透系数的分布不变,进行水流模拟得到 a、b、c、d、e、f、g、h 和 i 共 9 个区域(每个区域包含 64 个 2.5m×2.5m 网格)上的平均渗流速度.表 2 为 20m×20m 大网格较 2.5m×2.5m 小网格流速的变化率.从中可以看出,网格的增大对模拟非均质场中的渗流速度的影响较小.

表 2 大网格较小网格流速的变化率

网格	b	a	c	d	e	f	g	h	i
流速变化率/%	-12.09	5.00	-12.09	-3.55	-3.55	-1.36	-1.35	-1.36	-1.35

注:流速变化率=(大网格流速-小网格区域平均流速)/小网格区域平均流速

综上所述可以看出,网格变化对渗流场中的流速大小与分布似乎影响不大,而考虑到非均质场中渗流速度空间变化是产生机械弥散的根本原因,网格增大使模拟计算的弥散度显著改变的主要原因应是数值弥散或质量均衡误差,或二者的共同作用.

3.5 污染源质量浓度的影响

污染源质量浓度变化对几种数值算法模拟得出的弥散度的影响,能够反映出几种算法对不同质量浓度梯度问题的处理能力.在其他条件都相同的情况下,理论上污染点源的质量浓度对弥散度的计算并无影响,但在实际的数值计算中,会因为数值弥散和虚假波动而产生一定的误差.表 3 为 4 种算法分别在污染源质量浓度为 100、500、1000、5000、10000mg/L 时得出的弥散度值的相对误差.通过比较可以看出,几种方法得出的弥散度的相对误差都比较小,其中 HMOC 方法最小,从一定程度上反映了其在处理不同污染源质量浓度问题上具有一定优势,这可能是因为 HMOC 方法通过一个能根据质量浓度场的特征进行自动调节的程序,综合了 MOC 和 MMOC 的各自处理质量浓度梯度时的优点.

表 3 不同污染源浓度下不同算法得到弥散度相对误差

算法	MOC	HMOC	MMOC	TVD
相对误差/%	4.80	2.39	4.35	4.39

4 结论

通过选取具有实际代表性的模拟区条件及模型参数,运用国际流行的地下水模拟系统,本文展现了非均质介质渗透场中等效弥散度模拟计算过程,针对影响计算结果可靠性的主要因素进行了定量研究,探析了不同数值计算方法模拟计算纵向弥散度值的适用性.模拟分析结果总结如下:

1) 数值模拟手段可用来获得非均质介质渗流场因流速空间分布差异所产生的一定量级的等效纵向弥散度,并模拟观察到其在一定流速渗流场下,可产生不可忽视的弥散效果.另外,模拟出的污染羽形态虽然不十分规则,但基本可用椭圆形态来描述,因而随机分布非均质渗流场模拟产生的水动力弥散可被一个均质渗流场叠加一个等效弥散度参数来刻画.

2) 对几种常用数值算法的模拟应用比较后可知,无论模拟时间长短,TVD 都可保持较好的质量守恒,故适用于不同的模拟时间尺度;而混合欧拉-拉格朗日不同解法存在程度不一的质量均衡误差,但模拟时间较长时,MOC 或 HMOC 法误差变小;模拟时间较短时,MMOC 法误差不是很大.

3) 对于给定的非均质渗流场,应用本文探讨的不同数值模拟算法模拟估算纵向弥散度时,模拟计算得出的等效纵向弥散度随网格增大均有不同程度地增大,但 MMOC 方法计算得出的等效纵向弥散度对网格大小最为敏感.经进一步模拟计算得知,网格剖分大小对渗流场中的流速大小与分布(这种变化是产生机械弥散的内因)似乎影响不大,因此推断网格增大使模拟计算的弥散度显著改变的主要原因应是数值弥散或质量均衡误差,或二者的共同作用.因此,与数值弥散与质量均衡误差相比,非均质流速场因网格大小导致的变异不应作为选取适宜网格大小的主要顾虑.

4) 在数值模型中污染源质量浓度大小对模拟计算非均质渗流场等效纵向弥散度影响不大.

总之,应正确理解与掌握非均质渗流场等效弥散度数值模拟估算中的各种影响因素及其主次关系,确保模拟计算结果的可靠性.以上模拟分析结果可为地下水污染模拟研究,与工程应用中模型的水动力弥散参数确定,提供借鉴与方法依据.

参考文献

- [1] Gelhar, Welty, Rehfeldt. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers [J]. *Water Resour Res*, 1992, 28 (7): 1955-1974.
- [2] Fetter C W. Contaminant hydrogeology [M]. New Jersey: Prentice Hall, 1999: 53-55, 87-88.
- [3] Gelhar, Axness. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. [J]. *Water Resources Research*, 1983, 19 (1): 161-180.
- [4] 周义朋, 孙占学, 马新林, 等. MT3DMS 中混合欧拉-拉格朗日数值解法分析 [J]. *水文*, 2006, 26 (6): 38-40.
- [5] Shi X Q, Wu J C, Yuan Y S, et al. Effect of the anisotropy in porous media on the spatial variability of the hydraulic conductivity [J]. *Advances in Water Science*, 2005, 16 (5): 679-684 (in Chinese).
施小清, 吴吉春, 袁永生, 等. 含水介质各向异性对渗透系数空间变异性统计的影响 [J]. *水科学进展*, 2005, 16 (5): 679-684.
- [6] Peng W, Wu J F, Yan T T. Uncertainty analysis of the contaminant transport fate using conditional simulation of hydraulic conductivity [J]. *Journal of Nanjing University: Natural Sciences Edition*, 2008, 44 (3): 280-288 (in Chinese).
彭伟, 吴剑锋, 阎婷婷, 等. 渗透系数的条件模拟对污染物运移的不确定性分析 [J]. *南京大学学报: 自然科学版*, 2008, 44 (3): 280-288.
- [7] Shi X Q, Wu J C, Yuan Y S. Study on the spatial variability of hydraulic conductivity [J]. *Advances in Water Science*, 2005, 16 (2): 210-215 (in Chinese).
施小清, 吴吉春, 袁永生. 渗透系数空间变异性研究 [J]. *水科学进展*, 2005, 16 (2): 210-215.
- [8] Pickens J F, Grisak G E. Scale-dependent dispersion in a stratified granular aquifer [J]. *Water Resour Res*, 1981, 17 (4): 1191-1211.
- [9] Zhu Y S, Duan C J. MT3D, A3D transport model for simulating advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in ground water [J]. *Journal of East China Institute of Technology*, 2005, 28 (1): 26-28 (in Chinese).
朱玉水, 段存俊. MT3D—通用的三维地下水污染物运移数值模型 [J]. *东华理工学院学报*, 2005, 28 (1): 26-28.
- [10] Zheng C M, Wang P P. MT3DMS: A modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide, contract report SERDP-99-1 [R]. US Army Corps of Engineers Engineer Research and Development Center, Vicksburg, Mississippi, 1999: 7-11.
- [11] Jiao J J. Data-analyses methods for determining two-dimensional dispersive parameters [J]. *Ground Water*, 1993, 31 (1): 57-62.
- [12] 王明玉, 张嘉, 陈鸿汉. 大尺度非均质渗流场污染物水动力弥散参数的模拟估算 [C] // 国家科技重大水专项河流主题“流域行业点源水污染控制技术”研讨会论文集, 2009.

Suitability of the numerical simulation approach for estimation of longitudinal dispersivity in heterogeneous media

ZHANG Jia, WANG Ming-Yu

(Center for Water System Security & College of Environment and Resources,
Graduate University, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Abstract A few of numerical solution methods are briefly introduced, including MOC, MMOC, HOMC, and TVD, which are implemented in MT3DMS. Comparative analyses of mass errors and longitudinal dispersivity values obtained using the different methods were conducted. In addition, the impacts of the grid size and source concentration were examined. We present the basic procedure and the suitability analyses for longitudinal dispersivity estimation by numerical simulations.

Key words groundwater contamination, model, heterogeneous media, dispersivity, numerical simulation