

附件 2

地下水污染模拟预测评估 工作指南

（试行）

2014 年 10 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.....	2
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.....	4
第三章 地下水污染概念模型构建	6
3.1 资料收集与评述.....	6
3.2 主要污染指标识别.....	6
3.3 水文地质条件概化.....	7
3.4 污染状况概化.....	8
第四章 地下水污染趋势预测	10
4.1 工作目标和等级划分.....	10
4.2 预测工具选择.....	11
4.3 概念模型的数学表达.....	12
4.4 模型校准与验证.....	15
4.5 敏感性分析.....	17
4.6 模型预测结果分析.....	17
4.7 不确定性分析.....	18
4.8 模型的完善.....	18
第五章 地下水污染模拟预测评估技术成果	19
5.1 报告.....	19
5.2 图件.....	20
5.3 模型文件.....	21

附录 A (资料性附录) 资料需求与技术方法	22
附录 B (资料性附录) 地下水数学模型	35
附录 C (资料性附录) 地下水模型参数	46
附录 D (规范性附录) 评估成果表达示例	60

地下水污染模拟预测评估工作指南

(试行)

第一章 总 则

1.1 编制目的

为贯彻落实《全国地下水污染防治规划(2011-2020 年)》，推进地下水污染防治工作，增强地下水污染模拟预测评估的科学性和规范性，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》、《地下水质量标准》（GB/T 14848）及相关法律、法规、标准、文件，为地下水污染防治工作提供技术支持，编制《地下水污染模拟预测评估工作指南（试行）》（以下简称“指南”）。

1.2 适用范围

本指南适用于场地至区域尺度地下水污染概念模型构建和污染趋势预测。

本指南规定了地下水污染模拟预测评估指导原则、工作内容、工作流程、技术方法和成果要求。

1.3 编制依据

GB/T 14848 地下水质量标准

GB 5749 生活饮用水卫生标准

GB/T 14158 区域水文地质工程地质环境地质综合勘查规范
(1: 50000)

HJ 610 环境影响评价技术导则地下水环境

HJ/T 164 地下水环境监测技术规范

HJ/T 338 饮用水水源保护区划分技术规范

GB/T 14175 水文地质术语

DZ/T0201 地下水资源数值法计算技术要求

当上述标准和文件被修订时，使用其最新版本。

1.4 术语与定义

下列术语和定义适用于本指南。

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：地下水污染潜在的影响对象。

地下水污染概念模型：指地下水污染影响范围内，将水文地质条件与污染分布特征高度概化的模型。

解析法：利用数学方法对地下水运动方程和溶质运移方程进行直接求解的计算方法。

数值法：利用离散化方法求解数学模型微分方程近似解的方法。

1.5 指导原则

（1）科学性原则：地下水污染模拟预测评估应深入分析地下水赋存和运动条件，充分了解地下水污染程度和范围，准确描述污染源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：根据工作目标、具体水文地质条件、评估对象的污染特征，选择适当的污染模拟预测评估技术方法，构建有针对性的污染模拟预测评估模型。

(3) 循序渐进原则：地下水污染模拟预测评估工作应分期进行，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的实际工作。

1.6 组织编制单位

本指南由环境保护部污染防治司组织，环境保护部环境规划院和北京大学起草编制。

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在地下水环境调查评价工作基础上，开展地下水污染概念模型构建和污染趋势预测工作。

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，分析地下水环境状况调查结果，概化评估区水文地质条件，识别评估区内造成地下水污染的主要污染指标及其污染范围，概化评估区污染状况，构建地下水污染概念模型。

2.1.2 地下水污染趋势预测

依据评估区地下水环境敏感程度和地下水污染状况，确定趋势预测工作等级和评估重点。工作内容包括：工作目标和等级划分、概念模型的数学表达、预测工具选择、模型校准与验证、敏感性分析、模型预测结果分析等。

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、地下水污染趋势预测、报告编写等步骤。具体工作流程见图 1。

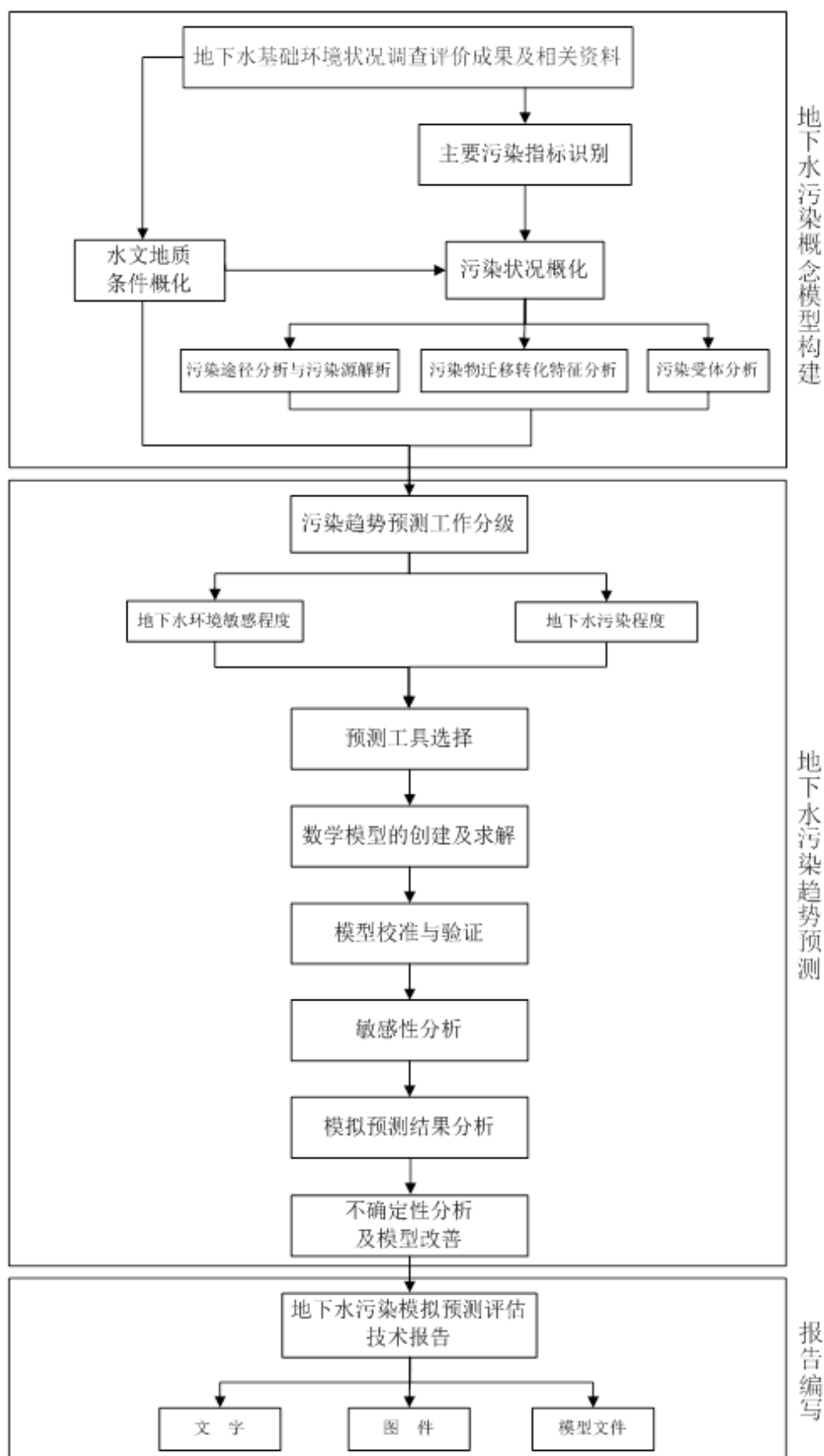


图 1 地下水污染模拟预测评估工作流程

第三章 地下水污染概念模型构建

3.1 资料收集与评述

地下水污染概念模型构建所需资料除了地下水环境状况调查第一和第二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、地下水污染评价结果等相关资料，还需在地下水环境状况调查的第三阶段补充收集或调查更为详尽的资料。资料的翔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。

3.2 主要污染指标识别

基于地下水质量评价和污染评价成果对评估区主要污染指标进行识别。

步骤一、污染指标筛查：筛选出超过《地下水质量标准》Ⅲ类水标准和《生活饮用水卫生标准》，同时污染等级为Ⅱ级及以上的指标。

步骤二、主要污染指标识别：如果步骤一中筛选出的污染指标属于“主要危害污染物”列表（见附表 A.3），则直接将该指标确定为主要污染指标。此外，地下水污染责任人、环境保护主管部门、公众等利益相关方认为应当进行评估的污染指标亦考虑为主要污染指标。根据具体情况可选用某种特定指标代表某一类污染物，例如使用总溶解固体代表无机盐类污染物，或以氯离子代表保守性污染物。

步骤三、主要污染指标验证：结合评估区污染源特征污染物以及地下水污染时空演变特征，验证主要污染指标的指示性。经

验证后，剔除不能代表评估区地下水污染状况的指标。

3.3 水文地质条件概化

水文地质条件概化是分析和研究一定范围内地下水系统的内部结构与动态特征的过程。通过适当简化和合理假设，对地下水系统内外地下水的补径排关系、含水层组类型及空间结构、边界条件及源汇项、地下水运动状态及参数分布特征等进行定性表达。

3.3.1 确定评估区范围

评估区范围的划定应能说明地下水水流状况，能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、地下水环境敏感区域等，必要时扩展至完整的水文地质单元，以及可能与污染区域所在的水文地质单元存在直接补排关系的区域。

3.3.2 边界条件概化

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位（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。

3.3.3 内部结构概化

对评估区含水层组和含水介质进行概化，分析含水层组的结构与岩性，确定含水层组的潜水或承压水类型，区别含水介质的均质或非均质性、各向同性或各向异性属性。查明含隔水层的空间分布形态，含水层的导水性、储水性及渗透方向的变化规律，含隔水层相互之间的接触关系，确认是否存在“天窗”、断层等沟通结构。

3.3.4 地下水运动状态概化

对评估区地下水运动状态进行概化，确定含水层组水流为稳定流或非稳定流、二维水流或三维水流、以及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要视具体情况而定。在局部溶洞发育处或宽大裂隙中，水流运动一般为非线性流或紊流，不能应用达西定律，但对于发育较均匀的裂隙、岩溶含水层中的地下水运动，可概化为达西流，按照松散孔隙含水层水流运动的方式处理。在大区域上，北方岩溶水运动近似满足达西定律，含水介质可概化为非均质、各向异性。

3.3.5 水文地质参数概化

对水文地质参数的时空分布进行概化，包括参数初步选择的数值范围，水平和垂向的初步分区方案等。对于参数的空间分布规律，常采用离散化的参数概化方法（即参数分区或参数化）来确定。参数分区的依据如下：

- （1）评估区抽水试验资料计算所得参数，包括渗透系数、储水系数、给水度及单位涌水量；
- （2）含水层分布规律，即埋深、厚度和岩性组合特征；
- （3）地下水天然流场、人工干扰流场、水化学场和温度场；
- （4）构造条件及岩溶发育规律（限于岩溶含水层）。

3.4 污染状况概化

地下水污染状况概化是在水文地质概念模型的基础上，明确污染源-污染物迁移途径-目标受体特征及相互关系的过程。

3.4.1 污染途径分析与污染源解析

3.4.1.1 污染来源识别

结合评估区地下水补径排条件、主要污染指标空间分布特征和水文地球化学特征、行业特征污染指标等，识别定位污染来源。

3.4.1.2 污染途径和污染物释放特征分析

根据评估区水文地质条件和污染源位置，明确污染物进入地下水的污染途径及受污染含水层、污染物释放形式及释放规律。将污染途径概化为间歇入渗型、连续入渗型、越流型、径流型；将污染物释放形式概化为点源或面源；将释放规律概化为连续恒定释放或非连续恒定释放。常见地下水污染途径分类见附表 A.4。

3.4.1.3 污染源解析

污染源解析优先使用空间叠图法，若仍无法确定污染来源，可在补充调查的基础上采用稳定同位素法、化学质量平衡法、化学指纹法、捕获区法或多元统计法等方法，分析各地下水污染源对污染现状的贡献程度。各类源解析方法详见附表 A.5。

3.4.2 污染物迁移转化机制分析

对评估区主要污染物在地下水中的物理迁移过程、生物地球化学转化过程进行定性分析，确定主要污染物是否存在吸附、衰变、降解、反应、挥发、变密度流和多相流等迁移转化过程。常见污染物在地下水中的迁移转化机制详见附表 A.6。

3.4.3 污染受体分析

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成果，确认地下水污染潜在影响的对象，如水源井、地表水、底泥、敏感人群等。

第四章 地下水污染趋势预测

4.1 工作目标和等级划分

4.1.1 工作目标

地下水污染趋势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。

4.1.2 评估工作等级划分依据

依据评估区地下水环境敏感程度和地下水污染程度对地下水污染趋势预测工作进行等级划分。

4.1.2.1 地下水环境敏感程度

评估区地下水环境敏感程度可分为敏感、较敏感、不敏感三级，分级原则见下表。

表 1 地下水环境敏感程度分级

分级	地下水环境敏感程度
敏感	集中式生活供水水源（包括已建成的在用、备用、应急水源，在建和规划的水源）保护区和准保护区；除生活供水水源以外的国家或地方政府设定的与地下水环境相关的其它保护区，如热水、矿泉水、温泉、盐卤水等特殊地下水资源保护区。
较敏感	集中式生活供水水源（包括已建成的在用、备用、应急水源地，在建和规划的水源地）准保护区以外的补给径流区；特殊地下水资源（如矿泉水、温泉等）保护区以外的分布区以及分散居民饮用水源等其它未列入上述敏感分级的环境敏感区。
不敏感	上述地区之外的其它地区。

4.1.2.2 地下水污染程度

地下水污染程度根据地下水环境状况调查阶段评估区地下水污染单点综合污染评价结果进行分级。

4.1.3 工作等级划分方法

综合上述两项原则，对地下水污染趋势预测工作等级划分如下表。

表 2 工作等级划分一览表

评估级别	地下水环境敏感程度	地下水污染程度
无需预测	全部级别	任何位置单点综合污染级别未超过 I 级
	不敏感	全部级别
一般预测	较敏感	最高单点综合污染级别为 II~IV 级
详细预测	较敏感	最高单点综合污染级别达 V 级或曾发生重大污染事件，且主要污染指标污染级别为 II 级及以上。
	敏感	最高单点综合污染级别为 II 级及以上

对于调查资料满足评估等级要求的地区直接开展相应的趋势预测工作，不满足评估等级要求的地区需补充收集资料，必要时开展更为深入的环境水文地质勘查和试验工作，以及污染扩散调查和监测工作。不同工作等级资料需求见附表 A.1。

4.2 预测工具选择

根据工作等级的需要，预测工具的选择需要在解析解模型和数值解模型，以及一维模型、二维模型和三维模型中进行。

表 3 不同工作等级的数学模型选择

项目	一般预测	详细预测
维数	一维、二维/准三维	三维/准三维
数据量	中等	较多
岩性特征	均质、各向同性	非均质、各向异性
地下水流态	稳定流/瞬时流	瞬时流

边界与初始条件	非瞬时流边界， 初始条件不一致	瞬时流边界， 初始条件不一致
关于水流与迁移过程假设	简单或较复杂的水流 与污染物迁移过程	复杂的水流 与污染物迁移过程
模拟方法	半解析解模型/数值解模型	数值解模型

注：各模型数据量的确定可以参考附表 A.1

4.3 概念模型的数学表达

在对地下水水流系统和污染状况概化基础上，用一组数学关系式来刻画系统的数量关系和空间形式，把概念模型转化为数学模型。地下水污染迁移趋势数学模型包括水流运动模型和污染物迁移模型两部分，污染物迁移的模拟预测要建立在可靠的地下水水流运动模拟的基础之上。

4.3.1 控制方程

地下水水流运动的模拟根据含水层达西定律、压缩释水理论、水均衡和水流连续性原理建立。地下水水流解析解和数值解模型的控制方程见附录 B.1。

地下水污染模拟预测是求取污染物在地下介质中浓度随时空变化的过程，水相污染物和非水相污染物的模拟预测使用不同的控制方程进行表达（见附录 B.2 和 B.3）。对于高度简化的概念型地下水污染问题，可以直接建立污染物浓度随时空变化的控制方程，并在给定边界条件后求取解析解或近似解。

实际问题中边界条件较为复杂，在无法应用解析解模型的情况下，可以通过求取数值解来考察地下水污染物的变化。最简单的地下水污物运移模型基于已知水流流场，将污染物视同随水运行的质点，通过追踪质点的轨迹来模拟污染物的运移规律。更为全面的地下水污物运移模型则要基于已有的离散化流场，考虑污

染物在对流、弥散、吸附、反应等过程共同作用下的演化规律。

4.3.2 边界条件

地下水流模型的边界条件包括定水头边界、定流量边界以及第三类边界（定水头边界和定水量边界的组合）。地下水污物运移模型的边界条件也有三类：指定浓度边界、指定浓度梯度或弥散通量边界、同时指定浓度及浓度梯度或总通量边界。

污染物运移受水流边界和污染物边界条件共同作用，控制模型边界单元污染物质量的流入量和流出量。在实际应用中常结合水流方程的定流量边界与污染迁移方程的指定浓度边界，确定适宜的污染物质量通量边界。

对于水流边界的定义通常有以下几类处理方式。

4.3.2.1 地表水体

（1）已知水头边界

地表水与含水层有密切的水力联系，经动态观测证明有统一水位，地表水对含水层有无限的补给能力，降落漏斗不可能超越此边界线时，地表水体就可以确定为定水头补给边界。

如果只是季节性的河流，只能在水期间定为定水头边界；如果只有某段河水与地下水有密切水力联系，则只将这一段确定为定水头边界。

（2）已知流量边界

地表水与地下水没有密切水力联系或河床渗透阻力较大时，仅仅是垂直入渗补给地下水，则应作为二类定流量补给边界。

4.3.2.2 断层接触边界

（1）隔水边界

如果断层本身不透水，或断层的另一盘是隔水层，则构成隔水边界。

(2) 流量边界

如果断裂带本身是导水的，计算区内为富含水层，区外为弱含水层时，则形成流量边界。

4.3.2.3 已知水头边界

如果断裂带本身是导水的，计算区内为导水性较弱的含水层，而区外为强导水的含水层时（这种情况，供水中少有，多出现在矿床疏干时），则可以定为定水头补给边界。

4.3.2.4 岩体或岩层接触边界

岩体或岩层接触边界，一般多属于隔水边界或流量边界。凡是流量边界，应测得边界处岩石的导水系数及边界内外的水头差，算出水力坡度，计算出补给量或流出量。

4.3.2.5 地下水的天然分水岭

地下水的天然分水岭，可以作为隔水边界，但应考虑地下水开采后是否会导致位置的变迁。

4.3.3 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；对于非稳定污染物迁移模型，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。

4.3.4 源汇项

源汇表示水流或污染物进入或离开模拟区域的机制。在水流

模拟中可以指定源和汇的通量，也可以通过计算求得。在污染物迁移控制方程中，源汇项表示溶于水的污染物通过源进入或通过汇离开模拟区域。

4.3.5 确定模型参数

模型的参数指运行水流模型和污染物运移模型需要输入的所有数据，包括：

（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：如渗透系数、孔隙度以及化学反应速率常数等；

（3）与源汇有关的各种参数：如污染物进入量和排出量、或注水量和抽水量。

常见的地下水模型参数确定方法见附表附表 C.1 至 C.10。

4.4 模型校准与验证

模型校准是通过调整模型输入参数，直到模型输出变量与野外观测值的误差达到精度要求的过程。模型输出变量可以从水头、流量、浓度、污染物运移时间、污染物去除率等指标中选择。

当数据资料较丰富时可开展模型验证。使用校准后的模型以稳定流或非稳定流的形式在新的时间段运行，使用预测结果与野外观测值进行对比，如误差无法达到精度要求需对模型进一步校准。

4.4.1 校准与验证依据

（1）模拟的地下水流场要与实际地下水流场基本一致；

（2）模拟的地下水动态过程要与实测动态过程基本相似；

(3) 从均衡的角度出发, 模拟的地下水均衡变化与实际要素基本相符;

(4) 校准后的水文地质参数要符合实际水文地质条件。

4.4.2 校准与验证方法

4.4.2.1 拟合 - 校正法

(1) 利用多孔 (或群孔) 抽水试验资料或地下水动态长期观测资料反求水文地质参数, 即解逆问题, 有直接解法和间接解法两类。鉴于目前逆问题的直接解法在数值计算中稳定性差, 一般可采用间接解法通过拟合 - 校正方法反求水文地质参数, 校准和验证数值模型;

(2) 校准和验证是建立数值模型的两个阶段, 必须使用相互独立的不同时间段的资料分别完成。采用校准阶段的资料反求水文地质参数, 即校准模型; 采用验证阶段的资料, 即验证模型。

4.4.2.2 拟合

(1) 水文地质参数可根据含水层的特征分区给出初始估计值, 在模型的校准过程中, 可对分区进行调整, 但应与其水文地质特征相符;

(2) 在模型校准中, 原则上不同水文地质参数分区中和第一类边界上均应有控制观测井的实测地下水水位及水质资料, 作为拟合的依据;

(3) 一般情况下, 原则上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%。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 ;

(4) 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,以水位拟合均方差小于允许误差作为解收敛的判断标准。地下水模拟流场应与实测流场形态一致,地下水的流向应相同;

(5) 要求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,相关系数须大于 0.85;

(6) 结合具体预测目标,对于进行详细预测且影响到重大地下水环境管理决策的评估对象,需提高模型校准的要求,对于一般预测和验证性的模拟预测,可适当降低校准目标。

4.5 敏感性分析

敏感性分析是地下水模拟预测中常用的一种研究不确定性的方法,其目的是分析模型对输入参数不确定性的敏感程度,表征各模型参数对模型的相对影响能力。敏感性分析是在合理的范围内(模型参数值的不确定范围)改变模型输入参数,并观察模型响应变化的过程。衡量模型响应的指标主要包括水头、流速、污染物浓度等。

4.6 模型预测结果分析

校准和验证完善的模型可用于预测研究区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。

模型预测工作的核心是设计合理的模拟情景,因此需要明确评估目标,确认评估所关注的关键问题。

常见的模拟情景有精确预测情景和保守预测情景。精确预测情景即将模型参数做可能范围内的最精确估计,参数取值最大限

度反映评估区的真实情况。保守预测情景即模型参数取最保守的值，反映最不利状态下的污染趋势。精确预测情景和保守预测情景之间的差别反映了模型结果的不确定性程度。

4.7 不确定性分析

模型不确定性分析是指分析列举出由于模型建立在一定的假设基础上，即使经过良好校准的模型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，地下水水流或污染物运移模型的运算结果仍然会存在一定的误差或者不确定性。如果地下水模拟预测的预报结果对规划和设计有重要意义，必须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，Monte Carlo 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。

4.8 模型的完善

如果有后续长期监测，发现了系统性能的明显变化，则需要对概念模型和模型参数进行修改，进行模型的完善。

第五章 地下水污染模拟预测评估技术成果

5.1 报告

5.1.1 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：

地下水污染状况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说明工作分级和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。

5.1.2 报告编制大纲

第一章 总论

包括项目背景、目的原则、评估范围、评估依据、评估方法等。

第二章 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。

第三章 地下水污染概念模型构建

- (1) 主要污染指标识别
- (2) 水文地质条件概化
- (3) 地下水污染状况概化

第四章 地下水污染迁移趋势预测

- (1) 工作等级
- (2) 概念模型的数学表达和模型工具选择
- (3) 水流模型的构建
- (4) 水流模型校准与敏感性分析
- (5) 污染物迁移模型的构建
- (6) 污染物迁移模型校准与趋势预测
- (7) 模型不确定性分析

第五章 地下水污染模拟预测评估结论与建议

- (1) 主要结论
- (2) 对策与建议

参考文献

5.2 图件

地下水污染模拟预测评估技术报告的图件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。地下水污染状况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.2。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.3。

5.3 模型文件

要求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，以保证项目管理方运行项目文件可再现模拟结果。

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	第一、 二阶段 调查	一般 趋势 预测	详细 趋势 预测
评估区背景资料	相关评估区历史，包括产生污染的活动（同样也应该包括评估区附近的土地）		√	√
	当前的使用（包括评估区布局）	√	√	√
	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		√	√
评估区水流概化特征资料				
主题	具体信息	第一、 二阶段 调查	一般 趋势 预测	详细 趋势 预测
评估区地质特征	主要岩性的几何尺寸（厚度和侧向延伸）		√	√
	构造（包括断层，裂隙）		√	√
	地质图，地质剖面图	√	√	√
	地下水水流方向	√	√	√
	水力梯度（水平向和垂直向）		√	√
	地下水水位（季节和长期性）与水流方向变化			√
	含水层特征（孔隙度，导水系数、渗透系数、给水度、储水系数、弥散系数等）		√	√
	含水层特征的横向和垂向变化			√
	地下水与地表水体（河流，湖泊，水渠等）间相互作用			√
	过去、当前与将来含水层管理对地下水区域影响，如抽水停止导致水位上升			√
	地质构造（断层）对水流的影响		√	√
	单层或多层含水层，弱透水层的重要性		√	√
	含水层厚度与有效厚度	√	√	√
	非饱和带厚度与水流特征	√	√	√
	地下水水位动态观测成果，含水层剖面图			√

评估区污染概化特征资料				
主题	具体信息	第一、 二阶段 调查	一般 趋势 预测	详细 趋势 预测
源项特征	污染历史（泄漏体积，释放量，地点，日期，频率，释放方法，持续时间）	√	√	√
	出现/确认的污染物	√	√	√
	污染物可能存在形式（如重质非水相流体，轻质非水相流体，溶解态，颗粒状等）		√	√
	污染物相态（固相、吸附相、自由相、溶解相与气相）		√	√
	污染物分布（土壤，非饱和带，饱和带）		√	√
	污染物浓度（土壤，非饱和带，饱和带）		√	√
	连续的，一次性的或减少的污染源		√	√
	污染物性质（溶解性，分配系数，密度，持久性）		√	√
污染途径	非饱和带			√
	饱和带		√	√
	地质，构造，地形控制		√	√
	优先流的影响：裂隙、排水系统、渗坑、建筑物、地基、废矿、钻孔等		√	√
污染物迁移转化机制	孔隙流，双孔隙流，裂隙流		√	√
	单相流或双相流			√
	密度控制流			√
	降解动力学			√
	吸附特征			√
	挥发			√
	弥散过程			√
污染受体	评估区以下或附近的地下水	√	√	√
	当前或潜在的地下水使用者		√	√
	地表水（泉水，溪流，水池，湿地）		√	√
	由评估区到污染受体之间距离		√	√
	污染受体敏感性		√	√
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			√
	优先流通道			√
污染物运移观测	污染羽萎缩、稳定、扩大、下潜（由于密度效应、补给或垂向水力梯度）			√
	污染物浓度季节性或长期变化			√

	影响污染迁移的过程（如对流，弥散，吸附，降解等）		√	√
	出现二次污染物的可能性		√	√
	污染物之间的反应，竞争的影响			√
	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			√
	污染分布图或等值线图，剖面图，时间序列图		√	√
生物地球化学环境	背景质量或对照质量		√	√
	好氧/厌氧		√	√
	pH，温度，盐度，氧化还原电位，溶解氧，碱度，NO ₃ /NH ₄ 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
水文地质条件资料 1) 含水层物理系统 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 2) 含水层结构 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 3) 含水层水文地质参数及空间变异 渗透系数、给水度、储水系数、弥散系数及孔隙度等 4) 钻孔 钻孔位置、孔口标高、岩性描述及成井结构等	1) 地质图与水文地质图 2) 地形图 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 4) 钻孔结构、地层岩性、柱状图、剖面图及成井报告等 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 6) 行政部门及私人企业的有关数据	1) 应有一定数量的控制点 2) 地质单元的厚度、延伸以及含水层的识别 3) 地形标高等值线、含水层厚度等值线 4) 含水层立体结构图、水文地质参数分布图 5) 地表水与地下水以及不同含水层之间的水力联系程度 6) 地下水对生态环境的支撑作用
水资源及其开发利用资料 1) 各种汇源项及其对地下水动力场的作用 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 3) 地表水体与地下水的相互作用 4) 地下水人工开采、回灌及其过程 5) 土地利用模式、灌溉方式、蒸发、降雨情况等	1) 降雨量及蒸发量 2) 地表水体流量及现状 3) 抽水试验及长期观测井的地下水水位监测数据 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 5) 灌溉区域、作物类型及分布情况 6) 水资源需求量及污水排放量预测分析 7) 其他政府、企业等有关部分的水资源开发利用数据	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 2) 数据采集的时间、地点、数值及测量单位应准确 3) 对于地下水数据,应注明是否为动水位 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
水质监测资料 1) 常规水质指标数据 2) 非常规水质指标数据	1) 评估区所在地建设项目环境影响评价报告 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	1) 不同时期不同点位的水质数据 2) 不同含水层位的水质数据 3) 不同监测指标数据

表 A.3 “主要危害污染物”名单

污染物	用 途
金属与阳离子	
铁	合金、机械、磁体
锰	合金、净水剂
铜	合金、涂料、电线、机械、建材、电镀、管道和杀虫剂
锌	合金、电镀、电子元件、汽车零件、杀真菌剂、盖屋板、电缆包装和营养素
钼	合金、颜料、润滑剂
汞	合金、电器、器械、杀真菌剂、杀菌剂、防霉剂、造纸和药物
砷	合金、染料、药物、焊料、电子元件、杀虫剂、灭鼠剂、除草剂和防腐剂
硒	合金、电子设备、陶瓷材料、催化剂
镉	合金、涂层、电池、电子设备、消防系统、涂料、杀真菌剂和显影剂
铅	合金、电池、汽油添加剂、板材与管材、涂料和辐射屏蔽
铍	空间技术中的机构材料、惯性制导系统、火箭燃料的添加剂和核反应堆中子的慢化剂和反应剂
钡	合金、润滑剂
镍	合金、陶瓷材料、电池、电镀和催化剂
银	合金、显影剂、化学品制造、镜子、电器、珠宝、仪器、催化剂和制药
铈	强化合金、焊料、板材和管材、烟火
钒	合金、催化剂、X 线的靶材
钛	合金、建材、磨蚀剂、涂料
铊	合金、玻璃、农药、广电应用
六价铬	用于电子产品、着色剂、防腐剂
非金属与阴离子	
硝酸根	肥料、防腐剂
亚硝酸根	肥料、防腐剂
氨	肥料、化学品制造、制冷剂、合成纤维、燃料和染料
氟	牙膏、饮用水添加剂、铝熔炼
氰	聚合物生成（重型轮胎）、涂料、冶金、杀虫剂
硼	合金、纤维和灯丝、半导体、推进剂
氯化氰	化工原料
挥发性酚类	来源于煤气洗涤、炼焦、合成氨、造纸、木材防腐和化工行业的工业废水
放射性核素	
铯 137	某些食物的 γ 辐射源
铬 51	血量、血细胞寿命、心输出量等的诊断
钴 60	辐射治疗、辐射、放射性探伤、科研实验
碘 131	药物诊断、治疗、泄漏检测、示踪剂、测定膜厚
铁 59	药物、示踪剂
磷 32	示踪剂、药物治疗、工业测量
钚 238, 钚 243	能源、军备武器
镭 226	药物治疗、射线照相
镭 228	天然存在
氡 222	药物、泄漏检测、射线照相、流速测定
钨 106	催化剂
锶 90	药物、工业应用

污 染 物	用 途
钍 232	天然存在
氚	示踪剂、发光仪标度盘
铀 238	核反应堆
锌 65	工业示踪剂
芳香烃	
苯乙烯	塑料、树脂、保护膜、中间物、汽油
萘	溶剂、润滑剂、炸药、防腐剂、中间物、杀真菌剂、防蛀剂、煤焦油副产品和汽油
苊	煤焦油副产品
芴	树脂产品、染料、杀虫剂、煤焦油副产品
菲	染料、炸药、麻药合成、生化研究
蒽	染料、中间物、煤焦油副产品、半导体研究
荧蒽	煤焦油副产品
芘	生化研究、煤焦油副产品
苯并(a)蒽	煤焦油副产品
蒾	有机合成、煤焦油副产品
苯并(b)荧蒽	煤焦油副产品
苯并(k)荧蒽	煤焦油副产品
苯并(a)芘	煤焦油副产品
二苯并(a,h)蒽	煤焦油副产品
苯并(g,h,i)花	煤焦油副产品
苯	洗涤剂、中间物、溶剂、汽油和煤焦油副产品
甲苯	塑料胶黏剂、溶剂、航空高辛烷值汽油调和料、稀释剂、化学品、炸药、洗涤剂、汽油和煤焦油副产品
乙苯	中间物、溶剂、汽油、煤焦油副产品
二甲苯（邻、间、对）	航空汽油、保护膜、溶剂、有机合成、汽油和煤焦油副产品
异丙苯	溶剂、化学品制造
硝基苯	溶剂、上光剂、化学品制造
苯胺	染料、中间物、显影剂、药物、除草剂、杀真菌剂、炼油和炸药
联苯胺	染料、试剂、橡胶硬化剂
二氢苊	
茚并(1,2,3)芘	
氧化烃	
甲醇	化学品制造、溶剂、汽车抗冻剂、染料
甲基叔丁基醚（MTBE）	无铅汽油中作为抗爆剂
苯酚	有机化工原料、溶剂、实验试剂和消毒剂
间甲酚	化学用品
丙烯酰胺	中毒性
丙烯腈	剧毒
邻苯二甲酸二丁酯	增塑剂、溶剂、黏合剂、杀虫剂、安全玻璃、油墨和纸膜
二(2-乙基己基)己二酸酯	有机溶剂
杂原子烃类	
三氯乙烷	杀虫剂、脱脂剂、溶剂
1,2-二氯丙烷	溶剂、中间物、精炼化合物、熏蒸剂、杀线虫剂、抗暴液添加剂
一溴二氯甲烷	溶剂、液体灭火剂

污 染 物	用 途
二溴氯甲烷	有机合成
氯仿	塑料、熏蒸剂、杀虫剂、制冷剂和推进剂
四氯化碳	脱脂剂、制冷剂和推进剂、熏蒸剂、化学品制造
溴仿	溶剂、中间物
二氯甲烷	溶剂、塑料、去污剂、推进剂、起泡剂
1,2-二氯乙烷	溶剂、脱脂剂、香皂成分、有机合成、汽油坑暴剂、涂料去除剂
氯乙烯	有机合成、聚氯乙烯及共聚物、黏合剂
1,1-二氯乙烯	莎纶（用于屏幕、室内装饰品、纤维、地毯等）、黏合剂、合成纤维
1,2-二氯乙烯	溶剂、香料、亮漆、热塑性塑料、燃料萃取合成物、药物
三氯乙烯/1, 1, 2 三氯乙烯	脱脂剂、涂料、干洗、染料、纺织物、溶剂、制冷剂和热交换液、熏蒸剂、中间物和航空材料
四氯乙烯	脱脂剂、干洗、溶剂、干燥剂、化学品制造、传热介质和驱虫保健剂
六氯丁二烯	溶剂、变压器油和液压油、热传输液
氯苯	溶剂、杀虫剂、化学品制造
1,2-二氯苯/邻二氯苯	溶剂、熏蒸剂、染料、杀虫剂、脱脂剂、上光剂和工业除臭剂
1,4-二氯苯/对二氯苯	杀虫剂、防蛀剂、杀菌剂、空间增味剂、中间物和熏蒸物
四氯苯	用于有机合成，用作绝缘液及变压器油的凝固抑制剂
五氯酚	杀虫剂、杀真菌剂、杀菌剂、灭藻剂、除草剂和木材防腐剂
2,4,6-三氯酚	杀真菌剂、除草剂、落叶剂
2,4-二氯酚	有机合成
对硝基酚	农药、医药、染料等精细化学品的中间体、皮革防霉剂以及酸值指示剂
烷基汞	剧毒
邻苯二甲酸二（2-乙基己基）酯	增塑剂
水合肼/水合联氨	还原剂、抗氧剂，用于制取医药、发泡剂
四乙基铅	有机合成、汽油抗震添加剂
吡啶/氮(杂)苯	溶剂、助染剂、缓蚀剂、催化剂
丁基黄原酸	橡胶工业中用作硫化促进剂，做铜、镍等的沉淀剂和比色剂，冶金工业中用作溶液中沉淀铜、镍等的试剂，纤维素基黄原酸钠用于人造纤维
苦味酸/三硝基苯酚	炸药
α -BHC	杀虫剂
β -BHC	杀虫剂
γ -BHC/林丹	杀虫剂
艾氏剂	杀虫剂
敌百虫	杀虫剂
内吸磷	农药
百菌清	杀菌剂
MSMA	除草剂
狄氏剂	杀虫剂
异狄氏剂	杀虫剂
氯丹	杀虫剂、油乳剂
克百威/呋喃丹	杀虫剂、杀线虫剂
甲拌磷（乙拌磷）	杀虫剂
涕灭威	杀虫剂、杀线虫剂
灭草松	除草剂
毒死蜱	除草剂
草甘膦	除草剂

污染物	用 途
滴滴涕	杀虫剂
六六六	杀虫剂
松节油	中药
灭多威	杀虫剂
高效氯氰菊酯	杀虫剂
百草枯	除草剂
氯苯嘧啶醇	杀菌剂
甲霜灵	农药
环氧七氯	七氯降解产物，也起到杀虫剂的作用
对硫磷	杀虫剂
敌力脱	杀菌剂
粉锈宁	杀菌剂
丙环唑	杀菌剂
异丙胺磷/2-氨基丙烷	溶剂、有机合成、乳化剂、橡胶硫化促进剂、杀虫剂、脱毛剂、表面活性剂、2, 4-滴的增溶剂
己唑醇	唑类杀菌剂，是留醇脱甲基化抑制剂
噻菌酯	杀菌剂
苯并咪唑	检验钴的试剂
代森锰锌	农药
百草敌	除草剂
绿草定	除草剂
二嗪磷	农药
麦草畏	除草剂
甲基对硫磷	杀虫剂
马拉硫磷	杀虫剂
敌敌畏	杀虫剂
甲萘威/西维因	杀虫剂
溴氰菊酯/敌杀死	杀虫剂
阿特拉津	除草剂、植物生长调节剂、杂草防治剂
三氯乙醛	杀虫剂原料
乙腈/甲基氰	有机溶剂
二氯乙酸	有机合成原料
三氯乙酸	有机合成原料
环氧氯丙烷	化工原料
氯丁二烯	化工原料
二溴化乙烯（EDB）	溶剂，杀菌剂，杀虫剂
二氯化乙烯（EDC）	溶剂，杀菌剂，杀虫剂
二(2-乙基己基)磷酸脂	萃取剂
三氯苯	有机溶剂
六氯苯	有机氯抗真菌剂
2,4-二硝基苯	化工原料
2,4,6-三硝基苯	化工原料
硝基氯苯	化工原料
2,4-二氯苯酚	染料中间体、杀菌剂、防腐剂，也用作聚酯纤维的溶剂
2,4,6-三氯苯酚	染料中间体、杀菌剂、防腐剂，也用作聚酯纤维的溶剂
p,p'-DDE	杀虫剂

污 染 物	用 途
p,p'-DDD	杀虫剂
o,p'-DDT	杀虫剂
p,p'-DDT	杀虫剂
异丙三哇硫磷	农药
乐果	杀虫剂

表 A.4 地下水污染途径分类

类型		污染途径	污染来源	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

表 A.5 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	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； 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； 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。	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； 可在短时间内得出较为精确的溯源结果。	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。
捕获区法	利用溶质迁移软件模拟示踪粒子在指定的位置和时间内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。	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。	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。
稳定同位素法	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。	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。	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。
化学指纹法	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。	适用范围较广，具有特征性，识别结果准确快速。	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。
化学质量平衡法	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：$d_i = \sum_{j=1}^p x_{ij} g_j \quad (i=1, 2, L, n)$源 j 的贡献率为：$\eta = g_j / \sum_{j=1}^p g_j$。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，即各排放源的贡献率。	该方法原理清楚，易理解； 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； 能够检测出是否遗漏了某重要源，可以检验其他方法的适用性。	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； 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； 排放源的选择上存在主观性和经验性； 要求排放源物质成分线性独立很难满足； 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	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。 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 $N \times M$ 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见存在较强的相关性，因此，可以用 P 个指标（$P < M$）来描述原来的样品集合。	应用简单且不需要事先对研究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； 利用一般的统计软件便可计算； 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； 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。	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 5~8 个因子，如果重要排放源类型>10，这种方法不能提供较好的结果。
-------	---	--	---

表 A.6 常见污染物在地下水中的迁移转化机制

污染物		对流	吸附	衰减/降解	水解	挥发
金属	锑	Y	Y	Y	Y	?
	砷	Y	Y	Y	Y	Y
	铍	Y	Y	N	Y	N
	镉	Y	Y	N	Y	N
	铬	Y	Y	N	Y	N
	铜	Y	Y	N	Y	N
	铅	Y	Y	Y	Y	?
	汞	Y	Y	Y	Y	Y
	镍	Y	Y	N	Y	N
	硒	Y	Y	Y	Y	?
	银	Y	Y	N	Y	N
	铊	Y	Y	N	Y	N
	锌	Y	Y	N	Y	N
	金属氰化物	N	N	Y	?	Y
卤代烃	二氯甲烷	?	N	N	N	Y
	三氯甲烷	?	N	N	N	Y
	四氯甲烷	?	N	N	N	Y
	溴甲烷	?	?	?	N	Y
	一氯二溴甲烷	?	?	?	N	?
	一溴二氯甲烷	Y	N	?	?	N
	1,2 - 二氯乙烷	?	N	?	N	Y
	1,1,1-三氯乙烷	?	N	N	N	Y
	1,1,2-三氯乙烷	?	N	N	N	Y
	1,2 - 二氯丙烷	?	?	?	?	Y
	氯乙烯	N	N	N	?	Y
	1,2-二氯乙烯	?	N	N	N	Y
	1,1- 二氯乙烯	?	N	N	N	Y
	三氯乙烯(TCE)	?	N	?	N	Y
	四氯乙烯(PCE)	?	N	N	N	?
氯代苯类	氯苯	?	?	?	N	Y
	1,2 - 二氯苯	?	?	?	N	Y
	1,3 - 二氯苯	?	?	?	N	?
	1,4 - 二氯苯	?	?	?	N	?
	1,2,4-三氯苯	?	?	?	N	?
单环芳烃	苯	?	?	?	N	Y
	甲苯	?	?	?	N	Y
	乙苯	?	?	?	N	Y
有机氯农药	α -六氯环己烷	?	?	Y	N	?
	β -六氯环己烷	?	?	Y	N	?
	δ -六氯环己烷	?	?	Y	N	?
	γ -六氯环己烷	?	?	Y	N	?
	4,4-DDD	?	Y	?	?	Y
	4,4-DDE	?	Y	?	N	Y
	4,4-DDT	?	Y	?	?	Y
	六氯苯	?	Y	N	N	?

注：Y”-确定有；“N”- 确定没有；“?”- 不确定。(资料源自 Spitz 和 Moreno(1996))

附录 B
(资料性附录)
地下水数学模型

B.1 地下水流数学模型

1.1 解析法

1.1.1 应用条件

地下水流解析法可以给出在各种参数值的情况下渗流区中任何一点上的水位（水头）值。但是，这种方法仅只适用于含水层几何形状规则、方程式简单、边界条件单一的情况。

1.1.2 预测模型

1.1.2.1 稳定运动

(1) 潜水含水层无限边界群井开采情况

$$H_0^2 - h^2 = \frac{1}{\pi k} \sum_{i=1}^n \left(Q_i \ln \frac{R_i}{r_i} \right) \quad (\text{B.1})$$

式中：

H_0 —潜水含水层初始厚度，m；

h —预测点稳定含水层厚度，m；

k —含水层渗透系数，m/d；

i —开采井编号，从1到n；

Q_i —第*i*开采井开采量，m³/d；

r_i —预测点到抽水井*i*的距离，m；

R_i —第*i*开采井的影响半径，m。

(2) 承压含水层无限边界群井开采情况

$$s = \sum_{i=1}^n \left(\frac{Q_i}{2\pi T} \ln \frac{R_i}{r_i} \right) \quad (\text{B.2})$$

式中：

s —预测点水位降深，m；

Q_i —第*i*开采井开采量，m³/d；

T —承压含水层的导水系数，m²/d；

R_i —第*i*开采井的影响半径，m；

r_i —预测点到抽水井*i*的距离，m；

i —开采井编号，从1到n。

1.1.2.2 非稳定运动

(1) 潜水情况

$$H_0^2 - h^2 = \frac{1}{2\pi k} \sum_{i=1}^n Q_i W(u_i) \quad (\text{B.3})$$

$$u_i = r_i^2 \mu / 4K\bar{M}t \quad (\text{B.4})$$

式中：

H_0 —潜水含水层初始厚度，m；

h —预测点稳定含水层厚度，m；

K —含水层渗透系数，m/d；

Q_i —第*i*开采井开采量, m^3/d ;

$W(u_i)$ —井函数, 可通过查表的方式获取井函数的值 (《地下水动力学》);

μ —给水度, 无量纲;

i —开采井编号, 从1到*n*;

r_i —预测点到抽水井*i*的距离, m ;

$\overline{M}$ —含水层平均厚度, m ;

t —为自抽水开始到计算时刻的时间;

i —开采井编号, 从1到*n*。

(2) 承压水情况

$$s = \frac{1}{4\pi T} \sum_{i=1}^n Q_i W(u_i) \quad (B.5)$$

$$W(u_i) = \int_{u_i}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy \quad (B.6)$$

$$u_i = \frac{\mu^* r_i^2}{4Tt} \quad (B.7)$$

式中:

s —预测点水位降深, m ;

T —承压含水层的导水系数, m^2/d ;

Q_i —第*i*开采井开采量, m^3/d ;

$W(u_i)$ —井函数, 可通过查表的方式获取井函数的值 (《地下水动力学》);

r_i —预测点到抽水井*i*的距离, m ;

i —开采井编号, 从1到*n*;

μ^* —含水层的贮水系数, 无量纲。

1.1.2.3 直线边界附近的井群

(1) 直线补给边界

a) 承压含水层中的井群

$$s = \frac{1}{2\pi T} \sum_{i=1}^n Q_i \ln \frac{r_{2,i}}{r_{1,i}} \quad (B.8)$$

式中:

s — n 个开采井在计算点处产生的总降深, m ;

T —导水系数, m^2/d ;

Q_i —第*i*个开采井的抽水量, m^3/d ;

$r_{1,i}$ —计算点至第*i*个实井的距离, m ;

$r_{2,i}$ —计算点至第*i*个虚井的距离, m ;

n —开采井的总数。

b) 潜水含水层中的井群

$$h = \sqrt{H_0^2 - \frac{1}{\pi K} \sum_{i=1}^n Q_i \ln \frac{r_{2,i}}{r_{1,i}}} \quad (B.9)$$

式中:

h —计算点处饱水带的厚度, m ;

H_0 —饱水带的初始厚度, m;

K —渗透系数, m/d;

Q_i —第 i 个开采井的抽水量, m^3/d ;

$r_{1,i}$ —计算点至第 i 个实井的距离, m;

$r_{2,i}$ —计算点至第 i 个虚井的距离, m;

n —开采井的总数。

计算出 h 后, 再由 $s=H_0-h$ 得到降深值。

(2) 直线隔水边界

a) 承压含水层中的井群

$$s = 0.366 \frac{1}{T} \sum_{i=1}^n Q_i \lg \frac{2.25 T t}{r_{1,i} r_{2,i} \mu^*} \quad (B.10)$$

式中:

s — n 个开采井在计算点处产生的总降深, m;

T —导水系数, m^2/d ;

Q_i —第 i 个开采井的抽水量, m^3/d ;

$r_{1,i}$ —计算点至第 i 个实井的距离, m;

$r_{2,i}$ —计算点至第 i 个虚井的距离, m;

μ^* —含水层的贮水系数, 无量纲;

n —开采井的总数。

b) 潜水含水层中的井群

$$s = \sqrt{H_0^2 - 0.732 \frac{1}{K} \sum_{i=1}^n Q_i \lg \frac{2.25 T t}{r_{1,i} r_{2,i} \mu}} \quad (B.11)$$

式中:

s —预测点水位降深, m;

H_0 —饱水带的初始厚度, m;

$T=KH_m$, K 为渗透系数, H_m 为饱水带的平均厚度;

μ —给水度, 无量纲;

Q_i —第 i 个开采井的抽水量, m^3/d ;

$r_{1,i}$ —计算点至第 i 个实井的距离, m;

$r_{2,i}$ —计算点至第 i 个虚井的距离, m;

n —开采井的总数。

1.2 数值法

1.2.1 应用条件

数值法可以解决许多复杂水文地质条件和地下水开发利用条件下的地下水资源评价问题, 并可以预测各种开采方案条件下地下水位的变化, 即预报各种条件下的地下水状态。但不适用于管道流 (如岩溶暗河系统等) 的模拟评价。

1.2.2 预测模型

对于非均质、各向异性、空间三维结构、非稳定地下水流系统:

1.2.2.1 控制方程

$$\mu_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + V \quad (B.12)$$

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。

1.2.2.2 初始条件

$$h(x, y, z, t) = h_0(x, y, z) \quad (x, y, z) \in \Omega, t = 0 \quad (\text{B.13})$$

式中:

$h_0(x, y, z)$ —已知水位分布;

Ω —模型模拟区。

1.2.2.3 边界条件

a) 第一类边界

$$h(x, y, z, t)|_{\Gamma_1} = h(x, y, z, t) \quad (x, y, z \notin \Gamma_1 \quad t \geq 0) \quad (\text{B.14})$$

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。

b) 第二类边界

$$K \frac{\partial h}{\partial n} \bigg|_{\Gamma_2} = q(x, y, z, t) \quad (x, y, z \notin \Gamma_2 \quad t > 0) \quad (\text{B.15})$$

式中:

Γ_2 —二类边界;

K—三维空间上的渗透系数张量;

$\vec{n}$ —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。

c) 第三类边界

$$(K(h - z) \frac{\partial h}{\partial n} + \alpha h) \bigg|_{\Gamma_3} = q(x, y, z) \quad (\text{B.16})$$

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;

$\vec{n}$ —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.2 污染物迁移转化过程数学表达

2.1 对流

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：

$$v = \frac{Ki}{n} \quad (\text{B.17})$$

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。

2.2 弥散和扩散

水动力弥散过程包括机械弥散与分子扩散。

$$D_h = D^* + \alpha v \quad (\text{B.18})$$

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：

$$D^* = DT \quad (\text{B.19})$$

式中： D —扩散系数，m²/s；

T —与弯曲度相关的系数，无量纲。

2.3 挥发

挥发性污染物在溶解相和蒸汽相分配的比例可以表达为：

$$C_v = HC \quad (\text{B.20})$$

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。

2.4 非水相污染物的物理迁移

非水相污染物（Nonaqueous Phase Liquids, NAPLs）在迁移过程中存在液态相、残留相、蒸气相及溶解相。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）：

$$C_d = SX \quad (\text{B.21})$$

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。

2.5 吸附平衡

污染物在地下水迁移过程的吸附或离子交换可使用吸附方程描述，包括线性吸附等温式、Freundlich 等温式及 Langmuir 等温式。

2.5.1 线性吸附等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C} \quad (\text{B.22})$$

2.5.2 Freundlich 等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C^{1/N}} \quad (\text{B.23})$$

2.5.3 Langmuir 等温式

$$K_d = \frac{C_s}{C(b - C_s)} \quad (\text{B.24})$$

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）。

在吸附条件下，污染物在地下水中迁移速率：

$$V = u / R_f \quad (\text{B.25})$$

式中：

$$R_f = 1 + \rho K_d / n \quad (\text{B.26})$$

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。

2.6 降解与衰变

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刻画，表达式如下：

$$C = C_0 e^{-\lambda t} \quad (\text{B.27})$$

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。

B.3 地下水污染物迁移数学模型

3.1 解析法

3.1.1 稳定源一维弥散方程

假设：河流被污染，污染物浓度为 C_0 ，河流中的污水连续地补给承压含水层致使地下水污染。假定河水污染地下水之前地下水中污染物的浓度为零，污水与含水层之间不发生吸附等其他化学作用，河流中的污水与地下水的密度及粘稠度相同。

上述问题的数学模型为（以隔水底板为 x 轴，河流为原点）：

$$\begin{cases} D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - V \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t} n \\ c(x=0, t>0) = c_0 \\ c(x=\infty, t \geq 0) = 0 \\ c(x \geq 0, t=0) = 0 \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

这里假定地下水实际平均流速 V 是常数，上式是一个一般的二阶线性齐次偏微分方程的定解问题，可用拉普拉斯积分变换法求解，原函数解为：

$$c = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Vt/n}{2\sqrt{Dt/n}} \right] + \frac{c_0}{2} \exp\left(\frac{Vx}{D}\right) \cdot \operatorname{erfc} \left[\frac{x+Vt/n}{2\sqrt{Dt/n}} \right] \quad (\text{B.29})$$

当 $D/Vx \leq 0.005$ 时，该函数的第二项可忽略不计，误差不大于 4%，则上式简化为：

$$\bar{c}(x, t) \approx \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Vt/n}{2\sqrt{Dt/n}} \right] \quad (\text{B.30})$$

式中：

n —有效孔隙度，无量纲；

V —地下水实际平均流速，m/s；

D —弥散系数， m^2/d ；

c_0 —污染物初始浓度，mg/L；

$\operatorname{erfc}()$ —余误差函数（可查《水文地质手册》获得）。

3.1.2 瞬时源一维弥散方程

假设：在上述的定解问题中，现假设污染的河水不是源源不断的侵入含水层，而是在某时刻 t_p 以脉冲的方式（或以“包体”的形式）侵入含水层，其余条件不变，这种情况下整个污染“包体”就像一个弥散带，它的长度随着时间的增长而增长。这样得到的定解方程简化为：

$$\bar{c}(x, t) = \frac{c_0}{2} \operatorname{erfc} \left[\frac{x-Vt/n}{2\sqrt{Dt/n}} \right] - \operatorname{erfc} \left[\frac{x-V(t-t_p)/n}{2\sqrt{Dt/n}} \right] \quad (\text{B.31})$$

式中：

n —有效孔隙度，无量纲；

V —地下水实际平均流速，m/s；

D —弥散系数， m^2/s ；

c_0 —污染物初始浓度，mg/L。

3.1.3 平面放射流（径向流）

当从钻孔中投入固定浓度的物质（ c_0 =常数）或固定流量的物质（ qc_0 =常数， q 为溶液的流量）时，如果地下水的天然坡度为零，则形成以钻孔为中心的散开放射流。在野外试验时常有这种物理模型。此类模型主要在于其流速沿程是变数，即随着离源地距离的增长而减少，液体的平均实际流速 u 与源的流量 q 及距离 r 的关系是：

$$u = \frac{q}{2\pi r n m} \quad (\text{B.32})$$

式中： m 为含水层厚度；

n 为有效孔隙度。

该定解问题的近似解为：

$$\text{对于 } c_0 = \text{常数} \quad c = c_0 |1 - F_1(v, F_0)| \quad (\text{B.33})$$

$$\text{对于 } qc_0 = \text{常数} \quad c = c_0 |1 - F_1(v, F_0) - F_2(v, F_0, B)| \quad (\text{B.34})$$

$$v = \frac{q}{4\pi D n m} \quad (\text{B.35})$$

$$F_0 = \frac{Dt}{nr^2} \quad (\text{B.36})$$

$$B = \frac{q}{4\pi D n m} \left(\frac{r}{r_0} \right)^2 (v-1) \quad (\text{B.37})$$

式中： D ：弥散系数， m^2/s ；

r_0 ：钻孔半径， m 。

$$F_1 = \frac{1}{\gamma(v)} \int_0^{\frac{1}{4F_0}} e^{-z} z^{v-1} dz \quad (\text{B.38})$$

$$F_2 = \frac{e^{-4F_0 B}}{\gamma(v)} \int_{\frac{1}{4F_0}}^{\infty} e^{-z + \frac{B}{2}} z^{v-1} dz \quad (\text{B.39})$$

式中 γ 为伽马函数。函数 F_1 及 F_2 可以由专门的表或图解法求得。

3.1.4 二维平面模型

含水层是单层、水平均质的岩层，水的实际流速 u 是常数，且平行于 x 轴。弥散系数也是常数，且与流速成正比（动力弥散体系）。污染源为点源（或称局部源），其浓度为 C_0 ，以流量进入。地下水中含该污染物的初始浓度为零。这样，不仅有沿流向的纵向弥散，同时还有横向的横向弥散。 $D_x \neq D_y \neq 0$ ， $D_z = 0$ ； $V_x = V \neq 0$ ， $V_y = V_z = 0$ 。令 $D/n = \alpha u$ ，

此时，溶质迁移的基本微分方程为：

$$\alpha_L u \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \alpha_T u \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - u \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (\text{B.40})$$

该定解问题的解为：

$$c(x, y, t) = \frac{Qc_0}{4\pi u \sqrt{\alpha_L \cdot \alpha_T}} \exp\left(-\frac{x}{2\alpha_L}\right) \cdot [W(u, b) - W(t, b)] \quad (\text{B.41})$$

式中： α —弥散度（具有长度量纲）；

u —平均实际流速， $u = V/n$ ，m/s；

n —有效孔隙度，无量纲；

V —地下水实际平均流速，m/s；

D —弥散系数，m²/s；

$W(u, b)$ —（Hantush）汉图土函数，该函数在地下水动力学中有专门的函数表可查。

3.1.5 二维剖面模型

延伸长度较大的贮油库的渗透属于这种模型。从平面上看，可以视为是一维弥散，而在剖面上，既有 x 轴（水平方向），还有 z 轴的弥散（铅直向下方向），形成剖面上的二维模型。

假定库底为半圆形，半径 r_0 相对较小，库长为 $2l$ ，含水层厚度 m 较大，以至可以不考虑底板的影响（ $m \rightarrow \infty$ ）。这种情况下，地下水的运动不仅受 x 方向地下水天然梯度的影响，而且还受污染水与天然水密度差（重力梯度）的影响。因此，地下水的流速是坐标 x, z 和浓度 c 的函数。要得出这个问题的精确解很困难，只有进一步简化求近似解，即假定 V_x 和 V_z 固定不变可以得出近似解。

上述条件下，溶质运移的基本方程是：

$$\frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{c}}{\partial r} = \frac{1}{K_x} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} \quad (\text{B.42})$$

式中： $r = \sqrt{x^2 + u^2}$

该定解问题的解析解为：

$$c = c_0 \exp[\alpha(x - x_0) + \sigma(u - u_0)](R_1 - R_2) \quad (\text{B.43})$$

$$R_1 = K_0(r\sqrt{v/K_x}) \quad (\text{B.44})$$

$$R_2 = \frac{2f_0}{\pi} \int_0^\infty \frac{\exp(-vt - \lambda^2 f_0) \cdot [I_0(\lambda r)N_0(\lambda) - I_0(\lambda)N_0(\lambda r)]\lambda}{(vt + f_0\lambda^2) \cdot [I_0^2(\lambda) + N_0^2(\lambda)]} \quad (\text{B.45})$$

式中： $u = z\sqrt{D_x/D_y}$ ， $\bar{c} = c_0 \exp(-\alpha x + \sigma u - vt)$

$$\alpha = \frac{u_x}{2K_x}; \sigma = \frac{u_u}{2K_x}; v = \frac{u_x + u_u}{4K_x}; f_0 = \frac{K_x t}{r_0^2}; r = \frac{r}{r_0}。$$

K_x —沿 x 方向的弥散系数 $K_x = D_x/n$ ；

u_x —沿 x 方向的实际渗透系数 $u_x = V_x/n$ ；

u_u —沿 z 方向的实际渗透系数 $u_u = V_u/n$ ；

I_0 和 N_0 —相应为取决于实际变数的第一类和第二类零阶贝塞尔函数；

K_0 —函数，当很大时，可以运用贝塞尔函数的解：

$$K_0 \approx \frac{e^{-z}}{\sqrt{2z/\pi}} \quad (\text{B.46})$$

3.2 数值法

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B1.2）和溶质运移模型两部分。

3.2.1 控制方程

$$R\theta \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i c) - Wc_s - Wc - \lambda_1 \theta c - \lambda_2 \rho_b \bar{c} \quad (\text{B.47})$$

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， $1/\text{d}$ ；

c_s —组分的浓度， mg/L ；

λ_1 —溶解相一级反应速率， $1/\text{d}$ ；

λ_2 —吸附相反应速率， $\text{L}/(\text{mg d})$ 。

3.2.2 初始条件

$$c(x, y, z, t) = c_0(x, y, z) \quad (x, y, z \in \Omega \quad t=0) \quad (\text{B.48})$$

式中：

$c_0(x, y, z)$ —已知浓度分布；

Ω —模型模拟区域。

3.2.3 定解条件

3.2.3.1 第一类边界—给定浓度边界

$$c(x, y, z, t)|_{\Gamma_1} = c(x, y, z, t) \quad (x, y, z \in \Gamma_1 \quad t \geq 0) \quad (\text{B.49})$$

式中：

Γ_1 —表示定浓度边界；

$c(x, y, z, t)$ —一定浓度边界上的浓度分布。

3.2.3.2 第二类边界—给定弥散通量边界

$$\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} \bigg|_{\Gamma_2} = f_i(x, y, z, t) \quad (x, y, z \notin \Gamma_2 \quad t \geq 0) \quad (\text{B.50})$$

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。

3.2.3.3 第三类边界—给定溶质通量边界

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C \bigg|_{\Gamma_3} = g_i(x, y, z, t) \quad (x, y, z \notin \Gamma_3 \quad t \geq 0) \quad (\text{B.51})$$

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。

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（溶质/水流）	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》1978 版，2010 版，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》2010 版及 1978 版。
		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 MODFLOWWELLTEST	
		6.经验数值			经验数值见附表 C.4
承压水单位释水系数	非稳定水流模型	1.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。	AquiferTest Aqtesolv MODFLOWTHCVFIT THEISFIT TSSLEAK	也可用野外试验和室内试验的方法
		2.经验数值			经验数值见附表 C.5

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.7 和附图 C.1
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.6
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》2010 版或相关文献。
		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。
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》2010 版。
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。		具体方法请参考《地下水数值模拟的理论与实践》，宁立波，董少刚，马传明编著。
		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			详见《水文地质手册》2010 版。
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。经验数值见附表 C.7， C.9
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 水平渗透系数取值范围

岩性	渗透系数/(m/s)	岩性	渗透系数/(m/s)
粘土	$(1 \sim 990) \times 10^{-12}$	粗砂砾石	$(1.74 \sim 18.9) \times 10^{-3}$
粉质粘土	$(4.75 \sim 9,380) \times 10^{-10}$	卵石	$>1.89 \times 10^{-2}$
砂质粘土	$(2.25 \sim 2,550,000) \times 10^{-12}$	砂砾石	$(4.75 \sim 9950) \times 10^{-4}$
粘质黄土	$(1 \sim 990) \times 10^{-12}$	白云岩	$(4.25 \sim 1160) \times 10^{-11}$
粉砂	$(0.09 \sim 17,400) \times 10^{-9}$	裂隙白云岩	$(1.1 \sim 50) \times 10^{-5}$
砂质粉土	$(6.94 \sim 30.1) \times 10^{-11}$	花岗岩	$(4.25 \sim 23.6) \times 10^{-13}$
极细砂	$(4.72 \sim 95.8) \times 10^{-6}$	风化花岗岩	$(3.3 \sim 52) \times 10^{-6}$
细砂	$(0.2 \sim 189) \times 10^{-6}$	裂隙花岗岩	$(1 \sim 9000) \times 10^{-7}$
中砂	$(0.9 \sim 2520) \times 10^{-6}$	砂岩	$(3.3 \sim 54,000) \times 10^{-9}$
粗砂	$(0.9 \sim 6610) \times 10^{-6}$	页岩	$(1.16 \sim 260,000,000) \times 10^{-12}$
海砂	$(1 \sim 18.9) \times 10^{-5}$	玄武岩	$(1.89 \sim 47,200) \times 10^{-11}$
细砂砾石	$(5.19 \sim 7.55) \times 10^{-3}$	透水玄武岩	$(4.75 \sim 475,000) \times 10^{-7}$
中砂砾石	$(7.55 \sim 10.4) \times 10^{-3}$	冰碛物	$(9.95 \sim 11,600,000) \times 10^{-13}$

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.3 部分垂直和水平渗透系数的经验比例

岩性	K_v / K_h	岩性	K_v / K_h
粘土	0.025 ~ 0.95	裂隙砂岩	0.002
砂, 粉砂, 粘土	0.1	砂岩	0.5 ~ 1.0
有机粉砂	0.6 ~ 0.8	页岩	0.1 ~ 0.5
灰岩, 白云岩	0.1 ~ 0.5	盐	1

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.4 给水度经验取值

岩性	给水度	岩性	给水度
粘土	0.01 ~ 0.18	粗砂	0.18 ~ 0.43
细砂砾石	0.13 ~ 0.40	细砂岩	0.02 ~ 0.40
中砂砾石	0.17 ~ 0.44	中砂岩	0.12 ~ 0.41
粗砂砾石	0.18 ~ 0.43	片岩	0.22 ~ 0.33
灰岩	0.00 ~ 0.36	风化片岩	0.06 ~ 0.21
黄土	0.14 ~ 0.22	粉质粘土	0.01 ~ 0.39
细砂	0.01 ~ 0.46	粉砂岩	0.01 ~ 0.33
中砂	0.16 ~ 0.46	凝灰岩	0.02 ~ 0.47

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.5 承压水释水（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	$(2.6 \sim 20) \times 10^{-3}$	裂隙基岩	$(3.3 \sim 69) \times 10^{-6}$
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	$(4.9 \sim 10) \times 10^{-4}$
致密砂砾石	$(4.9 \sim 10) \times 10^{-5}$	致密砂	$(1.3 \sim 2.0) \times 10^{-4}$

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.6 孔隙度经验取值

岩性	孔隙度/%	岩性	孔隙度/%
粉质粘土	34 ~ 61	白云岩	2.4 ~ 20
粘土	50 ~ 60	灰岩	1 ~ 50
砂	31 ~ 53	页岩	0 ~ 10
砂砾石	20 ~ 40	玄武岩	3 ~ 35
砂岩	5 ~ 48	花岗岩	0.1 ~ 2.2
白垩岩	2.3 ~ 5	风化花岗岩	8 ~ 57

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.7 弥散系数经验取值

介质	迁移距离 (m)	弥散度 (m)	介质	迁移距离 (m)	弥散度 (m)
冲积物	40	3	中细砂	57.3	1.5
冲积物	15	3	冰碛和细砂	4	0.06
冲积物	18,000	30.5	砂	3	0.03
冲积物	13,000	30.5	砂	8	0.5
冲积物	6.4	15.2	砂	13	1.0
冲积物	10,000	61	砂	100,000	5600 ~ 40,000
冲积物	3200	61	砂	2 ~ 8	0.01 ~ 0.42
冲积物 (凝灰岩)	91	10 ~ 30	砂	13 ~ 32.5	0.8 ~ 2.7
冲积物 (砾石)	290	41	砂	6	0.18
冲积物 (砾石)	25	0.3 ~ 1.5	砂	6	0.01
角砾化玄武岩	17.1	0.6	河砂	25	1.6
玄武岩,火山岩	20,000	91	河砂	40	0.06 ~ 0.16
玄武岩,火山岩	20,000	910	砂、粉砂和砾石	11 ~ 43	2 ~ 11
裂隙白云岩	23	5.2	砂、粉砂和砾石	79.2	15.2
断裂白云岩	122	15	砂、粉砂和砾石	16	1
裂隙白云岩	55	38.1	砂、粉砂和粘土	57.3	0.76
裂隙白云岩	21.3	2.1	混合砂砾石	200	7.5
白云岩	250	7	砂砾	25 ~ 150	11 ~ 25
裂隙花岗岩	5	0.5	砂砾		
裂隙花岗岩	17	2	砂砾	43,400	91.4
冰碛砂砾石	10	5	砂砾	18.3	0.26
卵砾石	54 ~ 9	1.4 ~ 11.5	砂砾	1.52	0.015
砂砾石	700	130 ~ 234	砂砾	16.4	2.13 ~ 3.35
灰岩	2,000	170	冰川砂砾	20,000	30.5
灰岩	91	11.6	冰川砂砾	3,500	6
灰岩	41.5	20.8	冰川砂砾	4,000	460
裂隙灰岩	32,000	23	冰川砂	600	30 ~ 60
裂隙灰岩	490	6.7	冰川砂	90	0.43
砂岩	3 ~ 6	0.16 ~ 0.6	砂卵砾石	6	11
砂岩和冲积沉积物	50,000	200	砂砾石粘土互层	800	15
砂、粉土和粘土	28	1	砂砾石粘土互层	1,000	12
冰川冲积砂	90	0.5	砂砾石粘土互层	19	2 ~ 3
冰川冲积砂	11	0.08	砂砾石粉粘互层	10.4	0.7
冰川冲积砂	700	7.6	砂砾石粉粘互层	100	6.7
冰川冲积砂	600	30 ~ 60	砂砾石粉粘互层	100	10
冰川冲积砂	90	0.43	砂砾石粉粘互层	500	58
中粗砂	250	0.96	冰碛物		3.0 ~ 6.1
中砂	38.3	4.0			

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.8 常见无机物分配常数区间

元素	介质岩性	Kd (mL/g)	备注
镅(Am)	粘土	50,000	pH=5 ~ 8
	砂壤土	971 ~ 4830	
	砂	249 ~ 476	
	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	200	实验室测试数据
	盐	300	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
锑(Sb)	砂	0	
砷(As)	玄武岩	1.4	
	砂	>39	
	壤土	>78	
	粘土	>39	
镉 (Cd)	砂	0.68	非钙质
	壤土	4.5	钙质
	粘土	0.17	pH=5.0
铯 (Cs)	冲积物	121 ~ 3165	
	闪长岩	8 ~ 1810	
	花岗岩	34.3 ~ 300	
	玄武岩	6.5 ~ 9520	
	砂岩	102	
	流纹岩	4 ~ 100,000	
	火山玻璃	6 ~ 84	
	石英斑岩	32 ~ 730	
	橄榄岩	75 ~ 1685	
	蛭石	52,000	蒸馏水
	高岭石	2500	蒸馏水
	粉质粘土	3000	
	粉砂	27 ~ 170	石膏
	白云岩	51 ~ 6657	
	石膏	419 ~ 3600	
	粉砂岩	661 ~ 8250	白云岩胶状物
	凝灰岩	100	实验室测试数据
铬 (Cr)	砂	1.3	
	壤土	2.6	
	粘土	2.6 ~ 30.2	pH=5.0
碳 (C)	玄武岩	0	实验室测试数据
	花岗岩	0	实验室测试数据
	盐	0	实验室测试数据
	凝灰岩	0	实验室测试数据
铜 (Cu)	泥砂壤土	704 ~ 1,330	
	壤质砂	106	

	砂	1,240 ~ 1,850	
	粘壤土	355 ~ 110,000	pH=5.5
	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	200	实验室测试数据
	盐	300	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
铕 (Eu)	石英砂	228 ~ 705	pH=7.7
	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	100	实验室测试数据
	盐	50	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
碘 (I)	凝灰岩	1.1	
	玄武岩	0	实验室测试数据
	花岗岩	0	实验室测试数据
	盐	0	实验室测试数据
铅 (Pb)	砂	190	非钙质
	壤土	314	钙质
	粘土	15.2	pH=5.0
	玄武岩	25	实验室测试数据
	花岗岩	5	实验室测试数据
	盐	2	实验室测试数据
	凝灰岩	25	实验室测试数据
汞 (Hg)	砂	5.2	
	壤土	130	
	粘土	>65	
钼 (Mo)	玄武岩	4 ~ 100	实验室测试数据
	花岗岩	1 ~ 25	实验室测试数据
	盐	1,250	实验室测试数据
	凝灰岩	4 ~ 100	实验室测试数据
铌 (Nb)	砂壤土	15.4 ~ 127	
	砂	32.4 ~ 37.2	
	玄武岩	3 ~ 500	实验室测试数据
	花岗岩	1 ~ 500	实验室测试数据
	盐	7 ~ 300	实验室测试数据
	凝灰岩	3 ~ 500	实验室测试数据
镍 (Ni)	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	10	实验室测试数据
	盐	6	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
铌(Nb)	玄武岩	100	实验室测试数据
	花岗岩	100	实验室测试数据
	盐	50	实验室测试数据
	凝灰岩	100	实验室测试数据
钯(Pd)	玄武岩	50	实验室测试数据

	花岗岩	10	实验室测试数据
	盐	3	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
镤(Pa)	玄武岩	100	实验室测试数据
	花岗岩	100	实验室测试数据
	盐	50	实验室测试数据
	凝灰岩	100	实验室测试数据
钷(Pu)	砂	2 ~ 10	pH<3
	粉砂	11.3 ~ 48.8	
	粘土	80.9	
	粘壤土	1.4 ~ 3,105	pH=7.08
	玄武岩	100 ~ 20,000	实验室测试数据
	花岗岩	100 ~ 50,000	实验室测试数据
	盐	50 ~ 50,000	实验室测试数据
	凝灰岩	0 ~ 100	实验室测试数据
镭(Ra)	凝灰岩	200	
	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	50	实验室测试数据
	盐	5	实验室测试数据
钷(Sm)	玄武岩	50	实验室测试数据
	花岗岩	100	实验室测试数据
	盐	50	实验室测试数据
	凝灰岩	50	实验室测试数据
硒(Se)	砂	3.2 ~ 15.6	
	壤土	16 ~ 1,08	
	粘土	0.56 ~ 29	
	玄武岩	5 ~ 20	实验室测试数据
	花岗岩	2	实验室测试数据
	凝灰岩	2	
锶(Sr)	玄武岩	16 ~ 220	pH=7.7
	石英砂	1.7 ~ 38	
	花岗岩	1.7 ~ 23	TDS=4250
	白云岩	5 ~ 14	
	粉质粘土	220 ~ 240	
	粉砂岩	8.32 ~ 9.56	黑色页岩
	石灰岩	0.19 ~ 8.32	页岩
	凝灰岩	170 ~ 300	
	蒙脱石	506	pH=7.5
	盐	5	实验室测试数据
	凝灰岩	100	实验室测试数据
铈(Tc)	玄武岩	0 ~ 20	实验室测试数据
	花岗岩	4	实验室测试数据
	盐	2	实验室测试数据
	凝灰岩	0 ~ 10	实验室测试数据

钍(Th)	玄武岩	500	实验室测试数据
	花岗岩	500	实验室测试数据
	凝灰岩	500	实验室测试数据
锡(Sn)	玄武岩	100 ~ 10	实验室测试数据
	花岗岩	500 ~ 10	实验室测试数据
	盐	1 ~ 50	实验室测试数据
	凝灰岩	500 ~ 0	实验室测试数据
铀(U)	粘土	16 ~ 39	河流泥砂
	变质片岩	270	
	玄武岩	6	实验室测试数据
	花岗岩	4	实验室测试数据
	盐	1	实验室测试数据
	凝灰岩	4	实验室测试数据
锆(Zr)	凝灰岩	260 ~ 500	
	玄武岩	500	实验室测试数据
	花岗岩	500	实验室测试数据
	盐	500	实验室测试数据

注：资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.9 常见有机物分配常数区间

污染物	介质岩性	K_d (ml / g)
苯	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00017$)	0.031
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00023$)	0.079
	细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00026$)	0.051
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00028$)	0.07
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.0006$)	0.885
	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00065$)	0.15
	细砂, 冰川湖积 ($f_{oc}=0.00102$)	1.8
	粉砂, 湖积 ($f_{oc}=0.00108$)	0.092
溴甲烷	中细砂, 冰川冲积	1.928
	砂, 砾石, 粉砂	6
四氯化碳	中细砂, 冰川冲积	1.8 ~ 2.5
氯苯	砂, 砾石, 粉砂	33
氯仿	砂, 砾石, 粉砂	2.5 ~ 3.8
二溴	砂, 砾石, 粉砂	6
1,2-二氯苯	砂, 砾石, 粉砂	100
	中细砂, 冰川冲积	3.9 ~ 9.0
六氯乙烷	中细砂, 冰川冲积	5.1
萘	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00017$)	0.12
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00023$)	0.648
	细砂, 冰川湖积 ($f_{oc}=0.00026$)	0.28
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00028$)	0.353
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.0006$)	9.03
	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00065$)	2.01
	细砂, 冰川湖积 ($f_{oc}=0.00102$)	21.8
	粉砂, 湖积 ($f_{oc}=0.00108$)	1.57
四氯乙烯	中细砂, 冰川冲积	2.7 ~ 5.9
甲苯	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00017$)	0.057
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00023$)	0.157
	细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00026$)	0.072
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00026$)	0.072
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.0006$)	4.152
	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00065$)	0.289
	细砂, 冰川湖积 ($f_{oc}=0.00102$)	8.296
	粉砂, 湖积 ($f_{oc}=0.00108$)	0.199
三氯乙烷	粘土	0.01 ~ 0.18
	粉砂	0.03
	粘砂	0.01 ~ 3.2
	细砂	0.07 ~ 0.7
	砂砾石	0.15 ~ 0.57
1,1,1-三氯乙烷	砂, 砾石, 粉砂	12
	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00017$)	0.119
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00023$)	0.383
	细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00026$)	0.19
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00028$)	0.261
	中细砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.0006$)	7.536
	中砂, 冰川冲积 ($f_{oc}=0.00065$)	0.805
	细砂, 冰川湖积 ($f_{oc}=0.00102$)	11.976
	粉砂, 湖积 ($f_{oc}=0.00108$)	0.569

注: 资料源自 Spitz 和 Moreno(1996)

表 C.10 常见无机物半衰期区间

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 Spitz 和 Moreno(1996)

图 C.1 纵向弥散度与观测尺度之间的关系

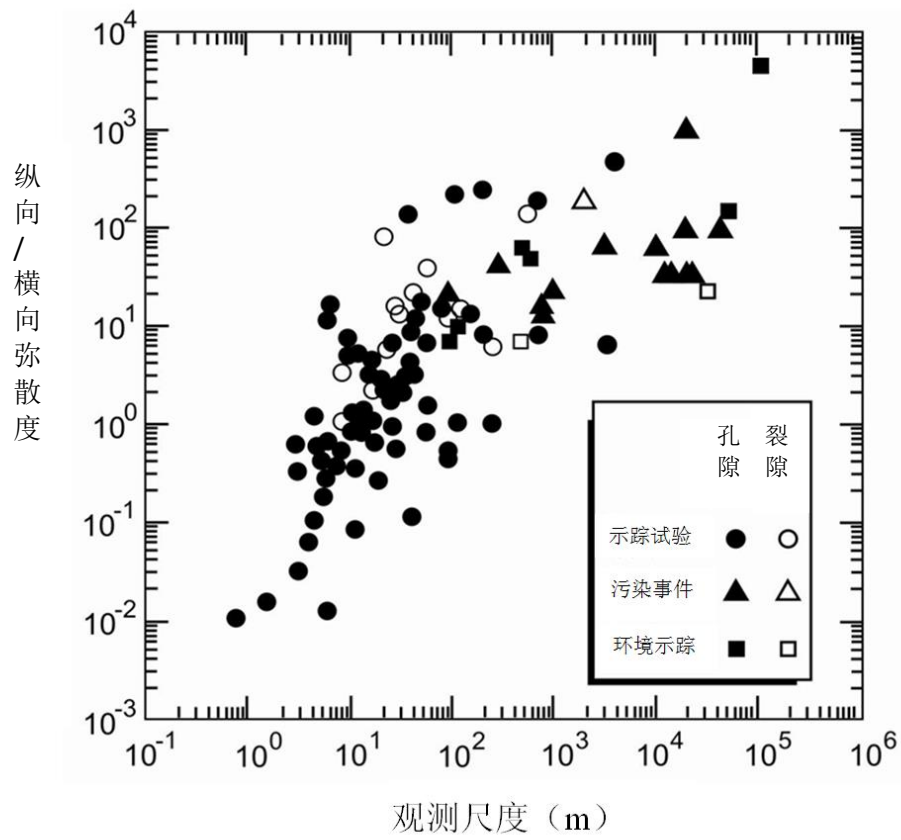
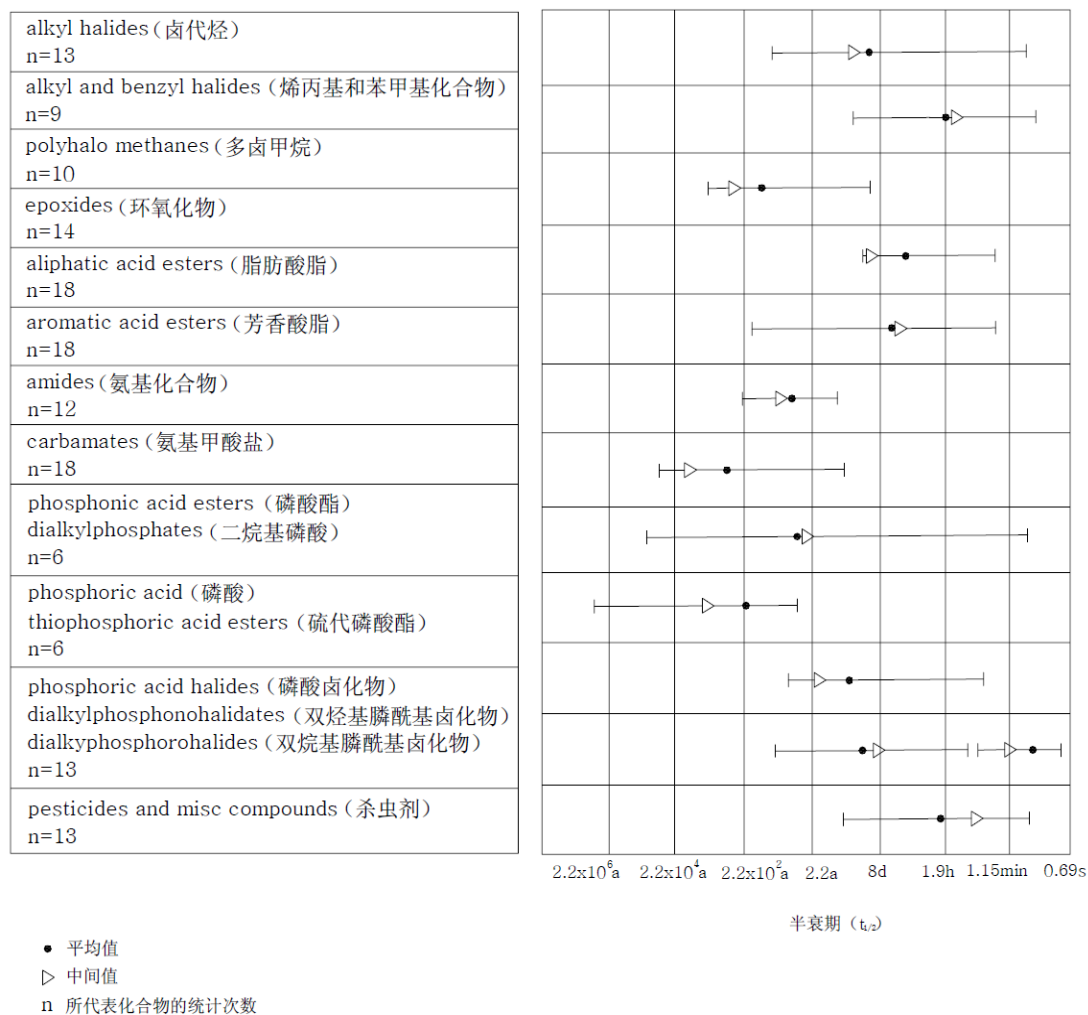
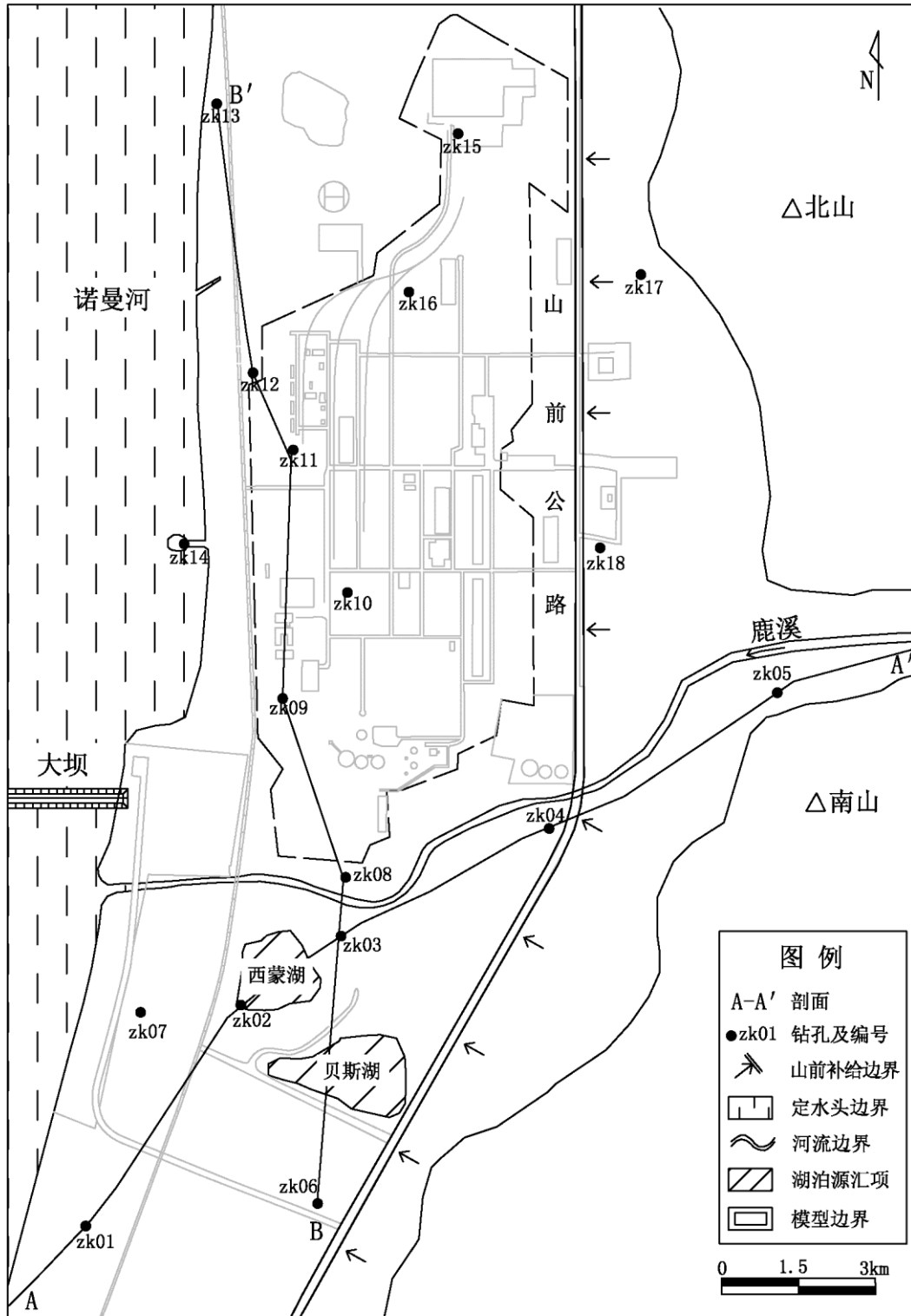


图 C.2 常见有机物半衰期区

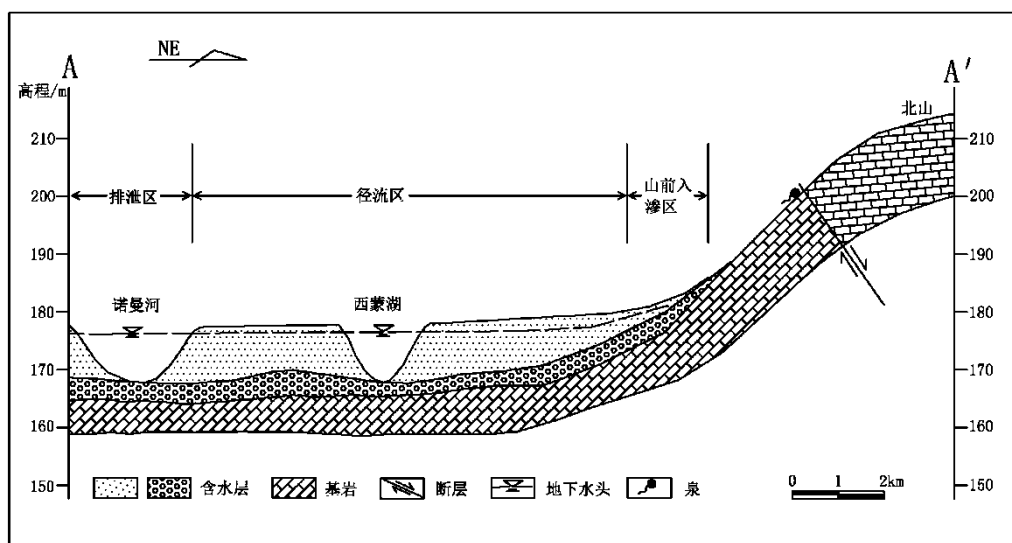


附录 D
(规范性附录)
评估成果表达示例

图 D.1 地下水水文地质条件概化图



(a) 平面图



(b) 剖面图

图 D.2 地下水污染概念模型示例

数据源（示例） 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。	剖面图 平面图	
不确定性分析 1. 漏油时间与漏油量； 2. 轻质油与溶解性油污染羽范围； 3. 轻质油污染羽是否迁移； 3. 挥发与降解量。	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、地下水中含溶解性污染物。 概念模型 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。	概念模型转换为数学模型 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主要合理性。

(a) 污染概念模型——源项

数据源（示例） 附近场址地质调查结果 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。	剖面图 嵌入式压力钻孔 河道 轻质油 假定污染羽 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 平面图 抽水钻孔 地下水等水位线 储油罐 假定污染羽	
不确定性分析 1.砾石透镜体侧向连续性； 2.含水介质各向异性范围； 3.污染羽几何尺寸。	概念模型描述 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的可渗透途径； 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。	概念模型转换为数学模型 使用砾石透镜体的导水系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。

(b) 污染概念模型——污染途径与污染受体

数据源（示例） 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，Fe，碱度，氯化物等； 2.实验室分析 f_{oc}； 3.土壤气体监测； 4.野外监测： pH, Eh, 溶解氧，温度等。	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。 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	
不确定性分析 1.污染羽的计算范围与观测范围是否存在显著差异； 2.计算中使用的衰减方程或导水系数值。	概念模型描述 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； 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。	概念模型转化为数学模型 有机物吸附通过线性等温线表征，其阻滞因子计算如下： $R = 1 + \frac{f_{oc} \cdot K_{oc} \cdot \rho}{n}$ 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）来自参考文献值，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。 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。

(c) 污染概念模型——污染过程

表 D.1 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	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。	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	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等； 3.地下水含水层控制点：主要包括控制含水层的各类钻孔。	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：研究区初始地下水位，用虚线描绘； 4.各类源汇项及其性质。

表 D.2 地下水污染状况概化成果要求

污染源解析	污染物迁移转化机制分析	污染受体分析
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。	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。	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。

表 D.3 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	包括评估区范围、主要居民点及标志性的地形、地貌等
评估区水文地质图	包括地表主要地理地貌，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