

序

此手册介绍了下一代 **MT3D**，其功能被显著扩展，并补充了以下内容：(1) 一个用于解决对流项的三阶总变差减小(TVD)方法，它保证了质量守恒但不会产生过多的数值弥散和人工波动；(2) 一个基于广义共轭梯度的有效迭代解法和 **Lanczos/ORTHOMIN** 加速方法用以去除对运移时间步长大小的稳定性限制；(3) 适应性非均衡吸附和双区对流-扩散质量运移选项；(4) 能接纳为模拟一般生物和化学反应而附加的反应包的多模块程序结构。

此手册中说明的这个新的质量运移模型被称为 **MT3DMS**，它的独特之处在于它将三种主要的运移解决技术包含在一套代码中，即标准有限差分法，基于粒子追踪的欧拉-拉格朗日法，高阶的有限单元 TVD 方法。既然没有一种单独的技术对所有的运移条件都有效，人们相信将各种有着优点和限制的解决方法综合起来，能为解决最广泛的运移问题提供最好的有效并准确的方法。

MT3DMS 可在具有多种类型的边界条件和外部源汇并考虑对流、弥散和一些基本化学反应的情况下，模拟地下水易混合污染物的浓度变化。模型中的化学反应为均衡控制或速率受限的线性或非线形吸附以及一级不可逆或可逆的动态反应。更多复杂的多组分化学反应可用附加的反应包模拟。**MT3DMS** 可采用通常的空间离散方法和运移边界条件，包括：(1) 承压、非承压或承压/非承压相转化的含水层；(2) 倾斜的模型层和同一层内单元厚度变化的模型层；(3) 定浓度或质量通量边界；(4) 外部水力源或汇，如井、渠、河、面状补给和蒸腾对溶质运移的作用。**MT3DMS** 可采用任何一个块体中心的有限差分水流模型，例如美国地质调查局的模块化有限差分地下水流模型，**MODFLOW**，并假设流体密度恒定且完全饱和。然而，**MT3DMS** 在这些条件下也可联合一个饱和度或密度变化的水流模型来模拟运移。

第 1 章 前言

1.1 目的及内容

被称为 MT3D 的模块化三维运移模型最初由 Zheng(1990)在 S. S. Papadopoulos & Associates, Inc.提出,后为美国环保署的 Robert S.Kerr 环境研究实验室提供了文件说明。在过去的几年中,多种版本的 MT3D 软件已被广泛用于污染物运移模拟和恢复评估研究。此手册介绍了下一代 MT3D,其功能被显著扩展,并补充了以下内容:(a)一个用于解决对流项的三阶总变差减小(TVD)方法,它保证了质量守恒但不会产生过多的数值弥散和人工波动;(b)一个基于广义共轭梯度的有效迭代解法用以去除对运移时间步长大小的稳定性限制;(c)适应性非均衡吸附和双区对流-扩散质量运移选项;(d)能接纳为模拟一般生物和化学反应而附加的反应包的多模块程序结构。

1.2 主要特点

此手册中说明的这个新的质量运移模型被称为 MT3DMS,其中,MT3D 代表 Modular 3-Dimensional Transport, MS 代表 Multi-Species,这种多模块结构简化了另外附加反应包的过程。

MT3DMS 拥有一系列选项可模拟一般水文条件下地下水流系统中污染物的对流、弥散/扩散和化学反应。这一节概括介绍 MT3DMS 的主要特点。

MT3DMS 的独特之处在于它将三种主要的运移解决技术(标准有限差分法,基于粒子追踪的欧拉-拉格朗日法,高阶的有限单元 TVD 方法)包含在一套代码中。既然没有一种单独的技术对所有的运移条件都有效,人们相信将各种有着优点和限制的解决方法综合起来,能为解决最广泛的运移问题提供最好的有效并准确的方法。

作为最初 MT3D 软件中显式公式的补充,MT3DMS 包括一个隐式公式,用一个通用有效解法解决。这种迭代法基于广义共轭梯度(GCG)法,并有三种预处理选择及对非对称矩阵的 Lanczos/ORTHOMZN 加速方案。如果选择了 GCG 解法,弥散、汇/源和反应项会被隐式求解,没有任何稳定性约束。对于对流项,用户可选择任何可用的解决方法,包括标准有限差分法,基于粒子追踪的欧拉-拉格朗日法和三阶 TVD 方法。有限差分法可以是完全显式的而没有任何稳定性约束限制运移步长,但基于粒子追踪的欧拉-拉格朗日法和三阶 TVD 方法仍有与粒子追踪法和 TVD 方法有关的对时间步长的约束。如果没有选择 GCG 方法,MT3DMS 自动选择具有一般稳定性约束的显式方法,这种显式公式对解决对流占优的问题是有效的,在这些问题中运移步长大小受精确限制。当隐式解法需要大量的迭代次数来收敛或当计算机系统没有足够的内存来应用隐式解法时,显式公式同样有用。

MT3DMS 利用一个可选的双区方程来模拟质量运移。利用这个方程,多孔介质被看作由两种不同的区域构成:流动的区域,在这个区域里对流在运移中占

主导；不流动的区域，在这个区域里，分子扩散在运移中占主导。对每个模型单元，不再是一种单独的有效孔隙，而是两种孔隙，一种对应流动区域，一种对应不流动区域被用来表示多孔介质的特性。流动和不流动区域之间的交换由一个质量转移系数表示。当模拟裂隙介质或极不均质多孔介质中的运移时，如果孔隙度和质量转移系数被合适表示，双区对流—扩散模型比单孔隙度的对流—扩散模型更合适。

MT3DMS 保留了和最初 MT3D 软件相同的模块化结构，它和美国地质调查局模块化三维有限差分地下水流模型(MODELFLOW, McDonald 和 Harbaugh 1988; Harbaugh 和 MacDonald 1996)是类似的。这种运移模型的模块化结构使在不需为没有用到的选项保留计算机内存空间的情况下单独模拟对流、弥散/扩散、源/汇混合和化学反应成为可能。另外，包括其他运移过程和反应的模块可即时补充到模型中，而无需改变原有代码。

正如最初的 MT3D 软件，MT3DMS 的提出是要利用任何象 MODELFLOW 的块体中心的有限差分流动模型，并且它基于浓度场的变化不会显著影响流场的假设。一个水流模型建立和校准后，运移模型需要的信息可以保存成硬盘文件并被运移模型利用。既然运移模型的大多数潜在用户很可能已熟悉了一个或多种水流模型，MT3DMS 提供了这样一个机会，用户不需要再学习一个新的水流模型或更改现有的水流模型以适应运移模型就能模拟污染物的运移。另外，运移模型之外进行单独水流模拟会大量节省计算机内存。当多个运移模型要求运行而水流模型保持不变时，这种模型结构可节省运行时间。虽然该报告只介绍了 MT3DMS 与 MODFLOW 的联合使用，但 MT3DMS 可以与其它块体中心的有限差分水流模型以一种简单直接的方式相结合。

MT3DMS 可在具有多种类型的边界条件和外部源汇并考虑对流、弥散和一些基本化学反应的情况下，模拟地下水易混合污染物的浓度变化。模型中的化学反应为均衡控制或速率受限的线性或非线形吸附以及一级不可逆或可逆的动态反应。应该注意的是，包含在 MT3DMS 中的基本化学反应程序包适用于单组分系统。附加的反应程序包，如 RT3D(Clement,1997)或 SEAM3D(Widdowson 和 Waddill,1997)被用于模拟更复杂的多组分反应。MT3DMS 能接纳非常普遍的空间剖分和运移边界条件，包括：(a)承压的、非承压的或者承压/非承压相互转化的含水层模型层；(b)倾斜且同一层内单元厚度不同的模型层；(c)指定浓度或质量通量边界；(d)外部的源或汇，如井、渠、河、面状补给和蒸腾对溶质运移产生的影响。

1.3 报告组织结构

该报告涵盖了 MT3DMS 运移模型的理论、数值解和应用。第 2 章简要论述了模型的物理—数学基础以及各种函数关系。第 3 章论述了 MT3DMS 采用的各种解法的基本理论。第 4 章论述了数值解的计算机实现。第 5 章介绍了程序结构和 MT3DMS 软件设计，它被分为一个主程序和许多程序包，每个程序包处理运移模拟的某个方面。第 6 章提供了模型输入的详细说明并讨论如何建立一个模拟。第 7 章介绍了用以测试 MT3DMS 软件的基准问题并举例说明了它的应用。附录包括迭代解法信息(附录 A)，MT3DMS 模型对计算机内存的要求(附录 B)，MT3DMS 和水流模型之间的相互联系(附录 C)，几个后期处理程序(附录 D)，输入说明表格(附录 E)。

第 2 章 污染物运移模型基本原理

2.1 基本方程

描述三维非稳定地下水流系统中 k 组分污染物的存在时间和运移的偏微分方程可写成

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n \quad (2.1)$$

式中：

C^k ： k 组分的溶解浓度， ML^{-3} ；

θ ： 介质孔隙度， 无量纲；

t ： 时间， T ；

x_i ： 沿直角坐标系轴向的距离， L ；

D_{ij} ： 水动力弥散系数张量， L^2T^{-1} ；

v_i ： 渗流或线性孔隙水流速， LT^{-1} ； 它与单宽流量存在如下关系： $v_i = q_i/\theta$ ；

q_s ： 单位体积含水层流量， 它代表源（正值）和汇（负值）， T^{-1} ；

C_s^k ： 源或汇水流中 k 组分的浓度， ML^{-3} ；

$\sum R_n$ ： 化学反应项， $\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$ 。

方程(2.1)的左侧可展开成两项

$$\frac{\partial(\theta C^k)}{\partial t} = \theta \frac{\partial C^k}{\partial t} + C^k \frac{\partial \theta}{\partial t} = \theta \frac{\partial C^k}{\partial t} + q'_s C^k \quad (2.2)$$

式中 $q'_s = \partial \theta / \partial t$ 为地下水储存量的变化率（单位： T^{-1} ）。

方程(2.1)中的化学反应项表示污染物存在和运移过程中一般的生物化学和地球化学反应。仅考虑化学反应的两种基本类型：水相—固相表面反应（吸附作用）和一阶速率反应，化学反应项可表示成

$$\sum R_n = -\rho_b \frac{\partial \bar{C}^k}{\partial t} - \lambda_1 \theta C^k - \lambda_2 \rho_b \bar{C}^k \quad (2.3)$$

式中：

ρ_b ： 介质容重， ML^{-1} ；

$\bar{C}^k$: 固体吸附 k 组分浓度, MM^{-1} ;

λ_1 : 溶解相的一阶反应速率, T^{-1} ;

λ_2 : 吸附相的一阶反应速率, T^{-1} 。

将方程(2.2)和(2.3)代入方程(2.1)并去掉组分号 k 以简化表示, 整理得

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s - q'_s C - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (2.4)$$

方程(2.4)本质上为质量平衡状态, 在特定时间内质量储存量(包括溶解和吸附相)的变化量与由弥散、对流、汇/源和化学反应引起的质量进出量的差值相等。

多种吸附过程(与运移时间尺度相比, 吸附是相当快的)经常被假设处于局部平衡状态。借助于局部平衡假设, 人们习惯于将方程(2.4)写成如下形式

$$R\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) + q_s C_s - q'_s C - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (2.5)$$

式中 R 代表阻滞因子, 它是一个无量纲因子, 被定义为

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \quad (2.6)$$

当局部平衡假设不合适时, 吸附过程通常用一阶动态质量转移方程表示, 它将在化学反应部分中被讨论。

注意到在上述基本运移方程中, 只采用了一种孔隙度。它经常被认为是有效孔隙度, 通常比多孔介质的总孔隙度要小。它反映出这样的事实: 一些孔隙中间可能含有渗流速率为零的不流动水体。然而, 正如 Zheng 和 Bennett 详细讨论的(1995, 第2章, 46-48页), 由于孔隙结构的复杂性, 所谓的有效孔隙度很难被实地测量。更确切地说, 有效孔隙度通常必须被理解为集中参数, 在模型校正过程中, 它给出了对污染羽运动和观察到的溶质累积效应的精确表示。在某些情况下, 例如裂隙介质或极不均质多孔介质中的运移, 采用多重孔隙度方法可能会更合适。在这种方法中, 为充满流动水的孔隙定义了一个主要孔隙度, 在这些孔隙中对流在运移中起主导作用; 并为充满不流动水的孔隙定义了一个次要孔隙度, 这些孔隙中的溶质运移主要为分子扩散。流动和不流动区域之间的溶质交换可用一个类似于用于描述非平衡吸附的动态质量转移方程定义。

运移方程通过达西定律与水流方程发生联系:

$$v_i = \frac{q_i}{\theta} = -\frac{K_i}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (2.7)$$

式中:

K_i : 渗透系数张量的主要分量, LT^{-1} ;

H : 水头, L

水头由三维地下水流动方程解得:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(K_i \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + q_s = S_s \frac{\partial h}{\partial t} \quad (2.8)$$

式中： S_s 为含水层的贮水系数 (L^{-1})， q_s 为方程(2.1)中定义的源汇项。

方程(2.7)和(2.8)中用到了这样的假设：渗透系数张量的主要分量 K_x , K_y , 和 K_z 与 x, y, z 坐标轴在同一方向上，因此所有次要组分（截项）变为零。该假设用于包括 MODFLOW (McDonald and Harbaugh, 1988; Harbaugh and McDonald, 1996) 在内的大多数常用有限差分地下水流动模型。

2.2 对流

运移方程中的对流项， $\partial(\theta v_i C)/\partial x_i$ ，描述了与地下水具同样速率的混溶污染物运移。对于许多实地污染物运移问题，对流项起主导作用。通常用一个无量纲的 Peclet 数量度对流的重要程度，被定义为

$$P_e = \frac{|v|L}{D} \quad (2.9)$$

式中： $|v|$ ：渗流速度矢量的大小， LT^{-1} ；

L ：特征长度，通常取单元格宽， L ；

D ：弥散系数， L^2T^{-1} 。

对于被称为陡锋问题的对流占优问题， Peclet 数为一个很大的值。对于纯对流问题， Peclet 数接近于无限大。

对于对流占优问题，运移方程的解经常受到如图 2.1 所示的两种数值问题的干扰。第一种是由截断误差引起的数值弥散，它与物理弥散有类似的效果。当物理弥散作用很小或可忽略时，数值弥散变得非常严重，将导致本应很陡的浓度锋发生拖尾（图 2.1a）。另一种数值问题是人工波动，如图 2.1b 所示，也被认为是过量和不足。

人工波动对于一些用来消除数值弥散的高阶方法非常典型，并且当浓度锋变陡时人工波动也更加严重。

为克服数值弥散和人工波动，MT3DMS 代码中有几种解法可供选择。特征值方法对于消除对流占优问题中的数值弥散非常有效。三阶 TVD 方法利用一个通用流量限制器减小了数值弥散和人工波动。当数值弥散不是很显著，如模型所用的网格很好或物理弥散很强时，可采用标准有限差分法提高计算效率。

2.3 弥散

2.3.1 弥散机理

多孔介质中的弥散指污染物的散播区域超出仅通过地下水平均速度而预期

的扩展范围 (Anderson, 1979 和 1984)。弥散由机械弥散和分子扩散引起。机械弥散是地下水实际流速在微观尺度上偏离平均速率的结果; 分子扩散由浓度梯度引起。与机械弥散的作用相比, 分子扩散通常是次要的且可被忽略, 而且只有当地下水流速很小时才显出其重要性。机械弥散和分子扩散合起来称作水动力弥散, 或简称弥散。

虽然人们已理解弥散机理, 运移模型中弥散现象的表示方法仍是一直被研究的对象。把机械弥散当作费克过程 (针对扩散有效), 人们提出了一种实用方法, 通过该方法不需要完整描述非均质流速场便可作出实际的运移计算, 这样做当然不能用于实际。虽然为表示弥散过程人们提出了许多不同的方法和理论, 方程(2.1) 仍是大多数实地模拟的基础 (Zheng 和 Bennett, 1995)。MT3DMS 中新提出的多

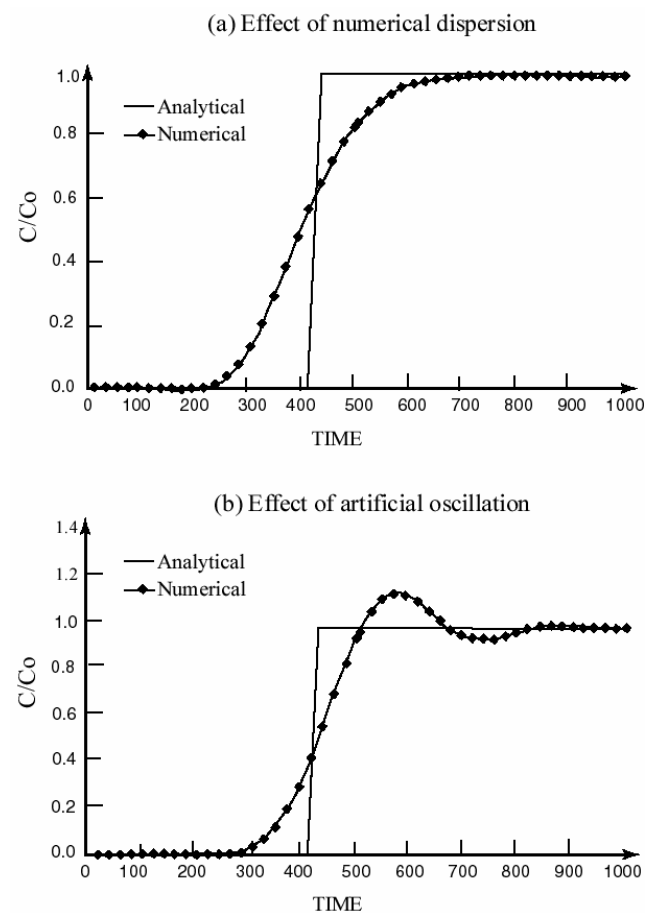


图 2.1 污染物运移模型中一般数值问题图示

区域对流—扩散方程或许可替代标准对流—扩散方程 (参见 2.6 节)。

2.3.2 弥散系数

按照 Bear (1972 和 1979), 各向同性多孔介质的水动力弥散张量 D_{ij} 被定义成如下分量形式:

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (2.10a)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (2.10b)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_T \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad (2.10c)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (2.10d)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad (2.10e)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad (2.10f)$$

式中：

D_{xx}, D_{yy}, D_{zz} ：弥散系数张量的主要分量， $L^2 T^{-1}$ ；

$D_{xy}, D_{xz}, D_{yx}, D_{yz}, D_{zx}, D_{zy}$ ：弥散系数张量的截项， $L^2 T^{-1}$ ；

α_L ：纵向弥散度， L ；

α_T ：横向弥散度， L ；

D^* ：有效分子扩散系数， $L^2 T^{-1}$ ；

v_x, v_y, v_z ：速度矢量沿 x, y, z 轴的分量， LT^{-1} ；

$|v| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}$ ：速度矢量的大小， LT^{-1} 。

当速度矢量与某一坐标轴同方向时，所有截项变为零。

严格来说，式(2.10a)到(2.10f)中针对各向同性介质由两个独立的弥散度定义的弥散系数张量，对各向异性多孔介质并不适用。这种情况下需要五个独立的弥散度 (Bear, 1979)。然而，野外获得所有五个弥散度一般来说是不可能的。作为一种可行的代替，运移模型中常假设各向同性弥散系数同样适用于各向异性多孔介质。

作为上述各向同性弥散的补充，MT3DMS 运移模型支持一种使用两个横向弥散度的形式，一个水平横向弥散度 α_{TH} ，一个垂向横向弥散度 α_{TV} 。下式由 Burnett 和 Frind 提出 (1987)：

$$D_{xx} = \alpha_L \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (2.11a)$$

$$D_{yy} = \alpha_L \frac{v_y^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_z^2}{|v|} + D^* \quad (2.11b)$$

$$D_{zz} = \alpha_L \frac{v_z^2}{|v|} + \alpha_{TV} \frac{v_x^2}{|v|} + \alpha_{TH} \frac{v_y^2}{|v|} + D^* \quad (2.11c)$$

$$D_{xy} = D_{yx} = (\alpha_L - \alpha_{TH}) \frac{v_x v_y}{|v|} \quad (2.11d)$$

$$D_{xz} = D_{zx} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_x v_z}{|v|} \quad (2.11e)$$

$$D_{yz} = D_{zy} = (\alpha_L - \alpha_{TV}) \frac{v_y v_z}{|v|} \quad (2.11f)$$

当两个横向弥散度相等时，公式(2.11a)到(2.11f)与公式(2.10a)到(2.10f)相同。在公式(2.10)到(2.11)中，弥散系数张量的分量根据地下水渗流速率 v 来定义。当孔隙度在空间上变化时，定义一个表观弥散系数张量更加方便：

$$\hat{D}_{ij} = \theta D_{ij} \quad (2.12)$$

式中，表观弥散系数 $\hat{D}$ 可利用单宽流量 q 的分量获得，而不是线形速率 v ，并且在式(2.10)和(2.11)中用 θD^* 代替 D^* 。

2.4 源汇项

基本方程的源汇项， $q_s C_s$ ，表示溶质通过源进入模型区域或通过汇离开模型区域的质量。 $q'_s C$ 可看作是“内部”源汇项，它表示由非稳定地下水储存量的变化引起的溶质质量储存量的变化，并不引起模型区域质量的进出。

源和汇，可分为面状和点状。面状分布的源和汇包括补给和蒸腾。点状源和汇包括井、渠及河流。在水流模型中定水头和一般水头边界也作为点状源或汇对待，因为在运移模型中它们与井、渠及河流的作用方式一样。

对于源，必须给定溶解物质的浓度。对于汇，溶解物质浓度通常与汇所在含水层中地下水的浓度相等，可不指定。但是，蒸腾是个例外，此时汇处溶解物质浓度会与地下水不同。可以假设蒸腾只从含水层中带走纯水，因此蒸腾通量中的浓度为零。

2.5 化学反应

MT3DMS 能处理平衡线性和非线性吸附，非平衡（速率受限）吸附，以及能表示放射性衰变和近似表示生物降解的一阶反应。设计用来模拟速率受限吸附

的通用公式也可用来模拟多区域对流—扩散模型中流动和不流动区域之间的动态质量转移。更复杂的化学反应可通过附加的反应包模拟。

2.5.1 平衡线性和非线性吸附

吸附作用表示溶于地下水（液相）和吸附于多孔介质（固相）的污染物之间的质量转移过程。通常假设液相和固相浓度之间存在平衡条件，并假设吸附作用与地下水速率相比非常快，可被看作是瞬时发生的。某恒定温度下溶解和吸附浓度之间的函数关系可表示成等温吸附线。利用式(2.6)中定义的阻滞因子，运移模型通常包括了平衡等温吸附线。MT3DMS 运移模型中考虑了三种类型的平衡等温吸附线（线性、Freundlich 和 Langmuir）。

a. 线性等温吸附线假设吸附浓度($\bar{C}$)与溶解浓度(C)成正比：

$$\bar{C} = K_d C \quad (2.13)$$

式中： K_d 为分配系数， L^3M^{-1} 。阻滞因子由下式给出：

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} K_d \quad (2.14)$$

b. Freundlich 等温吸附线为非线性等温吸附线，可表示为：

$$\bar{C} = K_f C^a \quad (2.15)$$

式中： K_f 为 Freundlich 常量， $(L^3M^{-1})^a$ ；

a 为 Freundlich 指数，无量纲。

K_f 和 a 都是经验系数。当指数 a 等 1 时，Freundlich 等温吸附线与线性等温吸附线相同。Freundlich 等温吸附线的阻滞因子按下式定义：

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} a K_f C^{a-1} \quad (2.16)$$

c. Langmuir 等温吸附线，由如下方程描述：

$$\bar{C} = \frac{K_l \bar{S} C}{1 + K_l C} \quad (2.17)$$

式中： K_l 为 Langmuir 常量， L^3M^{-1} ；

$\bar{S}$ 为介质对溶质的最大吸附量， MM^{-1} 。

Langmuir 等温吸附线的阻滞因子定义为：

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\theta} \left[\frac{K_l \bar{S}}{(1 + K_l C)^2} \right] \quad (2.18)$$

2.5.2 非平衡吸附

当局部平衡假设不适用时，吸附过程可用一个一阶可逆动态反应表示：

$$\rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \beta \left(C - \frac{\bar{C}}{K_d} \right) \quad (2.19)$$

式中： β ：溶解和吸附相之间的一阶质量转移率， T^{-1} ；

K_d ：线性吸附中吸附相的分配系数。

要解方程(2.19)需要同时解基本运移方程来获得受非平衡吸附影响的溶质运移的解。当质量转移率 β 增大（吸附过程加快）时，非线性吸附接近于方程(2.13)定义的平衡线性吸附。对于很小的 β 值，液相和固相之间的交换很慢，吸附可被忽略。

2.5.3 放射性衰减和生物降解

基本方程中的一阶不可逆反应项， $-(\lambda_1 \theta C + \lambda_2 \rho_b \bar{C})$ ，表示溶解相(C)和吸附相($\bar{C}$)的质量损失。反应速率常数通常按照半衰期给出：

$$\lambda = (\ln 2) / t_{1/2} \quad (2.20)$$

式中： $t_{1/2}$ 为放射性或可生物降解物质的半衰期，即：浓度降到原来一半所需的时间。

对于放射性衰减，两相的反应速率相同。但是，对于生物降解，人们发现某些反应仅发生于溶解相，这正是需要两个不同的速率常数的原因。应该注意的是，许多地下生物降解过程比一阶不可逆反应描述的要复杂的多。其他一些模拟更复杂的生物化学和地球化学反应的 MT3DMS 反应包目前已可利用或在发展中。

2.6 多区域质量转移

如前所述，裂隙介质或各向异性多孔介质中的溶质运移可被概化为一个多区域系统。充满可流动水的裂隙或大渗透系数区域（可流动区域）的运移主要为对流；充满不流动或相对停滞水的无裂隙区或小渗透系数区域（不流动区域）的运移主要为扩散。不考虑吸附情况下，多区域系统的基本方程可表示为：

$$\begin{aligned} \theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta_m D_{ij} \frac{\partial C_m}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m v_i C_m) \\ + q_s C_s - q'_s C_m - \lambda_{1,m} \theta_m C_m - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} \end{aligned} \quad (2.21a)$$

$$\theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \zeta (C_m - C_{im}) - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} \quad (2.21b)$$

式中：

C_m : 可流动区域的溶解浓度 (被看作是可流动的液体相), ML^{-3} ;

C_{im} : 不流动区域的溶解浓度 (被看作是不流动的液体相), ML^{-3} ;

θ_m : 可流动区域的孔隙度, 无量纲;

θ_{im} : 不流动区域的孔隙度, 即总孔隙度与可流动区域孔隙度之差,

$$\theta_{im} = \theta - \theta_m, \text{ 无量纲};$$

$\lambda_{1,m}$: 可流动液相的一阶反应速率, T^{-1} ;

$\lambda_{1,im}$: 不流动液相的一阶反应速率, T^{-1} ;

ζ : 可流动区域和不流动区域之间的一阶质量转移率, T^{-1} 。

方程(2.21a)表示的是总质量的质量守恒, 而方程(2.21b)为不流动区域的质量守恒。如果对于多区域系统中的溶质运移必须考虑吸附, 方程(2.21a)和(2.21b)可被重新写为:

$$\begin{aligned} \theta_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + f \rho_b \frac{\partial \bar{C}_m}{\partial t} + \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + (1-f) \rho_b \frac{\partial \bar{C}_{im}}{\partial t} \\ = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta_m D_{ij} \frac{\partial C_m}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m v_i C_m) + q_s C_s - q'_s C_m \\ - \lambda_{1,m} \theta_m C_m - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} - \lambda_{2,m} f \rho_b \bar{C}_m - \lambda_{2,im} (1-f) \rho_b \bar{C}_{im} \end{aligned} \quad (2.21c)$$

$$\begin{aligned} \theta_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} + (1-f) \rho_b \frac{\partial \bar{C}_{im}}{\partial t} \\ = \zeta (C_m - C_{im}) - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} - \lambda_{2,im} (1-f) \rho_b \bar{C}_{im} \end{aligned} \quad (2.21d)$$

式中:

$\bar{C}_m$: 可流动区域的吸附浓度 (被看作是可流动吸附相), MM^{-1} ;

$\bar{C}_{im}$: 不流动区域的吸附浓度 (被看作是不流动吸附相), MM^{-1} ;

f : 与流动液相联系的吸附区域 (f 可近似等于 θ_m/θ);

$\lambda_{2,m}$: 可流动吸附相的一阶反应速率, T^{-1} ;

$\lambda_{2,im}$: 不流动吸附相的一阶反应速率, T^{-1} 。

如果假设平衡等温吸附线为线性, 且可流动区域和不流动区域的吸附系数相同, 方程(2.21c)和(2.21d)可简化为:

$$\theta_m R_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \theta_{im} R_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta_m D_{ij} \frac{\partial C_m}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m v_i C_m) + q_s C_s \quad (2.21e)$$

$$- q'_s C_m - \lambda_{1,m} \theta_m C_m - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} - \lambda_{2,m} f \rho_b K_d C_m - \lambda_{2,im} (1-f) \rho_b K_d C_{im} \quad (2.21f)$$

$$\theta_{im} R_{im} \frac{\partial C_{im}}{\partial t} = \zeta (C_m - C_{im}) - \lambda_{1,im} \theta_{im} C_{im} - \lambda_{2,im} (1-f) \rho_b K_d C_{im}$$

式中：

$R_m = 1 + f \rho_b K_d / \theta_m$ ：可流动区域的阻滞因子，无量纲；

$R_{im} = 1 + (1-f) \rho_b K_d / \theta_{im}$ ：不流动区域的阻滞因子，无量纲。

对于多区域概念模型，方程(2.21a)，(2.21c)和(2.21e)中的弥散系数 D_{ij} 可等于或接近分子扩散系数，因为通过可流动和不流动区域之间的质量转移引入了机械弥散。当质量转移率 ζ 增加，即可流动与不流动域之间的质量交换加快时，多区域模型越来越像孔隙度接近多孔介质总孔隙度的单区域模型。相反，质量转移率 ζ 接近于零时，多区域模型也等同于一个单区域模型，但这个单区域模型的孔隙度接近于可流动区域的孔隙度。

2.7 初始条件

运移模型的基本方程描述的是地下水中溶质浓度的瞬时变化。因此，为获得方程的解，初始条件是必需的。

一般形式的初始条件写为：

$$C(x, y, z, t) = c_o(x, y, z) \quad \text{on } \Omega; \quad t = 0 \quad (2.22)$$

式中， $c_o(x, y, z)$ 为已知的浓度分布， Ω 代表整个模型区域。如果模拟非平衡吸附或多区域质量转移，还需要定义吸附相或不流动相的初始浓度。

2.8 边界条件

解基本方程还需要给定边界条件。MT3DMS 运移模型考虑了三类边界条件：(a) 已知浓度边界（Dirichlet 条件）；(b) 已知浓度梯度边界（Neuman 条件）；(c) (a) 和 (b) 的混合边界（Cauchy 条件）。

a. 对于 Dirichlet 边界条件，在整个模拟期间沿边界给定浓度：

$$C(x, y, z, t) = c(x, y, z, t) \quad \text{on } \Gamma_1, \quad t \geq 0 \quad (2.23)$$

式中： Γ_1 表示定浓度边界， $c(x, y, z, t)$ 为沿 Γ_1 所给的浓度。所给浓度可随时间变化。

在水流模型中，Dirichlet 边界为定水头边界，它作为地下水进出模型区域的源或汇。与之类似，运移模型中的定浓度边界作为源，提供进入模型区域的溶质；或作为汇，将溶质移出模型区域。水流模型中的定水头边界在运移模型中可能是定浓度边界，也可能不是。

b. 对于 Neuman 边界条件，垂直于边界方向的浓度梯度已知：

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = f_i(x, y, z, t) \quad \text{on } \Gamma_2, \quad t \geq 0 \quad (2.24)$$

式中： $f_i(x, y, z, t)$ 为已知函数，表示 Γ_2 边界法线方向上的弥散通量。一个特例是

无弥散质量通量边界， 其中 $f_i(x, y, z, t) = 0$ 。

c. 对于 Cauchy 边界条件，浓度和浓度梯度都给定：

$$\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C = g_i(x, y, z, t) \quad \text{on } \Gamma_3, \quad t \geq 0 \quad (2.25)$$

式中： $g_i(x, y, z, t)$ 为已知函数，表示 Γ_3 边界法线方向上的总通量（弥散和对流）。

对于物理无渗透边界，弥散和对流通量都等于零，因此 $g_i(x, y, z, t) = 0$ 。人们习惯于假设对流通量强于弥散通量，因此上述方程可简化为：

$$-q_i C = g_i(x, y, z, t) \quad (2.26)$$

方程(2.26)类似于源汇项，在运移模型中容易处理。

第3章 解法概述

3.1 引言

第2章中描述的对流—弥散方程的数值解被认为是个“令人为难”的难题 (Mitchell, 1984; Leonard, 1988)。其根本难点就在于, 空间一阶导数项 (对流) 和空间二阶导数项 (机械弥散和分子扩散) 同时存在于运移基本方程。虽然过去三十年中, 在地下水模拟及以外的领域已经发展了许多方法来解决该问题, 但始终没有一个方法能够在一般水文地质条件下给出完全令人满意的解。Zheng 和 Bennett (1995) 介绍了一些常用的运移方程的解法, 并讨论了其优缺点。

对流—弥散—反应方程的数值解法可以分为欧拉法, 拉格朗日法, 和混合欧拉—拉格朗日法 (Neuman, 1984)。同标准有限差分法或有限单元法一样, 欧拉法用固定网格法来解运移方程。欧拉法能保持质量守恒, 利用固定网格的优点及其方便性可有效处理弥散/反应占主导的问题。可是, 对于许多实际的对流占优问题, 欧拉法却太容易受数值弥散和人工波动影响。要克服这些问题, 需要小的网格尺寸和时间步长。

在拉格朗日法中, 运移方程 (包括对流和弥散项) 通过粒子追踪用变形网格或固定网格中的变形坐标来求解, 如随机步行法。拉格朗日法求解对流占优问题十分有效, 消除了数值弥散。但是, 没有固定网格或坐标系统, 拉格朗日法就会导致数值上的不稳定。并且, 对于有多个源或汇和复杂边界条件的非均质介质问题 (Yeh, 1990), 存在计算困难。粒子追踪所需的速度插值又会导致局部质量失衡和解的异常 (LaBolle, Fogg, and Tompson 1996)。另外, 这样获得的浓度解通常很粗糙, 需要加以平滑和说明。

混合欧拉—拉格朗日法试图综合这两种方法的优点, 即用拉格朗日法 (粒子追踪) 解对流项而用欧拉法 (有限差分或有限元) 解决弥散和反应项。但是, 一些常用的欧拉—拉格朗日法, 比如特征值法不能保持质量守恒。因为需要用到粒子追踪, 所以混合欧拉—拉格朗日法也面临一些困扰拉格朗日法的数值问题。另外, 在计算上它也不如纯粹的欧拉法或拉格朗日法有效。

近年来, 主要在流体动力学计算 (CFD) 领域提出了一些运移方程的求解方法, 有时统称为总变差减小 (TVD) 法 (Harten 1983, 1984)。TVD 就表示这些方法的共同特征: 相邻节点间的浓度差异总和在连续运移步长上逐渐减小。这是运移解不产生假波动的必要条件。TVD 法本质上是高阶有限差分 (或有限元) 法, 因此它属于欧拉法的一种, 本身能保持质量守恒。由于高阶方法将数值弥散最小化时产生了假波动, TVD 方法专门采用一些计算程序 (称为通量限制器) 来抑制或消除假波动而保留陡的浓度锋面。与上游或中心加权标准有限差分法相比, TVD 在解决对流占优问题上要更加精确, 虽然计算量大大增加。与拉格朗日法或者混合欧拉—拉格朗日法, 如特征值法相比, TVD 虽保留了陡浓度锋, 在消除数值弥散方面却不如它们有效。但是它的质量守恒特性、更小的内存需求, 以及其他优点使它成为标准有限差分法和基于拉格朗日或混合欧拉—拉格朗日法的粒子追踪法之间的最佳折中方案。

MT3DMS 包含了标准有限差分法, 几种混合欧拉—拉格朗日混合法, 以及

采用一个通用通量限制器的三阶TVD法。这些解法对弥散项，源汇项和反应项采用的都是显式或隐式有限差分法，但它们对对流项的处理是不同的。因此本章余下部分将重点讨论对流项的不同解法。和水流方程类似的弥散、源汇、反应项的有限差分法解法，将在下一章详细讨论。

3.2 标准有限差分法

第2章中描述的基本运移方程可以写成如下形式：

$$R\theta \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(\theta v_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(\theta v_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(\theta v_z C) + L(C) \quad (3.1)$$

式中 $L(C)$ 表示对包括弥散/扩散，源/汇，及化学反应在内的各种非对流项的算子。应用有限差分法，表示任何一个有限差分单元 (i, j, k) （见图3.1）中的对流项的三个分量的一阶偏导数可通过单元断面上的浓度值近似表示如下：

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\theta v_x C) + \frac{\partial}{\partial y}(\theta v_y C) + \frac{\partial}{\partial z}(\theta v_z C) = & \frac{q_{x(i,j+1/2,k)} C_{i,j+1/2,k} - q_{x(i,j-1/2,k)} C_{i,j-1/2,k}}{\Delta x_j} \\ & + \frac{q_{y(i+1/2,j,k)} C_{i+1/2,j,k} - q_{y(i-1/2,j,k)} C_{i-1/2,j,k}}{\Delta y_i} + \frac{q_{z(i,j,k+1/2)} C_{i,j,k+1/2} - q_{z(i,j,k-1/2)} C_{i,j,k-1/2}}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (3.2)$$

式中， Δx_j ， Δy_i ， Δz_k 表示 (i, j, k) 单元 x ， y ， z 三个方向上的宽度。 $j+1/2$ ， $i+1/2$ ， $k+1/2$ 表示垂直于 x ， y ， z 方向的单元断面。

各种解法的不同在于如何确定断面处的浓度。在标准有限差分法中，断面浓度是用上游或中心加权法估计的。在上游加权法中，某方向（比如 x 方向）上相邻两个节点之间的断面浓度与同方向上上游节点处的浓度相等，即：

$$C_{i,j-1/2,k} = \begin{cases} C_{i,j-1,k}, & \text{if } q_{x(i,j-1/2,k)} > 0 \\ C_{i,j,k}, & \text{if } q_{x(i,j-1/2,k)} < 0 \end{cases} \quad (3.3)$$

上游加权法可得到无波动干扰的解。但是对流项的解只在一阶的情况下是精确的，上游加权法用于对流占优问题时会导致显著的数值弥散，因为对流问题解的截断误差与之同阶，并且会淹没二阶导数的物理弥散项（Zheng 和Bennett 1995, 154-161）。

中心加权法中，断面上的浓度等于断面两侧浓度的加权平均值，即：

$$C_{i,j-1/2,k} = \alpha_x C_{i,j-1,k} + (1 - \alpha_x) C_{i,j,k} \quad (3.4)$$

式中， $\alpha_x = \Delta x_j / (\Delta x_{j-1} + \Delta x_j)$ 表示 x 方向的空间权重因子，该项与线性插值是相等的。当网格间距固定时， $\alpha_x = 0.5$ 。在这种方法中，对流项的解有二阶精度，它不会导致任何的数值弥散，因为弥散项的解也是二阶精度。但是，如果运移问题是对流占优的，这种方法会导致过多的人工波动，这是典型的高阶截断误差。

因为数值弥散和人工波动的双重问题，标准有限差分法仅适用于解决非对

流占优的运移方程，即当物理弥散显著或者网格间距合适时。许多资料显示，当

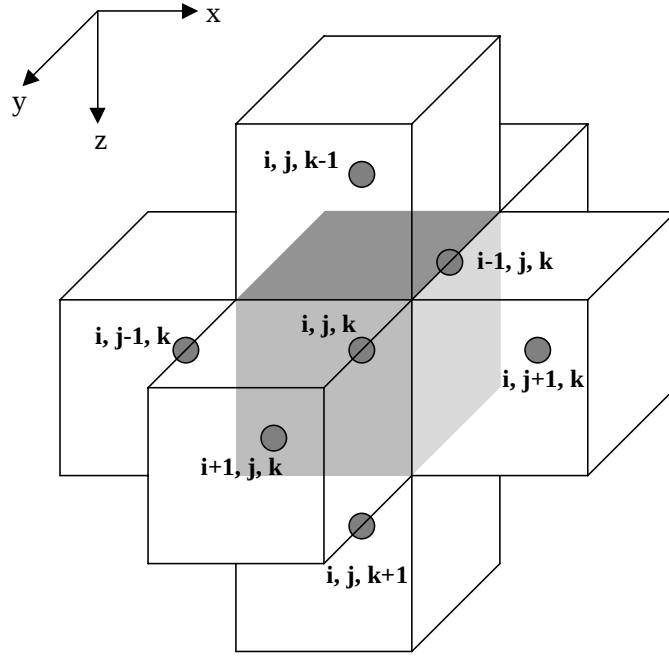


图3.1 有限差分（有限体积）网格剖分示意图

（节点*(i,j,k)*与相邻六个节点的断面用阴影表示）

Peclet 数小于4的时候（Zheng 和Bennett 1995），标准有限差分法，不论采用上游或中心加权都是比较精确的，可放心使用。另外，因为标准有限差分法在计算上效率更高，在模拟初期用它来获得初步的近似值是很有用的。

3.3 三阶 TVD 法

在许多文献上可以看到大量用来解决对流占优运移问题的TVD法（Harten1984;Osher 和Chakravarthy 1984,1986;Yee 1987;Cox 和Nishikawa1991）。MT3DMS软件采用基于ULTIMATE算法的三阶TVD法，ULTIMATE(Universal Limiter for Transient Interpolation Modeling of the Advective Transport Equations) (Leonard, 1988; Leonard and Niknafs, 1990, 1991)是早期QUICKEST(Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms) (Leonard, 1979)系统的一个分支。按照ULTIMATE方法，断面浓度由节点浓度的三多项式插值得到，并通过一通用通量限制程序来减小可能随陡浓度锋面产生的非物理波动。此方法是质量守恒的，没有过多的数值弥散，并且不会产生波动。此方法要明显优于普通的二次TVD法（Leonard ,1988），并被Roache（1992）认为可能是最精确的实用方法。一维ULTIMATE方法基本思想如下，下一章将给出三维方程。

方程(3.1)在均匀流场中的一维形式（图3.2）

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + L(C) \quad (3.5)$$

假定有限差分网格间距一定，局部坐标系以节点 *j* 为原点。并设速度从左向右为正（图3.2）。仅由于对流在节点 *j* (*x*=0) 处时间*n*+1的浓度可以写成：

$$C_j^{n+1} = C(0, \Delta t) = C(-v\Delta t, 0) \quad (3.6)$$

式中， Δt 表示时间步长。式(3.6)可以这样理解：假想节点 j 上游（左侧）距离 $v\Delta t$ 处有一个粒子，过了 Δt 时间以后，该粒子到达节点 j ，该粒子带来的浓就是节点 j 处的浓度。

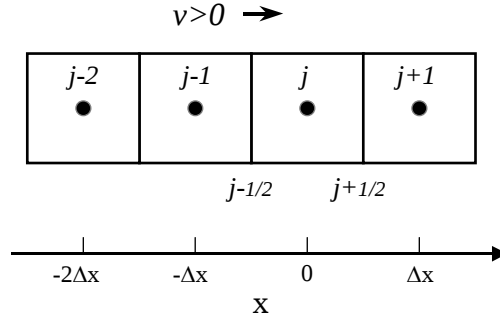


图 3.2 一维 ULTIMATE 方法中节点图示

原始浓度 $C(-v\Delta t, 0)$ 通常不与节点重合，因此必须通过相邻节点浓度插值得到。可用一个三次多项式插值，其一维形式可写成：

$$C(x, 0) = a + bx + cx^2 + dx^3 \quad (3.7)$$

从下式可看出，式中 a, b, c 和 d 是和节点浓度有关的系数。

$$\begin{aligned} C(0, 0) &= C_j, \text{ at } x = 0; \\ C(-2\Delta x, 0) &= C_{j-2}, \text{ at } x = -2\Delta x; \\ C(-\Delta x, 0) &= C_{j-1}, \text{ at } x = -\Delta x; \\ C(\Delta x, 0) &= C_{j+1}, \text{ at } x = \Delta x. \end{aligned} \quad (3.8)$$

方程(3.7)中四个待定系数需要四个节点来确定。这四个点分别是：节点 j ，与节点 j 相邻的两个节点，以及一个上游节点。如果速度方向是从右向左的，则这个上游节点就是 $j+2$ ，而非 $j-2$ 。因此，ULTIMATE方法采用的多项式插值是三次的，偏向上游方向。将式(3.8)代入(3.7)可确定这四个系数：

$$\begin{aligned} a &= C_j \\ b &= \frac{1}{\Delta x} \left(\frac{C_{j+1}}{3} + \frac{C_j}{2} - C_{j-1} + \frac{C_{j-2}}{6} \right) \\ c &= \frac{1}{2(\Delta x)^2} (C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1}) \\ d &= \frac{1}{6(\Delta x)^3} (C_{j+1} - 3C_j + 3C_{j-1} - C_{j-2}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

方程(3.6)的解可以由方程(3.7)和(3.9)得到：

$$\begin{aligned}
C_j^{n+1} &= C(0, \Delta t) = C(-v\Delta t, 0) = a + b(-v\Delta t) + c(-v\Delta t)^2 + d(-v\Delta t)^3 \\
&= C_j^n - C_r \left[\left(\frac{C_{j+1}^n}{3} + \frac{C_j^n}{2} - C_{j-1}^n + \frac{C_{j-2}^n}{6} \right) \right. \\
&\quad \left. - C_r \left(\frac{C_{j+1}^n - 2C_j^n + C_{j-1}^n}{2} \right) + C_r^2 \left(\frac{C_{j+1}^n - 3C_j^n + 3C_{j-1}^n - C_{j-2}^n}{6} \right) \right]
\end{aligned} \tag{3.10}$$

式中， $C_r = v\Delta t/\Delta x$ 。与显式有限差分法解出的断面浓度相比：

$$C_j^{n+1} = C_j^n - C_r (C_{j+1/2}^n - C_{j-1/2}^n) \tag{3.11}$$

可见，一维ULTIMATE方法中的断面浓度由下式决定：

$$\begin{aligned}
C_{j+1/2} &= (C_{j+1} + C_j)/2 - C_r (C_{j+1} - C_j)/2 \\
&\quad - (1 - C_r^2)(C_{j+1} - 2C_j + C_{j-1})/6
\end{aligned} \tag{3.12a}$$

和

$$\begin{aligned}
C_{j-1/2} &= (C_j + C_{j-1})/2 - C_r (C_j - C_{j-1})/2 \\
&\quad - (1 - C_r^2)(C_j - 2C_{j-1} + C_{j-2})/6
\end{aligned} \tag{3.12b}$$

式中，第一项对应中心加权标准有限差分法的解，第二项被看作是梯度项，第三项是曲率项。在二维或三维空间中，ULTIMATE方法会比式(3.12)复杂的多，会有更多的梯度项和曲率项，还会有附加的扭曲项（第4章）。但基本思想是一致的，更复杂的方程可按照上述步骤推导出来。

对流占优问题中涉及陡浓度锋时，(3.12)式得出的断面浓度会导致非物理波动。为避免该问题，ULTIMATE方法采用一通用通量限制器，在由多项式插值得出初步结果后，按照一定规则对断面浓度进行调整。以下是通用通量限制器如何工作的简单介绍（基于Leonard 和Niknafs,1990）。

图3.3显示了三个节点，即所求断面 $j+1/2$ 两侧的点 j 和 $j+1$ ， $j+1/2$ 上游临近节点 $j-1$ 。如果断面 $j+1/2$ 处的浓度处于相邻两个节点之间，浓度剖面是局部单调的，插值也不会产生假波动。另一方面，如果浓度剖面不是单调的，很可能是由假波动造成的，此时需要某计算程序（即通量限流器）来去除这种波动。所以，实现通量限制的第一步就是在断面浓度确定后检查其局部单调性。为此，我们用下式将图3.3中的所有浓度都标准化：

$$\tilde{C} = \frac{C - C_{j-1}}{C_{j+1} - C_{j-1}} \tag{3.13}$$

注意在这个式子中，考虑标准化浓度：

$$\tilde{C}_{j-1} = 0 \quad \text{和} \quad \tilde{C}_{j+1} = 1$$

如果通过图3.3所示3个节点的浓度剖面是单调的，则以下条件必然成立：

$$\tilde{C}_j^n \leq \tilde{C}_{j+1/2} \leq 1 \tag{3.14}$$

和

$$0 \leq \tilde{C}_{j-1/2} \leq \tilde{C}_j^n \tag{3.15}$$

以上两式是浓度剖面局部单调的必要条件,但不足以保证整体上的计算单调性。为此用标准化变量表示显式有限差分法在 j 点的解(3.11):

$$\tilde{C}_j^{n+1} = \tilde{C}_j^n - C_r (\tilde{C}_{j+1/2}^n - \tilde{C}_{j-1/2}^n) \quad (3.16)$$

为了保证局部单调性, $\tilde{C}_j^{n+1}$ 必须满足:

$$\tilde{C}_{j-1}^{n+1} \leq \tilde{C}_j^{n+1} \leq \tilde{C}_{j+1}^{n+1} \quad (3.17)$$

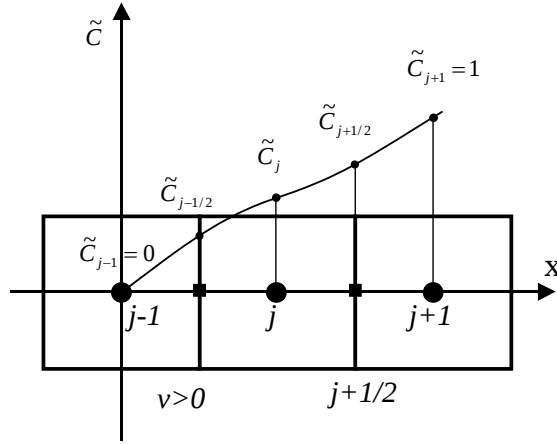


图3.3 断面 $j+1/2$ 附近浓度单调分布图示
(浓度按 3.13 式标准化)

最坏条件是:

$$0 \leq \tilde{C}_j^{n+1} \leq 1 \quad (3.18)$$

右侧不等式恒成立, 因为由式(3.16)可见, 当 $\tilde{C}_{j+1/2}^n \geq \tilde{C}_{j-1/2}^n$ 时, 有 $\tilde{C}_j^{n+1} \leq \tilde{C}_j^n \leq 1$ 。

左边的不等式代入(3.16)得:

$$\tilde{C}_{j+1/2} \leq \tilde{C}_{j-1/2} + \tilde{C}_j^n / C_r \quad (3.19)$$

同样, 对 $\tilde{C}_{j-1/2}$ 的最坏估计(=0)会产生对 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 附加的限制条件:

$$\tilde{C}_{j+1/2} \leq \tilde{C}_j^n / C_r \quad (3.20)$$

式(3.14)和(3.20)构成了断面浓度 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 关于节点浓度 $\tilde{C}_j^n$ 的通用限制器, 此时 $\tilde{C}_j^n$ 在以下单调区间内:

$$0 \leq \tilde{C}_j^n \leq 1 \quad (3.21)$$

图3.4是一个通用限制器的示意图。阴影部分表示式(3.14)和(3.20)给出的限

制条件。如果标准化后的断面浓度 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 落在这个区域内，则满足通用限制器的限制条件，也就是说，浓度剖面是局部单调的，没有假波动。如果 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 落在这个区域之外，就必须采取一些调整措施，从而抑制假波动，保持计算的单调性。最简单的方法就是设 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 与最近的上游节点浓度相等，即：

$$\tilde{C}_{j+1/2} = \tilde{C}_j^n \quad (3.22)$$

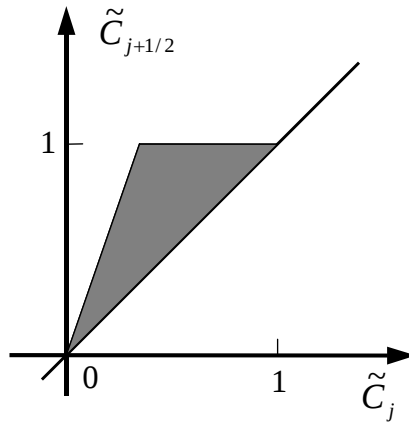


图 5. ULTIMATE 所用通用限制器限制条件图示

总的来说，上述ULTIMATE方法基本上分为这样几步：

- (1) 用(3.12)式对标准化的断面浓度 $C_{j+1/2}$ 建立直接估计；
- (2) 根据式(3.13)计算相应的标准化 $\tilde{C}_{j+1/2}$ 值，并将断面两侧相邻节点和上游临近节点浓度标准化；
- (3) 如果点 $(\tilde{C}_j^n, \tilde{C}_{j+1/2})$ 落在图3.4的阴影部分，则继续以下步骤；如果点 $(\tilde{C}_j^n, \tilde{C}_{j+1/2})$ 落在阴影之外，按 (3.22) 式调整 $\tilde{C}_{j+1/2}$ ；
- (4) 重建（非标准化） $C_{j+1/2} = C_{j-1} + \tilde{C}_{j+1/2} (C_{j+1} - C_{j-1})$ ；
- (5) 对每个有限差分单元（体积控制）断面重复上述操作。

3.4 混合欧拉—拉格朗日法

MT3DMS 采用了几种早期MT3D软件中的混合欧拉—拉格朗日方法。包括向前追踪特征值法（MOC），向后追踪修正特征值法（MMOC），以及两种方法的混合（HMOC）。下面将简单描述这些方法的基本原理和相关公式，这些方法在计算机上如何实现将在下一章详细讨论。

要运用混合欧拉—拉格朗日法，第2章方程(2.1)表示的基本运移方程需要表示成拉格朗日的形式。首先，对流项可以扩展成如下形式：

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta v_i C) = \theta v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C \frac{\partial (\theta v_i)}{\partial x_i} = \theta v_i \frac{\partial C}{\partial x_i} + C q_s \quad (3.23)$$

将式(3.23)代入(2.1)，两边同除以迟滞因子，基本方程就变为：

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{R\theta} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \bar{v}_i \frac{\partial C}{\partial x_i} - \frac{q_s}{R\theta} (C - C_s) - \frac{\lambda_1}{R} C - \frac{\lambda_2}{R} \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \quad (3.24)$$

式中， $\bar{v}_i = v_i/R$ 表示污染物粒子被延迟的速度。

方程(3.24)是一个欧拉表达式，式中偏导数 $\partial C/\partial t$ 表示空间上某点溶质浓度的变化速率。方程(3.24)可以表示成拉格朗日形式：

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{1}{R\theta} \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{q_s}{R\theta} (C - C_s) - \frac{\lambda_1}{R} C - \frac{\lambda_2}{R} \frac{\rho_b}{\theta} \bar{C} \quad (3.25)$$

式中，物质导数 $DC/Dt = \partial C/\partial t + \bar{v}_i \partial C/\partial x_i$ 表示溶质浓度沿某个污染粒子的迹线（或者速度场的特征线）的变化率。

引入有限差分法后，方程(3.25)中的物质导数可以近似表示成

$$\frac{DC}{Dt} = \frac{C_m^{n+1} - C_m^{n*}}{\Delta t} \quad (3.26)$$

方程(3.25)变为

$$C_m^{n+1} = C_m^{n*} + \Delta t \times RHS \quad (3.27)$$

式中， C_m^{n+1} ：节点m在时间n+1的溶质浓度；

C_m^{n*} ：节点m在时间n+1仅由对流引起的浓度，也可看作在中间时刻 n^* 的浓度；

Δt ：时间步长；

RHS：方程(3.25)中右边几项的有限差分近似。如果计算**RHS** 时用的是时刻n的浓度 C^n ，它是显式的；如果用的是n+1时刻的浓度 C^{n+1} ，它则是隐式的。

方程(3.27)构成了MT3DMS软件采用的混合欧拉—拉格朗日法的基本算法。在这些算法中，方程(3.27)中表示对流效应的 C_m^{n*} 项，在动坐标系中用拉格朗日法求解。而方程(3.27)中表示弥散、源汇和化学反应的第二项，则用显式或隐式的有限差分法在固定欧拉网格上求解。

按照近似表示对流项所采用的拉格朗日方法的不同，混合欧拉—拉格朗日法可以大致分为向前追踪特征值法(Garder, Peaceman, 和 Pozii 1964; Konikow 和 Bredehoft 1978; Zheng 1993; Konikow, Goode, 和 Hornberger 1996); 向后追踪

特征值法(Russell 和 Wheeler 1993; Yet et al. 1993); 以及这两种的混合(Neuman 1981 和1984, Farmer 1987; Yeh, Chang, Short, 1992)。每种方法的数值解法都被用于MT3DMS软件。这些方法的基本思想和概念在下面作简单讨论, 第4章将详细讨论它们的数值解法。

3.4.1 特征值法 (MOC)

MOC最初是Garder Peaceman, Pozii(1964)在水库模拟中为了计算易溶置换而解决多孔介质中运移问题时用的一种方法。后来美国地质调查二维运移模型使此法普及(Konikow 和Bredehoeft, 1978)并广泛应用于实地研究。MOC运用传统的粒子追踪技术来解决对流问题。模拟开始时, 一组运动粒子随机或者有序地分布在流场中。每个粒子对应一个直角坐标系中的浓度和位置。每隔一小段时间通过流场向前追踪粒子。在每个时间间隔的末尾, m 单元中由对流引起的平均浓度 C_m^{n*} 可以由该单元内粒子的浓度来估算(图3.5)。这个平均浓度可用算术平均值表示为:

$$C_m^{n*} = \frac{1}{NP_m} \sum_{p=1}^{NP_m} C_p^n \quad \text{if } NP_m > 0 \quad (3.28)$$

式中, NP_m 表示单元 m 中的粒子数;

C_p^n 表示 p 粒子在时刻 n 的浓度。

严格来说, 式(3.28)只在网格是规则时适用。可以用其他平均值算法来更精

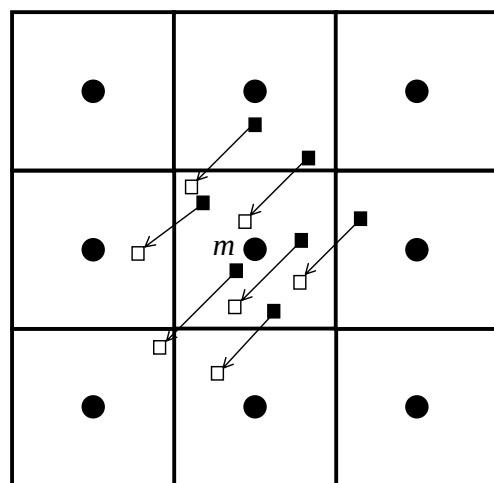


图3.5 MOC方法图解

每个时间段内向前追踪运动粒子, 时间间隔 Δt 内仅由对流引起的
单元 m 内的瞬时浓度由单元内粒子浓度的加权平均计算, 它
用来计算由弥散或其它过程引起的浓度变化

确地处理不规则网格。Zheng (1993) 提出了一个基于体积的平均值算法:

$$C_m^{n*} = \sum_{p=1}^{NP_m} V_p C_p^n / \sum_{p=1}^{NP_m} V_p \quad \text{if } NP_m > 0 \quad (3.29)$$

式中， V_p 表示最初产生 p 粒子的单元的体积。在规则的网格中，式(3.29)变为(3.28)。

对每个单元的 C_m^{n*} 估算完成后，就需要基于 C_m^{n*} 和 n 时刻的浓度 C_m^n 计算加权浓度 $C_m^{\hat{n}}$ 。

$$C_m^{\hat{n}} = \omega C_m^{n*} + (1 - \omega) C_m^n \quad (3.30)$$

式中 ω 为0.5-1之间的加权因子。利用显式或隐式有限差分法，式(3.27)中的第二项，即由弥散、源/汇、化学反应（方程3.27中右边的几项）引起的浓度变化就要用 $C_m^{\hat{n}}$ 来计算了。如果采用显式有限差分法，则

$$\Delta C_m^{n+1} = \Delta t \times RHS(C_m^{\hat{n}}) \quad (3.31)$$

式(3.31)中用加权浓度是一种平均方法，因为在这段时间间隔内同时发生了弥散、源/汇或化学反应。

单元 m 在时刻 $n+1$ 的浓度为 C_m^{n*} 和 ΔC_m^{n+1} 之和。所有运动粒子的浓度也被更新以反映由弥散、源/汇和化学反应引起的浓度变化。这就完成了MOC的一步运移运算，该过程一直持续到模拟时间结束。

MOC法的好处在于它可以避免空间截断误差引起的数值弥散。它的主要缺点在于因为要追踪大量运动粒子，尤其在三维时，计算缓慢并需要大量计算机内存。因为基于混合欧拉—拉格朗日方法的粒子追踪的不连续性不能保证特定时间步长内的局部质量守恒，在某些情况下，MOC方法可能导致严重的质量不守恒。在MT3DMS软件中，通过采用动态粒子分布方法，MOC所需的计算机内存显著减少。通过采用稳定速率插值和高阶粒子追踪算法，质量守恒问题也在一定程度上有所减轻。然而需要指出的是，如果网格极不规则，MOC也可以导致严重的质量不守恒。如果这种情况发生，并且不考虑数值弥散，就应该采用TVD法或者标准有限差分法。

3.4.2 修正特征值法（MMOC）

MMOC最初用来较精确的近似表示对流项而不损失计算效率(Russell and Wheel1983; Cheng, Casulli, and Milford 1984)。除了对对流项的处理，MMOC方法与MOC方法是类似的。MOC方法向前追踪大量的运动粒子以及每个粒子的浓度和位置。与MOC不同，MMOC方法于 $n+1$ 时刻在固定网格的节点放置一个假想粒子，向后追踪这个粒子来找到它在时刻 n 的位置，该位置处的浓度作为 C_m^{n*} 的近似值（图3.6）。

$$C_m^{n*} = C^n(\mathbf{x}_p) = C^n(\mathbf{x}_m - \mathbf{d}) \quad (3.32)$$

式中：

$\mathbf{x}_p$ ：沿迹线向后追踪时间间隔 Δt 后，节点 m 处粒子到达的位置；

$\mathbf{x}_m$ ：节点 m 的位置矢量；

$\mathbf{d}$ ：特征节点位移，即沿粒子轨迹从 $\mathbf{x}_m$ 到 $\mathbf{x}_p$ 的距离；

$C^n(\mathbf{x}_p)$ ： $\mathbf{x}_p$ 处在时刻 n 的浓度，通常由相邻节点浓度插值得到。

MMOC方法对每一个有限差分单元用一个粒子，而MOC方法通常需要几个粒子。因此，结合低阶插值使用的MMOC方法比MOC方法要快。此外，因为MMOC方法在每个新的时刻从节点开始追踪粒子，不需要在计算机内存中存储

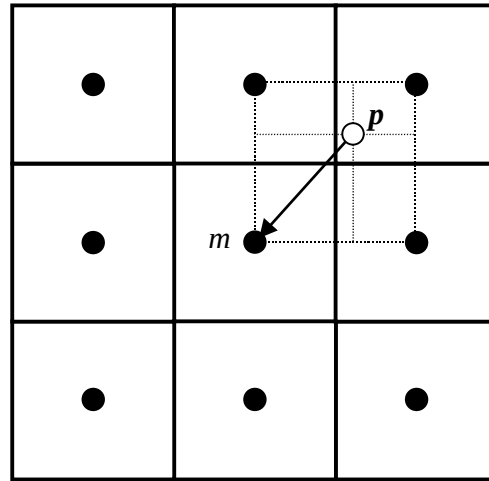


图3.6 MMOC方法图解

每个结点放置一假想粒子，并向后追踪它早期的位置，该位置处的浓度即为在这段时间内由对流引起的浓度

粒子的位置和浓度，对于MOC方法需要大量粒子的问题，MMOC方法需要更少的计算机内存。如果采用低阶插值方法，例如线性插值（二维中的双线性或三维中的三线性），MMOC方法也不会产生人工波动。然而，利用低阶插值方法，尤其处理陡浓度锋问题时，MMOC方法产生了显著的数值弥散。高阶插值方法可用来消除或减少数值弥散，例如，Cheng, Casulli 和 Milford(1984)在一个二维模拟中利用二次插值方法，发现没有发生数值弥散。然而，高阶插值比线性插值方法计算效率要低并且处理陡浓度锋问题时会导致严重的人工波动。Healy 和 Russall(1989)对一维问题测试了几种插值方法并得到如下结论：混合线性/二次插值方法可减少数值弥散和人工波动；缺点是比线性插值有更高的计算要求，尤其在多维模拟中，并且该方法不能很好地保持质量守恒，也就抵消了MMOC方法的计算效率。因为这些原因，MT3DMS运移模型中的MMOC方法仅利用低阶插值方法，而且也仅用于没有陡浓度锋因而数值弥散不太显著的情况下。

3.4.3 混合特征法 (HMOC)

如前所述, MOC方法和MMOC方法都是可用来解混合欧拉—拉格朗日方程。基于实地条件(浓度锋是陡或平滑)和计算机可用资源(通常MOC需要更多的内存空间和较长的计算时间)选用不同的方法。第三个选择是用两种方法的混合, 在此称为混合特征值法(HMOC)。

HMOC利用一个理论上和Neuman(1984)提出的类似的自适应方法来结合MOC和MMOC的优点。该方法的基本原理是求解过程对浓度场特征的自动适应。当出现陡浓度锋时, 通过利用浓度锋周围动态分布的运动粒子, 对流项由MOC方法求解。远离浓度锋的地方, 对流项通过MMOC方法求解, 在节点放置假想粒子并向后追踪。当由于弥散和化学反应陡浓度锋消失时, 向前追踪自动停止并去除相应的粒子。通过选择一个合适的标准来控制MOC和MMOC之间的转换, 自适应过程可在 $0 \sim \infty$ 整个Peclet数变化范围内为运移问题提供精确解, 它几乎没有数值弥散, 比MOC方法需要更少的粒子。

在特定环境下, HMOC中自适应的选择标准可能是不明显的, 自适应过程也不一定产生最佳解。在这些情况下, 人工选择采用MOC还是MMOC可能更有效。因此, 当前版本的MT3DMS中包括了这三种解法。

3.5 可用解法总结

MT3DMS的独特之处在于一套软件中有多种解法可供选择。如前所述, 对流项可用基于欧拉—拉格朗日方法的粒子追踪法, 标准有限差分法和三阶TVD(ULTIMATE)方法求解。在当前版本中, TVD方法经常是显式的, 受稳定性约束。有限差分法是显式还是隐式取决于用户是否选择了Generalized Conjugate Gradient Solver (GCG)解法(第4章)。如果选择了GCG, 利用上游或中心加权采用隐式有限差分法解对流项, 没有稳定性约束。如果没有选择GCG, 则利用显式有限差分方法, 受稳定性约束。当采用显式有限差分法时, 利用中心加权的显式方法是无条件不稳定的, 因此只能用上游加权。弥散项、源/汇和化学反应的求解, 选择GCG时是隐式的, 不选择时是显式的。MT3DMS软件结构以这样一种方式构建: 后续反应包开发者可显式或隐式地执行他们的附加反应包。

表3.1 MT3DMS中可用解法		
组	对流项解法选择	弥散、汇/源和化学反应解法选择
A	基于粒子追踪的欧拉—拉格朗日法 • MOC • MMOC • HMOC	显式有限差分法
B	基于欧拉—拉格朗日的粒子追踪法 • MOC • MMOC	隐式有限差分法

	• HMOC	
C	显式有限差分法 • 上游权重	显式有限差分法
D	<i>隐式有限差分法</i> • <i>上游权重</i> • <i>空间中心权重</i>	<i>隐式有限差分法</i>
E	<i>显式三阶TVD(ULTIMATE)</i>	显式有限差分法
F	<i>显式三阶TVD(ULTIMATE)</i>	<i>隐式有限差分法</i>
新的选择以斜体表示		

虽然流动模型不需要指定 x, y, z 坐标轴, 运移模型却需要指定。在 MT3DMS 模型中, 假定 x, y, z 坐标轴分别沿着行、列、和层方向。直角坐标系的原点位于左上角的第 1 行、第 1 列、第 1 层的单元, 即单元 (1, 1, 1), 如图 4.2 所示。因为 MT3DMS 和 MODFLOW 模型都采用自上而下给层编号的方法, 所以 z 轴指向高度降低的方向。在直角坐标系下, 沿行方向的单元宽度 Δr_i 即沿 x 轴方向

的距离 Δx_j ，沿列方向的单元宽度 Δc_i 即沿 y 轴方向的距离 Δy_i ，沿层方向的单元厚度 Δv_k 即沿 z 轴方向的距离 Δz_k 。

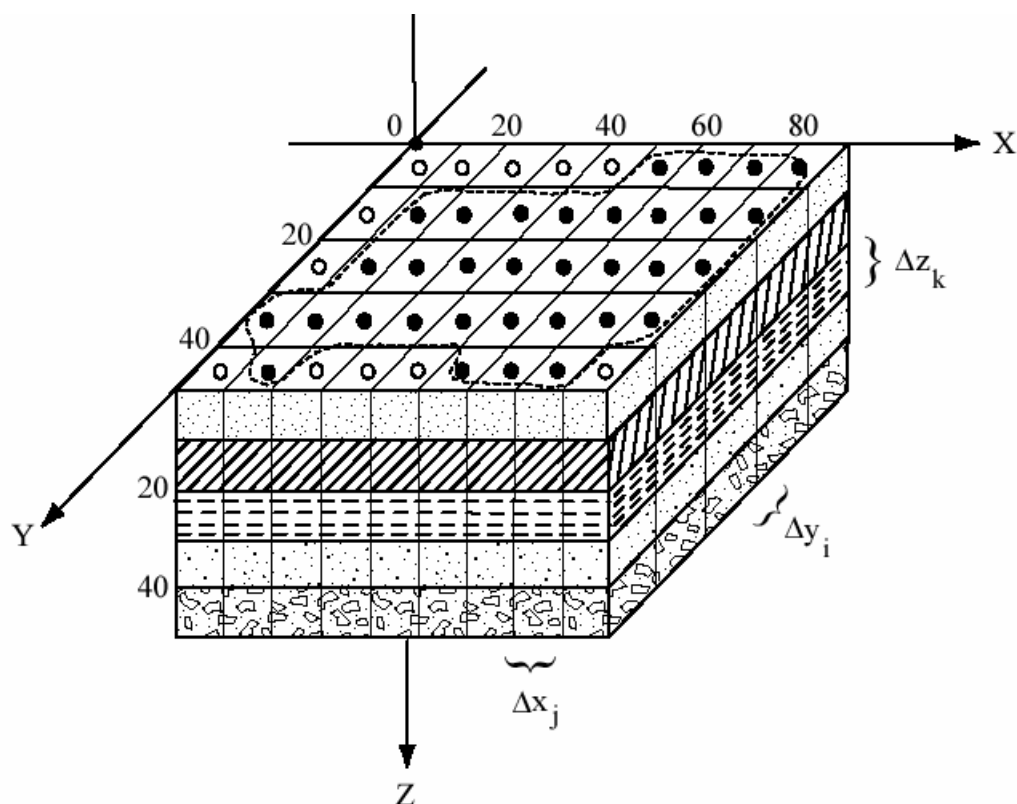


图 4.2 MT3DMS 所用直角坐标系示意图

假定沿行(x)方向 $\Delta x_j = 10$ ，沿列(y)方向 $\Delta y_i = 10$ ，沿层(z)方向 $\Delta z_k = 10$

如图 4.3 所示，运移模型的固定网格系统基于块体中心计算法则。块体中心计算法则就是在单元中心定义一个称为节点的点，在该点计算溶质浓度和水头。在整个单元范围内，假设弥散度和渗透系数等化学和水力系数是相同的。

如图 4.1 和图 4.2 所示，含水层系统通常在平面上由两组平行、正交的线分割，垂向上由一组平行平面分割，这样分割的每个单元都是矩形块。为了在处理厚度变化的地质单元时更具灵活性，MODFLOW 和运移模型 MT3DMS 在垂向上允许使用变形网格，如图 4.4 所示。这种变形的垂向剖分，会引起数值离散化误差，在运移模型中尤为突出。因此，垂向剖分严重变形时，使用 MT3DMS 模型模拟得到的结果需要仔细评价以确保结果的准确。

4.2 时间离散

在 MODFLOW 等大多数流动模型中，模拟时间经常被分成很多“应力期”——外部作用参数(即汇/源)为常量的时间段。当模拟非稳定流时，应力期被分成许多时间步长。每个应力期内的时间步长通常形成一个几何级数。时间步长的长度通常按照用户指定的应力期长度、时间步长数和一个时间步长乘数，由程序计算求得。

在 MT3DMS 模型中，运移模拟是以一个独立的流动模型解出的水头为基础

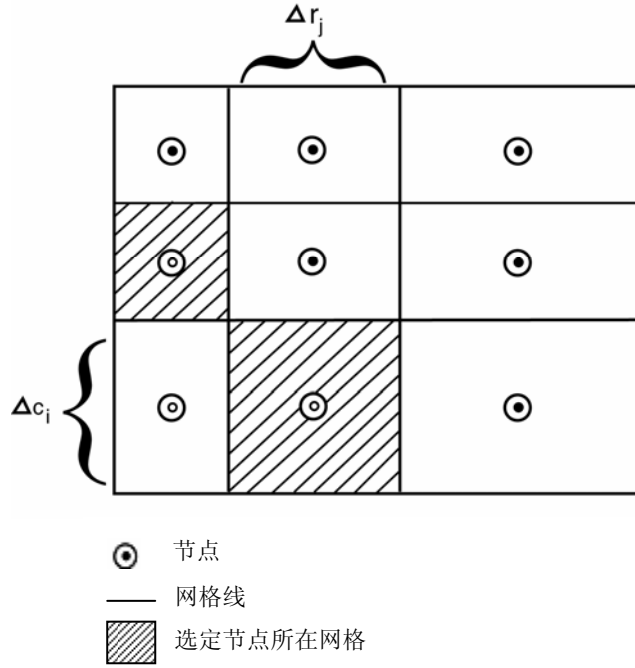


图 4.3 块体中心网格示意图
(McDonald 和 Harbaugh, 1988)

的。因为运移解有更加严格的稳定性约束和精度要求，求解水头的时间步长通常太大而不能用于运移过程求解。因此，求解水头的每一个时间步长被进一步分解更小的时间增量，这些时间增量称为运移步长。在每个运移步长内，水头被看作是不变的。运移步长的大小可以在模型输入中指定，或者由模型利用一个自动步长控制程序确定。时间的离散化见图 4.5。

一般来说，流动和运移模型应该有相同的应力期。在每一个应力期内用来求流动解的时间步长称为“流动时间步长”，流动时间步长的数目应该在运移模型中指定，以便流速场和汇/源信息能得到适时更新。仅当流动模型为稳定状态，只有一个应力期和一个时间步长时，MT3DMS 模型才允许流动模型和运移模型有不同数目的应力期。这是因为，当流动模型为稳定状态时，流速和汇/源信息只需在模拟开始时更新，在这种情况下，运移模型可以使用尽可能多的应力期来调节随时间变化的汇/源浓度，而此时汇/源的流速是不变的。

4.3 有限差分解法

4.3.1 隐式有限差分公式

在局部平衡假设下，运移方程的欧拉形式可写为

$$R\theta \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) + q_s C_s - q'_s C - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (4.1)$$

式中 $\hat{D}_{ij} = \theta D_{ij}$ ，为表观弥散系数张量，其它各项在第 2 章已定义。如果考虑非平衡吸附或双重孔隙度质量转移，则另外需要一个方程来定义吸附或者说不流动

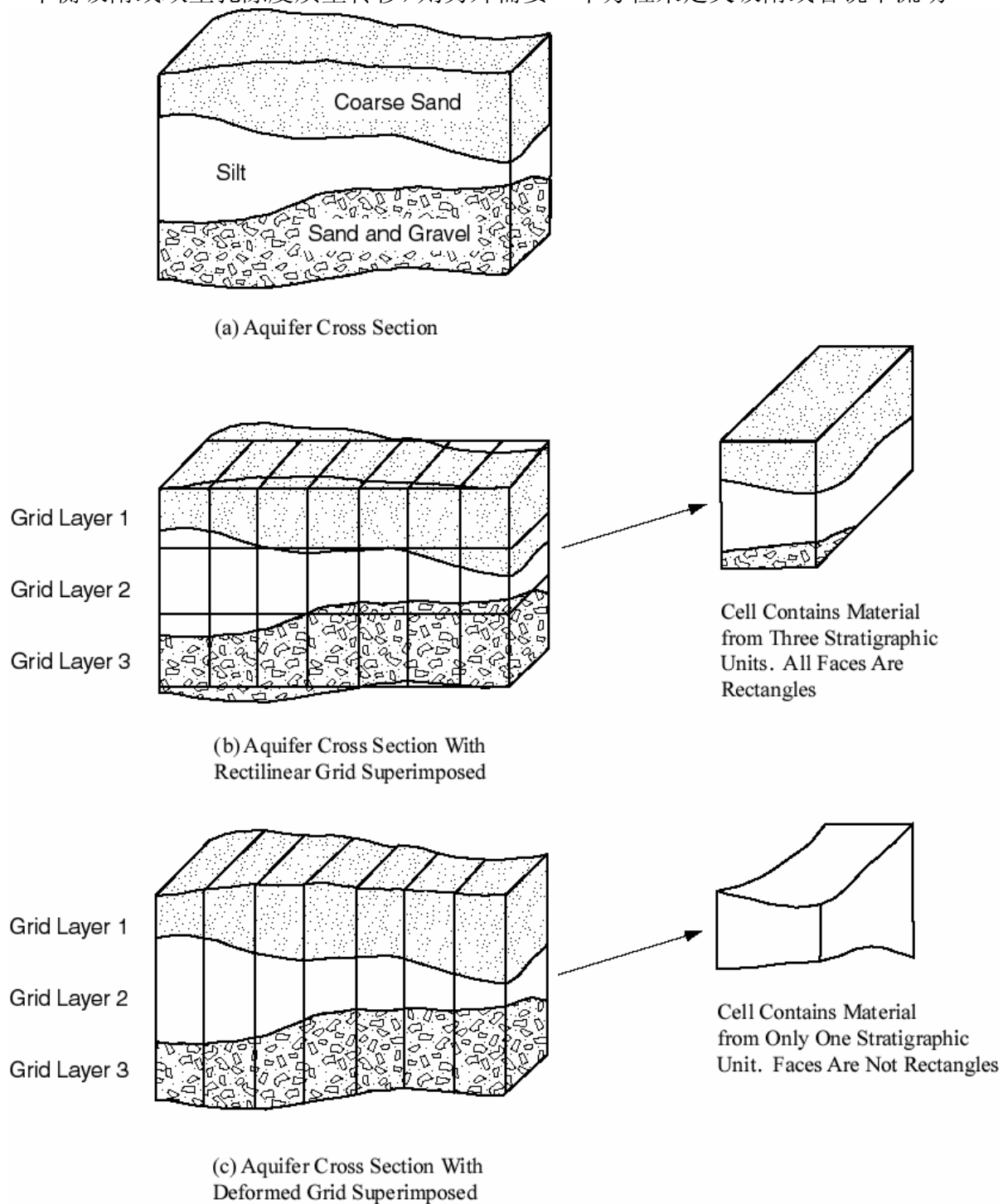


图 4.4 垂向剖分示意图
(McDonald 和 Harbaugh, 1988)

浓度的变化率，这一点将在后面“化学反应组分”中讨论。

节点 (i,j,k) 使用隐式有限差分法后，方程(4.1)中的对时间的导数近似等于

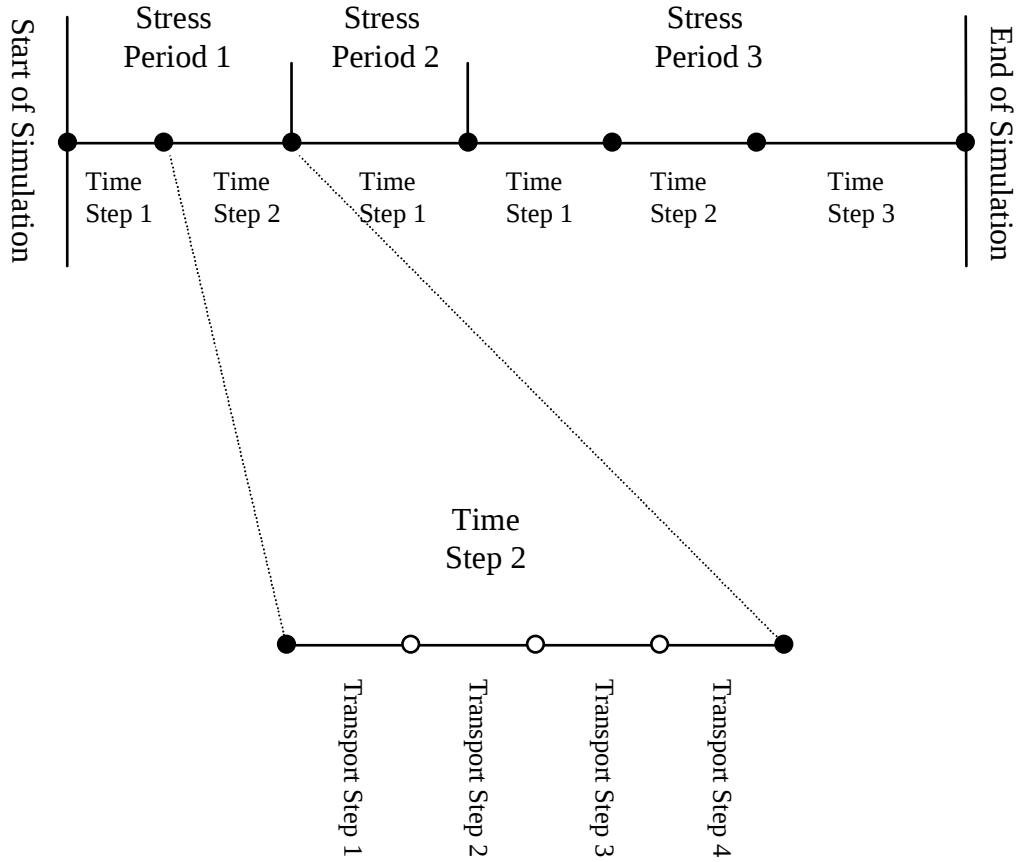


图 4.5 运移模型中模拟时间离散化
上部：模拟时间被分成应力期和时间步长；
底部：时间步长被进一步分成运移步长

$$R\theta \frac{\partial C}{\partial t} = R_{i,j,k} \theta_{i,j,k} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} \quad (4.2)$$

式中 n 代表浓度已知的上一个时刻， $n+1$ 代表下一个时刻。

方程(4.1)中的对流项，以分量的形式近似表示为

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) &= \frac{\partial}{\partial x} (q_x C) + \frac{\partial}{\partial y} (q_y C) + \frac{\partial}{\partial z} (q_z C) \\ &= q_{xi,j+1/2,k} \frac{\alpha_{xj+1/2} C_{i,j,k}^{n+1} + (1 - \alpha_{xj+1/2}) C_{i,j+1,k}^{n+1}}{\Delta x_j} - q_{xi,j-1/2,k} \frac{\alpha_{xj-1/2} C_{i,j-1,k}^{n+1} + (1 - \alpha_{xj-1/2}) C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x_j} \\ &\quad + q_{yi+1/2,j,k} \frac{\alpha_{yi+1/2} C_{i,j,k}^{n+1} + (1 - \alpha_{yi+1/2}) C_{i+1,j,k}^{n+1}}{\Delta y_i} - q_{yi-1/2,j,k} \frac{\alpha_{yi-1/2} C_{i-1,j,k}^{n+1} + (1 - \alpha_{yi-1/2}) C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y_i} \\ &\quad + q_{zi,j,k+1/2} \frac{\alpha_{zk+1/2} C_{i,j,k}^{n+1} + (1 - \alpha_{zk+1/2}) C_{i,j,k+1}^{n+1}}{\Delta z_k} - q_{zi,j,k-1/2} \frac{\alpha_{zk-1/2} C_{i,j,k-1}^{n+1} + (1 - \alpha_{zk-1/2}) C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (4.3)$$

式中 $\alpha_{xj\pm 1/2}$, $\alpha_{yi\pm 1/2}$ 和 $\alpha_{zk\pm 1/2}$ 是平流项的空间加权因子。如果使用上游加权法, 则加权因子定义为

$$\begin{aligned}\alpha_{xj+1/2} &= \begin{cases} 1 & q_{xi,j+1/2,k} > 0 \\ 0 & q_{xi,j+1/2,k} < 0 \end{cases} \\ \alpha_{yi+1/2} &= \begin{cases} 1 & q_{yi+1/2,j,k} > 0 \\ 0 & q_{yi+1/2,j,k} < 0 \end{cases} \\ \alpha_{zk+1/2} &= \begin{cases} 1 & q_{zi,j,k+1/2} > 0 \\ 0 & q_{zi,j,k+1/2} < 0 \end{cases}\end{aligned}\quad (4.4)$$

如果使用中心加权法, 则加权因子的定义为

$$\begin{aligned}\alpha_{xj+1/2} &= \frac{\Delta x_{j+1}}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \\ \alpha_{yi+1/2} &= \frac{\Delta y_{i+1}}{\Delta y_i + \Delta y_{i+1}} \\ \alpha_{zk+1/2} &= \frac{\Delta z_{k+1}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}}\end{aligned}\quad (4.5)$$

方程(4.1)中的弥散项用分量形式可近似表示为

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\hat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{D}_{xx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{D}_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\hat{D}_{xz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial y} \left(\hat{D}_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\hat{D}_{yy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\hat{D}_{yz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &+ \frac{\partial}{\partial z} \left(\hat{D}_{zx} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\hat{D}_{zy} \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\hat{D}_{zz} \frac{\partial C}{\partial z} \right) \\ &= \hat{D}_{xx_{i,j+1/2,k}} \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta x_j + 0.5\Delta x_{j+1})} - \hat{D}_{xx_{i,j-1/2,k}} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta x_{j-1} + 0.5\Delta x_j)} \\ &+ \hat{D}_{xy_{i,j+1/2,k}} \frac{\omega_{x_{j+1/2}} C_{i+1,j,k}^{n+1} + (1 - \omega_{x_{j+1/2}}) C_{i+1,j+1,k}^{n+1} - \omega_{x_{j+1/2}} C_{i-1,j,k}^{n+1} - (1 - \omega_{x_{j+1/2}}) C_{i-1,j+1,k}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0.5\Delta y_{i+1})} \\ &- \hat{D}_{xy_{i,j-1/2,k}} \frac{\omega_{x_{j-1/2}} C_{i+1,j-1,k}^{n+1} + (1 - \omega_{x_{j-1/2}}) C_{i+1,j,k}^{n+1} - \omega_{x_{j-1/2}} C_{i-1,j-1,k}^{n+1} - (1 - \omega_{x_{j-1/2}}) C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0.5\Delta y_{i+1})} \\ &+ \hat{D}_{xz_{i,j+1/2,k}} \frac{\omega_{x_{j+1/2}} C_{i,j,k+1}^{n+1} + (1 - \omega_{x_{j+1/2}}) C_{i,j+1,k+1}^{n+1} - \omega_{x_{j+1/2}} C_{i,j,k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{x_{j+1/2}}) C_{i,j+1,k-1}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0.5\Delta z_{k+1})} \\ &- \hat{D}_{xz_{i,j-1/2,k}} \frac{\omega_{x_{j-1/2}} C_{i,j-1,k+1}^{n+1} + (1 - \omega_{x_{j-1/2}}) C_{i,j,k+1}^{n+1} - \omega_{x_{j-1/2}} C_{i,j-1,k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{x_{j-1/2}}) C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta x_j (0.5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0.5\Delta z_{k+1})}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \hat{D}_{y_{i+1/2}, j, k} \frac{\omega_{y_{i+1/2}} C_{i, j+1, k}^{n+1} + (1 - \omega_{y_{i+1/2}}) C_{i+1, j+1, k}^{n+1} - \omega_{y_{i+1/2}} C_{i, j-1, k}^{n+1} - (1 - \omega_{y_{i+1/2}}) C_{i+1, j-1, k}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0.5 \Delta x_{j+1})} \\
& - \hat{D}_{y_{i-1/2}, j, k} \frac{\omega_{y_{i-1/2}} C_{i-1, j+1, k}^{n+1} + (1 - \omega_{y_{i-1/2}}) C_{i, j+1, k}^{n+1} - \omega_{y_{i-1/2}} C_{i-1, j-1, k}^{n+1} - (1 - \omega_{y_{i-1/2}}) C_{i, j-1, k}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0.5 \Delta x_{j+1})} \\
& + \hat{D}_{yy_{i+1/2}, j, k} \frac{C_{i+1, j, k}^{n+1} - C_{i, j, k}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta y_i + 0.5 \Delta y_{i+1})} - \hat{D}_{yy_{i-1/2}, j, k} \frac{C_{i, j, k}^{n+1} - C_{i-1, j, k}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta y_{i-1} + 0.5 \Delta y_i)} \\
& + \hat{D}_{yz_{i+1/2}, j, k} \frac{\omega_{y_{i+1/2}} C_{i, j, k+1}^{n+1} + (1 - \omega_{y_{i+1/2}}) C_{i+1, j, k+1}^{n+1} - \omega_{y_{i+1/2}} C_{i, j, k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{y_{i+1/2}}) C_{i+1, j, k-1}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0.5 \Delta z_{k+1})} \\
& - \hat{D}_{yz_{i-1/2}, j, k} \frac{\omega_{y_{i-1/2}} C_{i-1, j, k+1}^{n+1} + (1 - \omega_{y_{i-1/2}}) C_{i, j, k+1}^{n+1} - \omega_{y_{i-1/2}} C_{i-1, j, k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{y_{i-1/2}}) C_{i, j, k-1}^{n+1}}{\Delta y_i (0.5 \Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0.5 \Delta z_{k+1})} \\
& + \hat{D}_{zx_{i, j, k+1/2}} \frac{\omega_{z_{k+1/2}} C_{i, j+1, k}^{n+1} + (1 - \omega_{z_{k+1/2}}) C_{i, j+1, k+1}^{n+1} - \omega_{z_{k+1/2}} C_{i, j-1, k}^{n+1} - (1 - \omega_{z_{k+1/2}}) C_{i, j-1, k+1}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0.5 \Delta x_{j+1})} \\
& - \hat{D}_{zx_{i, j, k-1/2}} \frac{\omega_{z_{k-1/2}} C_{i, j+1, k-1}^{n+1} + (1 - \omega_{z_{k-1/2}}) C_{i, j+1, k}^{n+1} - \omega_{z_{k-1/2}} C_{i, j-1, k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{z_{k-1/2}}) C_{i, j-1, k}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta x_{j-1} + \Delta x_j + 0.5 \Delta x_{j+1})} \\
& + \hat{D}_{zy_{i, j, k+1/2}} \frac{\omega_{z_{k+1/2}} C_{i+1, j, k}^{n+1} + (1 - \omega_{z_{k+1/2}}) C_{i+1, j, k+1}^{n+1} - \omega_{z_{k+1/2}} C_{i-1, j, k}^{n+1} - (1 - \omega_{z_{k+1/2}}) C_{i-1, j, k+1}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0.5 \Delta y_{i+1})} \\
& - \hat{D}_{zy_{i, j, k-1/2}} \frac{\omega_{z_{k-1/2}} C_{i+1, j, k-1}^{n+1} + (1 - \omega_{z_{k-1/2}}) C_{i+1, j, k}^{n+1} - \omega_{z_{k-1/2}} C_{i-1, j, k-1}^{n+1} - (1 - \omega_{z_{k-1/2}}) C_{i-1, j, k}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0.5 \Delta y_{i+1})} \\
& + \hat{D}_{zz_{i, j, k+1/2}} \frac{C_{i, j, k+1}^{n+1} - C_{i, j, k}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta z_k + 0.5 \Delta z_{k+1})} - \hat{D}_{zz_{i, j, k-1/2}} \frac{C_{i, j, k}^{n+1} - C_{i, j, k-1}^{n+1}}{\Delta z_k (0.5 \Delta z_{k-1} + 0.5 \Delta z_k)}
\end{aligned} \tag{4.6}$$

式中 ω_x , ω_y , 和 ω_z 表示空间加权因子, 评估弥散截项时用于计算单元截面上的浓度, 定义为

$$\begin{aligned}
\omega_{x_{j+1/2}} &= \frac{\Delta x_{j+1}}{\Delta x_j + \Delta x_{j+1}} \\
\omega_{y_{i+1/2}} &= \frac{\Delta y_{i+1}}{\Delta y_i + \Delta y_{i+1}} \\
\omega_{z_{k+1/2}} &= \frac{\Delta z_{k+1}}{\Delta z_k + \Delta z_{k+1}}
\end{aligned} \tag{4.7}$$

将方程(4.2), (4.3)和(4.6)代入(4.1)式, 两边分别乘以 $\Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k$ (即单元 (i, j, k) 的体积), 得到常用的对单元 (i, j, k) 的有限差分方程

$$\begin{aligned}
& A_{i,j,k}^1 C_{i,j,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^2 C_{i,j,k-1}^{n+1} + A_{i,j,k}^3 C_{i,j,k+1}^{n+1} + A_{i,j,k}^4 C_{i-1,j,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^5 C_{i+1,j,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^6 C_{i,j-1,k}^{n+1} \\
& + A_{i,j,k}^7 C_{i,j+1,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^8 C_{i-1,j,k-1}^{n+1} + A_{i,j,k}^9 C_{i,j-1,k-1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{10} C_{i,j+1,k-1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{11} C_{i+1,j,k-1}^{n+1} \\
& + A_{i,j,k}^{12} C_{i-1,j,k+1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{13} C_{i,j-1,k+1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{14} C_{i,j+1,k+1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{15} C_{i+1,j,k+1}^{n+1} + A_{i,j,k}^{16} C_{i,j-1,k-1}^{n+1} \\
& + A_{i,j,k}^{17} C_{i-1,j+1,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^{18} C_{i+1,j-1,k}^{n+1} + A_{i,j,k}^{19} C_{i+1,j+1,k}^{n+1} = b_{i,j,k}
\end{aligned} \tag{4.8}$$

式中 A 为系数矩阵， b 是包括所有已知量的右边矢量。系数矩阵 A 的 19 个系数和矢量 b 包含的已知项，分成 5 组介绍：基本组分、对流、弥散、汇/源和化学反应。

(1) 基本组分

矩阵 A 和右边矢量 b 的基本组分源于对时间导数的近似，即

$$A_{i,j,k}^1 = -R_{i,j,k} \theta_{i,j,k} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k / \Delta t \tag{4.9}$$

$$b_{ijk} = -R_{ijk} \theta_{ijk} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k C_{ijk}^n / \Delta t \tag{4.10}$$

式中 $R_{i,j,k}$ 为阻滞因子，如果没有吸附作用或者吸附作用不是局部平衡的，其值等于 1。在模拟非线性吸附时，使用前一次迭代计算的浓度值更新 $R_{i,j,k}$ 。

对于无效和浓度不变的单元，经常有 $C_{i,j,k}^{n+1} = C_{i,j,k}^n$ ，可通过下式计算得到

$$A_{i,j,k}^1 = -1 \tag{4.11}$$

$$b_{i,j,k} = -C_{i,j,k}^n \tag{4.12}$$

(2) 对流组分

对流作用对系数矩阵 A 的贡献如下所示

$$\begin{aligned}
A_{i,j,k}^1 = & -\alpha_{xj+1/2} Q_{xi,j+1/2,k} + (1 - \alpha_{xj-1/2}) Q_{xi,j-1/2,k} - \alpha_{yi+1/2} Q_{yi+1/2,j,k} \\
& + (1 - \alpha_{yi-1/2}) Q_{yi-1/2,j,k} - \alpha_{zk+1/2} Q_{zi,j,k+1/2} + (1 - \alpha_{zk-1/2}) Q_{zi,j,k-1/2}
\end{aligned} \tag{4.13a}$$

$$A_{i,j,k}^2 = \alpha_{zk-1/2} Q_{zi,j,k-1/2} \tag{4.13b}$$

$$A_{i,j,k}^3 = -(1 - \alpha_{zk+1/2}) Q_{zi,j,k+1/2} \tag{4.13c}$$

$$A_{i,j,k}^4 = \alpha_{yi-1/2} Q_{yi-1/2,j,k} \tag{4.13d}$$

$$A_{i,j,k}^5 = -(1 - \alpha_{yi+1/2}) Q_{yi+1/2,j,k} \tag{4.13e}$$

$$A_{i,j,k}^6 = \alpha_{xj-1/2} Q_{xi,j-1/2,k} \tag{4.13f}$$

$$A_{i,j,k}^7 = -(1 - \alpha_{xj+1/2}) Q_{xi,j+1/2,k} \tag{4.13g}$$

式中 Q 为通过两个相邻单元截面的体积流速，等于单位流量乘以截面积。例如， $Q_{xi,j+1/2,k} = q_{xi,j+1/2,k} \Delta y_i \Delta z_k$ ，就是通过单元 (i,j,k) 和 $(i,j+1,k)$ 之间截面 $(i,j+1/2,k)$ 的体

积流速。

(3) 弥散组分

弥散作用对系数矩阵 $\mathbf{A}$ 的贡献如下所示

$$A_{i,j,k}^1 = -\tilde{D}_{xxijk} - \tilde{D}_{xxij-1k} - \tilde{D}_{yyijk} - \tilde{D}_{yyi-1jk} - \tilde{D}_{zzijk} - \tilde{D}_{zzijk-1} \quad (4.14a)$$

$$A_{i,j,k}^2 = \tilde{D}_{zzi,j,k-1} - \tilde{D}_{xzi,j,k} \omega_{xj+1/2} + \tilde{D}_{xzi,j-1,k} (1 - \omega_{xj-1/2}) - \tilde{D}_{yzi,j,k} \omega_{yi+1/2} + \tilde{D}_{yzi-1,j,k} (1 - \omega_{yi-1/2}) \quad (4.14b)$$

$$A_{i,j,k}^3 = \tilde{D}_{zzi,j,k} + \tilde{D}_{xzi,j,k} \omega_{xj+1/2} - \tilde{D}_{xzi,j-1,k} (1 - \omega_{xj-1/2}) + \tilde{D}_{yzi,j,k} \omega_{yi+1/2} - \tilde{D}_{yzi-1,j,k} (1 - \omega_{yi-1/2}) \quad (4.14c)$$

$$A_{i,j,k}^4 = \tilde{D}_{yyi-1,j,k} - \tilde{D}_{xyi,j,k} \omega_{xj+1/2} + \tilde{D}_{xyi,j-1,k} (1 - \omega_{xj-1/2}) - \tilde{D}_{zyi,j,k} \omega_{zk+1/2} + \tilde{D}_{zyi-1,j,k} (1 - \omega_{zk-1/2}) \quad (4.14d)$$

$$A_{i,j,k}^5 = \tilde{D}_{yyi,j,k} + \tilde{D}_{xyi,j,k} \omega_{xj+1/2} - \tilde{D}_{xyi,j-1,k} (1 - \omega_{xj-1/2}) + \tilde{D}_{zyi,j,k} \omega_{zk+1/2} - \tilde{D}_{zyi-1,j,k} (1 - \omega_{zk-1/2}) \quad (4.14e)$$

$$A_{i,j,k}^6 = \tilde{D}_{xxi,j-1,k} - \tilde{D}_{yxi,j,k} \omega_{yi+1/2} + \tilde{D}_{yxi-1,j,k} (1 - \omega_{yi-1/2}) - \tilde{D}_{zxi,j,k} \omega_{zk+1/2} + \tilde{D}_{zxi,j,k-1} (1 - \omega_{zk-1/2}) \quad (4.14f)$$

$$A_{i,j,k}^7 = \tilde{D}_{xxi,j,k} + \tilde{D}_{yxi,j,k} \omega_{yi+1/2} - \tilde{D}_{yxi-1,j,k} (1 - \omega_{yi-1/2}) + \tilde{D}_{zxi,j,k} \omega_{zk+1/2} - \tilde{D}_{zxi,j,k-1} (1 - \omega_{zk-1/2}) \quad (4.14g)$$

$$A_{i,j,k}^8 = \tilde{D}_{yzi-1,j,k} \omega_{yi-1/2} + \tilde{D}_{zyi,j,k-1} \omega_{zk-1/2} \quad (4.14h)$$

$$A_{i,j,k}^9 = \tilde{D}_{xzi,j-1,k} \omega_{xj-1/2} + \tilde{D}_{zxi,j,k-1} \omega_{zk-1/2} \quad (4.14i)$$

$$A_{i,j,k}^{10} = -\tilde{D}_{xzi,j,k} (1 - \omega_{yi-1/2}) - \tilde{D}_{zxi,j,k-1} \omega_{zk-1/2} \quad (4.14j)$$

$$A_{i,j,k}^{11} = -\tilde{D}_{yzi,j,k} (1 - \omega_{yi+1/2}) - \tilde{D}_{zyi,j,k-1} \omega_{zk-1/2} \quad (4.14k)$$

$$A_{i,j,k}^{12} = -\tilde{D}_{yzi-1,j,k} \omega_{yi-1/2} - \tilde{D}_{zyi,j,k} (1 - \omega_{zk+1/2}) \quad (4.14l)$$

$$A_{i,j,k}^{13} = -\tilde{D}_{xyi,j-1,k} \omega_{xj-1/2} - \tilde{D}_{zxi,j,k} (1 - \omega_{zk+1/2}) \quad (4.14m)$$

$$A_{i,j,k}^{14} = \tilde{D}_{xzi,j,k} (1 - \omega_{xj+1/2}) + \tilde{D}_{zxi,j,k} (1 - \omega_{zk+1/2}) \quad (4.14n)$$

$$A_{i,j,k}^{15} = \tilde{D}_{yzi,j,k} (1 - \omega_{yi+1/2}) + \tilde{D}_{zyi,j,k} (1 - \omega_{zk+1/2}) \quad (4.14o)$$

$$A_{i,j,k}^{16} = \tilde{D}_{xyi,j-1,k} \omega_{xj-1/2} + \tilde{D}_{yxi-1,j,k} \omega_{yi-1/2} \quad (4.14p)$$

$$A_{i,j,k}^{17} = -\tilde{D}_{xyi,j,k} (1 - \omega_{xj+1/2}) - \tilde{D}_{yxi-1,j,k} \omega_{yi-1/2} \quad (4.14q)$$

$$A_{i,j,k}^{18} = -\tilde{D}_{xyi,j-1,k} \omega_{xj-1/2} - \tilde{D}_{yxi,j,k} (1 - \omega_{yi+1/2}) \quad (4.14r)$$

$$A_{i,j,k}^{19} = \tilde{D}_{xyi,j,k} (1 - \omega_{xj+1/2}) + \tilde{D}_{yxi,j,k} (1 - \omega_{yi+1/2}) \quad (4.14s)$$

式中 $\tilde{D}$ 表示“弥散传导率”，定义为表观弥散系数 $\hat{D}$ 乘以计算弥散通量时的断面面积再除以计算浓度梯度时的距离。例如，通过截面 $(i, j+1/2, k)$ 的弥散通量的弥散传导率的定义如下

$$\tilde{D}_{xxi,j+1/2,k} = \hat{D}_{xxi,j+1/2,k} \frac{\Delta y_i \Delta z_k}{(0.5\Delta x_j + 0.5\Delta x_{j+1})} \quad (4.15a)$$

$$\tilde{D}_{xyi,j+1/2,k} = \hat{D}_{xyi,j+1/2,k} \frac{\Delta y_i \Delta z_k}{(0.5\Delta y_{i-1} + \Delta y_i + 0.5\Delta y_{i+1})} \quad (4.15b)$$

$$\tilde{D}_{xzi,j+1/2,k} = \hat{D}_{xzi,j+1/2,k} \frac{\Delta y_i \Delta z_k}{(0.5\Delta z_{k-1} + \Delta z_k + 0.5\Delta z_{k+1})} \quad (4.15c)$$

其它截面上的弥散传导率可用类似表达式定义。

表观弥散系数的分量由达西流量(单位流量)分量和弥散度，按照第 2 章给出的方程求得。例如， $\hat{D}_{xx}$ 、 $\hat{D}_{xy}$ 和 $\hat{D}_{xz}$ 的值在单元 (i, j, k) 和 $(i, j+1, k)$ 之间的截面沿 x 方向求得。达西流量的 x 分量可以由流动模型直接得到。 y 分量和 z 分量可以由截面上沿 y 和 z 方向的达西流量插值求得(图 4.6)。

$$q_{yi,j+1/2,k} = \frac{1}{2} \left[(q_{yi-1/2,j,k} + q_{yi+1/2,j,k}) \omega_{xj+1/2} + (q_{yi-1/2,j+1,k} + q_{yi+1/2,j+1,k}) (1 - \omega_{xj+1/2}) \right] \quad (4.16a)$$

$$q_{zi,j+1/2,k} = \frac{1}{2} \left[(q_{zi,j,k-1/2} + q_{zi,j,k+1/2}) \omega_{xj+1/2} + (q_{zi,j+1,k-1/2} + q_{zi,j+1,k+1/2}) (1 - \omega_{xj+1/2}) \right] \quad (4.16b)$$

$$q_{i,j+1/2,k} = \sqrt{q_{xi,j+1/2,k}^2 + q_{yi,j+1/2,k}^2 + q_{zi,j+1/2,k}^2} \quad (4.16c)$$

在单元紧邻的基础上将纵向和横向弥散度输入模型。单元截面上的值利用加权因子插值得到：

$$\alpha_{L_{i,j+1/2,k}} = \alpha_{L_{i,j,k}} \omega_{xj+1/2} + \alpha_{L_{i,j+1,k}} (1 - \omega_{xj+1/2}) \quad (4.16d)$$

$$\alpha_{TH_{i,j+1/2,k}} = \alpha_{TH_{i,j,k}} \omega_{xj+1/2} + \alpha_{TH_{i,j+1,k}} (1 - \omega_{xj+1/2}) \quad (4.16e)$$

$$\alpha_{TV_{i,j+1/2,k}} = \alpha_{TV_{i,j,k}} \omega_{xj+1/2} + \alpha_{TV_{i,j+1,k}} (1 - \omega_{xj+1/2}) \quad (4.16f)$$

单元截面 $(i, j+1/2, k)$ 处 $\hat{D}_{xx}$ 、 $\hat{D}_{xy}$ 和 $\hat{D}_{xz}$ 的值按下式计算

$$\begin{aligned} \hat{D}_{xxi,j+1/2,k} &= \alpha_{L_{i,j+1/2,k}} q_{xi,j+1/2,k}^2 / q_{i,j+1/2,k} + \alpha_{TH_{i,j+1/2,k}} q_{yi,j+1/2,k}^2 / q_{i,j+1/2,k} \\ &\quad + \alpha_{TV_{i,j+1/2,k}} q_{zi,j+1/2,k}^2 / q_{i,j+1/2,k} \end{aligned} \quad (4.16g)$$

$$\hat{D}_{xyi,j+1/2,k} = (\alpha_{L_{i,j+1/2,k}} - \alpha_{TH_{i,j+1/2,k}}) q_{xi,j+1/2,k} q_{yi,j+1/2,k} / q_{i,j+1/2,k} \quad (4.16h)$$

$$\hat{D}_{xz_{i,j+1/2,k}} = (\alpha_{L_{i,j+1/2,k}} - \alpha_{TV_{i,j+1/2,k}}) q_{x_{i,j+1/2,k}} q_{y_{i,j+1/2,k}} / q_{i,j+1/2,k} \quad (4.16i)$$

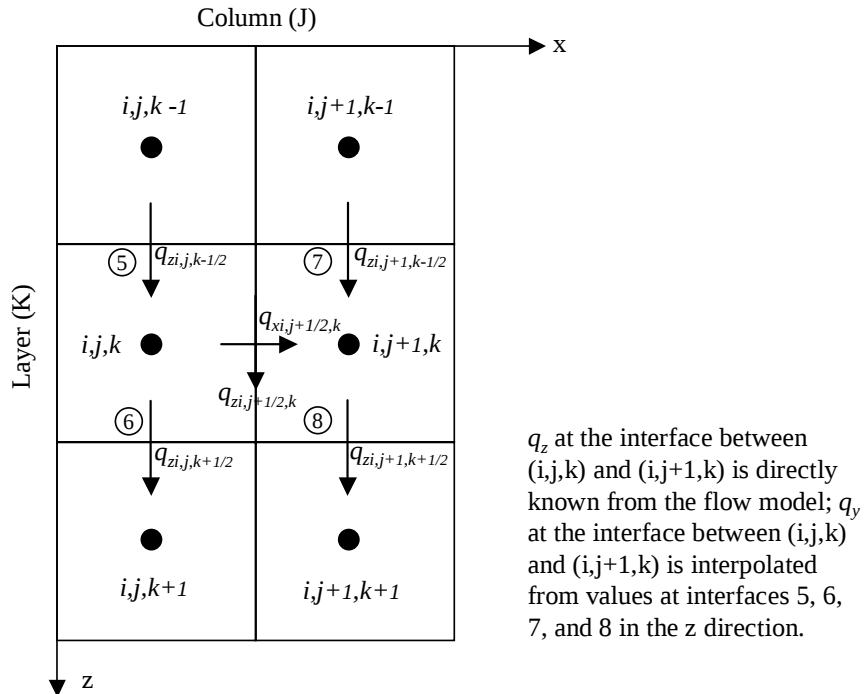
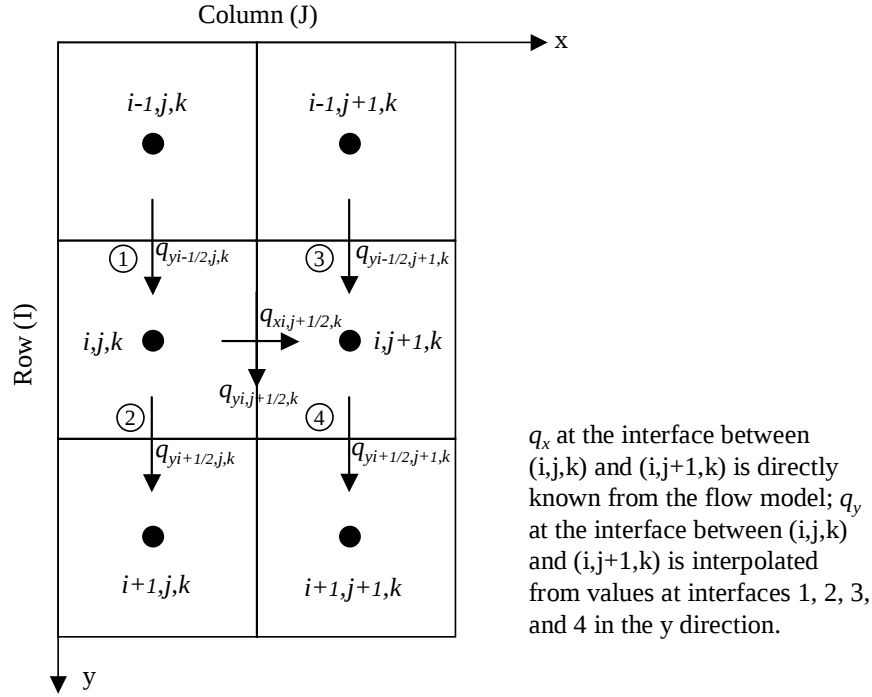


图 4.6 为计算弥散系数分量 D_{xx} , D_{xy} 和 D_{xz} , 单元截面上沿 x 方向速度分量评估

利用方程 4.16(a)到(i)所示同样的方法, 在单元截面沿 y 方向计算分量

$\hat{D}_{yx}, \hat{D}_{yy}$ 和 $\hat{D}_{yz}$ ，沿 z 方向计算分量 $\hat{D}_{zx}, \hat{D}_{zy}$ 和 $\hat{D}_{zz}$ 。

(4) 汇/源组分

汇/源作用对系数矩阵 A 和右边矢量的贡献如下所示：

$$A_{i,j,k}^1 = Q_{s(i,j,k)}^- - Q'_{s(i,j,k)} \quad (4.17)$$

$$b_{i,j,k} = -Q_{s(i,j,k)}^+ C_{s(i,j,k)} \quad (4.18)$$

式中

$Q_{s(i,j,k)}^+ = q_{s(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k$ ($q_{s(i,j,k)} > 0$)，表示液相源的体积流速；

$Q_{s(i,j,k)}^- = q_{s(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k$ ($q_{s(i,j,k)} < 0$) 表示液相汇的体积流速；

$Q'_{s(i,j,k)} = q'_{s(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k$ 表示非稳定地下水贮存量的变化率。

Q_s 和 Q'_s 都可从模型中得到。

(5) 化学反应组分

化学反应对系数矩阵 A 和右边矢量的贡献取决于吸附浓度是如何处理的。

对于线性平衡吸附， $\bar{C}_{i,j,k}^{n+1} = K_d C_{i,j,k}^{n+1}$ ，并可将此式合并入系数矩阵：

$$A_{i,j,k}^1 = -\lambda_{1(i,j,k)} \theta_{i,j,k} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k - \lambda_{2(i,j,k)} \rho_{b(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k K_d \quad (4.19)$$

对于非线性平衡吸附，吸附浓度近似等于前一次迭代计算的溶质浓度，这样可以将其集中到右边矢量中：

$$A_{i,j,k}^1 = -\lambda_{1(i,j,k)} \theta_{i,j,k} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k \quad (4.20)$$

$$b_{i,j,k} = \lambda_{2(i,j,k)} \rho_{b(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k \bar{C}_{i,j,k}^{n+1}$$

对于作为一阶动态质量转移方程模拟的非平衡吸附作用，如第 2 章所讨论的，需要另外一个方程来定义吸附浓度：

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = L(C) - \lambda_1 \theta C - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (4.21)$$

$$\rho_b \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \beta (C - \bar{C}/K_d) - \lambda_2 \rho_b \bar{C} \quad (4.22)$$

式中 $L(C)$ 是对所有非反应项的算子。

若只考虑化学反应项，则方程(4.21)和(4.22)在单元(i,j,k)的隐式有限差分近似表示为：

$$\theta_{i,j,k} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + \rho_{b(i,j,k)} \frac{\bar{C}_{i,j,k}^{n+1} - \bar{C}_{i,j,k}^n}{\Delta t} = -\lambda_1 \theta_{i,j,k} C_{i,j,k}^{n+1} - \lambda_2 \rho_{b(i,j,k)} \bar{C}_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.23)$$

$$\rho_{b(i,j,k)} \frac{\bar{C}_{i,j,k}^{n+1} - \bar{C}_{i,j,k}^n}{\Delta t} = \beta_{i,j,k} (C_{i,j,k}^{n+1} - \bar{C}_{i,j,k}^{n+1} / K_{d(i,j,k)}) - \lambda_2 \rho_{b(i,j,k)} \bar{C}_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.24)$$

联立上述两式在系数矩阵和右边矢量可得：

$$A_{i,j,k}^1 = -(\lambda_{1(i,j,k)} \theta_{i,j,k} + \beta_{i,j,k}) \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k + \beta_{i,j,k}^2 / K_{d(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k / (\rho_{b(i,j,k)} / \Delta t + \beta_{i,j,k} / K_{d(i,j,k)} + \lambda_{2(i,j,k)} \rho_{b(i,j,k)}) \quad (4.25)$$

$$b_{i,j,k} = -\beta_{i,j,k} / K_{d(i,j,k)} \Delta x_j \Delta y_i \Delta z_k \rho_{b(i,j,k)} \bar{C}_{i,j,k}^n / (\rho_{b(i,j,k)} + \beta_{i,j,k} \Delta t / K_{d(i,j,k)} + \lambda_{2(i,j,k)} \rho_{b(i,j,k)} \Delta t) \quad (4.26)$$

介于流动区域和不流动区域的双重区域的质量转移可以使用相似的方法求得。

(6) 矩阵方程的求解

对于模型中的每一个有效节点，都可以写出方程(4.8)，这样就可以得到一个线性方程组，矩阵形式为

$$AC^{n+1} = b \quad (4.27)$$

MT3DMS 软件中包括一个求解矩阵方程(4.27)的通用迭代法，此解法以广义共轭梯度法为基础。该解法由一个名为广义共轭梯度(GCG)的新程序包实现。下文略述了 GCG 法的一些基本特点，对 GCG 程序包所采用的迭代算法的详细描述见附录 A。

GCG 程序包采用的基本迭代算法有三种预处理选择：Jacobi，对称逐次超松弛(SSOR)和修正不完全乔列斯基(MIC)。MIC 预处理达到收敛的迭代次数比 Jacobi 和 SSOR 少，但要占用更多的内存。当系数矩阵 A 为非对称矩阵，正如使用全隐式有限差分法时，可以使用 Lanczos/ORTHOMIN 加速算法(Jea 和 Young, 1983; Young 和 Mai, 1988)对迭代算法进行加速。Lanczos/ORTHOMIN 加速算法的使用大大提高了迭代算法的收敛速度。当对流项使用三阶 TVD 法或者粒子追踪法求解时，系数矩阵 A 为对称矩阵，此时 Lanczos/ORTHOMIN 加速算法就是标准共轭梯度(CG)加速法，它与 MODFLOW 中的 PCG2 程序包所采用的加速算法是相似的。

GCG 法有两个迭代循环，一个内循环和一个外循环。在内循环过程中，当结果达到用户指定的收敛精度或者达到用户指定的最大循环次数时停止运算。在内循环过程中，矩阵 A 的所有系数和右边矢量均保持不变。一些系数根据浓度确定时，例如在非线性吸附作用条件下，这些系数必须在一定次数的迭代运算完成后被更新。这可以通过将外循环的最大迭代次数设置为比 1 大的数来实现。当新的外部迭代开始时，利用最近计算的浓度将这些系数更新。当在一次外部循环中只进行了一次内迭代就达到收敛时，所得到的解可以认为是全局收敛的，直接进行下一个运移步长的模拟。

方程(4.8)表明，当弥散张量的所有截项都在系数矩阵中时，对于三维问题，系数矩阵 A 是只有 19 个非零对角元素的稀疏矩阵。GCG 程序包中有一选项可以将所有的弥散截项移到右边矢量中，也就是说，与弥散截项相关的浓度被赋以上一迭代过程计算出来的值。这样，这些浓度变为已知量，可以转移到右边矢量中。利用该选项，对于三维问题，系数矩阵只包括 9 个非零对角元素。集中的弥散截项的使用可以减少 GCG 方法近三分之二的内存，并且收敛速度加快，对计算精度的影响也是很小的。外部迭代循环的次数可设置为大于 1，这一点虽然不是必

需的，但是这样做后，当结果收敛时，集中的弥散截项可以得到更新。

4.3.2 显式有限差分公式

在原来的 MT3D 软件中，使用显式有限差分求解弥散项、源汇项和化学反应项，而不是使用迭代法。使用粒子追踪法或者显式有限差分法求解对流项。MT3DMS 中保留了显式有限差分法作为一种可选方法。显式有限差分法可表示为

$$R_{i,j,k} \theta_{i,j,k} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} = L_{ADV}(C^n) + L_{DSP}(C^n) + L_{SSM}(C^n) + L_{RCT}(C^n) \quad (4.28)$$

式中 L_{ADV} , L_{DSP} , L_{SSM} 和 L_{RCT} 分别表示对流项、弥散项、源汇项和化学反应项的有限差分算子。因为用时刻 n 的已知浓度估计有限差分算子，所以在每一个步长内，单元(i,j,k)在时刻 $n+1$ 的浓度可以直接计算求得：

$$C_{i,j,k}^{n+1} = C_{i,j,k}^n + \frac{\Delta t}{R_{i,j,k} \theta_{i,j,k}} [L_{ADV}(C^n) + L_{DSP}(C^n) + L_{SSM}(C^n) + L_{RCT}(C^n)] \quad (4.29)$$

显式差分法的解受多种对运移时间步长的稳定性约束限制，不同运移组分的稳定限制条件如下：

a. 对流

$$\Delta t \leq \frac{R}{|v_x|/\Delta x + |v_y|/\Delta y + |v_z|/\Delta z} \quad (4.30a)$$

b. 弥散

$$\Delta t \leq \frac{0.5R}{\left(\frac{D_{xx}}{\Delta x^2} + \frac{D_{yy}}{\Delta y^2} + \frac{D_{zz}}{\Delta z^2} \right)} \quad (4.30b)$$

c. 汇/源

$$\Delta t \leq \frac{R\theta}{|q_s|} \quad (4.30c)$$

d. 化学反应

$$\Delta t \leq \frac{1}{|\lambda_1| + |\lambda_2|} \quad (4.30d)$$

当使用显式差分法时，对每一个有效单元都计算各类运移组分的稳定性约束，其最小值作为求解对应运移组分的最大允许步长。各类运移组分的最大允许步长作为模拟过程的实际运移步长。

显式法简单，而且不像迭代法那样占用大量内存。对某些对流为主的运移问题，显式法是很有效的解法，因为这时运移步长由精度要求限制，而不是稳定性约束。尽管如此，对某些运移问题，例如空间网格规则、弥散系数大和/或强汇/源情况下，稳定性约束会导致非常小的运移步长。在这些情况下，我们就可以使用上文提到的 GCG 法来提高运算效率。此外，对于非线性吸附问题，使用显式

法要求步长太小，此时隐式法会更有效。

4.4 三阶 TVD 法

4.4.1 一般方程

第 3 章中已经介绍了三阶 TVD 法(ULTIMATE)的基本原理，本节介绍 ULTIMATE 法的三维一般形式。

在 ULTIMATE 法中，对流项的求解独立于使用前面所讨论的标准隐式、显式有限差分法求解的其它各组分。如果使用隐式有限差分法求解非对流组分，那么使用 ULTIMATE 法求解对流组分后，对流引起的浓度变化就集中到右边矢量 b 中，对流系数矩阵的贡献为 0。另一方面，如果使用显式有限差分法求解非对流组分，使用 ULTIMATE 法求解得到的对流组分引起的浓度变化将加到求解单元的总浓度变化上。

仅考虑对流作用时的三维运移方程为

$$\theta \frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}(q_x C) - \frac{\partial}{\partial y}(q_y C) - \frac{\partial}{\partial z}(q_z C) \quad (4.31)$$

采用显式有限差分法，对于单元(i,j,k)，方程(4.31)可写成（见图 4.7）：

$$\begin{aligned} \theta_{i,j,k} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} = & -\frac{q_{xi,j+1/2,k} C_{i,j+1/2,k}^n - q_{xi,j-1/2,k} C_{i,j-1/2,k}^n}{\Delta x_j} \\ & -\frac{q_{yi+1/2,j,k} C_{i+1/2,j,k}^n - q_{yi-1/2,j,k} C_{i-1/2,j,k}^n}{\Delta y_i} \\ & -\frac{q_{zi,j,k+1/2} C_{i,j,k+1/2}^n - q_{zi,j,k-1/2} C_{i,j,k-1/2}^n}{\Delta z_k} \end{aligned} \quad (4.32)$$

整理后得到时刻 $n+1$ 单元(i,j,k)处的解：

$$\begin{aligned} C_{i,j,k}^{n+1} = & C_{i,j,k}^n - (\gamma)_{right} C_{i,j+1/2,k}^n + (\gamma)_{left} C_{i,j-1/2,k}^n \\ & - (\gamma)_{front} C_{i+1/2,j,k}^n + (\gamma)_{back} C_{i-1/2,j,k}^n \\ & - (\gamma)_{bottom} C_{i,j,k+1/2}^n + (\gamma)_{top} C_{i,j,k-1/2}^n \end{aligned} \quad (4.33)$$

式中，Courant 数 γ 定义为

$$\begin{aligned}
(\gamma)_{left} &= \frac{q_{xi,j-1/2,k} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta x_j} = \frac{v_{xi,j-1/2,k} \Delta t}{\Delta x_j} \\
(\gamma)_{right} &= \frac{q_{xi,j+1/2,k} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta x_j} = \frac{v_{xi,j+1/2,k} \Delta t}{\Delta x_j} \\
(\gamma)_{front} &= \frac{q_{yi+1/2,j,k} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta y_i} = \frac{v_{yi+1/2,j,k} \Delta t}{\Delta y_i} \\
(\gamma)_{back} &= \frac{q_{yi-1/2,j,k} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta y_i} = \frac{v_{yi-1/2,j,k} \Delta t}{\Delta y_i} \\
(\gamma)_{top} &= \frac{q_{zi,j,k-1/2} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta z_k} = \frac{v_{zi,j,k-1/2} \Delta t}{\Delta z_k} \\
(\gamma)_{bottom} &= \frac{q_{zi,j,k+1/2} \Delta t}{\theta_{i,j,k} \Delta z_k} = \frac{v_{zi,j,k+1/2} \Delta t}{\Delta z_k}
\end{aligned} \tag{4.34}$$

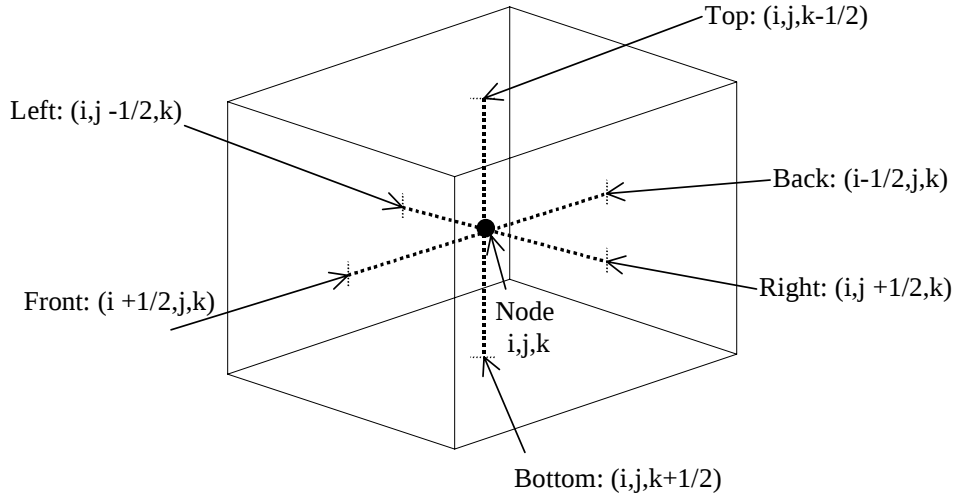


图 4.7 单元(i,j,k)周围 6 个截面图解

利用第 3 章所讨论的节点浓度的三次多项式插值，左截面上的浓度值为

$$\begin{aligned}
C_{i,j-1/2,k}^n &= \bar{C}_{i,j-1/2,k} - \frac{d_x}{2} f_x - \frac{d_y}{2} f_y - \frac{d_z}{2} f_z \\
&\quad - \frac{(\overline{\Delta x_j^2} - d_x^2)}{6} f_{xx} + \left(\frac{d_y^2}{6} - \frac{\overline{\Delta y_i} d_y}{4} \right) f_{yy} + \left(\frac{d_z^2}{6} - \frac{\overline{\Delta z_k} d_z}{4} \right) f_{zz} \\
&\quad + \left(\frac{d_x d_y}{3} - \frac{\overline{\Delta x_j} d_y}{4} \right) f_{xy} + \left(\frac{d_x d_z}{3} - \frac{\overline{\Delta x_j} d_z}{4} \right) f_{xz} + \frac{d_y d_z}{3} f_{yz}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

式中 d_x , d_y , 和 d_z (量纲, L) 在左截面 $(i,j-1/2,k)$ 上定义为

$$\begin{aligned}
d_x &= v_{xi,j-1/2,k} \Delta t \\
d_y &= v_{yi,j-1/2,k} \Delta t \\
d_z &= v_{zi,j-1/2,k} \Delta t
\end{aligned} \tag{4.36}$$

方程(4.35)中左截面的浓度值共有 10 项组成：1 个平均项，3 个一阶导数项和 6 个混合二阶导数项，这 10 项组成了浓度的三阶近似值。方程(4.35)的右边第 1 项是一个加权平均值：

$$\overline{C}_{i,j-1/2,k} = \omega C_{i,j-1,k}^n + (1-\omega)C_{i,j,k}^n \quad (4.37)$$

式中，加权因子 ω 为

$$\omega = \frac{\Delta x_j}{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j} \quad (4.38)$$

左截面的法线梯度为

$$f_x = \frac{C_{i,j,k}^n - C_{i,j-1,k}^n}{\overline{\Delta x_j}} \quad (4.39)$$

式中 $\overline{\Delta x_j}$ 表示单元 $(i, j-1, k)$ 和 (i, j, k) 的中心距离：

$$\overline{\Delta x_j} = \frac{\Delta x_{j-1} + \Delta x_j}{2} \quad (4.40)$$

y 方向的迎风梯度取决于速度的方向：

$$\begin{aligned} f_y &= (C_{i,j-1,k}^n - C_{i-1,j-1,k}^n) / \overline{\Delta y_i} & v_{xi,j-1/2,k} > 0, v_{yi,j-1/2,k} > 0 \\ &= (C_{i+1,j-1,k}^n - C_{i,j-1,k}^n) / \overline{\Delta y_{i+1}} & v_{xi,j-1/2,k} > 0, v_{yi,j-1/2,k} < 0 \\ &= (C_{i,j,k}^n - C_{i-1,j,k}^n) / \overline{\Delta y_i} & v_{xi,j-1/2,k} < 0, v_{yi,j-1/2,k} > 0 \\ &= (C_{i+1,j,k}^n - C_{i,j,k}^n) / \overline{\Delta y_{i+1}} & v_{xi,j-1/2,k} < 0, v_{yi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.41)$$

式中

$$\overline{\Delta y_i} = \frac{\Delta y_{i-1} + \Delta y_i}{2} \quad (4.42)$$

同理， z 方向的迎风梯度为

$$\begin{aligned} f_z &= (C_{i,j-1,k}^n - C_{i,j-1,k-1}^n) / \overline{\Delta z_k} & v_{xi,j-1/2,k} > 0, v_{zxi,j-1/2,k} > 0 \\ &= (C_{i,j-1,k+1}^n - C_{i,j-1,k}^n) / \overline{\Delta z_{k+1}} & v_{x_{xi,j-1/2,k}} > 0, v_{z_{xi,j-1/2,k}} < 0 \\ &= (C_{i,j,k}^n - C_{i,j,k-1}^n) / \overline{\Delta z_k} & v_{x_{xi,j-1/2,k}} < 0, v_{z_{xi,j-1/2,k}} > 0 \\ &= (C_{i,j,k+1}^n - C_{i,j,k}^n) / \overline{\Delta z_{k+1}} & v_{x_{xi,j-1/2,k}} < 0, v_{z_{xi,j-1/2,k}} < 0 \end{aligned} \quad (4.43)$$

式中

$$\overline{\Delta z_k} = \frac{\Delta z_{k-1} + \Delta z_k}{2} \quad (4.44)$$

基于一阶导数可计算各个二阶导数。沿 x 方向的迎风二阶导数(曲率)的计算需要三个单元：两个相邻单元和一个上游单元。它的一阶导数形式为

$$\begin{aligned} f_{xx} &= [(f_x)_{i,j-1/2,k} - (f_x)_{i,j-1/2,k-1}] / \Delta x_{j-1} & v_{xi,j-1/2,k} > 0 \\ &= [(f_x)_{i,j+1/2,k} - (f_x)_{i,j-1/2,k}] / \Delta x_j & v_{xi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.45)$$

沿 y 和 z 方向的曲率为

$$\begin{aligned} f_{yy} &= \left[(f_y)_{i-1/2,j,k} - (f_y)_{i-1/2,j,k} \right] / \Delta y_{i-1} & v_{yi,j-1/2,k} > 0 \\ &= \left[(f_y)_{i+1/2,j,k} - (f_y)_{i-1/2,j,k} \right] / \Delta y_i & v_{yi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\begin{aligned} f_{zz} &= \left[(f_z)_{i,j,k-1/2} - (f_z)_{i,j,k-1/2} \right] / \Delta z_{k-1} & v_{zi,j-1/2,k} > 0 \\ &= \left[(f_z)_{i,j,k+1/2} - (f_z)_{i,j,k-1/2} \right] / \Delta z_k & v_{zi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.47)$$

最终可以得到三个迎风混合二阶导数(扭转项), 沿 x 轴的两项为

$$\begin{aligned} f_{xy} &= \left[(f_y)_{i-1/2,j,k} - (f_y)_{i-1/2,j-1,k} \right] / \overline{\Delta x_j} & v_{yi,j-1/2,k} > 0 \\ &= \left[(f_y)_{i+1/2,j,k} - (f_y)_{i+1/2,j-1,k} \right] / \overline{\Delta x_j} & v_{yi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.48)$$

$$\begin{aligned} f_{xz} &= \left[(f_z)_{i,j,k-1/2} - (f_z)_{i,j-1,k-1/2} \right] / \overline{\Delta x_j} & v_{zi,j-1/2,k} > 0 \\ &= \left[(f_z)_{i,j,k+1/2} - (f_z)_{i,j-1,k+1/2} \right] / \overline{\Delta x_j} & v_{zi,j-1/2,k} < 0 \end{aligned} \quad (4.49)$$

垂直于 x 轴的一项为

$$f_{yz} = \left[(f_y)_{i,j-1/2,k+1/2} - (f_y)_{i,j-1/2,k-1/2} \right] / \overline{\Delta z_k} \quad (4.50)$$

每一个扭转项的计算需要四个单元。同理, 可估计右、后、前、顶和底截面上的值。

在使用上述方程求出 6 个截面上的浓度值以后, 如果必要的话, 利用第 3 章论述的通用通量限制器来修正这些值, 以限制高阶插值引起的假波动。然后, 方程(4.33)使用修正后的截面浓度值计算节点(i,j,k)在时刻 n+1 仅由对流引起的浓度。

4.4.2 质量守恒和稳定性约束

要确保质量守恒需假定截面上的值连续。也就是说单元在左截面的浓度值等于相邻单元的右截面上的值。因此, 每个单元只需计算和存储三个截面上的值, 另外三个截面上的值可由前面的计算获得。

当模型中同一层中单元厚度在空间上有较大的变化时, 就会产生质量守恒误差, 这一点必须引起注意。在这种情况下, 必须修正 Courant 数。为了强调单元厚度的空间变化, 用 $\Delta z_{i,j,k}$ 代替 Δz_k , 左、上两截面的 Courant 数修正为

$$\begin{aligned} (\gamma)_{left} &= \frac{\Delta z_{i,j-1,k}}{\Delta z_{i,j,k}} \frac{v_{xi,j-1/2,k} \Delta t}{\Delta x_j} \\ (\gamma)_{front} &= \frac{\Delta z_{i-1,j,k}}{\Delta z_{i,j,k}} \frac{v_{yi-1/2,j,k} \Delta t}{\Delta y_i} \end{aligned} \quad (4.51)$$

方程(4.34)中其它 4 个 Courant 数保持不变。

MT3DMS 中使用的 ULTIMATE 法为显式的, 因此, 运移步长受稳定性约束限制, 限制条件为

$$\Delta t \leq \frac{R}{|v_x|/\Delta x + |v_y|/\Delta y + |v_z|/\Delta z} \quad (4.52)$$

将方程(4.52)应用于模型中的每一个有效单元, Δt 的最小值作为 ULTIMATE

法的最大允许步长。

4.5 欧拉—拉格朗日法

4.5.1 速度插值

MOC 和 MMOC 均使用粒子追踪技术近似表示运移过程中的对流组分。因为粒子追踪法需要由节点计算出的水头值来估算任意点的速度，所以粒子追踪计算中需要利用速度插值法来计算任意点的速度。

在 MT3DMS 中使用简单分段线性插值法(Pollock, 1988; Zheng, 1988)。此法假定在一个有限差分单元中，速度分量在其方向上线性变化。因此，单元(i,j,k)中任意点的达西通量的 x 分量可以用同方向上的截面通量表示(图 4.8)。

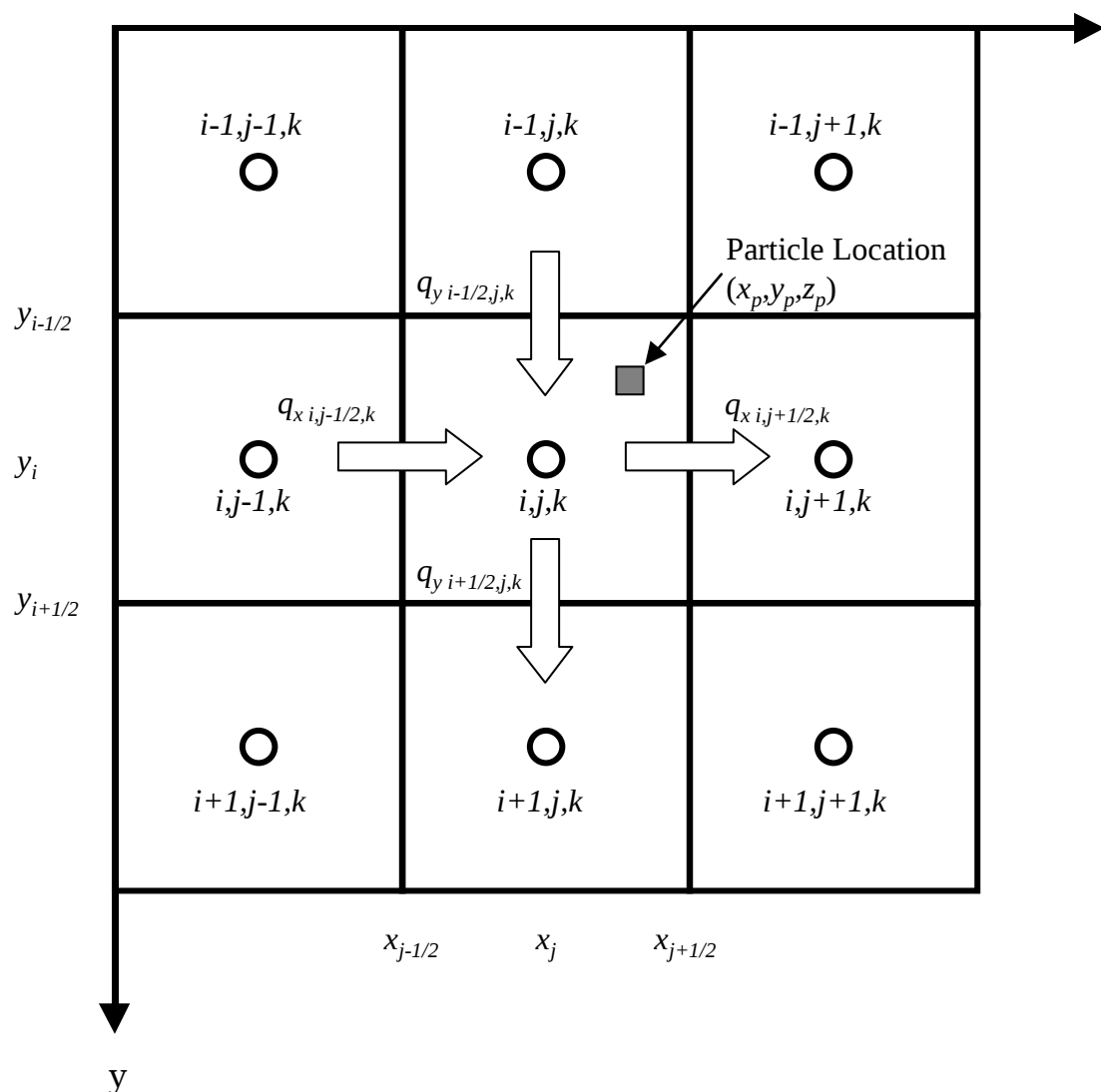


图 4.8 粒子追踪所用速度插值

$$q_x(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_x)q_{i,j-1/2,k} + \alpha_x q_{i,j+1/2,k} \quad (4.53)$$

式中

$$q_{i,j-1/2,k} = -K_{i,j-1/2,k} (h_{i,j,k} - h_{i,j-1/2,k}) / (x_j - x_{j-1})$$

表示通过单元(i, j-1, k)和(i, j, k)间截面的通量或单位流量, $K_{i,j-1/2,k}$ 表示两单元渗透系数的调和平均值。在流动模型中计算截面通量并直接用于运移模型;

$q_{i,j+1/2,k} = -K_{i,j+1/2,k} (h_{i,j+1/2,k} - h_{i,j,k}) / (x_{j+1} - x_j)$ 表示单元(i,j,k)和(i, j+1, k)间的截面通量;

$$\alpha_x = (x_p - x_{j-1/2}) / \Delta x_j, \text{ 为 } x \text{ 分量的线性插值因子};$$

x_p, y_p, z_p 为粒子位置的直角坐标;

$x_{j\pm 1/2}$ 为单元(i, j, k)左、右截面的 x 坐标;

x_j 为节点(i, j, k)的 x 坐标;

Δx_j 为单元(i, j, k)沿 x 轴的单元宽度。

线性或者孔隙水流速的 x 分量 v_x 为

$$v_x(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_x(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.54)$$

式中 $\theta_{i,j,k}$ 为单元(i,j,k)的孔隙度。

同理, 可得速度的 y、z 分量:

$$q_y(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_y)q_{i-1/2,j,k} + \alpha_y q_{i+1/2,j,k} \quad (4.55)$$

$$v_y(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_y(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.56)$$

式中, $\alpha_y = \frac{y_p - y_{i-1/2}}{\Delta y_i}$ 是 y 分量的线性插值因子。

$$q_z(x_p, y_p, z_p) = (1 - \alpha_z)q_{i,j,k-1/2} + \alpha_z q_{i,j,k+1/2} \quad (4.57)$$

$$v_z(x_p, y_p, z_p) = \frac{q_z(x_p, y_p, z_p)}{\theta_{i,j,k}} \quad (4.58)$$

式中, $\alpha_z = (z_p - z_{k-1/2}) / \Delta z_k$ 是 z 分量的线性插值因子。

使用这种方法计算得到的速度场与三维流动方程的块体中心有限插分公式得到的速度场是相同的，因此，此法保证了每个有限差分块体的局部质量守恒。同时，也防止了由于非均质介质渗透系数的不同引起的速度分布的不连续。

值得注意的是，这种速度插值与早期的 MOC 模型(Garder et. al., 1964; Konikow and Bredehoeft, 1978)中的多线性方法不同。三维流场的多线性方法假设在三个方向上速度分量线性变化，因此，每个分量上的速度是连续的。Goode (1990)发现在均匀介质中，多线性方法计算得到的结果更好，但是，多线性方法与块体中心有限差分法描述的单元紧邻质量守恒并不相符。在非均质介质中，多线性法也不能象分段线性法那样防止速度场分布的不连续性。为此以及分段线性法的高计算效率，MT3DMS 模型采用该方法进行速度差值。

4.5.2 粒子追踪法

在速度场已知的情况下，可以使用数值追踪法模拟粒子的运动来近似表示污染物锋面的对流。通常，粒子追踪法使用一阶欧拉法(Konikow 和 Bredehoeft, 1978; Goode 和 Konikow, 1989):

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \frac{\Delta t}{R} v_x(x^n, y^n, z^n) \\ y^{n+1} = y^n + \frac{\Delta t}{R} v_y(x^n, y^n, z^n) \\ z^{n+1} = z^n + \frac{\Delta t}{R} v_z(x^n, y^n, z^n) \end{cases} \quad (4.59)$$

式中

$x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1}$ 表示新时刻 $n+1$ 的粒子坐标； x^n, y^n, z^n 表示时刻 n 时的粒子坐标； v_x, v_y, v_z 表示 (x^n, y^n, z^n) 点处计算的线性速度； R 为阻滞因子； Δt 表示运移步长的大小，通常用 Courant 数 γ 表示：

$$|\Delta t| \leq \gamma \text{MIN} \left(\frac{R\Delta x}{v_x}, \frac{R\Delta y}{v_y}, \frac{R\Delta z}{v_z} \right) \quad (4.60)$$

式中 Courant 数表示在一个运移步长内粒子在任何一个方向运动经过的单元数。当 Δt 为正时，粒子向前运动，为负时，向后运动。

在粒子追踪计算中，每一个运移步长内，所有粒子的运移步长大小是相同的。位于速度相对一致的区域粒子，使用一阶欧拉法就可以保证精度。但是，对于位于水流汇聚或发散强烈区域的粒子，例如源或汇区附近，除非 Δt 很小，否则一阶欧拉法保证不了精度。在这种情况下，可使用高阶方法，例如四阶 Runge-Kutta 法。四阶 Runge-Kutta 法的基本思想是，在一个追踪步长内计算四次速度：初始点一次，两个试算中点两次和试算终点一次(图 4.9)。根据四次计算的速度得到一个加权速度，使粒子运动到新的位置 $(x^{n+1}, y^{n+1}, z^{n+1})$ ，计算过程如下(Press et al., 1986; Zheng, 1989):

$$\begin{cases} x^{n+1} = x^n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \\ y^{n+1} = y^n + \frac{1}{6}(l_1 + 2l_2 + 2l_3 + l_4) \\ z^{n+1} = z^n + \frac{1}{6}(m_1 + 2m_2 + 2m_3 + m_4) \end{cases} \quad (4.61)$$

式中

$$\begin{aligned} k_1 &= \Delta t v_x(x^n, y^n, z^n, t^n) \\ k_2 &= \Delta t v_x(x^n + k_1/2, y^n + l_1/2, z^n + m_1/2, t^n + \Delta t/2) \\ k_3 &= \Delta t v_x(x^n + k_2/2, y^n + l_2/2, z^n + m_2/2, t^n + \Delta t/2) \\ k_4 &= \Delta t v_x(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} l_1 &= \Delta t v_y(x^n, y^n, z^n, t^n) \\ l_2 &= \Delta t v_y(x^n + k_1/2, y^n + l_1/2, z^n + m_1/2, t^n + \Delta t/2) \\ l_3 &= \Delta t v_y(x^n + k_2/2, y^n + l_2/2, z^n + m_2/2, t^n + \Delta t/2) \\ l_4 &= \Delta t v_y(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} m_1 &= \Delta t v_z(x^n, y^n, z^n, t^n) \\ m_2 &= \Delta t v_z(x^n + k_1/2, y^n + l_1/2, z^n + m_1/2, t^n + \Delta t/2) \\ m_3 &= \Delta t v_z(x^n + k_2/2, y^n + l_2/2, z^n + m_2/2, t^n + \Delta t/2) \\ m_4 &= \Delta t v_z(x^n + k_3, y^n + l_3, z^n + m_3, t^n + \Delta t) \end{aligned}$$

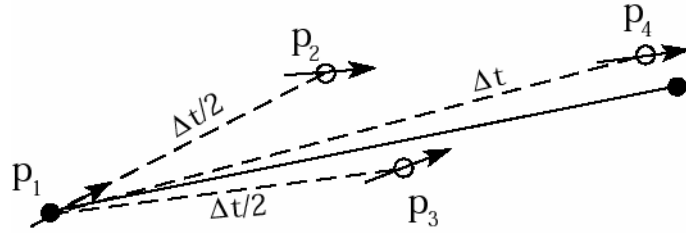


图 4.9 四阶 Runge-Kutta 法

与欧拉法相比，四阶 Runge-Kutta 法更精确，而且在四阶 Runge-Kutta 法允许使用较大的追踪步长。尽管如此，四阶 Runge-Kutta 法的运算消耗比欧拉法要大的多。当进行三维模拟，所用粒子较多时，四阶 Runge-Kutta 法没有欧拉法的效果好。针对这些原因，MT3DMS 模型提供了三种选择：一阶欧拉法、四阶 Runge-Kutta 法和两者的混合。当合理使用这些选项时，在有限差分网格中无需使用很小的步长就可以达到足够的精度。

4.5.3 MOC 法

MOC 法的第一步就是在有限差分网格中生成代表粒子。MT3DMS 运移模型使用动态方法来控制运动粒子的分布，而不是在每一个网格布置相同数目的粒子。根据所谓的“相对单元浓度梯度”或 DCCELL，每一个单元中分布的粒子数或大或小，DCCELL 的定义为

$$DCCELL_{i,j,k} = \frac{CMAX_{i,j,k} - CMIN_{i,j,k}}{CMAX - CMIN} \quad (4.62)$$

式中

$$CMAX_{i,j,k} = \max_{kk=k-1}^{k+1} \left(\max_{jj=j-1}^{j+1} \left(\max_{ii=i-1}^{i+1} (C_{ii,jj,kk}) \right) \right) \text{ 表示单元}(i, j, k)\text{周围相邻单元的最大浓}$$

度；

$$CMIN_{i,j,k} = \min_{kk=k-1}^{k+1} \left(\min_{jj=j-1}^{j+1} \left(\min_{ii=i-1}^{i+1} (C_{ii,jj,kk}) \right) \right) \text{ 表示单元}(i, j, k)\text{周围相邻单元的最小浓}$$

度；

$CMAX$ 表示所有网格中的最大浓度；

$CMIN$ 表示所有网格中的最小浓度。

使用动态法时，用户指定标准 DCEPS，DCEPS 是一个接近于 0 数；相对浓度梯度比 DCEPS 大的单元中放置较多的粒子，NPH；相对浓度梯度比 DCEPS 小的单元中放置较少的粒子，NPL，即

$$\begin{cases} NP_{i,j,k} = NPH, & \text{if } DCCELL_{i,j,k} > DCEPS; \\ NP_{i,j,k} = NPL, & \text{if } DCCELL_{i,j,k} \leq DCEPS. \end{cases} \quad (4.63)$$

式中， $NP_{i,j,k}$ 表示单元(i, j, k)中粒子的数目。

最初，如果单元的浓度梯度为 0 或很小(即单元周围的浓度场相对稳定)，单元中粒子的数目是 NPL，NPL 可能为 0 或者某个较小的整数。这样做是妥当的，因为该单元和相邻单元间由对流引起的浓度变化不明显。如果单元的浓度梯度很大，这表示该单元周围的浓度场变化很大，则这个单元中粒子数是 NPH。

当粒子离开源或在汇积聚时，必须在源增加新的粒子或者在汇减少粒子。在既不是源又不是汇的单元，随着浓度梯度随时间的变化，也必须增加或减少粒子数。这些由动态增加一减少程序完成，在程序中，指定每个单元中允许的最大和最小粒子数，分别用 NPMIN 和 NPMAX 表示。当任一单元(源或非源)中的粒子的数比指定的最小值 NPMIN 小时，将 NPL 或 NPH 个粒子添加到单元中，添加的粒子并不影响已有的粒子。另一方面，当任一单元(汇或非汇)中的粒子数超过指定的最大数目 NPMAX 时，将所有的粒子从单元中去掉，换成 NPH 个粒子来保证质量守恒。为了节省计算机存储空间，删除粒子所占用的内存空间被新加入的粒子重新使用。

图 4.10 描述了在均匀流场中，模拟二维连续点源溶质运移时，动态粒子分布法与普通法的差别。普通法在整个模拟区中添加或保持几乎相同的粒子分布，

而动态法则动态调整粒子的分布，以适应浓度场的变化。许多关于污染物运移模型的实际问题，污染羽状体可能只占据有限差分网格的很小一部分，而且只在陡锋处浓度变化很快。在这些情况下，粒子的总数目就比普通分布方法要少得多，因此极大提高了 MOC 模型的效率而损失很小的精度。

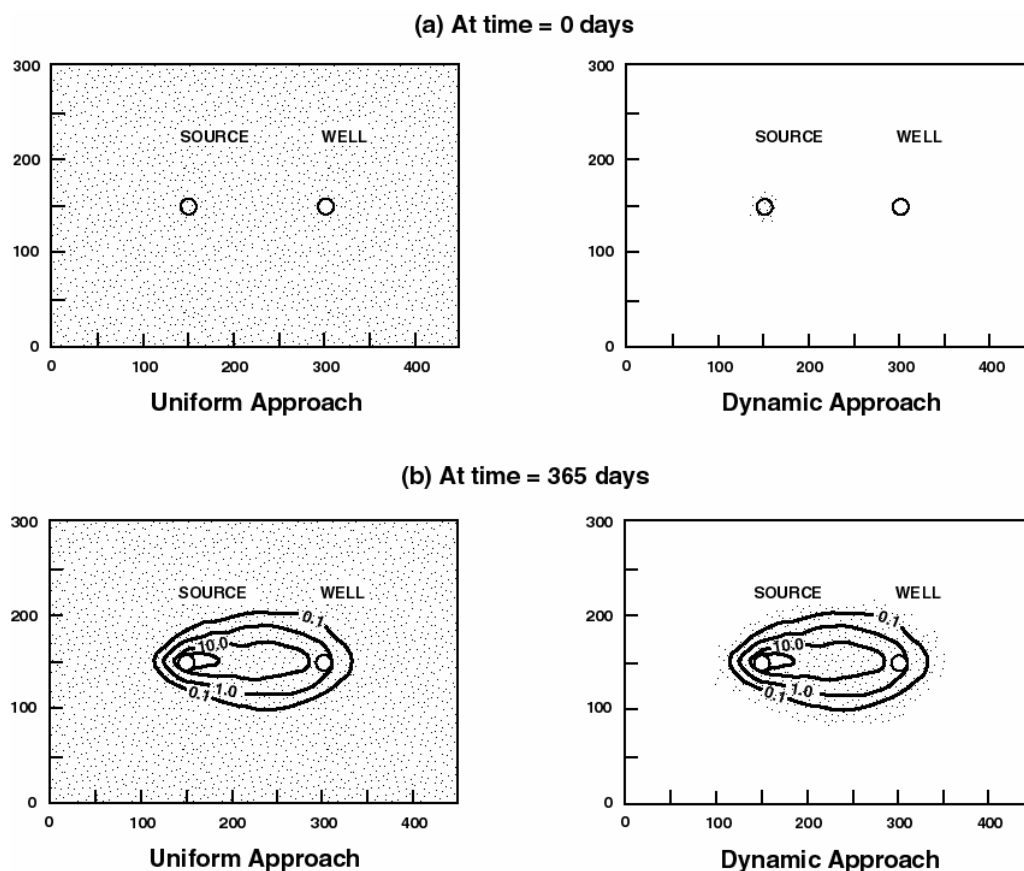


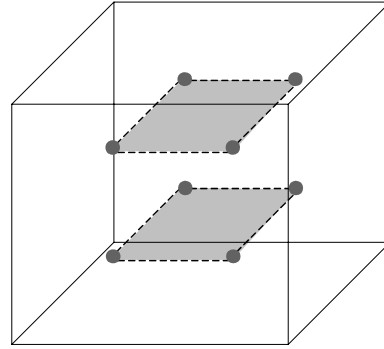
图 4.10 控制运动粒子分布的普通和动态方法比较

粒子的分布模式是确定的还是随机的可通过用户指定的选项控制 (图 4.11)。如果选择确定模式，那么用户不但要指定每个单元中粒子的数目，而且还要指定平面上粒子分布模式和有粒子分布的垂向上平面的数目。如果选择了随机模式，用户只需指定每个单元中所分布的粒子数目。然后程序调用随机数发生器，将指定数目的粒子随机地分布到每个单元内(选项的选择在第 6 章——输入说明中讨论)。如果流场相对均匀的话，确定模式的效果好一些。另一方面，如果在高度非均质的介质中有许多汇或源，流场很不均匀，则随机模式比确定模式更能反映流场的本质。

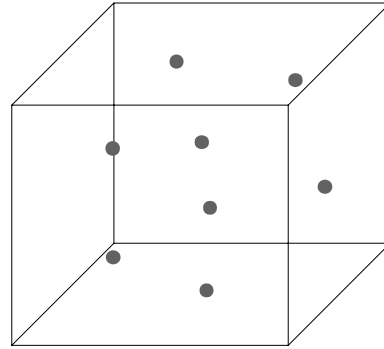
每个粒子都有一些属性，即 x , y , z 坐标和浓度。粒子的初始浓度等于粒子初始化所在的单元的浓度。每一运移步长开始后，利用上文论述的粒子追踪技术，所有的粒子都在 Δt 时间增量内运动。在运移步长结束时，运动粒子的 x , y , z 坐标值被更新以反映它们的新位置。运移步长结束时，仅由对流作用引起的有限差分单元的平均浓度 $C_{i,j,k}^{n*}$ ，可以由单元中所有粒子的浓度求得。如果使用算术平均值求解，则单元的平均浓度为

$$C_{i,j,k}^{n*} = \frac{1}{NP_{i,j,k}} \sum_{l=1}^{NP_{i,j,k}} C_l^n, \text{ if } NP_{i,j,k} > 0 \quad (4.64)$$

如果网格不规则，那么使用郑 (1993)的基于体积的平均算法：



(a) Example of initial particle placement with fixed pattern (8 particles are placed on 2 vertical planes).



(b) Example of initial particle placement with random pattern (8 particles are placed randomly in the cell).

图 4.11 运动粒子地初始分布

$$C_{i,j,k}^{n*} = \sum_{l=1}^{NP_{i,j,k}} V_l C_l^n / \sum_{l=1}^{NP_{i,j,k}} V_l \quad \text{if } NP_{i,j,k} > 0 \quad (4.65)$$

式中 V_l 是第 l 号粒子产生的单元的体积。如果单元中粒子的数目为 0，那么经过粒子追踪后单元的平均浓度等于上一个时段的单元浓度，因为这种单元的浓度随时间的变化可以忽略不计或者由外源控制：

$$C_{i,j,k}^{n*} = C_{i,j,k}^n, \text{ if } NP_{i,j,k} = 0 \quad (4.66)$$

进行上文所述的粒子追踪和平均运算时，必须带有单元编号。如果有限差分网格是规则的，则可直接用粒子的坐标 (x_p, y_p, z_p) 表示单元的编号 (JP, IP, KP) ，依据公式为：

$$\begin{cases} JP = INT(x_p / \Delta x) + 1 \\ IP = INT(y_p / \Delta y) + 1 \\ KP = INT(z_p / \Delta z) + 1 \end{cases} \quad (4.67)$$

式中, $INT(x)$ 是 FORTRAN 函数, 其值等于 x 的整数部分; $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ 是 x 、 y 和 z 方向的相同的网格间距。如果有限差分网格格式不规则, 粒子在任一方向(例如 x) 的坐标必须与同一方向的单元截面的坐标相比较, 以确定粒子位于哪一个单元。

当每个单元的 $C_{i,j,k}^n$ 项求出以后, 可以通过它使用上述的有限差分法求解由于弥散、汇/源和/或化学反应 $(\Delta C_{i,j,k}^{n+1})$ 引起的浓度变化。然后, 所有有效粒子的浓度加上离子所在单元的浓度变化 $(\Delta C_{i,j,k}^{n+1})$ 来更新。因此, 对于单元 (i, j, k) 中的运动粒子:

$$C_l^{n+1} = C_l^n + \Delta C_{i,j,k}^{n+1} \quad (4.68)$$

式中 C_l^{n+1} 表示位于单元 (i, j, k) 的第 l 号粒子在新时刻的浓度值。如果 $\Delta C_{i,j,k}^{n+1}$ 为正值, 则方程(4.68)直接计算; 但是, 如果 $\Delta C_{i,j,k}^{n+1}$ 为负值, 当粒子在上一个时刻的浓度为 0 或者很小时, 运动粒子的浓度可能变为为负值。当出现这种情况时, 将单元中的粒子全部去除, 替换成具有这个单元浓度的新粒子。

4.5.4 MMOC 法

MMOC 法的第一步就是使用粒子追踪技术将单元节点上的粒子在时间上向后推移。向后追踪的目的就是要找到在时间步长的起始时刻粒子的初始位置, 时间步长结束时, 粒子从初始位置运动到节点位置。与初始位置相关的浓度记为 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, 是时间增量 Δt 内仅由于对流作用引起的单元浓度。

位置 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ 通常与节点的坐标不一致。因此, 必须使用相邻节点的浓度来插值计算 $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ 处的浓度。MT3DMS 运移模型中使用一次多项式插值法, 在二维下为双线性或在三维下为三线性。假设 $\hat{x}$ 位于节点 x_{j-1} 和 x_j 之间, $\hat{y}$ 位于 y_{i-1} 和 y_i 之间, $\hat{z}$ 位于 z_{k-1} 和 z_k 之间(图 4.12), 则一次多项式插值的一般方程为

$$\begin{aligned} C(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) = & (1 - \omega_x)(1 - \omega_y)(1 - \omega_z)C_{i-1,j-1,k-1} + (1 - \omega_x)\omega_y(1 - \omega_z)C_{i,j-1,k-1} \\ & + \omega_x(1 - \omega_y)(1 - \omega_z)C_{i-1,j,k-1} + \omega_x\omega_y(1 - \omega_z)C_{i,j,k-1} \\ & + (1 - \omega_x)(1 - \omega_y)\omega_z C_{i-1,j-1,k} + (1 - \omega_x)\omega_y\omega_z C_{i,j-1,k} \\ & + \omega_x(1 - \omega_y)\omega_z C_{i-1,j,k} + \omega_x\omega_y\omega_z C_{i,j,k} \end{aligned} \quad (4.69)$$

式中 ω_x, ω_y 和 ω_z 为插值因子:

$$\begin{cases} \omega_x = \frac{\hat{x} - x_{j-1}}{0.5\Delta x_j + 0.5\Delta x_{j-1}} \\ \omega_y = \frac{\hat{y} - y_{i-1}}{0.5\Delta y_i + 0.5\Delta y_{i-1}} \\ \omega_z = \frac{\hat{z} - z_{k-1}}{0.5\Delta z_k + 0.5\Delta z_{k-1}} \end{cases} \quad (4.70)$$

如果，x、y 或 z 方向不进行模拟计算，则相应的加权因子为 0。计算过程中忽略对无效单元的计算。方程(4.69)表示的低次插值法计算效率高，质量平衡误差小，而且没有人工波动。尽管如此，这种线性方法会引起数值弥散。随着浓度锋面的变陡，数值弥散变大。在 MT3DMS 运移模型中，MMOC 法仅适用于浓度峰面相对平缓的问题(使用 MOC 或 TVD 技术处理陡锋问题)。当浓度场相对平滑时，由 MMOC 法引起的数值弥散可以忽略不计。

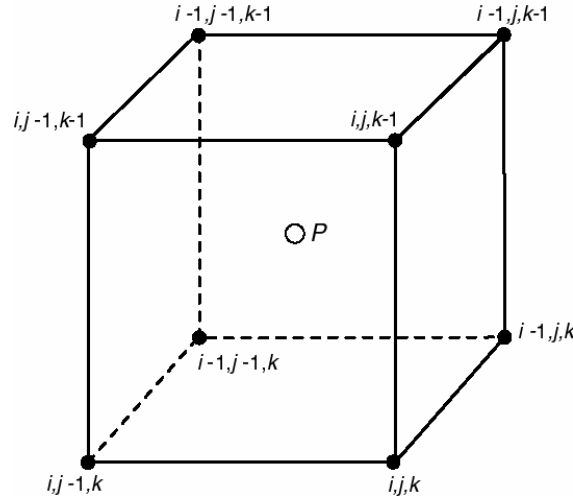


图 4.12 三维空间用三线性法通过相邻节点浓度插值 P 点浓度

在 MMOC 法中，汇或源是一类比较特殊的问题，需要区别对待。首先，检查汇所在单元所有截面上的内法向水力梯度，如图 4.13。如果汇是对称的，则节点的速度为 0。因此，MT3DMS 软件在单元中布置许多粒子，而不是在节点上放置一个粒子。粒子的数目和分布由用户指定选项控制，方法与 MOC 中的一样。每个粒子在 Δt 时间内向后追踪，浓度用相邻节点浓度插值计算，然后利用距离反比加权法，根据所有粒子的浓度计算单元的平均浓度：

$$C_{i,j,k}^{n*} = \frac{\sum_{l=1}^{NP} C_l^n / d_l}{\sum_{l=1}^{NP} 1/d_l} \quad (4.71)$$

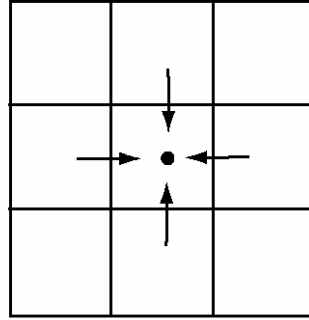
式中 d_l 表示第 l 号粒子的初始位置与节点间的距离。距离反比加权法与 MOC 中使用的简单平均算法不同：前者对于离节点近的粒子赋的权重大；而后者对所有的粒子都赋相同的权重。

然后，对汇所在单元计算所有截面的外法向水力梯度，向后追踪法将所有汇

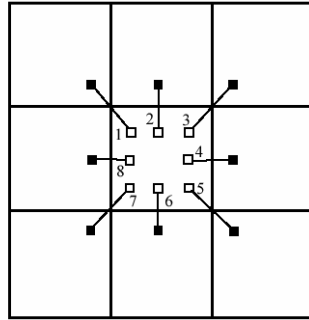
处的粒子向节点聚集，那么

$$C_{i,j,k}^{n*} = C_{i,j,k}^n \quad (4.72)$$

使用 MMOC 法时，在每一个时间步长内粒子重新运动，因此没有必要占用内存来存储粒子的位置和浓度。这样，通常 MMOC 法对内存要求小，而且一般说来比 MOC 法效率高。



(a) At a sink cell with inward gradients on all interfaces.



(b) Instead of placing one single particle at the node, multiple particles are placed and tracked backward. In this example, 8 particles distributed with a fixed pattern are used.

图 4.13 MMOC 法中对汇所在单元的空间处理

4.5.5 HMOC 法

向前追踪 MOC 法非常适合求解陡锋问题(纯对流问题或对流占优问题)，因为它本质上消除了数值弥散。对于污染羽仅占有限差分网格很小一部分，浓度场仅在陡锋面上变化很快的许多实际问题，采用动态粒子分布的 MOC 法效率也很高。但是，当对弥散和化学反应来说对流逐渐不占优时，MOC 法的优势就不那么明显了，因为随着物理弥散作用的增强，数值弥散的影响已不是很大。进一步说，当弥散作用使污染羽占据模拟区域的大部分时，三维模拟中 MOC 法需要的运动粒子的数目变得很大，对内存的要求超出了绝大多数个人电脑的配置。向后追踪 MMOC 法作为 MOC 法的补充处理缓锋面问题，因为 MMOC 法对内存要求少，而且计算效率高。

如果流场和弥散参数相对稳定，空间剖分相对规则，则可以直接根据 Peclet 数选用 MOC 法或 MMOC 法：

$$Pe_i = \frac{|v_i| \Delta x_i}{D_{ii}}; \quad i = x, y \text{ or } z \quad (4.73)$$

式中所有项目已在前面定义。MOC 法适用于 Peclet 数较大的问题，而 MMOC

法适用于 Peclet 数较小的问题。根据经验，当 Peclet 数大于 10 时，MOC 法计算效率高；而当 Peclet 数小于 0.1 时，用 MMOC 法不会产生显著的数值弥散。需要指出的是这种经验只是根据有限次的试验得出的，不可能对所有情况都适用。

在某些情况下，仅使用 MOC 法可能需要大量内存而且运行时间也长，而使用 MMOC 法则会产生明显的数值弥散，没有一个方法能给出满意的解。在这些情况下，一种将 MOC 和 MMOC 结合在一起的混合法，HMOC，可能效果会更好。HMOC 法的基本思想是利用一个自适应程序结合 MOC 和 MMOC 的优点，利用 MOC 求解浓度梯度大的区域，利用 MMOC 求解浓度梯度小的区域。根据所要计算的单元和方程(4.62)中定义的相邻单元间的相对浓度梯度判断浓度锋面的陡峭程度，并在此基础上进行自动选择。通过用户指定的 *DMHMOC* 标准来实现混合法：

$$\begin{cases} \text{MOC is used,} & \text{if } DCCELL_{i,j,k} > DCHMOC \\ \text{MMOC is used,} & \text{if } DCCELL_{i,j,k} \leq DCHMOC \end{cases} \quad (4.74)$$

在每一个运移过程开始时，每一个单元计算的 *DCCELL* 与 *DCHMOC* 进行比较。如果 $DCCELL_{i,j,k} > DCHMOC$ ，借助于运动粒子，单元的对流组分使用 MOC 技术求解。如果计算单元中没有粒子，则加入新的粒子。另一方面，如果 $DCCELL_{i,j,k} \leq DCHMOC$ ，利用 MMOC 法求解单元的对流组分。如果单元中有不动的粒子，则将其去除。*DCHMOC* 标准是经验性的，但对于第 7 章中讨论的测试问题，位于 0.001 和 0.01 之间的值便可以达到要求。恰当地选择 *DCHMOC* 的值，对于 0 到 ∞ 之间的所有的 Peclet 数，自适应程序都能给出精确的解，且没有数值弥散，而且比单独使用 MOC 法时利用的运动粒子要少得多。

4.6 质量平衡计算

每一个运移步长结束时都会进行一次质量平衡计算，将所有计算结果累加给出地下水系统总的质量流入流出信息。总的流入流出量的差值也可以作为模拟结果精度的评价指标。

源向含水层系统中注入质量，汇从含水层中抽出质量，包括定浓度边界、定水头边界、一般随水头边界、井、渠、河流、回灌、蒸腾和化学反应。除此之外，含水层的储存量的释放和积累也被看作是源汇，因为含水层储存量的释放可以明显的增加地下水流动系统的水量，储存量的积累则可以明显减少地下水流动系统的水量。与其它源汇不同的是，质量储存量的变化不包括含水层的质量进出。储存量的积累或释放包括溶解相(溶质质量)，如果模拟吸附作用，还包括吸附相(吸附质量)。

使用下面的公式计算总的质量流入流出量的差值，将其作为一个百分误差：

$$\text{DISCREPANCY}(\%) = \frac{(\text{IN} - \text{OUT})}{0.5(\text{IN} + \text{OUT})} \times 100 \quad (4.75)$$

式中 IN 表示总的流入质量，包括从外部源流入地下水流动系统的量和由于溶质和吸附浓度降低而从储存量中释放的部分；OUT 表示总的流出质量，包括从汇流出地下水系统的量和由于溶质和吸附浓度增加而增加的储存量。

DISCREPANCY 表示 IN 和 OUT 的百分数差值。一般说来,质量平衡误差是衡量数值解法有效性的一个标准,对合适的数值解法来说它是一个很小的值。

公式(4.75)是流动模型和运移模型质量误差的一个粗略估计,在任何情况下都适用。但是,公式(4.75)并不包括任一时间含水层中的总质量,可能在某些情况下方程(4.75)不能对是否质量守恒进行准确测量(含水层中任一时刻的总质量等于含水层的初始质量加上所有通过源增加的量,减去通过汇减少的量)。因此,MT3DMS 中提供另一种质量差值衡量指标:

$$\text{DISCREPANCY}(\%) = \frac{(\text{SOURCE} + M_o) - (\text{SINK} + M_t)}{0.5[(\text{SOURCE} + M_o) + (\text{SINK} + M_t)]} \times 100 \quad (4.76)$$

式中

M_t 表示含水层在时刻 t 的总质量(溶解和吸附量); M_o 表示在模拟开始时的初始质量(溶解和吸附量); SOURCE 表示从外部源流入含水层的量; SINK 表示外部汇流处的量。

如果使用标准有限差分法或三阶 TVD 法,质量平衡误差是很小的,通常小于 1%。如果不是这样的话,那么很有可能解法没有收敛或者发生了某些错误。因为对每一个模型单元,标准有限差分法或三阶 TVD 法开始于一个质量平衡状态,对有效解来说,质量误差一定很小。

由于运动粒子的不连续性,基于粒子追踪的解并不能保证在每一个步长内单元的质量进入量等于流出量。下面举例具体说明,如图 4.14,假设有一口井向单元 1 以一定的速率连续注入一定浓度的水,单元 1 的浓度与注入的水相同。除单元 1 外,其他所有单元的初始浓度为 0。假设在单元 1 中放置 4 个运动粒子。显然,这些粒子运动到单元 2 需要一段时间,直到全部进入单元 2 之前(记时间为 t_0),含水层质量储存量并没有变化,但是一定的质量通过注水井进入了含水层。因此,如果模拟步长小于 t_0 ,第一个运动步长的质量平衡误差是 200%,因为 OUT 项等于 0,而 IN 项不等于 0。当然,这并不能说明解不正确,这只是该算法和所选择步长的一个特例。随着模拟的进行,质量平衡误差就会减小到接近于 0,因为由含水层浓度增加引起的含水层质量的增加近似等于注水井注入的量。因此,对于粒子追踪法来说,单看某一个步长的质量平衡误差是没有意义的;而所有的步长误差的累积量和平均的质量平衡信息才可以作为模拟结果是否可以接受的标准。

第 5 章 程序结构和设计

5.1 整体结构

MT3DMS 运移模型的计算机程序使用与美国地质调查中使用的三维有限差分地下水流动模型或 MODFLOW (McDonald 和 Harbaugh 1998; Harbaugh 和 McDonald 1996) 相类似的模块结构。像 MODFLOW 模型, MT3DMS 模型由一个主程序和许多独立的子程序组成。子程序, 又称模块, 组合形成一系列程序包。每个程序包完成一方面运移模拟。MT3DMS 和 MODFLOW 在程序结构和设计上相似, 这就为 MT3DMS 运移模型和最为广泛使用的水流模型之一的 MODFLOW 模型连用提供了方便。

图 5.1 为一般模拟运行的模型程序的执行过程。模拟时间分为应力期, 也被称为抽水期。在应力期, 应力 (即汇/源) 参数是恒定的。每个应力期分为一系列的时间步长。在每一时间步长内, 水头和流量用流动模型求解, 结果供运移模型使用。由于与流动模型相比, 运移模型对时间步长大小有更严格的要求, 解决流动问题时时间步长的大小可能会超出运移解的精度和稳定性所要求的极限。因此, 在流动问题中所用的时间步长, 进一步分成更小的步长, 称为运移步长。在运移步长内水头和流量认为是不变的。

在进入应力期循环之前, 程序先执行属于整个模拟的 3 个子程序 (图 5.1)。在定义程序中, 定义模拟问题, 即: 模型的大小、应力期个数、如果是多组分模拟组分的数目, 以及模拟中的各种运移选择。在分配程序中, 给数组分配内存, 数组维数由定义程序中指定的参数决定。在读取和准备程序中, 读取并处理模拟过程中不变的输入数据。这些输入数据包括: 空间和时间离散化信息、边界条件、初始条件、运移参数、解法参数以及输出控制选项。

应力期循环中第一个程序是应力程序, 它为当前应力期获取时间信息: 应力期长度, 应力期内时间步长的数量和每个时间步长的长度。接着第二个读取和准备程序读取并准备当前应力期内不变的输入数据, 即需要指定汇和源的浓度。运移模型通过一个无格式的流动-运移连接文件, 获取位置, 类型和流动模型中模拟的所有源汇的流速。源的浓度自动设为零, 除非用户在读取和准备程序中指定了不同的浓度。汇的浓度一般设为等于汇所在含水层在汇处的浓度, 在读取和准备程序中可指定浓度的蒸腾除外。

在流动时间步长循环中, 第三个读取和准备程序读取并处理流动模型中保存的水头和流动项, 自动合并指定的水力边界条件。参数程序然后计算某些在水头解的每一个时间步长内不变的系数, 例如, 弥散系数。

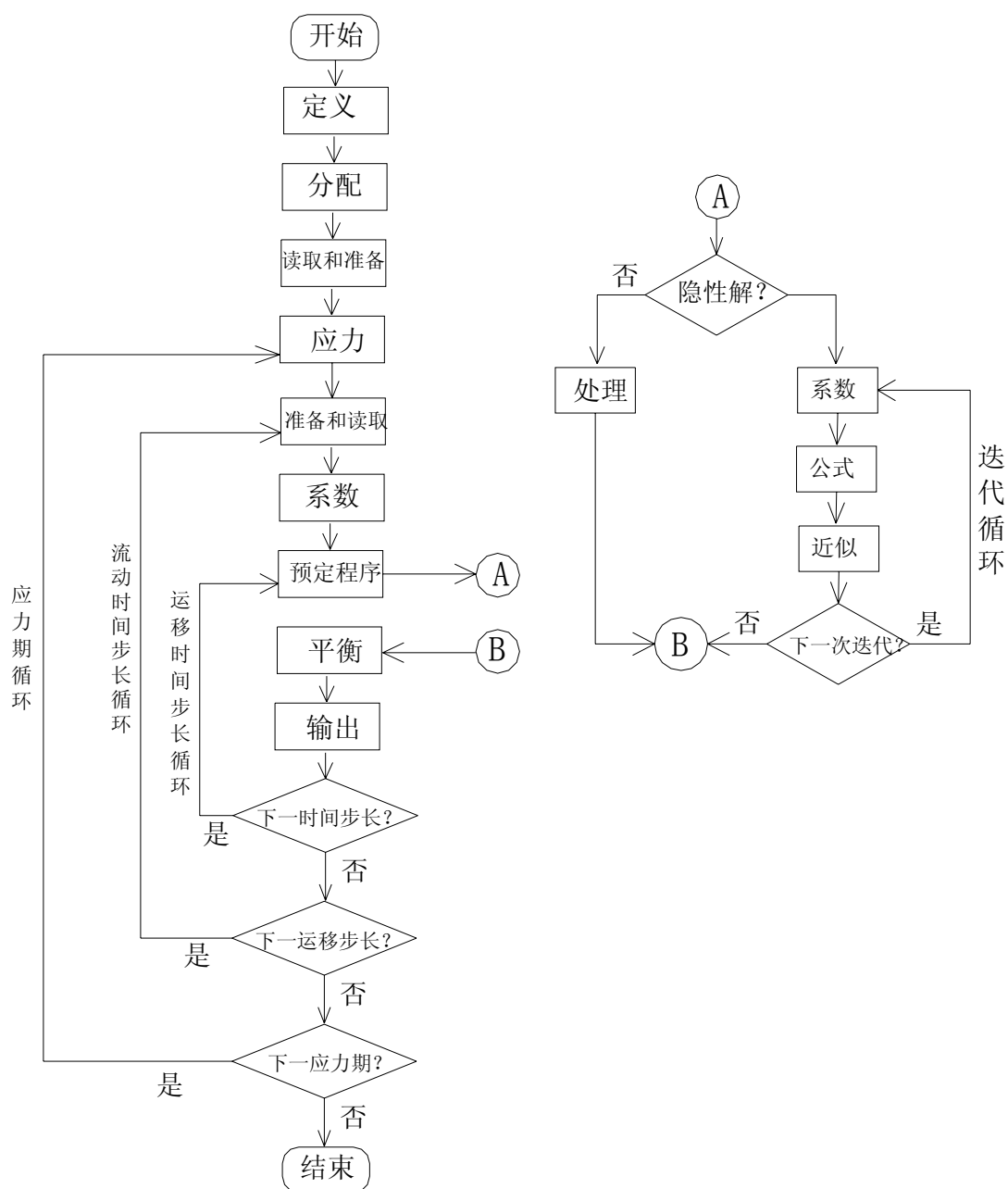


图 5.1 运移模拟典型顺序

在运移时间步长循环中，*预处理程序*确定了一个合适的步长大小，用于当前运移时间步长。选取显式或隐式解法，*预处理程序*后面将会运行不同的程序。如果选择显式解法，*解决程序*在一个步长内直接解决每一个运移组分，没有任何迭代。如果选择隐式解法，程序就会进入迭代循环。在迭代循环中，另一个参数程序更新在每次迭代中都会改变的非线性系数，*公式化程序*为迭代更新并准备系数矩阵，*近似程序*求解线性方程。*预算程序*计算并准备总体的质量平衡信息，*输出程序*根据用户指定的输出控制选项保存模拟结果。

运移方程中的四个组分（平流、弥散、汇/源混合和化学反应）都采用前面讨论的一般程序求解。求解通过使用单独的模块或者说独立的子程序完成，每个模

块完成一特定过程。例如，对流组分通过 5 个模块实现：ADV3AL,ADV3RP,ADV3SV,ADV3FM 和 ADV3BD。ADV 表示这些模块解决运移组分（平流）。数字 3 表示计算机代码的当前版本。AL（abbreviation 的缩写），RP（Read & Prepare 的缩写），SV（Solve explicitly 缩写），FM（Formulate 的缩写），BD（Budget 的缩写）表示这些模块执行的程序。主程序调用的模块称为主要模块以区别于那些次级模块，次级模块仅在它们所属的主要模块中使用。主要模块 ADV3AL，ADV3RP，ADV3SV，ADV3FM 和 ADV3BD 和与之相关的次级模块一起组成一个程序包，称为对流程序包（简称为 ADV）（图 5.2）。弥散，汇/源混合和化学反应处理过程是相似的，分别组成弥散程序包（DSP），汇/源混合程序包（SSM）和化学反应程序包（RCT）。

除了四个运移分程序包以外，MT3DMS 模型程序还包括四个附加程序包：基本运移程序包（BTN），流动模型分界面程序包（FMI），广义共轭梯度程序包（GCG），和实用程序包（UTL）。BTN 处理整个运移模型需要的基本工作。这些工作包括模拟问题的定义，初始条件和边界条件的指定，合适运移步长的确定，整体质量平衡信息的准备和模拟结果的输出。FMI 结合流动模型获得流动解。目前，这种结合通过无格式的连接文件完成，文件内容包括流动模型解出的水头，各种水流和源汇项。这个文件以运移模型所需要的格式读取和处理。GCG 解决基于广义共轭梯度法的隐式有限差分法产生的矩阵方程。UTL 包括一些实用模块，其它模块调用这些模块完成计算机输入和输出的工作。

MT3DMS 运移模型中所有主要模块组成的程序包都列在图 5.2 中。手册中所有的程序包列在表 5.1 中。MT3DMS 和早期的 MT3D 最根本的区别是增加了 GCG 解法程序包和在其它运移程序包中增加了公式化模块目的是公式化 GCG 解法需要的系数矩阵。

5.2 内存分配

MT3DMS 运行一模型所需的计算机内存存在运行期间是动态分配的。MT3DMS 用两个称为“X”数组（为实数型变量）和“IX”数组（为整型变量）的一维数组来存储各个数据数组，数据数组的维数取决于被模拟的问题。相应的程序包通过分配程序计算各数据数组的大小并累加，累计量作为指针指示 X 和 IX 数组中各数据数组的位置。所有分配程序结束后，各数组的累加量即为 X 和 IX 数组的大小，然后 X 和 IX 数组利用 FORTRAN-90 的 ALLOCATE 语句动态分配内存。如果计算机系统没有足够的内存就会出现错误信息并终止程序。

在具体问题中，X 和 IX 数组的大小决定于使用程序包的种类和数量。X 和 IX 数组的准确大小可根据附录 A 中的说明计算。它们也可以通过简单地运行程序得到，程序总会输出所需 X 和 IX 数组的大小，即使因为计算机系统不能为 X 和 IX 提供足够的内存而终止程序。一般认为，用隐式矩阵解法与不用隐式矩阵解法相比，所需的附加内存是模型节点总数 15~46 倍。粒子追踪法所需的附加内存约为移动粒子总数和流动组分数值的 4~8 倍。

MT3DMS 模型程序针对处理 3 维模拟。当程序用于处理一维或二维问题时为节省内存一些数组是不需要的，这些数组在 X 和 IX 数组中不被分配。例如，ZP 数组用于存储移动粒子的纵坐标。如果程序用于模拟平面上的二维问题，不需要 ZP 也不再为其分配内存，在程序中不会用到或操作 ZP。当用户需要修改计算机代码时，这一点是必须注意的。

程序包

程序	BTN	FMI	ADV	DSP	SSM	RCT	GCG
定义(DF)	BTN3DF						
分配内存(AL)	BTN3AL	FMI3AL	ADV3AL	DSP3AL	SSM3AL	RCT3AL	GCG3AL
读取准备(RP) ¹	BTN3RP		ADV3RP	DSP3RP		RCT3RP	GCG3RP
应力(ST)	BTN3ST						
读取准备(RP) ²					SSM3RP		
读取准备(RP) ³		FMI3RP					
参数(CF) ⁴				DSP3CF			
预处理(AD)	BTN3AD						
解决 (SV)	BTN3SV		ADV3SV	DSP3SV	SSM3SV	RCT3SV	
参数(CF) ⁵						RCT3CF	
公式化 (FM)	BTN3FM		ADV3FM	DSP3FM	SSM3FM	RCT3FM	
近似 (AP)							GCG3AP
预算 (BD)	BTN3BD		ADV3BD	DSP3BD	SSM3BD	RCT3BD	
输出 (OT)	BTN3OT						

注释：

读取和准备程序 1 读取和处理在整个模拟期间不变的输入数据。

读取和准备程序 2 读取和处理每个应力期内不变的输入数据。

读取和准备程序 3 读取和处理在流动模拟每个时间步长内不变的输入数据。

参数程序 4 计算在流动模拟每一个时间步长不变的参数。

参数程序 5 在矩阵解法的每一外部迭代中更新非线性反应参数。

图 5.2 以程序和程序包组织的 MT3DMS 主要模块

表 5.1 MT3DMS 运移模型中的程序包

程序包名称	缩写	程序包描述
基本运移	BTN	处理整个运移模型需要的基本工作，这些工作包括：问题的定义、边界条件和初始条件描述，步长的确定、质量平衡信息的准备和模拟结果输出。
流动模型连接	FMI	连接流动模型。通常，连接通过包括水头和流动项的无格式磁盘文件完成。FMI 程序包读取文件内容并准备运移模型所需要的水头和流动项。
对流	ADV	利用显式方法求解由对流引起的浓度改变，或为矩阵解法公式化对流项的系数矩阵。
弥散	DSP	利用显式方法求解由弥散引起的浓度改变，或为矩阵解法公式化弥散项的系数矩阵。
汇和源混合	SSM	利用显式方法求解由汇或源引起的浓度改变，或为矩阵解法公式化汇或源的系数矩阵。
化学反应	RCT	利用显式方法求解由反应引起的浓度改变，或为矩阵解法公式化反应项的系数矩阵。
广义共轭梯度解法	GCG	解决运移方程隐式解产生的矩阵方程。
实用	UTL	包括被主要模块调用以完成像数据数组的输入/输出的一般工作的实用性模块。

5.3 输入结构

像以前的 MT3D 软件，MT3DMS 输入结构用于从模拟所需要的许多不同文件中收集输入数据。该输入结构在许多方面上和 MODFLOW 是相似的。因此，对熟悉 MODFLOW 的人来说，理解并准备 MT3DMS 模型的输入是十分简单和直接的。另外，MT3DMS 和 MT3D 的输入结构是兼容的。因此，以前为 MT3D 准备的任何输入文件不需要任何修改就可用于 MT3DMS。然而，需要指出的是，如果对旧的输入文件不作任何修改，MT3DMS 新增加的许多功能就不能使用。

每一次模拟中都经常用到基本运移程序包 BTN。因此，每次程序运行都需要 BTN 的输入文件。在 BTN 的输入文件中，有一条记录包含 TRNOP 逻辑数组。TRNOP 数组的每个元素都对应一个主要选项，一般来说是一个程序包（图 5.3）。通过设置 TRNOP 对应元素为 T（代表真）调用选项；设置为 F（F 代表假）关闭选项。当某选项被使用时，就需要包括选项所需特定数据的输入文件。例如，TRNOP 数组的第二个元素对应于弥散选项（或程序包）。如果需要模拟弥散，TRNOP 数组的第二个元素必须置为 T。一个包含弥散参数的输入文件被创制并被程序读入。

除了 BTN 的主要输入文件和多种运移组分程序包的输入文件外，运移模型经常还需要另外一个输入文件，这个文件包括饱水带厚度，单元截面通量，包括非稳定地下水储存在内的汇和/或源的位置和流速。这个文件由与运移模型联合使用的水流模型生成，由 MT3DMS 模型中水流模型连接程序包 FMI 读取。这个文件的结构和形式在第 6 章和附录 C 中有描述。

	对 流	弥 散	源 汇 混 合	化 学 反 应	广 义 共 轭 梯 度	为 附 加 程 序 包 保 留			
TRNOP									
元素序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9 10

TRNOP 输入记录示例

TRNOP	T	T	T	F	T	F	F	F	F	F
元素序号	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10

注释：

- 1、使用对流选项，对流（ADV）程序包需要一输入文件；
- 2、使用弥散选项，弥散（DSP）程序包需要一输入文件；
- 3、使用汇和源选项，汇和源混合（SSM）程序包需要一输入文件；
- 4、使用化学反应选项，化学反应（RCT）程序包需要一输入文件；
- 5、使用广义共轭梯度选项，广义共轭梯度（GCG）程序包需要一输入文件；
- 6-10、为将来的附加反应包保留。

图 5.3 利用逻辑 TRNOP 数组包括的运移组分和解法说明。

TRNOP 数组放在基本运移程序包 BTN 的输入文件中

在标准 ANSI FORTRAN 语言中，数据文件必须用一个 FORTRAN 单元号码和一个文件名打开才能被程序接受。该过程在属于实用程序包的子程序 OPENFL 中完成。文件的名称可以通过监视屏交互式输入或通过下一章中讨论的批处理中的响应文件输入。与主要输入文件相关的单元号码预先放置在主程序中。如果必要的话，它们可以通过修改下列主程序中的参数声明来修改：

PARAMETER (INBTN=1, INADV=2, INDSP=3, INSSM=4, INRCT=8,
INGCG=9, INVHF=10)

其中

- INBTN 基本运移程序包的单元号码；
- INADV 对流程序包的单元号码；
- INDSP 弥散程序包的单元号码；
- INSSM 汇/源混合程序包的单元号码；
- INRCT 化学反应程序包的单元号码；
- INGCG 广义共轭梯度程序包的单元号码；

NVHF 由水流模型连接程序包读取的无格式水流—运移连接文件单元号码。一旦与程序包相关的单元号码用于模拟，它就不能再用到其他地方。

5.4 输出结构

MT3DMS 程序产生一个标准输出文件和几个可选输出文件。模型的每一次运行都生成标准输出文件。可选输出文件只有在被请求时才会生成。输出文件中信息的数量、种类和记录频率通过基本运移程序包的输入文件中用户指定的选项来控制。这些输出文件的作用如下：

a、标准输出文件：包含对输入数据的反馈（以便核对来保证它们的准确读入），在用户指定时间和每个应力期结束后，输出各组分的计算浓度和其他一些有用的信息，如模型计算参数和质量预算。

b、无格式的浓度文件，每种污染物组分产生一个文件（缺省名：MT3Dnnn.UCN，nnn 为组分索引号）：包含为了后期处理或者连续运行在用户指定时间以无格式（二进制）形式存储的浓度。

c、观测文件，每种污染物组分产生一个文件（缺省名：MT3Dnnn.OBS，nnn 为组分索引号）：包含在用户指定的观测点，每一个运移步长或用户指定时间间隔内浓度和总耗时。

d、质量预算文件，每种污染物组分产生一个文件（缺省名：MT3Dnnn.MAS，nnn 为组分索引号）：文件包含每一个运移步长或用户指定时间间隔内，质量预算一览。

e、模型网格结构文件（缺省名：MT3D.CNF）：包含模型空间剖分信息，此信息可用于后期处理的图形化显示（附录 D）。

缺省文件 MT3Dnnn.UCN, MT3Dnnn.OBS 和 MT3Dnnn.MAS 的格式和结构与原来 MT3D 代码保存的单组分对应文件 MT3D.UCN, MT3D.OBS 和 MT3DMAS 是相同的。因此，他们可以被相同的现有图形接口软件或其他后期处理程序处理而不需要任何改动。

与这些输出程序相关的单元号码放在主程序的参数声明中：

PARAMETER (IOUT=16, ICNF=17, IUCN=200, IOBS=400, IMAS=600)

其中

IOUT 标准输出文件的单元号码；

ICNF 模型网格结构文件 MT3D.CNF 单元号码；

IUCN 无格式的浓度文件 MT3Dnnn.UCN 的单元号码初始值，组分#nnn 的单元号码为（IUCN+nnn）。例如，组分#001 的无格式浓度文件为 MT3D001.UCN，存在 201 单元中。

IOBS 观测文件 MT3Dnnn.OBS.单元号码初始值，组分#nnn 的单元号码为（IOBS+nnn）。例如，组分#001 的观测文件为 MT3D001.OBS，存在 401 单元中。

IMAS 质量预算文件 MT3001.MAS 单元号码初始值。组分#nnn 的单元号码为（IMAS+nnn）。例如，组分#001 的质量预算文件为 MT3D001.MAS，存在 601 单元中。

如果必要的话，可以通过修改以上的参数声明改变这些单元号码。

5.5 计算机程序描述（版本 3.5）

MT3DMS 运移模型的计算机程序是用美国国家标准协会（ANSI）定义的 FORTRAN 77 语言编写的。然而，在程序中，也用到了一些有用的 FORTRAN-90 扩展部分，包括以下语句：

```
IMPLICIT NONE
ALLOCATABLE
ALLOCATE
DO ENDDO
CYCLE
EXIT
```

因此，源代码用标准 FORTRAN 90 编译程序编译，虽然一些 FORTRAN 77 编译程序，如 Lahey F77L3 编译程序也支持这些扩展部分。

源代码中所有实数型数据都声明为单精度。如果有必要以双精度运行模型，仅在 MT3DMS 程序的每个子程序中把语句 IMPLICIT NONE 改成 IMPLICIT DOUBIE PRECISION (A-H,O-Z)。同时，用户必须修改附加在 MODFLOW 或其他流动模型的 LKMT3 程序包从而用双精度保存流动项。

MT3DMS 程序的主程序和所有子程序（包括在主要和次级模块）简要描述如下。更多的信息，使用者可从源码注释中查阅。

5.5.1 主程序—MAIN350

主程序控制整个程序的执行，图 5.4 所示的流程图显示了主程序调用的所有主要模块。每次模拟主程序的基本步骤为

1. 给主要的输入输出文件分配单元号码并打开这些文件。
2. 定义模拟问题，包括层、行、列、应力期和主要运移选项。
3. 为存储所有数据数组计算 X 和 IX 数组大小。
4. 为 X 和 IX 数组分配内存，如果系统没有足够的内存则终止程序。
5. 读取并处理在模拟期间不变的输入数据。
6. 对每一个应力期：
 - (1) 获取应力期时间信息。
 - (2) 读取并处理需要指定的源或汇的浓度。
 - (3) 对每一流动时间步长：
 - (a) 读取饱水带厚度，单元截面通量，源和 / 或汇的位置和流速。
 - (b) 计算当前时间步长内不变的参数。
 - (c) 对每一个运移时间步长：
 - (i) 为当前运移步长确定一个合适的大小。
 - (ii) 显式求解运移方程各组分或者为迭代解公式化各运移组分的系数矩阵。
 - (iii) 准备质量平衡信息。
 - (iv) 打印或保存模拟结果。
 - (v) 如果运移步长数量超出指定的最大值，终止程序。
7. 结束程序。

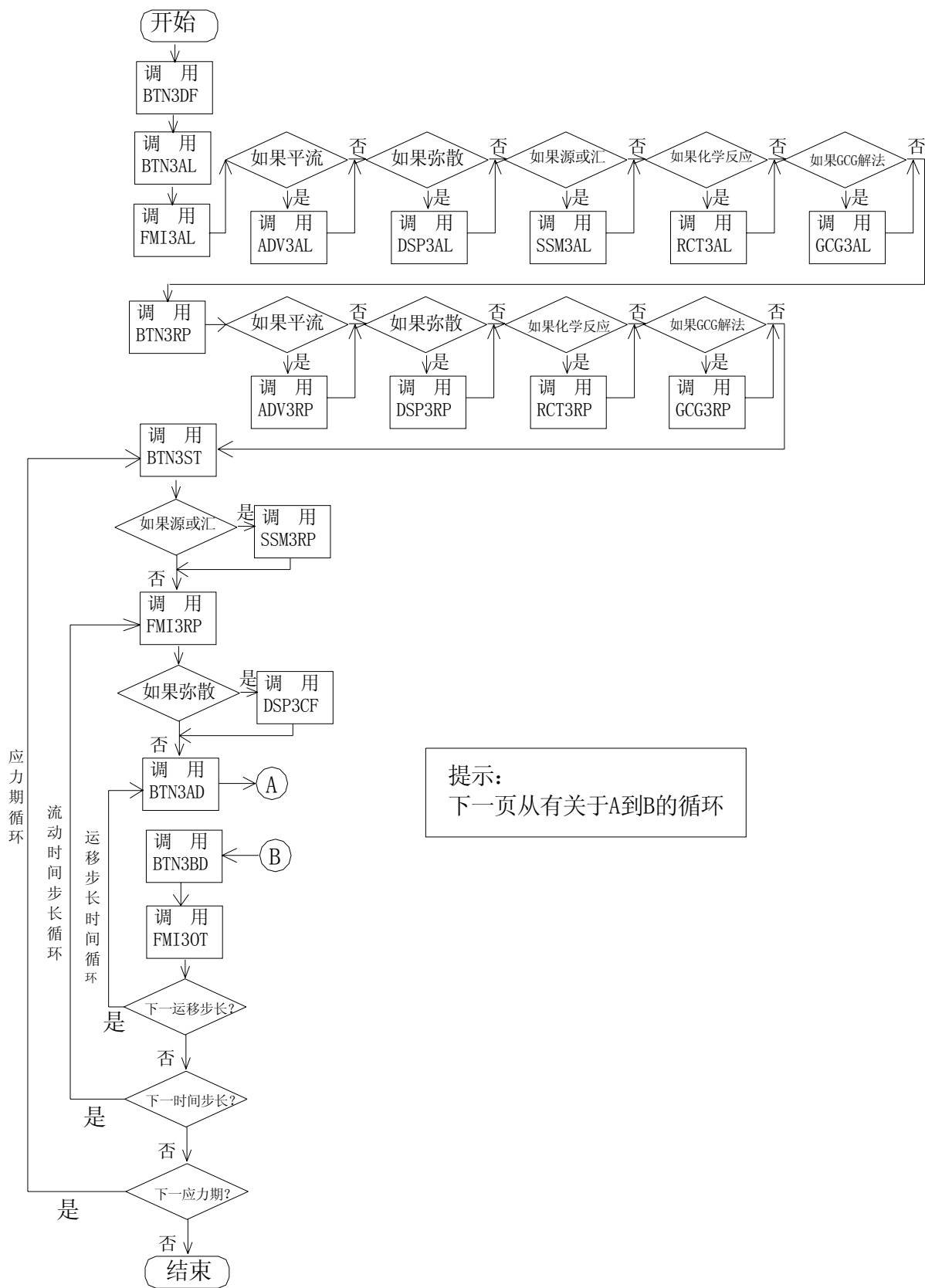


图 5.4 MT3DMS 主程序流程图

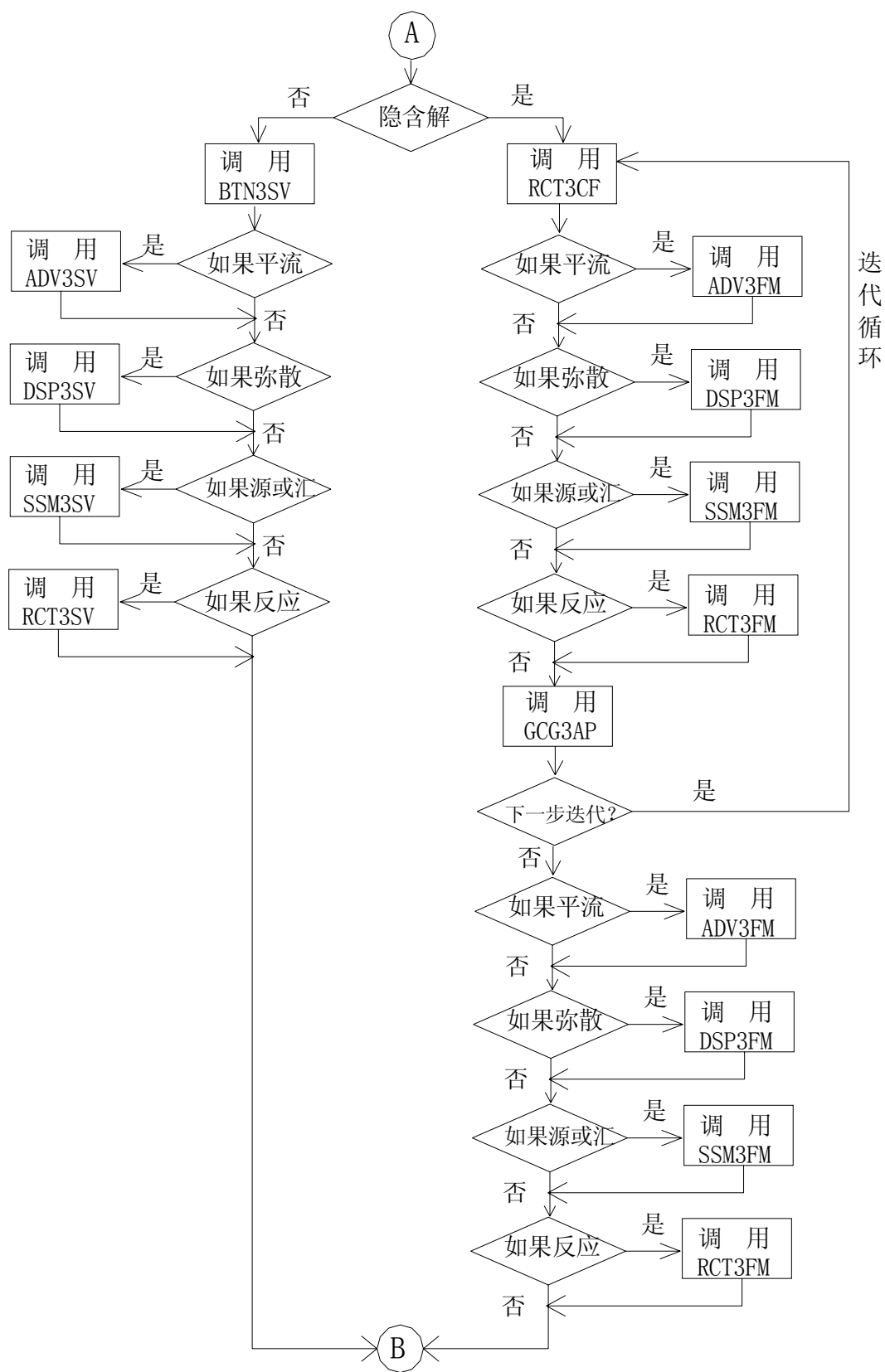


图 5.4 (接上)

5.5.2 基本运移程序包—BTN350

基本运移程序包 BTN 包括 9 主要模块，各模块按照执行顺序描述如下：

BTN3DF：通过读取层、行、列及应力期的数目、组分总数和使用的运移选项定义模拟问题。

BTN3AL：为模型作为整体需要的基本数据数组分配空间。

BTN3RP：读取并准备整个模型需要的基本的数据数组。

BTN3ST：读取应力期时间信息。

BTN3AD：为每一个运移步长确定一个合适的步长大小。

BTN3FM：为下一步隐式解重新设置并公式化系数矩阵。

BTN3SV：为下一步显式解重新设置数组并准备。

BTN3BD：准备整体质量平衡信息。

BTN3OT：根据用户指定选项打印并保存模拟结果。

5.5.3 对流程序包—ADV350

ADV 程序包由 5 个主要模块和许多次级模块组成：

ADV3AL：为对流程序包需要的数据数组分配空间。

ADV3RP：读取并准备解决对流项需要的输入数据。

ADV3FM：如采用显式有限差分方法，公式化与对流项相关的系数矩阵。

ADV3SV：用以下方法求解对流项：(a)基于粒子追踪的欧拉—拉格朗日法；(b)显式有限差分方法；(c)三阶 TVD 方法。主要模块包括下列次级模块，它们根据所执行的功能命名：

SADV3F：用显式上游有限差分法解决对流项。

SADV3U：使用三阶 TVD 法(ULTIMATE)求解对流项。SADV3U 调用一个名为 CFACE 的函数利用三次插值估算截面浓度。

SADV3M：使用向前追踪特征值法(MOC)求解对流项。

SADV3B：使用向后追踪修正特征值法(MMOC)求解对流项。

SADV3Q：根据有限差分公式计算流入和流出有限插分单元的质量通量。

次级模块 SADV3M 和 SADV3B 调用下列的子程序：

VPOINT：用分段线性插值计算任意点的速度。

EULER：利用一阶欧拉算法完成粒子追踪。

PK4：利用四阶 Runge-Kutta 算法完成粒子追踪。

PARMGR：动态管理运动粒子的分布，必要时插入或删除粒子。

CNCRAD：计算某单元和邻近单元间的相对浓度梯度。

GENPTN：以固定模式在有限差分单元插入粒子。

GENPTR：以随机模式在有限差分单元插入粒子。

CPOINT：用一次多项式插值根据相邻节点浓度计算任意点

浓度。

ADV3BD: 如果采用隐式解法, 准备与对流相关的预算信息。

5.5.4 弥散程序包—DSP350

弥散程序包 DSP 程序包括 6 个主要模块, 按照执行顺序描述如下:

DSP3AL: 为弥散程序包需要的数据数组分配空间。

DSP3RP: 读取并准备弥散参数。

DSP3CF: 计算水动力弥散系数分量。

DSP3FM: 如果使用隐式解, 公式化与弥散项相关的系数矩阵。

DSP3SV: 用显式有限差分法求解弥散项。

DSP3BD: 如果使用显式方法, 准备与弥散项相关的预算信息。

5.5.5 源汇混合程序包—SSM350

源汇混合程序包 SSM 包括 5 个主要模块, 按照执行顺序描述如下:

SSM3AL: 为源汇混合程序包需要的数据数组分配空间。

SSM3RP: 读取并准备需要指定的源和 / 或汇的浓度。

SSM3FM: 如果使用隐式解法, 公式化与汇 / 源相关的系数矩阵。

SSM3SV: 用显式有限差分公式求解由汇 / 源引起的浓度改变。

SSM3BD: 如果采用隐式解法, 准备与汇 / 源相关的预算信息。

5.5.6 化学反应程序包—RCT350

RCT 程序包包括 6 个主要级模块和一个次级模块。

RCT3AL: 为化学反应程序包需要的数据数组分配空间。

RCT3RP: 读取并准备化学反应参数。

RCT3CF: 如果使用隐式解法, 计算随每次迭代改变的非线性反应参数。

RCT3FM: 如果使用隐式解法, 公式化与反应项有关的系数矩阵。

RCT3SV: 利用显式有限差分公式求解由化学反应引起的浓度改变。

RCT3BD: 如果使用隐式解法, 准备与反应有关的预算信息。

RCT3RP 和 RCT3SV 都使用了以下次级模块:

SRCT3R: 对指定的等温吸附线计算吸附浓度和阻滞因子。

5.5.7 广义共轭梯度解法程序包—GCG350

广义共轭梯度程序包 GCG 包括下列主要模块:

GCG3AL: 广义共轭梯度解法程序包需要的数据数组分配空间。

GCG3RP: 读取并准备矩阵解法参数。

GCG3AP: 求解运移方程隐式解产生的矩阵方程。

5.5.8 水流模型连接程序包—FMI350

水流连接模型程序包 FMI 包括 3 个主要模块和 3 个次级模块。

FMI3AL: 读取无格式的水流—运移连接文件的标题并获取有关流动模型的重要信息。

FMI3RP1: 通过调用次级模块 READHQ, 读取并准备饱水带厚度和单元截面上沿列、行和层方向的通量。

FMI3RP2: 通过调用次级模块 READPS (读取点状汇或源) 和 READPS (读取面状汇和源) 读取并准备各种汇 / 源的位置和流速。

5.5.9 实用程序包—UTL350

实用程序包 UTL 包括下列被其他模块调用以完成一般计算机输入 / 输出工作的实用子程序:

OPENFL: 打开输入或输出文件。

RARRAY: 读取一维或二维实数型数据数组, 其格式为块、带状, 表单, 无格式或任何用户指定的格式。

IARRAY: 读取一维或二维整数型数据数组, 其格式为块、带状, 表单, 无格式或任何用户指定的格式。

RPRINT: 以包或条带格式输出一维或二维实数型数据数组。

IPRINT: 以包或条带格式输出一维或二维整数型数据数组。

第 6 章 输入说明

6.1 概要

MT3DMS 代码结合了格式化的、表式和无格式的输入格式，它调用两个通用数组读取器来输入数据数组。这些输入格式和数组读取器在这一章中被描述以便在准备输入文件时供参考。

6.1.1 输入格式

1. 格式化的

如果一个数值采用格式化形式输入，那么该数值的类型和它所占据空间必须和它的格式说明相一致。程序使用四种输入变量类型：整型、实数型、字符型和逻辑型。

在接下来的输入说明中，整型变量的格式说明被记为 **Iw**，**I** 表示变量必须是整数形式(不能有小数点或者指数)，**w** 表示为变量保留的空间长度。如果输入数值比 **w** 表示的空间宽度小，没有填满的空间被默认为空格。合适地输入数值是一个好习惯。

实数型变量地格式说明被记为 **Fw.d**。**w** 表示为输入数值保留的空间长度，小数部分占 **d** 个长度。当实际的输入区出现小数点时，它不考虑格式中指定的 **d**。因此，即使输入说明中实数型变量的说明被写成 **F10.0**，输入数值仍可以以如 12.345 或 0.12345 的形式输入。另外，也可以以指数形式输入，如 1.2345E-5。

字符型变量的输入说明被记为 **Aw**，**w** 表示为字符型变量保留的空间长度。如果字符串小于 **w** 个字符宽度，没有填满的空间被认为空格。

最后，逻辑变量的输入说明被记为 **Lw**。**w** 表示为逻辑变量保留的空间长度。逻辑数据必须以 T(真)或 F(假)输入，不保留没有占据的空间。

2. 表式(自由格式)

表式(自由格式)输入有以下几个特征：

- (1) 表式记录被逗号或空格隔开的数值序列；
- (2) 当输入数据的数目等于输入数据表中的项数或者输入碰到/时就会终止记录；
- (3) 一条表式记录可占据输入文件的几行，但每个新记录必须在新一行开始；
- (4) 表式输入允许重复输入形式： $n*d$ ，式中 n 为无符号非零整型常数， $n*d$ 表示连续输入 n 个 d 。

3. 无格式的(二进制)

一个无格式的文件为二进制的无格式记录序列。无格式文件不能被直观检查，但它比格式化文件要小而且处理快。模型程序使用这种无格式的形式输入水流模型保存的水流解，并将计算浓度写入一无格式文件中，用于后期处理。

6.1.2 数组读取器 *RARRAY* 与 *IARRAY*

用户要输入模型的大部分数据由一维或二维实数型或整型数组组成。三维数组被看作是一系列二维数组，每一个二维数组对应模型的一层并按照层号顺序输入。

在 MT3DMS 模型中，数组作为“数组控制记录”输入，有选择性地加上包含数组元素的一系列记录。如果数组的元素值相等，那么这个值就在控制记录中指定，并且不必再读取相关的数组。如果数组元素是变化的，含有元素数值的记录按照数组控制记录中指定的不同的输入格式读取。为了完成这些任务，本程序提供两个实用的子程序，*RARRAY* 用于读取一维或二维的实数型数组，*IARRAY* 用于读取一维或二维的整型数组。这两个数组读取器与 MODFLOW(McDonald 和 Harbaugh)模型中的数组读取器 U2DREL 和 U2DINT 是兼容的。当然，*RARRAY* 和 *IARRAY* 也允许输入块、带和表格式的数组。

对于每一个要输入的数组，*RARRAY* 和 *IARRAY* 首先要在为调用数组读取器的主要选项保留的单元上读取数组控制记录。例如，单元 1 预设于基本运移程序包，这样，*RARRAY* 和 *IARRAY* 就为基本运移程序包从单元 1 中读取输入文件中的数组控制记录。数组控制记录的内容和形式如下：

对于实数型数组读取器(*RARRAY*):

记录: IDEAD CNSTNT FMIN IPRN

格式: I10 F10.0 A20 I10

对于整型数组读取器(*IARRAY*):

记录: IREAD ICONST FMTIN IPRN

格式: I10 I10 A20 I10

说 明

1. IREAD—决定数组值如何读取

- (1) 如果 IREAD=0，对于 *RARRAY* 数组每一个元素将设置成等于 CNSTNT，对于 *IARRAY*，设置成等于 ICONSTD。
- (2) 如果 IREAD=100，在控制记录后有一个输入数值数组。数组数值以数组控制记录中的第三部分指定的格式(FMTIN)从读取控制记录的相同单元读入。
- (3) 如果 IREAD=101，在数组控制记录后有一组“块”格式的数组值。块格式包括指定块数目的记录，NBLOCK；输入值的 NBLOCK 记录(自由格式)，它指定了每个块的首行(I1)，末行(I2)，首列(J1)，末列(J2)和为块中每个单元分配的块值(ZZ/IZ) (ZZ 是 *RARRAY* 中的实型值，IZ 是 *IARRAY* 中的整型值)，如下所示：

NBLOCK (自由格式)

I1, I2, J1, J2, ZZ/IZ (块 1) (自由格式)

I1, I2, J1, J2, ZZ/IZ (块 2) (自由格式)

I1, I2, J1, J2, ZZ/IZ (块 NBLOCK) (自由格式)

如果后来的块与先前的块有重叠，则优先考虑后来的块。这样便于第一个块占满整个栅格，并允许后来的块优先占据栅格，避免栅格存在无值区(见图 6.1)。

IREAD		CNSTNT		FMTIN		IRPN	
100		0.		(10F5.1)		3	
2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1
2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1	2.1
10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2
10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2	10.2
23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	0.4	0.4
23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	0.4	0.4
23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	0.4	0.4
23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	0.4	0.4
23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	23.5	0.4	0.4
0	0	0	0	0	0	0.4	0.4
(a) 按照用户指定格式(10F5.1)读入的一个 10×10 数组(IREAD=100)							
101		0.		(FMTIN not used)		3	
5	<-----		NBLOCK				
1	10	1	10	0			
1	2	1	10	2.1			
3	4	1	10	10.2			
5	9	1	7	23.5			
5	10	8	10	0.4			
(b) 用块格式读入的(a)所示相同数组(IREAD=101)							
102		0.		(10F5.0)		3	
4	<-----NZONE						
2.1	10.2	23.5	0.4	<-----	ZV(NZONE)		
1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1
2	2	2	2	2	2	2	2
2	2	2	2	2	2	2	2
3	3	3	3	3	3	4	4
3	3	3	3	3	3	4	4
3	3	3	3	3	3	4	4
3	3	3	3	3	3	4	4
0	0	0	0	0	0	4	4
(c) 用带格式读入的(a)所示相同数组(IREAD=102)，用(10F5.0)格式读取带指针							
103		0.		(FMTIN not used)		3	
20*2.1	20*10.2	7*23.5	3*0.4	7*23.5	3*0.4	7*23.5	3*0.4
7*23.5	3*0.4,7*23.5,3*0.4		7*0	3*0.4			
(d) 用表格式输入的(a)所示相同数组(IREAD=103)							

图 6.1 RARRAY 和 IARRAY 所用的各种输入格式图示

图 6.1 RARRAY 和 IARRAY 所用的各种输入格式图示

- (4) 如果 IREAD=102, 在数组控制记录后有一“带”格式的数值数组。每一个带代表一个输入变量的值, 带由带号码区分, 带号码为一整数, 实际上可以看作是输入变量相应值的代号。带格式包括指定带号码的记录, (NZONE); 输入变量值的数组, ZV(NZONE)或 IZV(NZONE), 这些值根据带号码(1, 2, 3.....)按序排列, ZV 是对应 RARRAY 的实数型数组, IZV 是对应 IARRAY 的整型数组。后面的 ZV/IZV 是带指针数组, A(NCOL, NROW)/A(NCOL, NROW), 用来指定分配给模型给定层中节点(单元)的带号。数组的元素一般为整型(例如, 区别每一单元所在带的整型代码)。但是, 这些元素储存在为输入变量保留的数组中, 因而遵从输入变量的格式。因此, 带指针要按照数组控制记录中第三部分指定的格式(FMTIN)读取, 对 RARRAY 该格式指定为实数型, 对 IARRAY 指定为整型。如果一个单元的带指针为零, 这个单元的值就设定为零(见图 6.1)。

RARRAY 的带格式:

NZONES (自由格式)

ZV(1), ZV(2),ZV(NZONE) (自由格式)

A(NCOL, NROW) (FMTIN 的格式)

IARRAY 的带格式:

NZONE (自由格式)

IZV(1), IZV(2),IZV(NZONE) (自由格式)

IA(NCOL, NROW) (FMTIN 的格式)

- (5) 如果 IREAD=103, 在数组控制记录后有一个数值数组, 数组值用表格式(自由格式)读取。(见图 6.1)。
- (6) 如果 IREAD=除 0, 100, 101, 102, 103 之外的任何一个值, 数组值从单独的一个文件中读取。
- (a) 如果 IREAD>0, 它就是单元号, 外部文件采用 FMTIN 指定的格式读取。
- (b) 如果 IREAD<0, 用 IREAD 的绝对值表示单元号, 数组数值从外部无格式文件中读取。该无格式文件包括一头记录和 NCOL*NROW 个数值的无格式记录。
2. CNSTNT/ICONST—常量。它的使用取决 IREAD 的数值
- (1) 如果 IREAD=0, 数组的每一个元素都设定为 CNSTNT/ICONST。
- (2) 如果 IREAD≠0, 且 CNSTNT/ICONST≠0, 数组元素要乘以 CNSTNT/ICONST。
3. FMTIN—用于读取数组值或带指针数组的格式说明。这种格式必须加括号, 如(15F5.0)表示实数型数值, (15I5)表示整型数值。
4. IPRN—指示标志, 提示用户正在读取的数组要不要打印出来核对, 它也用作打印格式的代码。只有当 IREAD 不为零时它才能使用。如果指定的值超出了表 6.1 中所列的范围, IPRN 就设定为零。如果 IPRN 小于零, 数组不会被打印。

表 6.1 对应于 IPRN 代码的打印格式
(据 McDonald 和 Harbaugh, 1988)

<u>IPRN</u>	<u>RARRAY</u>	<u>IARRAY</u>
0	10G11.4	10I11
1	11G10.3	60I1
2	9G13.6	40I2
3	15F7.1	30I3
4	15F7.2	25I4
5	15F7.3	20I5
6	15F7.4	
7	20F5.0	
8	20F5.1	
9	20F5.2	
10	20F5.3	
11	20F5.4	
12	10G11.4	

6.2 输入和输出变量单位

MT3DMS 软件对输入、输出变量使用一致的单位。在基本运移程序包的输入文件中，用户决定时间、长度和质量的单位。任何输入变量或常量的单位必须与三个基本单位相一致。例如，设定天(d)作为时间单位，英寸(ft)为长度单位，英镑(lb)为质量单位。这样，水头单位为 ft，溶质浓度单位为 lb/ft³，弥散度单位为 ft，线性吸附分配系数单位为 ft³/lb，一级动态反应的反应速率单位为 d⁻¹，等等。类似的，如果选用国际标准单位，秒(s)，厘米(cm)，克(g)作为时间、长度和质量的单位，相应地，水头单位是 cm，溶度单位是 g/cm³，弥散度单位是 cm，线性吸附分配系数单位是 cm³/g，一级动态反应的反应速率单位是 s⁻¹，等等。需要强调的是，用户选择的单位仅是为了标识不同的值，并不影响计算结果。

需要特别指出的是溶度的单位。相容单位的使用有时可能引起溶度的值很大或很小，使结果更容易受舍入误差影响。再者，使用例如 ppm 的通用单位，要比相容但复杂的单位，如 lb/ft³ 要方便得多。在 MT3DMS 软件中，如果不需要模拟非线性吸附或其它类型的非线性反应，允许使用任何一个浓度单位。输出浓度的单位将会与输入单位一致。值得注意的是，模型计算的质量是由浓度乘以流量乘以时间得出来的。这样，如果使用非相容单位并且值的绝对值很重要的话，就需要一个转化因子来转化计算质量到正确的单位，这个转化由用户完成。也可

能会用相对浓度进行计算,在这种情况下,输入模型的所有的浓度要根据含水层或水源地的最大浓度(C_0)划分等级,模型以相对浓度(C/C_0)模拟变化量。

6.3 与流动模型连接

MT3DMS 被设计为与块体中心的有限差分流动模型联合使用,这就允许用户独立地构建和校准一个流动模型。在运行 MT3DMS 之前,饱和带厚度,通过单元截面的各方向的通量,包括非稳定地下水储存的各个源/汇的位置和流速,由水流模型求解并储存在无格式的“流动—运移连接文件”中。该文件的存储方式应使得 MT3DMS 能通过流动模型连接程序包直接恢复该文件。附录 C, 连接 MT3DMS 和流动模型, 将详述无格式流动—运移连接文件的结构和形式。

6.3.1 LinkMT3D 程序包与 MODFLOW 代码的合并

许多实例中, 美国地质调查局的模块化三维有限差分地下水流动模型 (MODFLOW)用于解决流动问题, 一个程序包配合 MODFLOW 储存 MT3DMS 需要的信息。这个程序包在第 3 版中叫做 LKMT3, 已与 MODFLOW 代码合并, 并与 MT3DMS 分离。首选使用 MODFLOW 而不用与 MT3DMS 分离的那个程序包, LKMT3 程序包必须添加到 MODFLOW 中。

为了把 LKMT3 程序包添加到 MODFLOW 中, 在下面两个声明中把 LKMT3.INC 文件的声明插入到 MODFLOW 的主程序中。

```
CALL BAS10C (...)  
IF(CNVG .EQ. 0) STOP
```

这一步可用 FORTRAN 的 Include 声明完成:

```
CALL BAS10C (...)  
INCLUDE 'LKMT3.INC'  
IF(CNVG .EQ. 0) STOP
```

其中 Include 声明的语法对不同的编译程序会稍有不同, 经过修改后要重新编译主程序。接下来, 为 LKMT3 程序包编译源文件, 即 LKMT3.FOR 或 LKMT3.F90, 并将它与 MODFLOW 其它文件连接起来。

需要指出的是, 上面所述的程序用于 MODFLOW88 版本(MODFLOW88, McDonald 和 Harbaugh, 1988)。为了给新版 MODFLOW (即 MODFLOW-96) (Harbaugh 和 McDonald, 1996)添加 LKMT3 程序包, 需要将程序稍作改动。查阅 MT3DMS 中的 MODDLOW.TXT 文件获取详细信息。

6.3.2 激活 MODFLOW 模拟中的 LinkMT3D 程序包

要激活已添加到 MODFLOW 中的 LKMT3 程序包, 用户需要为 MODFLOW 基本程序包的输入文件中的 IUNIT 数组的第 22 个元素 (即 IUNIT(22)) 输入一个正整数。这就指示 MODFLOW 程序保存无格式的流动—运移连接文件供

MT3DMS 使用。这个正整数也用作要存储饱水带厚度和流动项的单元编号。因此，这个值必须是唯一的，没有被其它输入和输出文件使用过。如果 IUNIT(22) 指定为 0，LKMT3 程序包将不保存文件。

6.4 基本运移程序包的输入说明

基本运移程序包 BTN 的输入在单元 INBTN=1 上读取，该单元在主程序中已设定。由于 BIN 程序包在每一个模拟中都要用到，经常要用到这个输入文件。注意下划线部分是新版本的新特点。

对于每一个模拟：

A1: 记录: HEADING(1)

格式: A80

- HEADING(1)是模拟运行的任何名称或标题的第一行，这一行不能超过 80 个字符。

A2: 记录: HEADING(2)

格式: A80

- HEADING(2)是模拟运行的任何名称或标题的第二行，这一行不能超过 80 个字符。

A3: 记录: NLAY, NROW, NCOL, NPER, NCOMP, MCOMP

格式: 6I10

- NLAY 是总层数;
- NROW 是总列数;
- NCOL 是总行数;
- NPER 是总应力期数;
- NCOMP 是当前模拟中化学组分的总数，对单组分模拟设定 NCOMP=1。
- MCOMP 是可流动组分的总数，MCOMP 必须等于或等于 NCOMP。对但组分模拟设定 MCOMP=1。

注意: 运移和反应都包括流动组分，而非流动组分(NCOMP-MCOMP)只被包括在反应中。而且，对 NCOMP 所包含的每一种组分，如果通过化学反应程序包指定了等温吸附线或双区质量转移，MT3DMS 会自动追踪吸附或非流动的对应该部分。这样，就没有必要单独定义一个非流动组分来模拟吸附和双区系统。为了配合 MT3DMS 使用附加反应程序包时，才需要单独定义非流动组分。

A4: 记录: TUINT, LUNIT, MUNIT

格式: 3A4

- TUINT 是时间单位，如 DAY 或 HOUR;
- LUNIT 是长度单位，如 FT 或 M;
- MUNIT 是质量单位，如 LB 或 KG。

注意,这些单位名称只用作区别值的属性,并不影响模型的输出结果。

A5: 记录: TRNOP (10)

(ADV DSP SSM RCT GCG XXX XXX XXX XXX XXX)

格式: 10L2

- TRNOP 是主要运移和解法选项的逻辑标识。TRNOP (1)到(5)分别对于对流, 弥散, 汇源混合, 化学反应和广义共轭梯度解法程序包。如果任何一个选项被选择, 输入与 TRNOP 对应的元素为 T, 否则输入 F。 TRNOP (6)到(10)为附加程序包保留。

A6: 记录: LAYCON (NLAY)

格式: 40I2

- LAYCON 是一个一维整型数组, 表明模型层的类型。数组的每一个值对应一个模型层。若 NLAY>40, 可根据需要分多行输入 LAYCON。若 LAYCON=0, 模型层是承压的。输入后面数组中的层厚 DZ 将作为该层的饱和带厚度使用。
若 LAYCON≠0, 模型层是非承压的, 也可以在承压和非承压之间转化。饱和带厚度由流动模型计算并保存在流动-运移连接文件中, 供运移模型读取和使用。(应注意到, 这一类型对应于 MODFLOW 中 LAYCON 的值 1, 2, 3; 在运移模拟中不必区分这些层的类型)

A7: 数 组: DELR(NCOL)

读取器: RARRAY

- DELR 是一个一维实数型数组, 它代表单元格沿行, 也就是列数(j)增长方向的宽度(Δx)。给网格每列都定义一个值。

A8: 数 组: DELC(NROW)

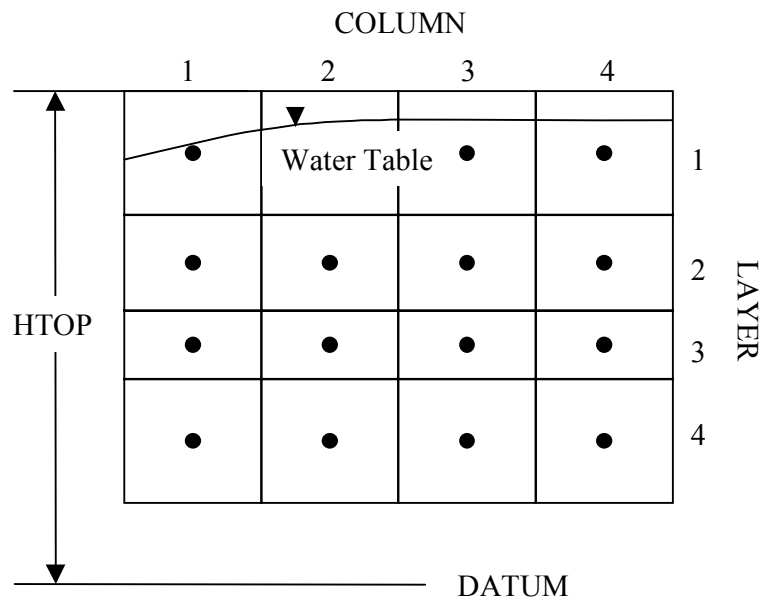
读取器: RARRAY

- DELC 是一个一维实数型数组, 它代表单元格沿列, 也就是行数(i)增长方向的宽度(Δy)。给网格每行都定义一个值。

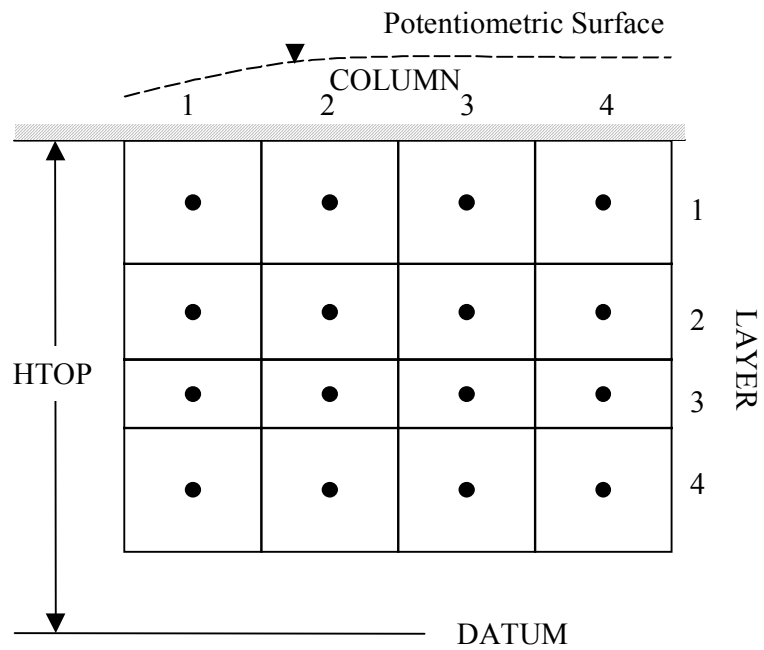
A9: 数 组: HTOP(NCOL, NROW)

读取器: RARRAY

- HTOP 是一个二维数组, 定义模型层第一层(顶层)的顶板高度, 相对于如水头同样的资料。
如果第一层是非承压的, 可以将 HTOP 简单地置为高于潜水面的一个统一高度(见图 6.2a)。值得注意的是, 第一层单元格的浓度是在该层底部和 HTOP 之间的中点处计算的。因此, HTOP 不能给得比潜水面高太多。还有, HTOP 与第一层底部高程之差必须等于下一个记录中定义的层厚 DZ。
如果第一层是承压的, HTOP 等于上覆于该层的承压单元的底部高程(见图 6.2b)。



(a) Array HTOP for an unconfined aquifer.



(b) Array HTOP for a confined aquifer.

图 6.2 潜水和承压含水层的 HTOP 数组图解

A10: 数 组: DZ(NCOL, NROW) (每层一个数组)

读取器: RARRAY

- DZ 是每一模型层中所有单元的厚度。DZ 是一个三维数组。三维数组的输入处理成对应于每一层的一系列二维数组的输入，每层

一个数组，按层序 1, 2,NLAY 输入。第一层的厚度必须等于 HTOP 与其底部高程之差。当网格剖分成水平层时，第一层的 HTOP 与每一层的 DZ 是恒定的(见图 6.3a)。如果网格在垂向上是变形的，同一层中各单元的 HTOP 和 DZ 也可能是变化的(见图 6.3b)。

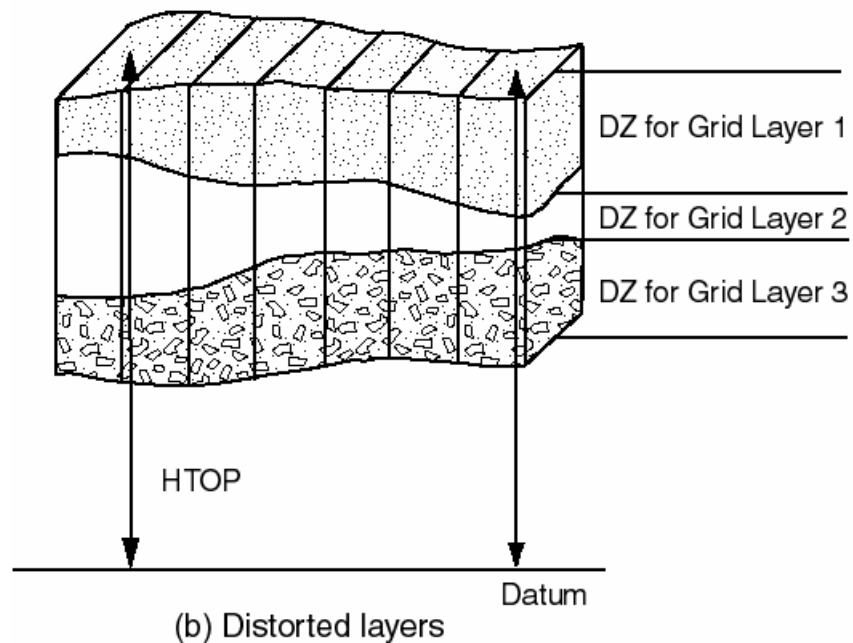
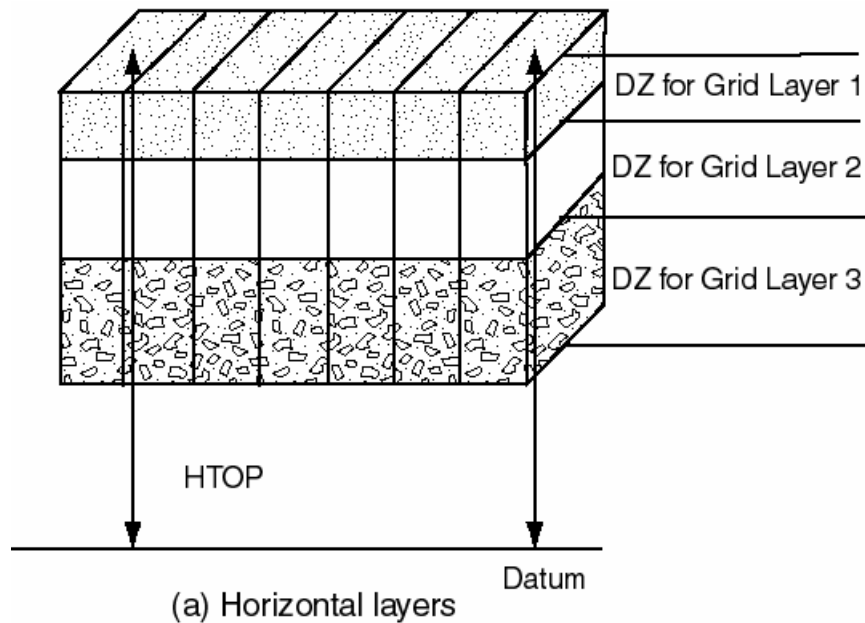


图 6.3 对不同垂向剖分方案的 HTOP 和 DZ 数组

A11: 数 组: PRSITY(NCOL, NROW) (每层一个数组)

读取器: RARRAY

- PRSITY 是单孔隙系统中介质的有效孔隙度(见第 2 章的论述)。如果模拟一个双孔隙度系统, PRSITY 必须指定为可流动孔隙度(即, 充满流动水的连通孔隙体积与多孔介质的总体积之比)。不流动孔隙度通过化学反应程序包定义。

A12: 数 组: ICBUND(NCOL, NROW) (每层一个数组)

读取器: IARRAY

- ICBUND 为一整型数组, 为每个模型单元定义边界条件 (不活动, 定浓度, 活动)。对于多组分模拟, ICBUND 定义的边界由各组分共用。值得注意的是, 不同的组分通过源汇混合程序包允许有不同的定浓度边界条件。

如果 ICBUND=0, 对所有组分来说, 单元都是非活动浓度单元。

需要注意的是, 无水流或干单元会被自动转换成非活动浓度单元。再者, 取决于水流的活动单元可以当作非活动浓度单元以减小运移模拟的面积, 只要这些单元附近的溶质运移是不显著的。

如果 ICBUND<0, 对所有组分来说, 单元都是定浓度单元。在整个模拟过程中, 单元中每一组分的初始浓度不变。(要在同一单元为不同的组分定义不同的浓度条件, 参见汇源混合程序包)。流动模型中的定水头单元除非明确定义为定浓度单元, 否则不能看作是定浓度单元。

如果 ICBUND>0, 单元是活动 (变化) 浓度单元, 其浓度值需要计算。

为每一组分输入 A13

A13: 数 组: SCONC(NCOL, NROW) (每层一个数组)

读取器: RARRAY

- SCONC 是模拟开始时的初始浓度 (初始条件) (单位, ML-3)。对于多组分模拟, 所有组分必须赋初始浓度, 每次一个组分。

A14: 记录: CINACT, THKMIN

格式: 2F10.0

- CINACT 是标识非活动浓度单元(ICBUND=0)的值。即使没有预计到模型中有非活动单元, 也必须赋予 CINACT 一个值。
- THKMIN 是单元中饱和层厚度的最小值, 用占整个模型层厚度(DZ)的百分比的小数来表示, 在这个值以下的单元认为是非活动单元。缺省值是 0.01, 即层厚的百分之一。

A15: 记录: IFMTCN, IFMTNP, IFMTRF, IFMTDP, SAVUCN

格式: 4I10, L10

- IFMTCN 是一个标识, 指示是否将计算的浓度输出到标准输出文本文件, 如果打印同时作为打印格式代码。打印格式代码同表 6.1 所列相同。

IFMTCN>0, 浓度以 wrap 格式打印(图 6.4a)

IFMTCN<0, 浓度以 strip 格式打印(图 6.4b)

IFMTC=0, 浓度结果不打印。

- IFMTNP 是一个标识, 指示是否将每一单元的质点数(整数)打印, 如果打印作为打印格式代码。约定与 IFMTCN 是一样的。
- IFMTRF 是一个标识, 指示是否将模拟计算的阻滞因子打印, 如果打印作为打印格式代码。约定与 IFMTCN 是一样的。
- IFMTDP 是一个标识, 指示是否将模拟计算的加权距离加权的弥散度系数打印, 如果打印作为打印格式代码。约定与 IFMTCN 是一样的。
- SAVUCN 是一个逻辑标识, 指示是否将浓度解保存在缺省的无格式(二进制)文件 MT3Dnnn.UCN, 其中, nnn 表示组分索引号, 该文件可用于后期处理或作为连续运行的初始条件。

如果 SAVUN=T, 各组分的浓度将保存缺省文件 MT3Dnnn.UCN 中。

另外, 为与 MT3Dnnn.UCN 联合使用用于后期处理, 模型空间离散信息将保存在缺省名为 MT3D.CNF 的文件中。

如果 SAVUCN=F, MT3Dnnn.UCN 和 MT3D.CNF 都不创建。

A16: 记录: NPRS

格式: I10

- NPRS 是一个标识, 指示输出频率, 也指示按照总模拟时间还是运移步长数目指定输出频率。注意, 打印或保存的内容由前面记录(Record A15)中输入的值控制。

如果 NPRS>0, 模拟结果将输出到标准输出文本文件中, 或者保存到下一条记录 TIMPRS(NPRS)指定的无格式浓度文件中。

如果 NPRS=0, 除在模拟结束时, 模拟结果不会被打印或者保存。

如果 NPRS<0, 打印或保存模拟结果, 无论运移步长数是否是 NPRS 的倍数。

仅当 NPRS>0 时, 输入 A17

A17: 记录: TIMPRS(NPRS)

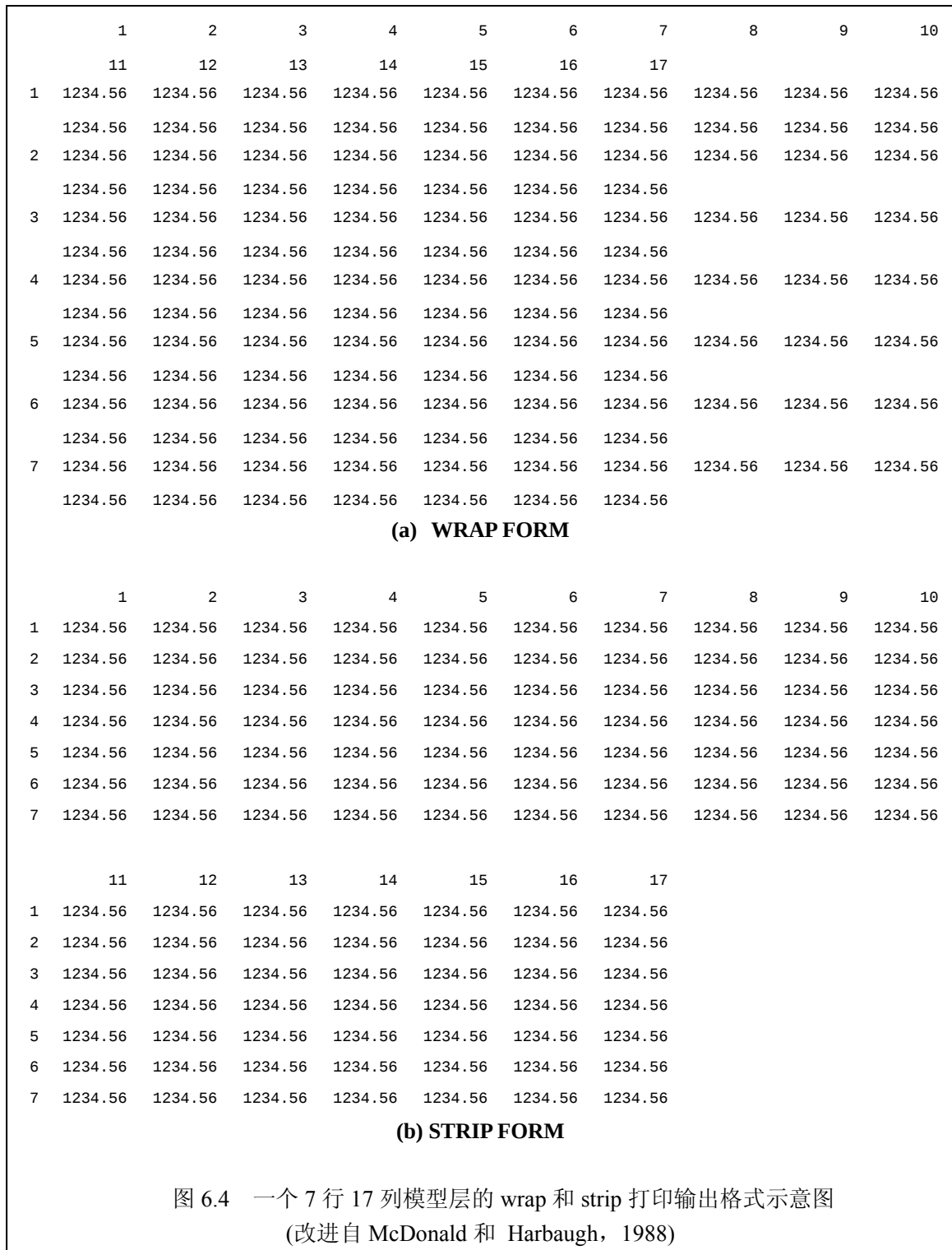
格式: 8F10.0

- TIMPRS 是总耗时, 此时将模拟结果打印到标准输出文本文件或保存在缺省的无格式浓度文件 MT3Dnnn.UCN 中。如果 NPRS>8, TIMPRS 根据需要可多行输入。

A18: 记录: NOBS, NPROBS

格式: 2I10

- NOBS 是观测点的编号, 观测点上各组分的浓度都将按指定频率保存在缺省文件 MT3Dnnn.OBS 中, nnn 是组分索引编号。
- NPROBS 是一个整数, 表明指定观测点的浓度保存频率。每 NPROBS 步保存一次浓度。



仅当 NPROBS>0 时，输入 A19

A19: 记录: KOBS, IOBS, JOBS

格式: 3I10

- KOBS, IOBS 和 JOBS 是观测点或观测井所在位置的单元索引(层, 行, 列), 这个单元每一步运移的浓度都要打印到文件 MT3Dnnn.OBS 中。每个观测点输入一组 KOBS, IOBS, JOBS 值。

A20: 记录: CHKMAS, NPRMAS

格式: I10, I10

- CHKMAS 是一个逻辑标识, 指示是否将质量平衡信息打印到缺省文件 MT3Dnnn.MAS 文件中, 其中 nnn 是组分索引号。
CHKMAS=T, 每一步运移的质量平衡信息都会保存在 MT3Dnnn.MAS 中。
CHKMAS=F, 文件 MT3Dnnn.MAS 不会被创建。
- NPRMAS 是一个整数, 指示质量平衡信息保存到 MT3Dnnn.MAS 的频率。每 NPRMAS 步保存一次质量平衡信息。

对于每一个应力期

A21: 记录: PERLEN, NSTP, TSMULT

格式: F10.0, I10, F10.0

- PERLEN 是当前应力期的长度。如果是非稳定流问题, 这里指定的 PERLEN 必须与流动模型中相同。如果是稳定流, PERLEN 可按需要设定为任何值。
- NSTP 是当前应力期下非稳定流模拟时间步长的编号。如果是稳定流, NSTP=1。
- TSMULT 是非稳定流问题中连接时间步长长度的乘数, 仅当 NSTP>1 时才使用。

TSMULT>0, 当前应力期内每一流动时间步长的长度将用 MODFLOW 中的几何级数进行计算。如果是非稳定流模型, 此处指定的 NSTP 和 TSMULT, 必须与在流动模型中指定的相同。

TSMULT≤0, 当前应力期内每一流动时间步长的长度从 TSLNGH 记录中读取 (见 A22)。当时间步长的长度不是基于流动模型中的几何级数时, 需要此选项。

如果 TSMULT≤0, 输入 A22

A22: 记录: TSLNGH(NSTP)

格式: 8F10.0

TSLNGH 提供了当前应力期下流动解的时间步长的长度。仅当流动解的时间步长的长度不是基于几何级数时才需要这一记录。如果 NSTP>8, 按需要可分行输入 TSLNGH。

A23: 记录: DT0, MXSTRN, TTSMULT, TTSMAX

格式: F10.0, I10, 2F1.0

- DT0 是用户指定的流动解中每一个时间步长内运移步长大小。DT0 根据解法选项是显式还是隐式进行不同的说明。
对于显式解法 (即没有用 GCG), 程序将总是计算遵从各种稳定性标准的最大的运移步长大小。将 DT0 置为 0 使得模型计算的运移步长大小在模型中被使用。然而, 模型计算的 DT0 不可能总是理想的。这种情况下, 应该通过调整 DT0 找到一个值从而得到最好的结果。如果所给的 DT0 的值大于模型计算的

步长大小，模拟将采用模型计算步长大小，而不是用户指定的值。

对于隐式解法（即采用 GCG 解法），DT0 就是最初的运移步长大小。如果它的值为零，将采用基于对流程程序包中用户指定的 Courant 数而由模型计算的 DT0。后面的运移步长大小可能增加或者保持不变，取决于用户指定的运移步长的乘数 TTSMULT 和对流项解法。

- MXSTRN 是在水流模型一个时间步长内所允许的运移步长的最大值，如果运移步长数超过 MXSTRN，模拟就会终止。
- TTSMULT 是对一个水流时间步长内连续运移步长的乘数，如果采用广义共轭梯度(GCG)解法且对流项选用标准有限差分法求解。1.0 到 2.0 之间的值通常认为是恰当的。如果没有使用 GCG 程序包，运移被显式求解，就像最初的 MT3D 软件，而且不管用户输入何值 TTSMULT 总是设置为 1.0。值得注意的是对于基于粒子追踪的解法和三阶 TVD 方法，不会用到 TTSMULT。
- TTSMAX 是当运移步长大小的乘数 TTSMULT 大于 1.0 时的最大运移步长大小。TTSMAX 等于零表示无最大值限制。

6.5 对流程程序包的输入说明

对流程程序包的输入是从主程序中的单元 INADV=2 读取。仅当用到对流程程序包时才需要输入文件，然而这个程序包基本上所有情况下都要用到。注意加下划线的部分是当前版本引入的一些新的特征量。

对每次模拟

B1: 记录: MIXELM, PERCEL, MXPART, NADVFD

格式: I10, F10.0, 2I10

- MIXELM 是一个用来表示对流解法选项的整型标识。
MIXELM=0, 上游或中心加权的标准有限差分法，取决于 NADVFD 的值；
=1, 向前追踪特征值法 (MOC)；
=2, 向后追踪特征值法 (MMOC)；
=3, 混合特征值法，即自动、动态选择 MOC 法或 MMOC 法；
=-1, 三阶 TVD 方法 (ULTIMATE)。
- PERCEL 是 Courant 数，即：一个运移步长内任何方向上允许对流的单元数（或单元的一部分）。
对于隐式有限差分法或粒子追踪法，PERCEL 的值没有限制，但是为了精确，它的值一般不大于 1。应该注意的是，对整个模型网格都要检查 PERCEL 的限制，因此，即使 PERCEL 大于 1，在模型中的大部分位置上对流也不会大于一个单元格长度。
对于显式有限差分法或三阶 TVD 方法，PERCEL 仍然是一个稳定性限制，要求它不能超过 1。如果指定值超过了 1 将会被自动重设为 1。
- MXPART 表示允许运动粒子的最大数目，只有在 MIXELM=1 或 3

时才会用到。

- NADVFD 是一个用来表示采用何种加权方法的整型标识，它仅当对流项用隐式有限差分法求解时才会用到。
NSDVFD=0或1，上游加权（缺省）。
=2，中心加权。

（如果MIXELM=1, 2或3时，输入B2）

B2: 记录: ITRACK, WD

格式: I10, F10.0

- ITRACK 是一个标识，表示欧拉—拉格朗日方法选用的是何种粒子跟踪法。
ITRACK=1，采用一阶欧拉算法。
=2，采用四阶 RUNGE-KUTTA 算法；该选项取决于计算要求，而且只有在 PERCEL>1 时才会用到。
=3，采用一阶和四阶的混合算法；RUNGE-KUTTA 算法在源/汇单元及其相邻单元中使用，而其它单元采用 EULER 算法。
- WD 是一个介于 0.5~1 之间的浓度权重因子。它用于粒子追踪法中的算子分割。它的值一般取 0.5 就是恰当的。但为了取得更好的质量平衡，它的值可以进行调整，一般来说随着对流占主导程度的增大，它的值可以增加至接近于 1。

（如果MIXELM=1或3，输入B3）

B3: 记录: DCEPS, NPLANE, NPL, NPH, NPMIN, NPMAx

格式: F10.0, 5I10

- DCEPS 是一个相对较小的单元浓度梯度。当梯度值小于它时对流可忽略；它的值一般为 10⁻⁵。
- NPLANE 是一个标识，指示原始粒子放置时所采用的是随机模式还是固定模式。
NPLANE=0，原始放置采用随机模式。粒子用一个称为随机数生成器（图4.11b）的程序随机分布于水平和垂直方向。通常首选这种模式，因为它能够使非均匀流场或分散/汇集流场中的质量平衡偏差变得更小。
NPLANE>0，原始放置采用固定模式。NPLANE的值就等于垂直平面的数目，在这些平面上原始粒子放在每个单元体（图4.11a）。只有在相对均匀的流场中固定模式比随机模式要好。对于平面上的二维模拟，将NPLANE设为1；对于交错组合或三维模拟，NPLANE一般设为2；如果在垂直方向上需要更好的分辨率可以增加NPLANE的值。
- NPL 是相对单元浓度梯度小于或等于 DCEPS 的单元中每个单元放置的原始粒子数。一般来说，既然当相对单元浓度梯度小于或等于 DCEPS 时对流可以忽略，NPL 的值可以设为 0。将 NPL 设为与 NPH 相等会导致整个网格内每个单元内的粒子数目相等（即均匀方法）。
- NPH是相对单元浓度梯度大于DCEPS的单元中每个单元放置的原始粒子数。NPH的选择由流场的性质和计算机内存的限制决定，一般来

说，在相对均匀的流场中其值小一些，而在相对非均匀的流场中其值大些。但是，其值在二维模拟中很少有必要大于16，三维模拟中取32也足够了。如果选用的是随机模式，NPH个粒子随机分步在单元体中；如果选用的是固定模式，NPH除以NPLANE的商才是每个垂向平面中放置粒子的数目，这个值接近于图6.5中的某个值。

- NPMIN是每个单元中能够放置粒子的最小数目。如果在一个运移步长结束时单元中的粒子数少于NPMIN，新的粒子将被插入以保证足够的粒子数目。在相对均匀的流场中NPMIN可设为0，而在分散/汇集的流场中其值大于0。一般来说，其值取0~4就足够了。
- NPMAX是每个单元中能够放置粒子的最大数目。如果在一个单元中粒子的数目超过了NPMAX，所有的粒子将被从这个单元中拿走，然后换入新的粒子，其数目为NPH，以保持质量平衡。一般来说，NPMAX的值可以近似设为NPH的两倍。

（如果MIXELM=2或3时，输入B4）

B4: 记录: INTERP, NLSINK, NPSINK

格式: 3I10

- INTERP是一个标识，指示MMOC方法中采用的浓度插值法。目前，仅采用线性内插法。输入INTERP=1。
- NLSINK是一个标识，指示MMOC方法中采用随机模式还是固定模式布置初始粒子以近似表示汇处单元。约定与NPLANE相同，一般来说将NPSINK设为和NPLANE相等就是恰当的。
- NPSINK是MMOC方法中近似表示汇单元的所有粒子的数目。约定与NPH相同，一般来说将NPSINK设为和NPH相等就够了。

（如果MIXELM=3时，输入B5）

B5: 记录: DCHMOC

格式: F10.0

- DCHMOC是临界相对浓度梯度，用来控制HMOC解法中MOC或MMOC的选择。
在相对浓度梯度大于DCHMOC的单元中选用MOC解法。
在相对浓度梯度小于或等于DCHMOC的单元中选用MMOC解法。

6.6 弥散程序包的输入说明

弥散程序包的输入是从主程序中的单元INDSP=3中读取的。仅当模拟用到弥散程序包时才会需要输入文件。

对每次模拟:

C1: 数 组: AL(NCOL, NROW) (每层一个数组)

读取器: RARRAY

- AL是模型网中每个单元的纵向弥散度 α_L (单位L)。

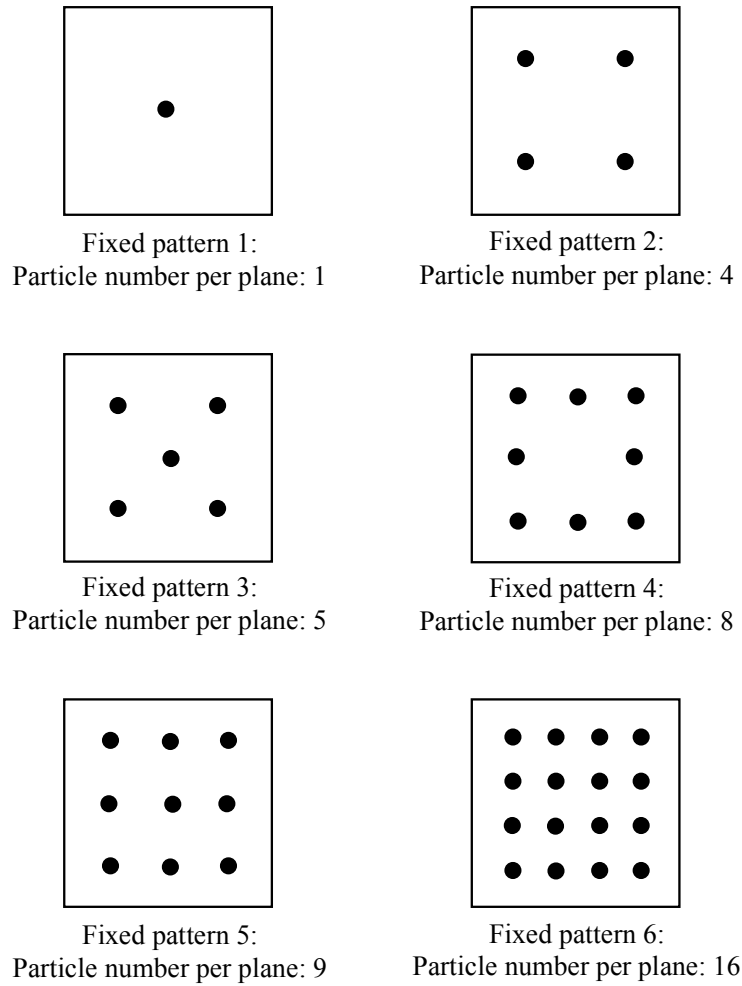


图 6.5 采用固定格式的初始粒子分布。如果采用固定格式，每个单元放置的粒子数(NPL 或 NPH)被垂向平面的数目 (NPLANE) 相除，给出每个垂向平面放置的粒子数，这个数接近于上图所示的一个值。

C2: 数 组: TRPT(NLAY)

读取器: RARRAY

- TRPT是一个一维实数型数组，定义模型中每一层水平横向弥散度 α_{TH} 和纵向弥散度 α_L 的比值。数组中每个值对应模型中的一层。

最近的一些野外研究表明TRPT一般不大于0.1。

C3: 数 组: TRPV(NLAY)

读取器: RARRAY

- TRPV是垂向横向弥散度 α_{TV} 和纵向弥散度 α_L 的比值。数组中每个值对应于模型中的一层。最近的一些野外研究表明TRPV一般不大于0.01。

将TRPV的值设置成与TRPT相等就可以用标准各向同性弥散模型（第2章方程2.10）。否则就采用修正的各向同性弥散模型（第2章方程2.11）。

C4: 数 组: DMCOEF(NLAY)

读取器: RARRAY

- DMCOEF是有效分子扩散系数（单位： L^2T^{-1} ）。如果分子扩散的影响不大，可将DMCOEF置为0。数组中每一个值对应于模型中的一层。

6.7 源/汇混合程序包的输入说明

源/汇混合程序包的输入是从主程序中单元INSSM=4中读取的。有源或汇用于水流模型时就需要输入文件，包括在定水头或一般水头边界条件。对于源/汇类型的划分，MT3DMS和MODFLOW是一样的（McDonald 和Harbaugh 1988）。注意加下划线的部分是当前版本引入的一些新的特征。

对每次模拟:

D1: 记录: FWEL, FDRN, FRCH, FEVT, FRIV, FGHB, (FNEW(n), n=1, 4)

格式: 10L2

- FWEL是井的逻辑标识。
- FDRN是渠的逻辑标识。
- FRCH是补给的逻辑标识。
- FEVT是蒸散发的逻辑标识。
- FRIV是河的逻辑标识。
- FGHB是一般水头边界的逻辑标识。

FNEW是为附加的源/汇项保留的逻辑标识。

如果水流模型中用到以上各项中任何一项，它相应的标识就必须置为T（真），否则置为F（假）。

注意，当用MODFLOW来为MT3DMS求解水流结果时，MODFLOW中的LKMT的版本2和以后版本会在无格式的水流—运移连接文件中为这些标识存储合适的值。如果这些标识赋值不正确，MT3DMS将发出警告，重新设置这些标识到正确的值，然后继续进行模拟。

还应该注意的是，一个常用的MODEFLOW附加程序包，

Streamflow-Routing (STR)，由河选项支持。它是通过将MT3DMS中的河选项与STR程序包连接，而不是MODFLOW中的RIV程序包实现的。因此，RIV和STR不能在同一个MODFLOW模拟中同时使用。

D2: 记录: MXSS

格式: I10

- MXSS是水流模型中所有点汇和点源的最大数目。点汇和点源包括定水头单元，井，渠，河流和一般水头边界单元。补给和蒸腾被当作面状的源汇处理，因此，它们不被计算在内。MXSS的值应该设置得接近水流模型中实际的点源和点汇的总数，以减少用于存储点源和点汇的计算机内存。

对于各应力期:

(如果 FRCH=T, 输入 D3)

D3: 记录: INCRCH

格式: I10

- INCRCH是一个标识, 指示一个包含各组分的浓度补给通量的数组是否在当前应力期内被读取。

如果 $\text{INCRCH} \geq 0$, 包含各组分浓度补给通量的数组将会被读取。

如果 $\text{INCRCH} < 0$, 则使用前一个应力期的浓度补给通量。如果在第一应力期内就指定 $\text{INCRCH} < 0$, 程序将把正的补给通量(源)的浓度默认为 0, 而负的补给通量(汇)的浓度默认为含水层的浓度。

(如果 FRCH=T 且 $\text{INCRCH} \geq 0$, 为各组分输入 D4)

D4: 数 组: CRCH (NCOL, NROW)

读取器: RARRAY

- CRCH 是特定组分补给通量的浓度。如果补给通量为正, 则把它当作一个源, 它的浓度值可根据需要指定。如果补给通量为负, 则把它当作汇(排泄), 它的浓度值通常设成等于汇所在单元的地下水的浓度。值得注意的是, 补给/排泄的位置和流速是通过无格式化的水流-运移连接文件直接从水流模型中获得的。

(如果 FEVT=T, 输入 D5)

D5: 记录: INVCEVT

格式: I10

- INVCEVT 是一个标识, 指示一个包含各组分的浓度蒸腾通量的数组是否在当前应力期内被读取。

如果 $\text{INVCEVT} \geq 0$, 读取包含各组分蒸腾通量的浓度的数组。

如果 $\text{INCRCH} < 0$, 则使用前一个应力期的蒸腾通量的浓度。如果第一应力期内就指定 $\text{INCRCH} < 0$, 程序将把负的蒸腾通量(汇)的浓度默认为含水层的浓度, 而正的蒸腾通量(源)的浓度默认为 0。

(如果 FEVT=T 且 $\text{INVCEVT} \geq 0$, 为各组分输入 D6)

D6: 数 组: CRCH (NCOL, NROW)

读取器: RARRAY

- CEVT 是某特定组分的蒸腾通量的浓度。蒸腾是唯一可以由外面指定浓度的汇。值得注意的是, 汇的浓度不能大于汇单元所在含水层的浓度, 因此, 为汇指定的浓度大于含水层的浓度, 它被自动设置成等于含水层的浓度。还有, 蒸腾的位置和流速可以通过无格式的水流-运移连接文件直接从水流模型中获得。

D7: 记录: NSS

格式: I10

- NSS 是需要给定浓度值的点源的数量。未给定的点源的浓度值默认为 0。（点汇的浓度值一般设为等于汇处地下水的浓度）
值得注意的是，在 MT3DMS 中，点源广义上不仅包括水流模型中与流速相关的项，而且还包括那些与水流不相关的项。这种“质量负荷”源可以用作污染源，它对流场的水力特性影响很小。

（如果 $NSS > 0$ ，输入 NSS 次 D8）

D8: 记录: KSS ISS JSS CSS ITYPE, (CSSMS(n), n=1, NCOMP)
格式: 3I10, F10.0, I10, [自由的]

- KSS, ISS, JSS 是点源所在单元的索引（层，行，列），对点源的每种组分都要指定浓度。
- CSS 是在单组分模型中，根据 ITYPE 的值所给定的源浓度值或质量负荷率。（在多组分模型中不使用 CSS，然而仍然要给它输入一个值。）

值得注意的是，对于大多数的源，CSS 认为是单位体积 (ML^{-3}) 的单位质量的源浓度，它乘以在水流模型中相应的流速 (L^3T^{-1})，就得出该源的质量负荷率 (MT^{-1})。

对于特定的源 ($ITYPE=15$)，CSS 直接作为源的质量负载率 (MT^{-1})，因而不需要水流模型得出的流速。

如果源被指定为定浓度单元 ($ITYPE=-1$)，CSS 的给定值直接作为指定单元的浓度值。如果指定单元跟水流模型中的源汇有关，则不需要流速。

- ITYPE 是指示点源类型的整型值，如下所示：
ITYPE=1，定水头单元；
=2，井；
=3，渠（注意：在 MODFLOW 中一般认为渠也是汇，因此，如果是从 MODFLOW 中得出水流结果，渠的浓度不能被给定。）
=4，河（或溪）；
=5，一般水头边界单元；
=15，质量负荷源；
=-1，定浓度单元。
- (CSSMS(n), n=1, NCOMP)为 $NCOMP > 1$ 的多组分模拟定义一个点源的浓度值。在多组分模拟中，有必要定义跟点源相关的所有组分的浓度值。例如：如果一种含某种组分的化学物质注入一个多组分系统中，该组分的浓度指定大于零而其他组分的浓度定为零。CSSNS(n)以自由格式输入，用逗号或者空格来分开。
在指定定浓度条件 ($ITYPE=-1$) 时要注意以下几点：
(a) 此处输入文件中定义的定浓度条件要优先于基本运移程序包中定义的定浓度条件。
(b) 在有多期应力的模拟中，一个定浓度单元，一旦被定义，在模拟进行期间它始终保持定浓度，然而在不同的应力期它可以有不同的浓度值。
(c) 在一个多组分模拟中，如果在同一个单元上只需要为选定组

分定义不同的定浓度条件, 那么就要为这些组分给定所需要的浓度值, 同时将其他组分给为负值。在 MT3DMS 中负值表示对指定组分不赋予定浓度值。

6.8 化学反应程序包的输入说明

化学反应的程序包的输入从主程序中的单元 INRCT=8 读取。只有进行化学反应模拟时才需要输入文件。另外, 双区系统运移模拟的选择也是通过该文件指定的。有下划线的表示在当前版本中新引入的特征量。

对于每个模拟:

E1: 记录: ISOTHM, IREACT, IRCTOP, IGETSC

格式: 4I10

- ISOTHM 用来标识哪种类型的吸附作用或者双区质量转移被模拟:
ISOTHM=0, 没有吸附被模拟;
=1, 线性吸附 (均衡控制);
=2, Freundlich 吸附作用 (均衡控制);
=3, Langmuir 吸附作用 (均衡控制);
=4, 一级动态吸附 (非均衡的);
=5, 双区质量运移 (没有吸附作用);
=6, 双区质量运移 (有吸附作用)。
- IREACT 用来标识所模拟的动态反应类型:
IREACT=0, 没有动态速率反应被模拟;
IREACT=1, 一级不可逆反应。
注意: 该反应程序包不能模拟不同组分之间的化学反应。要想模拟组分之间的反应需要使用一个特定的附加程序包。
- IRCTOP 是一个整型标识, 指示怎样输入反应变量:
IRCTOP $\geq$ 2, 所有反应变量被指定为三维数组;
IRCTOP<2, 所有反应变量指定为一维数组, 数组的每个值对应于一层。该选项主要是为了保留对以前版本 MT3D 的兼容性。
- IGETSC 是一个整型标识, 指示当模拟非均衡吸附 (ISOTHM=4) 或者双区质量转移 (ISOTHM=5 或 6) 时, 各组分的非均衡吸附相或不流动相的初始浓度是否被读取。
IGETSC=0, 不读取吸附或不流动相的初始浓度。缺省状态下, 假定吸附相与溶解相处于平衡 (ISOTHM=4), 非流动区的浓度为零 (ISOTHM=5 或者 6)。
IGETSC>0, 将读取所有组分的吸附相或非流动液体相的初始浓度。

(如果 ISOTHM=1, 2, 3, 4, 6; 但不等于 5, 输入 E2A)

E2A: 数 组: RHOB (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- RHOB 为含水层介质的容重 (单位 ML^{-3})。

(如果 ISOTHM=5, 6, 输入 E2B)

E2B: 数 组: PRSITY2 (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- PRSITY2 是模拟双区系统时不可流动区域的孔隙度, 即, 由不可流动液体所填充的孔隙体积与含水层介质总体积的比值。

(如果 IGETSC>0, 为每一组分输入 E2C)

E2C: 数 组: SRCONC (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- SRCONC 是如果 ISOTHM=4, 用户为某一特定组分的吸附相指定的初始浓度 (单位 ML^{-1})。注意: 对于均衡控制的吸附作用, 不能给定吸附相的初始浓度。
SRCONC 是如果 ISOTHM=5 或 6, 用户为不可流动液体相给定的初始浓度 (单位 ML^{-1})。

(如果 ISOTHM>0, 为每一组分输入 E3)

E3: 数 组: SP1 (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- SP1 是第一个吸附参数, 它的使用取决于选择的吸附作用类型 (即: ISOTHM 的值):
对于线性吸附 (ISOTHM=1) 和非均衡吸附 (ISOTHM=4), SP1 是分配系数 (K_d) (单位: L^3M^{-1})。
对于 Freundlich 吸附 (ISOTHM=2), SP1 是 Freundlich 平衡常数 (K_f) (单位取决于 Freundlich 指数 a)。
对于 Langmuir 吸附 (ISOTHM=3), SP1 是 Langmuir 平衡常数 (K_l) (单位, L^3M^{-1})。
对于没有吸附的双区质量转移 (ISOTHM=5), SP1 不使用, 但必须输入。
对于有吸附的双区质量转移 (ISOTHM=6), SP1 也是分配系数 (K_d) (单位, L^3M^{-1})。

(如果 ISOTHM>0, 为每一组分输入 E4)

E4: 数 组: SP2 (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- SP2 是第二个吸附或双区模型参数。SP2 的使用取决于选择的吸附作用或双区模型的类型:
对于线性吸附 (ISOTHM=1), SP2 被读取但不被使用;
对于 Freundlich 吸附 (ISOTHM=2), SP2 是 Freundlich 均衡指数 a 。
对于 Langmuir 吸附 (ISOTHM=3), SP2 是最大吸附浓度 (S) (单位, MM^{-1})。
对于非均衡吸附 (ISOTHM=4), SP2 是溶解相和吸附相之间的一级质量转移速率 (单位 T^{-1})。
对于双区质量转移 (ISOTHM=5 或 6), SP2 是两之间的一级一级质量转移速率 (单位, T^{-1})。

(如果 IREACT>0, 为每一组分输入 E5)

E5: 数 组: RC1 (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- RC1 是溶解 (液体) 相的一级反应速率 (单位 T^{-1})。如果一个双区系统被模拟, 流动区域和不可流动区域的液体相的反应速率被假定为是相同的。

(如果 IREACT>0, 为每一组分输入 E6)

E6: 数 组: RC2 (NCOL, NROW) (一个数组对应于一层)

读取器: RARRAY

- RC2 是吸附相的一级反应速率 (单位 T^{-1})。如果一个双区系统被模拟, 流动区域和不可流动区域的吸附相的反应速率被假定为是相同的。
通常如果反应是放射性衰变, RC2 应该等于 RC1, 而对于生物降解, RC2 可能不等于 RC1。
注意: 如果模拟中没有吸附作用, RC2 被读取但不使用。

6.9 广义共轭梯度解法程序包的输入说明

广义共轭梯度程序包 GCG 的输入是在主程序中单元 INCG=9 上读取的。如果 GCG 解法被用于隐式解法则输入文件式是必需的。该程序包在 MTDMS 中是新添加的。

对于每次模拟:

F1: 记录: MXITER, ITERI, ISOLVE, NCRS

格式: 自由的

- MXITER 是最大外部迭代次数; 只有当非线性等温吸附线用于模拟时, 它的值必须设为一个大于 1 的整数。
- ITERI 是最大内部迭代次数, 大多数情况下 30—50 之间的一个值就够了。
- ISOLVE 是 Lanczos/ORTHOMIN 加速方法中使用的预处理器的类型:
=1, Jacobi
=2, SSOR
=3, 改进的不完全 Cholesky (MIC) (MIC 通常收敛比较快, 但是需要相当大的内存)。
- NCRS 是一个整型标识, 表示对弥散张量的截项的处理:
=0, 将所有弥散张量的截项放到右边 (近似但效率);
=1, 包括全部的弥散张量 (加大的内存)

F2: 记录: ACCL, CCLOSE, IPRGCG

格式: 自由的

- ACCL 是 SSOR 的松弛因子, 它的值一般是 1.0。
- CCLOSE 是关于相关浓度的收敛标准, 一般是 10^{-4} 到 10^{-6} 之间的一个

实数。

- IPRGCG 是打印每次迭代的最大浓度变化的时间间隔。在每个应力期结束时打印，IPRGCG 默认为零。

6.10 模拟运行的开始

开始一个模拟和的运行有两种方法。第一种方法是输入执行文件的名字，程序将提示用户各种输入和输出文件的名字。下面给出一个例子，其中“C:\>”为命令提示符，“MT3DMS”为 MT3DMS 程序中执行文件的名字：

C: \>MT3DMS

```
+++++
+++++
+                                     +
+                               MT3DMS                               +
+                   A Modular Three-Dimensional Transport Model
+
+   For Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reactions
+
+                               of Contaminants in Groundwater Systems
+
+                                     +
```

```
+++++
+++++
```

```
Enter Name for Standard Output File:      test1.m3d
Enter Name for Basic Transport Input File: test1.btn
Enter Name for Advection Input File:      test1.adv
Enter Name for Dispersion Input File:     test1.dsp
Enter Name for Sink & Source Input File:  test1.ssm
Enter Name for Chemical Reaction Input File: test1.rct
Enter Name for GCG Solver Input File:     test1.gcg
Enter Name for Unformatted Flow-Transport Link File: test1.umd
Print out Heads and Flow Terms for Checking (Y/N)?  N
```

STRESS PERIOD NO. 1

TIME STEP NO. 1

FROM TIME = 0.00000 TO 100.00

Transport Step: 10 Step Size: 10.000 Total Elapsed Time:

100.000

Program Completed.

第二种方法是创建一个文件，该文件包含按程序所需顺序排列的输入和输出文件的名字。对于上面例子该文件所包含的内容如下所示：

```
test1.m3d
test1.btn
test1.adv
test1.dsp
test1.ssm
test1.rct
test1.gcg
test1.umd
N
```

然后，在命令提示符下，输入：

```
C:\>MT3DMS < RUN.FIL
```

6.11 前一个模拟运行的延续

有时候，有必要将一个长的模拟运行过程拆成几个短的。例如：如果水流模型有多个应力期和时间步长，由水流模型生成的无格式的头文件和水流文件会非常大。如果没有足够的磁盘空间，必须把模拟时间分成几个时间间隔，每一个时间间隔都有单独的头文件和水流文件。然后，对于水流模型的每个时间间隔运行运移模型。MT3DMS 中模拟运行的延续跟 MODFLOW 水流模型中水流模拟的延续是相似的。

首先，把前一个运行最后一步中的浓度保存在默认的非格式文件 MT3Dnnn.UCN 中。然后，重新命名该文件并把它作为下一个运行的起始浓度。如果在 MT3Dnnn.UCN (nnn 为组分索引号) 中存有更多步的浓度值，通过 SAVELAST 程序提取最后一步的浓度值，该程序包含在 MT3DMS 分类文件中（见附录 D）中。读取起始浓度的数组读取器（RARRAY）能够读取由模型生成的非格式的浓度文件而不加修改。因为在模拟开始质量预算项设为零，打印的预算只代表单个运行过程。因此，如果需要一系列连续运行过程的总预算，每个运行的总和能够从外部累加。类似地，程序仅对单个模拟运行的模拟时间进行追踪；一系列连续运行过程的总模拟时间必须通过从外部累加各运行过程的模拟时间得到。

第7章 基准问题及应用实例

这一章描述了几个用来测试MT3MDS软件的准确性和性能的基准问题。用解析法或其他软件的数值法也可以解决这些基准问题。此外，介绍了一些应用实例来说明如何用运移软件来解决更复杂的问题。运行这些测试问题所要求的所有输入文件包含在与MT3DMS的分类文件中。建议用户在解决自己的问题以前，试着解决这些测试问题以熟悉MT3DMS软件的各种模拟选项和输入/输出结构。

7.1 均匀流场中的一维运移

VanGenuchten和Alves (1982) 提出了一个稳定均匀流场中包含对流、弥散和一些简单的化学反应的溶质运移的相对全面的一维解析解。这部分讨论的问题包含以下的初始和边界条件：

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 0 \\ C(0,t) &= C_0 \quad t > 0 \\ \frac{\partial C}{\partial x}(\infty,t) &= 0 \quad t > 0 \end{aligned} \quad (7.1)$$

用一个由101列、1行、1层组成的数值模型来解决该问题，并和VanGenuchten和Alves具有相同初始和边界条件的解析解相对比。模拟中模型参数如下：

单元格行宽 (Δx) = 10m, 单元格列宽 (Δy) = 1m, 层厚度 (Δz) = 1m,
地下水渗流率 (v) = 0.24m/d., 孔隙度 (θ) = 0.25, 模拟时间 (t) = 2000d.

在水流模型中，第一列和最后一列是定水头边界。任意水头值被用来建立所要求的均匀水力梯度。在运移模型中第一列是定浓度边界，相对浓度为1。最后一列被设置为距离源足够远，近乎于一个解析解中假设的无限一维流场。以不同的弥散度 α_L ，阻滞因子 R 和衰减速率常数 λ ，运行四次模拟：

情况1a: $\alpha_L = 0$, $R = 1, \lambda = 0$	仅对流
情况1b: $\alpha_L = 10 \text{ m}$, $R = 1, \lambda = 0$	对流和弥散
情况1c: $\alpha_L = 10 \text{ m}$, $R = 5, \lambda = 0$	对流，弥散和吸附
情况1d: $\alpha_L = 10 \text{ m}$, $R = 5, \lambda = 0.002 \text{ d}^{-1}$	对流，弥散，吸附和衰减

在这一例子中，假定线性等温吸附线，并通过给定多孔介质一相同容重和线性等温吸附线同一分配系数（见第2章）为模型定义了无量纲的阻滞因子。

情况1a和1b用参数为DCEPS= 10^{-5} , NPLANE=1, NPL=0, NPH=4, NPMIN=0,

NPMAX=8的MOC法求解。这些参数表示，在相对浓度梯度（即DCCELL）等于或小于 10^{-5} ，认为可忽略的单元中没有放置粒子（即NPL=0）；四个粒子（即 NPH=4）以固定模式（即NPH=4）被插入到一个垂直平面（NPLANE=1）中DCCELL大于 10^{-5} 的单元中。因为NPMIN=0，仅当DCCELL大于 10^{-5} 的单元没有颗粒以后新的粒子才能增加。由于流场为一维均匀流场，初始粒子的分布采用固定模式和一个垂直平面。情况1c和1d用MMOC方法求解。MMOC所需要的求解参数NLSINK和NPSINK被设置为等于MOC方法的NPLANE和NPH。

所有情况均可获得解析解（实线）和数值解（符号）很好的匹配（图7.1）。需要指出的是，即使纯对流问题（情况1a）也没有发生数值弥散。弥散度为10m，情况1b浓度分布更平滑。由于吸附作用，情况1c的浓度锋面要比情况1b移动的慢。而情况1d的运移是最慢的，这是因为吸附和放射性衰减的作用。

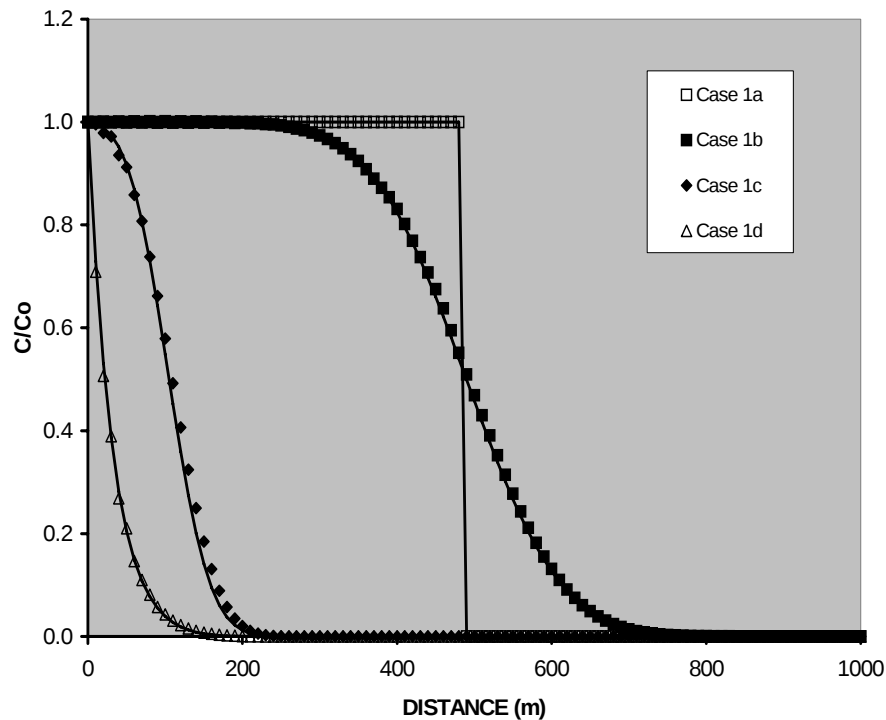
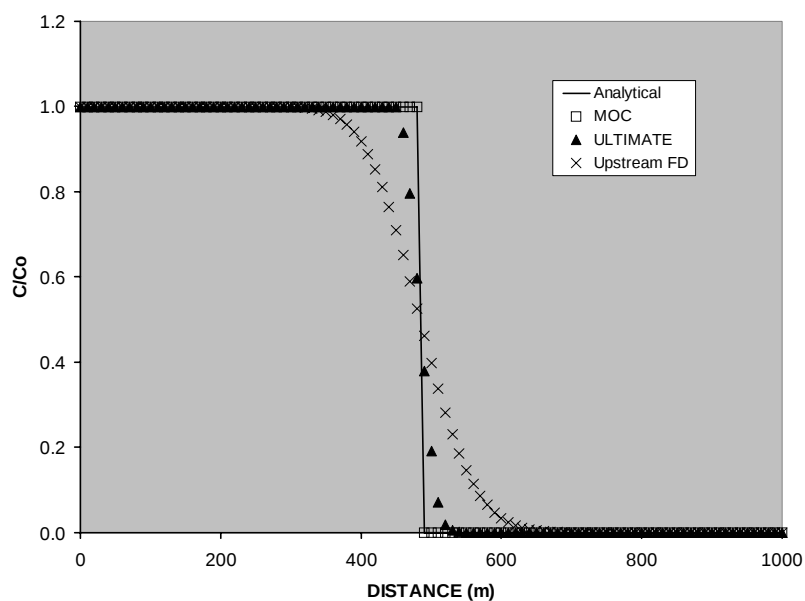


图7.1 一维测试问题计算浓度与解析解比较。
解析解以实线表示，数值解用不同的符号表示。

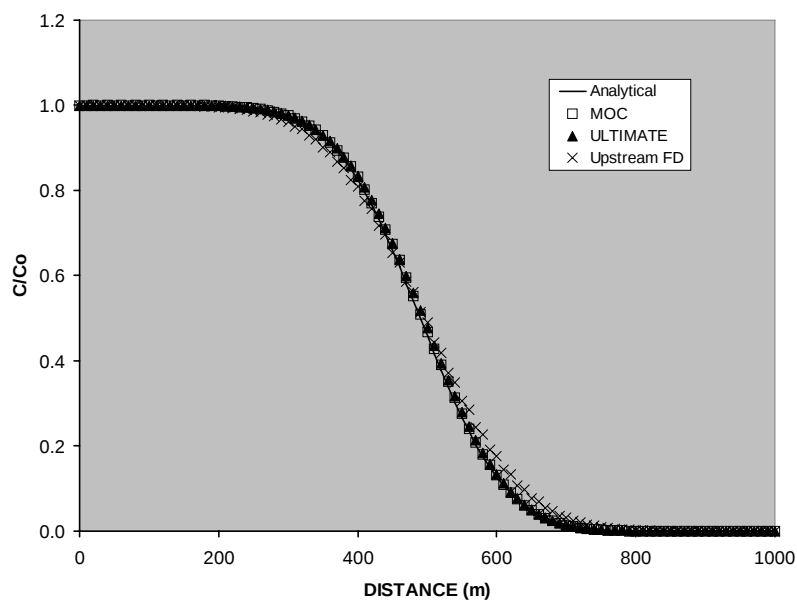
我们可以在精确度上检验不同解法的效果。在情况1a中，运移问题纯对流问题，即网格的Peclet数是无限大的（ $P_e = v\Delta x/D_{xx} = \Delta x/\alpha_L = \infty$ ）。这一例子给出了对不同运移解法的严格检验。情况1b中网格的Peclet数是1，即 $P_e = v\Delta x/D_{xx} = 10/10 = 1$ ，它表明运移问题不再是对流占主导地位，并且可以通过大多数运移方法解决而没有很大的困难。

图7.2a显示了对流项的基于特征值法(MOC)，三阶TVD方法(ULTIMATE)和上游加权显式有限差分法的数值解和解析解的比较。MOC法得到了与解析解相同的解。这说明在对流占主导地位的问题中MOC法是最有效的。而ULTIMATE法的解不如MOC法接近解析解，但是这种解法比上流有限差分法有了很大提高。

图7.2b是同样的比较，但是运移问题的网格Peclet数等于1。因为运移问题不再是对流占主导地位，标准有限差分法更合理精确，如图所示。计算上更精确的MOC和ULTIMATE方法在解的精确度上提高很少。所以标准有限差分法能有效的应用于对流不占优的问题（如 $P_e \leq 4$ ），尽管这种方法对对流占优问题不是很精确（如图7.2a所示）。



(a) 纯对流情况 ($P_e = \infty$)



(b) 平滑情况 ($P_e = 1$)

图 7.2 纯对流(a)和平滑情况(b)的三种不同数值解与解析解比较

7.2 非线性或非平衡吸附的一维运移

7.2.1 非线性吸附

Grove和Stollenwerk(1984)提出了模拟具有非线性平衡吸附和离子交换的一维对流—弥散运移的计算机编码。在这一节，MT3DMS软件用来解决Grove和Stollenwerk(1984)描述的同一测试问题，包括Freundlich和Langmuir等温线。模型的初始和边界条件为

$$\begin{aligned} C(x,0) &= 0 \\ -\theta D \frac{\partial C}{\partial x} + qC \Big|_{x=0} &= \begin{cases} f_0, & 0 < t < t_0 \\ 0, & t > t_0 \end{cases} \quad (7.2) \\ \frac{\partial C}{\partial x}(\infty, t) &= 0 \quad t > 0 \end{aligned}$$

其中，源溶液浓度 C_0 ，在给定时间 t_0 以后减少到0。模拟中的模型参数与Grove和Stollenwerk(1984)给出的相同，如下：

网格间距(Δx)=0.16cm 容重(ρ_b)=1.587g/cm³
弥散度(α_L)=1cm Freundlich平衡常数 $K_f=0.3(\mu g/g)(l/mg)^a$
地下水渗漏速度(v)=0.1cm/s Freundlich吸附指数 $a=0.7$
空隙度(θ)=0.37 Langmuir平衡常数 $K_l=100l/mg$
Langmuir吸附能力 $\bar{S}=0.003 \mu g/g$ 原溶液浓度 $C_0=0.05mg/l$

源脉从持续时间 $t_0=160s$

由于流场处于稳定状态，因此水流模拟仅需要一个应力期。然而为了适应源溶液浓度的变化，在运移模型中用两个应力期。水流模型的边界条件是在模拟区域的两端为定水头，水头值任意给定来建立要求的达西流。运移模型的边界条件是左侧为定质量通量（第三类）边界和右侧的零弥散质量通量边界（第二类）。第三类边界条件是通过给定对流质量通量（即， $f_0=qC_0$ ，其中 q 是边界断面的流入量或流出量）近似给出的。这在测试问题中是通过设定左侧定水头结点处流入浓度对于第一、第二应力期分别为0.05mg/l和0得到的。第二类边界条件是通过设置其距离源足够远以使污染羽在给定模拟时间内无法到达来处理的。

正如在输入说明中指出的，对线性吸附其吸附常数可以使用不一致的单位，只要保证最终的阻滞因子无量纲。然而对非线性吸附，吸附常数的单位一定要与浓度单位一致。对于Freundlich吸附，阻滞因子 $R=1+(\rho_b/\theta)K_f a C^{a-1}$ 。所以对这一测试问题， K_f 的单位一定是 $[\rho_b]^{-1}[C]^{1-a}$ 或 $(\mu g/g)(l/mg)^a$ 。对于Freundlich吸附，

阻滞因子 $R=1+(\rho_b/\theta)[K_l \bar{S}/(1+K_l C)^2]$ 。所以，在测试问题中 K_l 的单位一定是

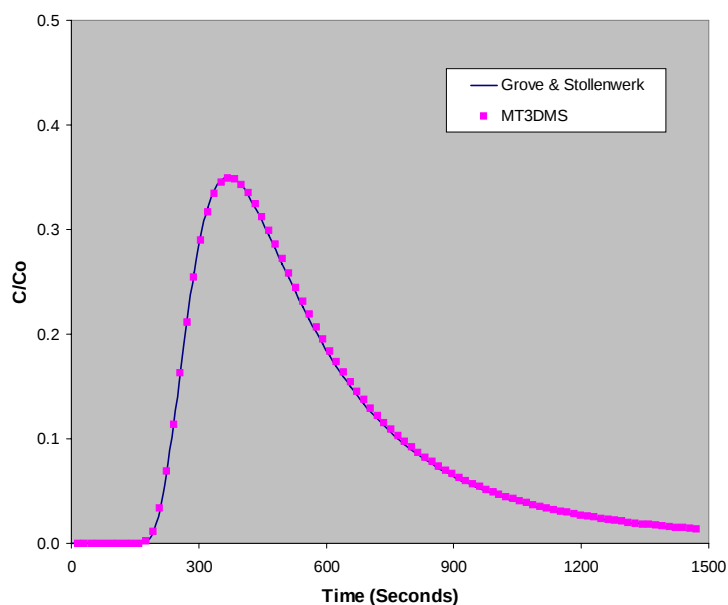
$[C]^{-1}$ 或 l/mg ，而吸附能力 $\bar{S}$ 的单位是 $[K_l]^{-1}[\rho_b]^{-1}$ 或 $\mu g/g$ 。对于测试问题还要指出

的是浓度单位用 $[mg/l]$ 而长度单位是 $[cm]$ ，结果，通过MT3DMS计算的预算项

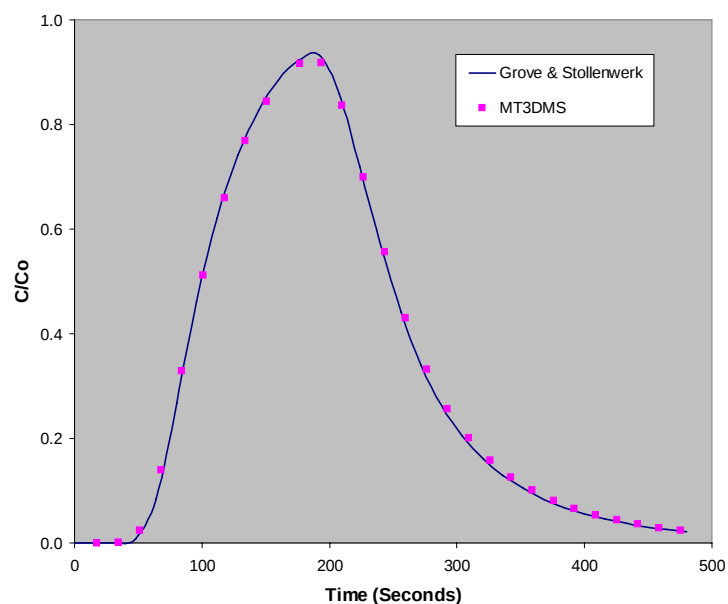
必须恰当的转换以使用它们的绝对值。

对于一个小Pelet数0.16，该测试问题不是对流占优的。对于对流项，所用的解法是中心加权完全隐式的有限差分法。因为包括非线性反应，广义共轭梯度(GCG)解法外部迭代的最大次数比1大。解的收敛标准设为 10^{-6} ，并且利用了改进的不完全Cholesky(MIC)预处理器。

图 7.3 展示了距离源 8cm 处由 MT3DMS 计算的结果曲线与 Grove 和 Stollenwerk(1984)计算的曲线的对比。二者都与Freundlich和Langmuir等温吸附线很好地吻合。



(a) Freundlich 吸附



(b) Langmuir 吸附

图 7.3 包括非线性 Freundlich（上图）和 Langmuir（下图）等温吸附线的一维运移的 MT3DMS 和基于 Grove 和 Stollenwerk (1984) 的数值解的比较

7.2.2 非平衡吸附

MT3DMS的一个新特点是能在化学或物理不平衡条件下模拟溶质运移。在这一节，MT3DMS用来解决一维线性非平衡吸附的运移问题。测试问题与前一节描述的非线性吸附一样，除了吸附常数。在这里吸附常数给定为分配系数(K_d)， $0.933\text{cm}^3/\text{g}$ ，一阶质量转移系数 β ，范围 $0-20\text{s}^{-1}$ 。

这一测试问题的解法是，对流项利用显式三阶TVD方法，对于所有其他项采用隐式有限差分法。因为非平衡吸附是线性的，GCG解法外部迭法的最大次数被设为1。解的收敛标准设为 10^{-6} ，并且采用了不完全Cholesky (MIC)预处理器。

图7.4展示了在距离源8cm的观测点处，对一系列 β 值MT3DMS法的解和Weerts (1994)的解析解是很好吻合的。需要指出的是Weerts定义的质量转移系数 α 与本文中所用的 β 是不同的，相差一个系数 $\rho_b K_d$ 。 β 为0时，数值解和没有吸附作用的解析解是一致的。另一方面， β 等于 20s^{-1} 时，非平衡吸附过程是足够快的以至于达到平衡条件，此时阻滞因子 $R=5$ 。

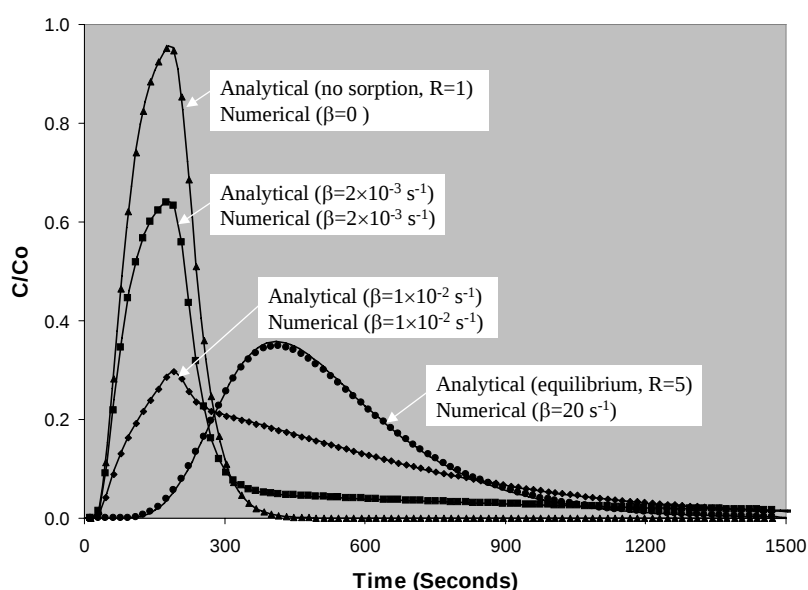


图 7.4 包括非平衡吸附的一维运移的解析解（实线）和数值解（符号）比较

7.3 均匀流场中的二维运移

稳定均匀流场中点源连续注入的二维运移的解析解由Wilson和Miller (1987)提出。该解析解在下列假设条件下是适用的：(a) 含水层在面上无限延伸，在垂向上相对较薄，可假设垂向混合瞬时完成；(b) 注水率与周围均匀流相比不显著。

建立一个由46列，31行，1层组成的数值模型，用于与Wilson和Miller (1987)的解析解相对比。水流方向与模型方向水平，如图7.5所示。模拟中模型参数如下：

单元格行宽 (Δx) = 10m	单元格列宽 (Δy) = 10m
层厚 (Δz) = 10m	地下水渗漏 (v) = 1/3m/d
空隙度 (θ) = 0.3	体积注入率 = 1m ³ /d
纵向弥散度 = 10m	注水浓度 = 1000ppm
横向到纵向弥散度 = 0.3	模拟时间 (t) = 365d

水流模型东侧与西侧边界为定水头边界，南侧与北侧为隔水边界。定水头边界的水头值任意选取以建立要求的水力梯度。模拟时间的选择要使由点源发展的羽状体不能到达边界。

网格Peclet数为1，运移问题不是对流占优的，能通过MT3DMS任一解法求解并能达到足够的精确度。选择HMOC和ULTIMATE解法来进行对比。HMOC解法中采用的经验参数为DCEPS= 10^{-5} ，NPLANE=1，NPL=0，NPH=16，NPMIN=2，NPMAX=32和DCHMOC= 10^{-3} 。ULTIMATE方法不需要任何经验解法参数。

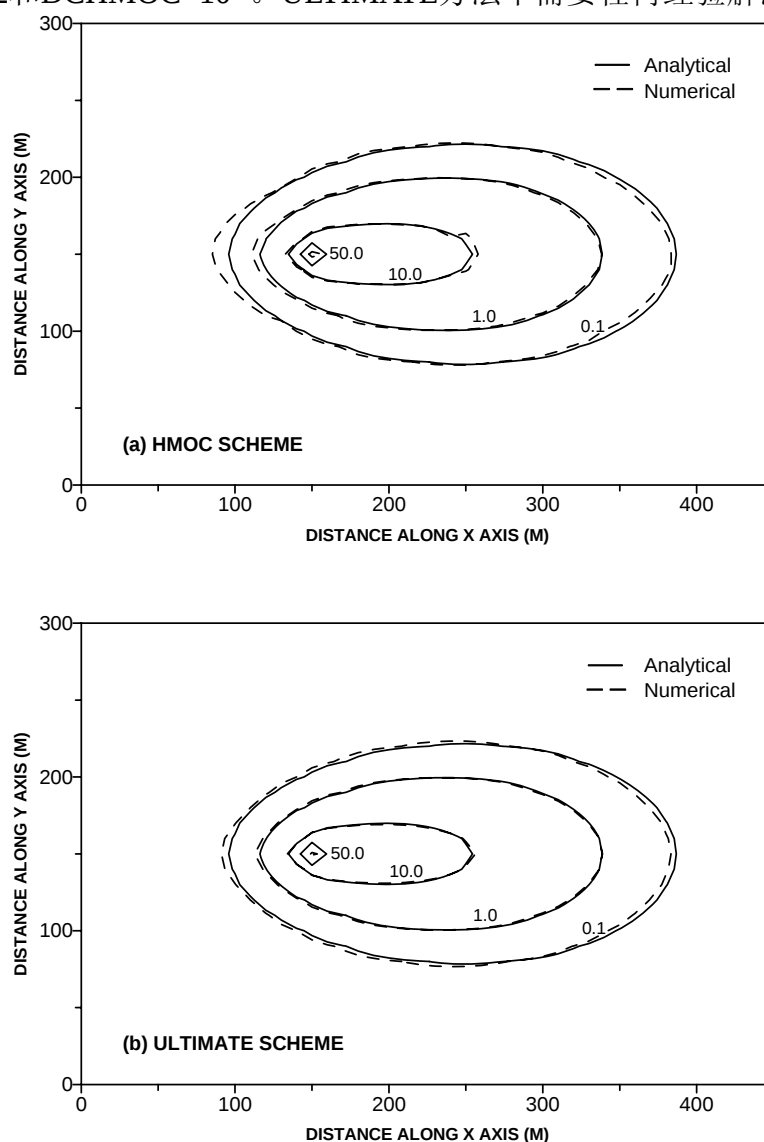


图 7.5 模型网格沿水流方向的连续点源二维运移的数值解与解析解比较

模拟365天后计算浓度如图7.5，HMOC法和ULTIMATE法的解都与解析解吻合很好。HMOC法的质量平衡误差的波动范围为+5%，具有基于粒子追踪的解法

的特点；而对于ULTIMATE法，质量平衡误差约为0.0001%。

7.4 斜向流场的二维运移

这一节讨论的问题与前一节讨论的相似，除了水流方向与模型网格的行、列都成45度角外。这个问题的网格Peclet数在纵向上是5，横向上是50。由于浓度锋面很陡，加上网格取向的影响，该问题在溶质运移技术方面提出了一个具有挑战性的测试。

建立一个由100列、100行和1层组成的数值模型。该测试问题的结构如图7.6所示，模拟中使用的模型参数如下：

单元格行宽 (Δx) = 10m；

单元格列宽 (Δy) = 10m；

层厚 (Δz) = 1m；

地下水的渗流量 (v) = 1m/day；

孔隙度 (θ) = 0.14；

纵向弥散度 = 2m；

横向与纵向弥散度的比率 = 0.1；

注水速率 = 0.01m³/day；

注水浓度 = 1000ppm；

模拟时间 (t) = 1000d

图7.6(a)到(d)分别展示了解析解与以MOC方法为基础的数值解、上流加权标准有限差分法、三阶TVD(ULTIMATE)方法的比较。MOC方法的解法控制参数为DCEPS = 10⁻⁵、NPLANE=0、NPL = 0、NPH=16、NPMIN=2、NPMAX=32。从图7.6(b)可以看出，基于MOC方法的解和解析解最接近。图7.6(c)中基于显式上流有限差分法的解产生了较大的数值弥散。而如图7.6(d)所示，ULTIMATE方法不能像MOC方法一样保持浓度的峰值，与标准上流有限差分法比较，它在很大程度上减少了数值弥散。给定同一个运移步长大小，有限差分法比ULTIMATE方法快了近三倍，ULTIMATE方法比MOC方法的两倍还快。ULTIMATE方法和上流有限差分法的对内存的要求是相同的，而MOC方法要求与所需的粒子数目成正比的附加内存。

7.5 径向流场内的二维运移

这一节中考虑的测试问题是从一完整井注入的溶质的二维运移问题。这个问题的目的是测试应用于径向流场时MT3DMS的准确性。这个问题的假定条件如下：

- 井的注水率是常数；
- 与由注水产生的速率相比围地下水的速率可以忽略；
- 含水层在区域范围内是均质的、各向同性的、无限延伸的；
- 流场处于稳定状态。

运移问题的初始条件和边界条件：

$$\begin{aligned}
C(r,0) &= 0 \\
C(r_w,t) &= C_0 \quad t > 0 \\
\frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r \rightarrow \infty} &= 0 \quad t > 0
\end{aligned} \tag{7.3}$$

式中 r_w 是井的半径。该问题的一个近似解析解由Moench和Ogata(1981)提出，并用于Javandel等(1984)开发的计算机程序(LTIRD)。

建立一个由31列、31行和1层组成的数值模型，与Moench和Ogata(1981)提出的解析解进行比较。用于模拟的模型参数如下：

单元格行宽 (Δx) = 10m;
 单元格列宽 (Δy) = 10m;
 层厚 (Δz) = 1m;
 注水率 = 100m³/d;
 孔隙度 (θ) = 0.3;
 纵向弥散度 = 10m;
 横向与纵向弥散度的比率 = 1.0;
 模拟时间 (t) = 27d。

水流模型由四个定水头边界包围。为了与解析运移解中流场无限大的假设接近，首先用一个水流解析解计算稳定水头分布。然后由解析解得到的水头在水流模型用作定水头边界的水头值。调整运移模型的模拟时间以确保羽状体不能到达定水头边界。

在运移模型中，位于16列、16行的单元格作为定浓度边界，相对浓度值为1。沿x和y方向上的网格Peclet数在空间上是变化的，它取决于速度矢量的x和y分量。然而，注意到水流方向一直是以45°斜向的，在水流方向上Peclect数是相同的。因此，用于估计网格Peclect数的特征长度 L 为 $(10^2 + 10^2)^{1/2} = 14.1$ ，10是x和y方向上的网格宽度，因此 $Pe_L = vL/D_L = vL/(\alpha_L v) = 14.1/10 = 1.4$ 。换句话说，运移不是对流占优的，MT3DMS中的任一解法都能获得令人满意的结果。

为了比较，ULTIMATE方法和隐式上游有限差分法被用于解决对流项，而弥散和源/汇项用隐式有限差分法求解。GCG解法运用不完全Cholesky (MIC)预处理，收敛误差标准为 10^{-4} 。

注水井中的计算浓度断面曲线如图7.7所示，从图可看出，基于ULTIMATE方法的数值解与解析解吻合很好。尽管有些数值弥散，上游加权完全隐式有限差分法与解析解也吻合较好。然而，采用较大的运移步长乘数，完全隐式有限差分法中的运移步长增大时，数值解就变地不太准确了。

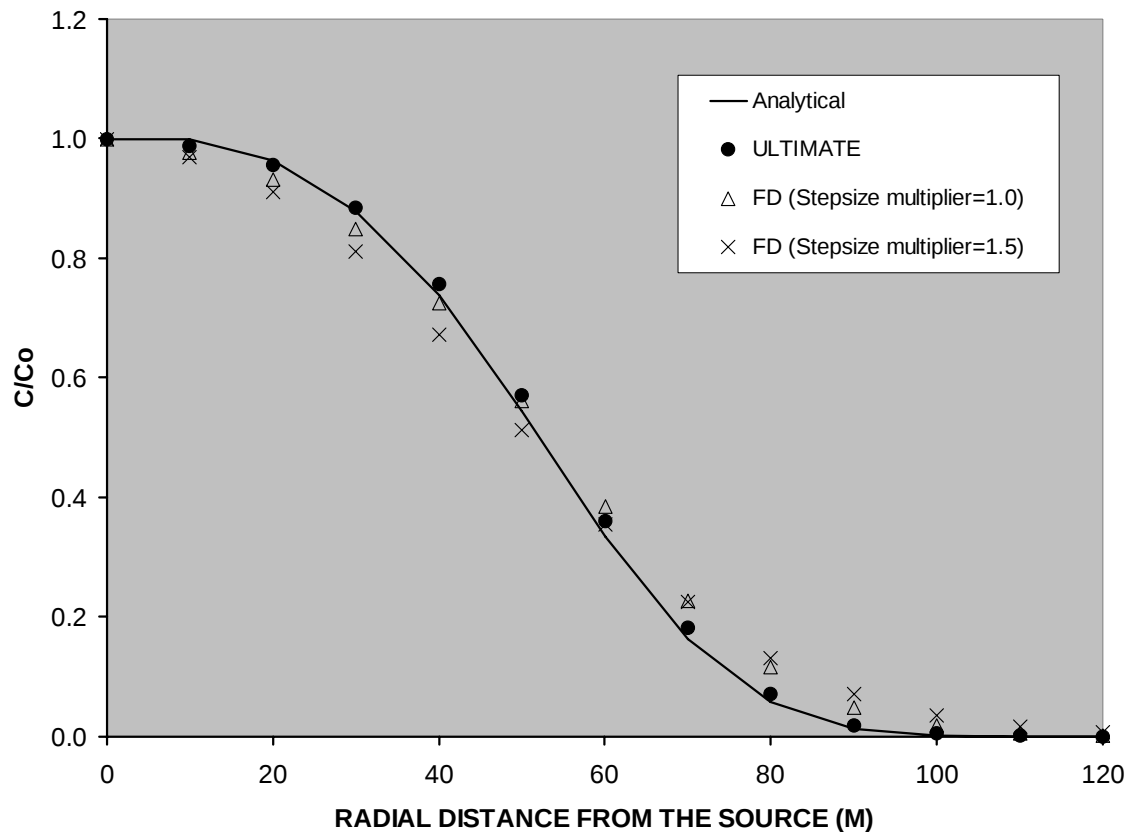


图 7.7 径向流场中点源二维运移的解析解和数值解比较

7.6 注水井或抽水井中的浓度

这一节中考虑的测试问题包括承压含水层完整井中注水/抽水循环中的浓度变化。这个问题由El-Kadi (1988)首先提出的，然后被Zheng(1993)用作对MOC方法的一个很难的测试。定浓度 C_0 的水注进井里。在一定时间 t_1 后，水流反向，污染的水被抽出。假定流场是无穷大的区域，在注水和抽水开始时就会瞬时达到稳定状态，对于这个问题的近似解析解是由Gelhar和Collins(1971)提出的。

由31列、31行和1层组成的数值模型用于模拟注水或抽水时浓度的变化，并与Gelhar和Collins(1971)提出的近似解析解比较。模拟中的模型建立和输入参数与El-Kadi(1988)和Zheng(1993)所使用的是相同的，如下：

- 单元格行宽 (Δx) = 900ft;
- 单元格列宽 (Δy) = 900ft;
- 层厚 (Δz) = 20ft;
- 含水层水力传导系数 = 0.005ft/s;
- 孔隙度 (θ) = 0.3;
- 纵向弥散度 = 100ft;
- 横向与纵向弥散度的比率 = 1.0;
- 注水速率 = 1ft³/s

注水的相对浓度=100%;

注水时间=2.5年;

抽水时间=7.5年。

沿水流方向的网格Peclet数对于这个问题来说大约是13，表示对流占主导地位。MOC和ULTIMATE方法用来解决这个问题的对流项；源/汇项和弥散项用GCCG程序包显式求解，收敛标准为 10^{-4} 。为了比较，上游加权完全隐式有限差分法也被用来解决这个问题。MOC方法的解法参数为：

NPL=16,NPH=16,NPMIN=4,NPMAX=32。因为NPL等于NPH，所以整个网格初始化为每个单元16个粒子的均匀分布。初始粒子在每个单元体内随机放置。因为网格的粗糙、严重的偏离和流场的汇集的天然性质，采用四阶Runge-Kutta粒子追踪算法以提高粒子追踪解法的准确性。

注水/抽水井中的浓度断面曲线如图7.8所示。对于给定的相同的56天的运移步长，MOC方法与解析解的吻合达到最好，而完全隐式上游有限差分法和解析解匹配最差。考虑到这个问题相对较大的网格Peclet数，结果是在预料之中的。就注水井或抽水井的浓度匹配而言，MOC方法效果很好，但是如果经验解法参数没有合适地调整，它就会导致显著的质量平衡误差。换句话说，ULTIMATE方法和有限差分法是在本质上是质量守恒的。

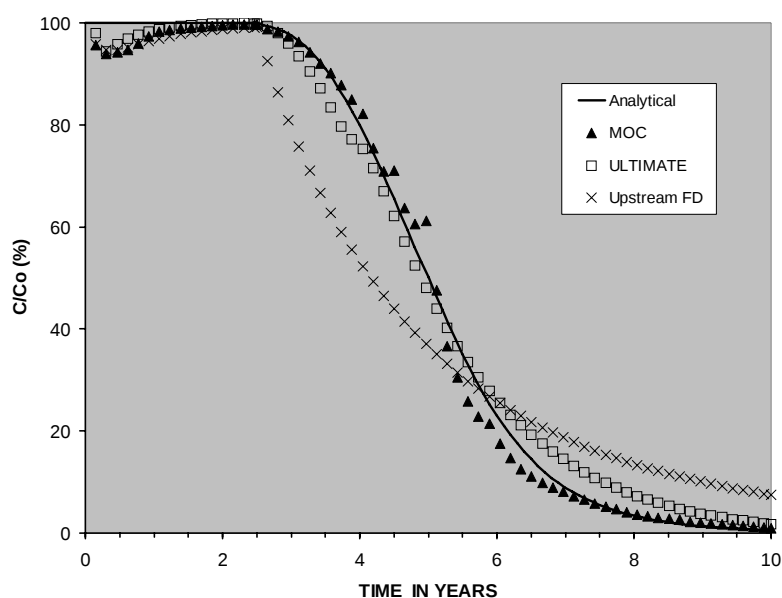


图 7.8 注水或抽水井的计算浓度与 Gelhar 和 Collins (1971) 提出的解析解比较

7.7 均匀流场中的三维运移

在7.3节，均匀流场点源二维运移中，假设含水层相对较薄和瞬时垂直混合。然而，如果含水层较厚不能假设瞬时垂直混合时，点源以外的溶质的运移就应当被认为是三维的。具有与7.3节讨论的模型相同的初始和边界条件的三维运移的解析解由Hunt(1978)提出。

为了与Hunt(1978)提出的解析解比较，建立由21列、15行和8层组成的数值模型求解三维运移问题。点源被放置在第3列、第8行和第7层。模拟中使用的模型参数如下：

单元格行宽 (Δx) = 10m

单元格列宽(Δy)=10m

层厚 (Δz) = 10m

含水层的水力传导系数=0.5m/d

孔隙度 (θ) = 0.2

纵向弥散度=10m

水平横向与纵向弥散度的比率=0.3

垂直横向与纵向弥散度的比率=0.3

注水速率=0.5m³/d

注入水的相对浓度=100%

模拟时间=100天。

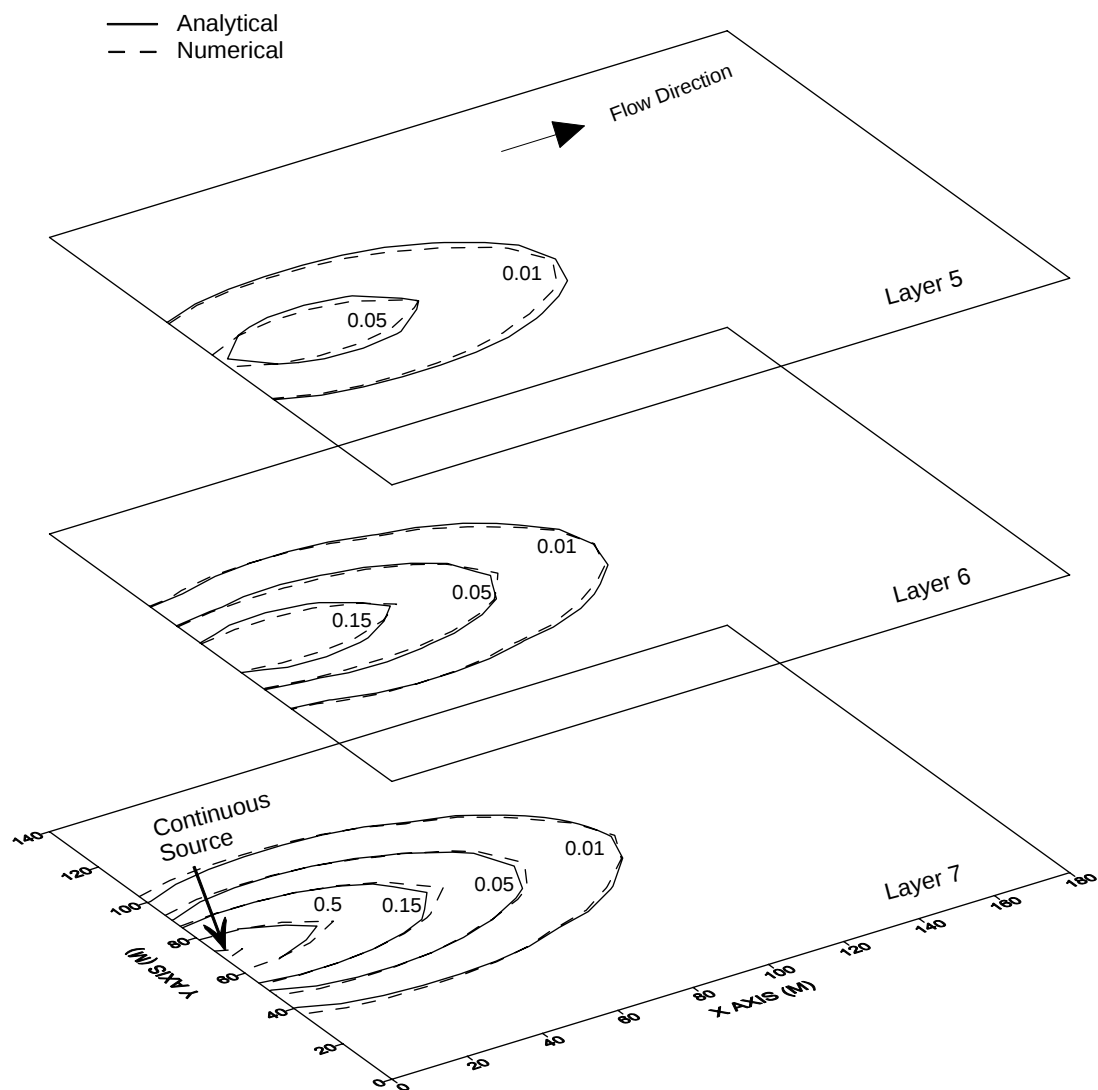


图 7.9 均匀流场中连续点源三维运移的数值解与解析解比较

因为该测试问题的网格Peclect数很小，

($Pe_x = v_x \Delta x / D_{xx} = v_x \Delta x / (\alpha_L v_x) = 10/10 = 1$; $Pe_y = Pe_z = 0$)，MT3DMS中任何一种解法都可以给出令人满意的结果。如图7.9所示，模拟100天后基于ULTIMATE方法的5、6、7层的计算浓度与解析解吻合很好。需要指出的是解析解假设含水层无限延伸。因为点源位于没有质量通量的底层附近，所以用一个镜像点源来考虑边界对解析解的影响。

7.8 非均质含水层中二维垂向运移

这个问题由Sudicky(1989)提出，为了证明在假想实地尺度下，拉普拉斯变换加辽金方法的适用性。该问题考虑了极不规则的流场中非均质断面内的水流和溶质运移，与空间离散相比弥散系数较小，纵向和横向弥散度的比值很大。Segol(1994)把这个问题称为众多基准模拟中的“不连续的滑铁卢问题”。Wan der Heijde(1995)将这一问题作为“Level2”测试的例子，目的是测试潜在的有疑问的参数耦合，并证明对于典型实际问题软件的适用性。

7.8.1 概念模型

Sudicky(1989)考虑的区域如图7.10(a)所示,是一个长250m、深度由6.5m(沿左边界)变化到5.375m(沿右边界)的变形的四边形。假定水流系统处于稳定状态。水流的边界条件如图7.10(a)所示。左侧和底部边界是不透水的，沿右边界给定5.375m的统一水头。沿着系统顶部的潜水面作为一个自由水面，整个面上的补给均为10cm/yr。由细粒粉砂($K_H=5 \times 10^{-4}$ cm/sec)组成的含水层中存在两个由中砂($K_H=10^{-2}$ cm/sec)组成的透镜体。假定水力传导系数是各向同性的。

溶质运移的边界条件如图7.10(b)所示。沿系统顶部浓度是给定的。从 $x=40$ m到 $x=80$ m的延伸区域的相对浓度为1.0，其它地方为0.0。5年后，源被去除，沿着顶部的浓度值变为零。区域内最初没有污染。给定同一孔隙度0.35、纵向弥散度(α_L)0.5m、横向弥散度(α_{TV})0.005m和有效扩散系数 1.34×10^{-5} cm²/sec。

7.8.2 水流解

Sundicky(1989)用Frind和Matanaga的二元有限元技术解决水流问题。该系统离散成由水平方向上的51个等间隔的节点($\Delta x=5$ m)和垂向上25个节点组成的三角形。潜水面的位置通过反复调整垂向上位于中砂透镜体以上的节点的位置来确定。水头和水流函数的解如图7.10(c)所示。

MODFLOW和MT3DMS所使用的集中块水流模型，横截面表示为1行和55个5m长的列。既然MODFLOW通过在固定网格内重复求解确定了潜水面的高度，那么横截面的垂向离散就是要接近而不是复制有限元素模型。如图6所示Sudicky(1989)估计左边界潜水面的高度大约是6.5m，所以两节点的平均垂直距离大约是0.25m。MODFLOW模型被分成均匀厚度0.25m的27层，潜水面在最高的6个层内是允许下降的。

7.8.3 运移解

Sudickey(1989)采用拉普拉斯变换加辽金 (LTG)有限元法来解决运移问题, 与解决水流问题的解法使用相同的网格。LTG方法适用于解决弥散度相对较小的问题。

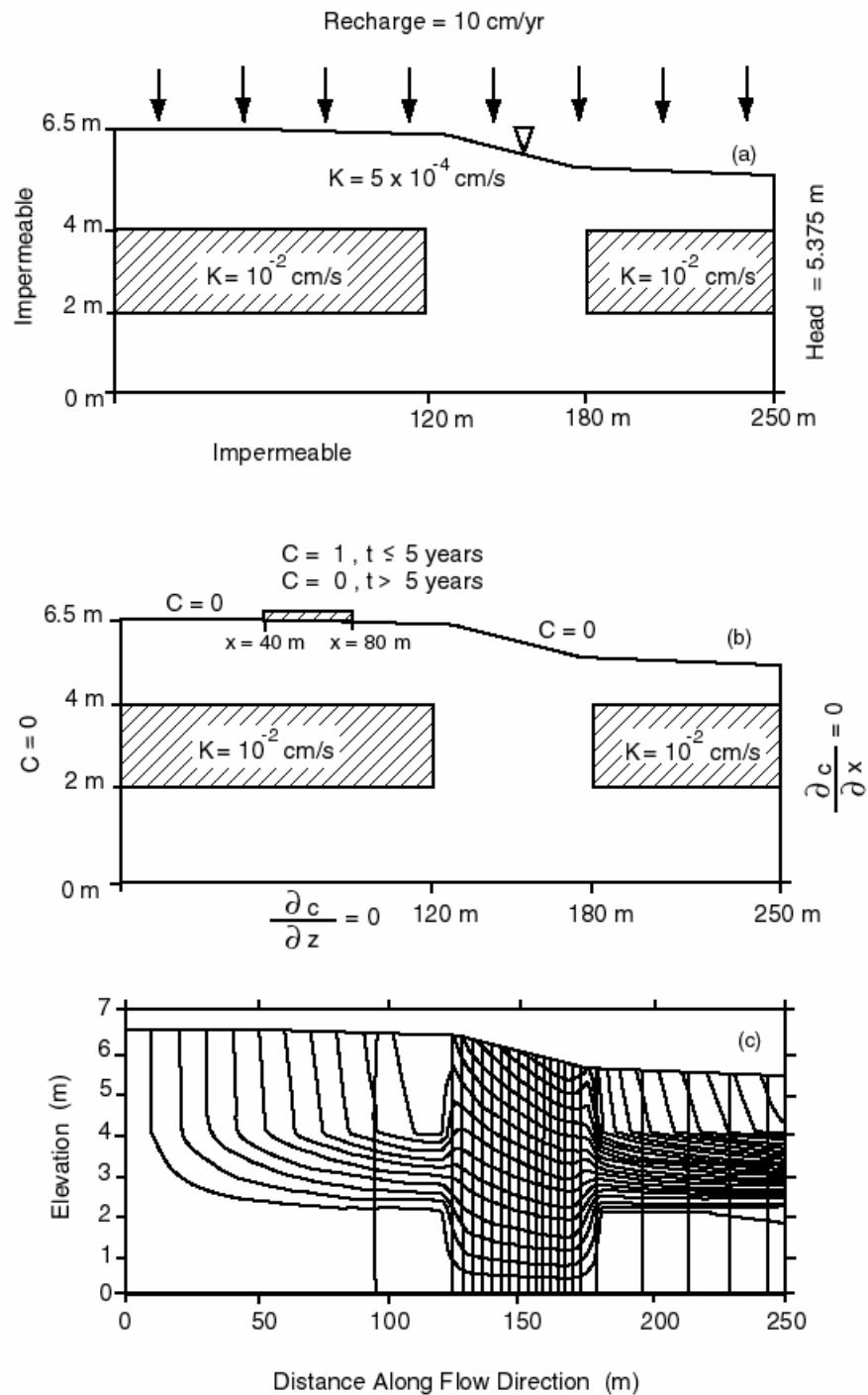


图 7.10 (a)物理系统和水流边界条件; (b)运移边界条件; (c)水头和流量函数的解。水头等值线间距为 0.05m, 流量函数解为 $1 \text{ m}^2/\text{day}$

对于MT3DMS模拟，非稳定顶部边界条件用随时间变化的定浓度单元模拟，这在源/汇混合程序包中可以做到。MOC解法用于对流项，解法控制参数如下：

PERCEL=1.0;
ITRACK=3(混合Euler和四阶 Runge-Kutt方法);
WD=0.5;
DCEPS= 10^{-5} ;
NPLANE=0(初始粒子随机放置);
NPL=0;
NPH=10;
NPMIN=2;
NPMAX=20。

图7.11和7.12分别为由LTG方法和采用MOC的MT3DMS方法获得的运移解。从运移解法之间以及有限元法和有限差分法的垂向离散方法之间的基本区别看，这两个解的一致性合理的。Sudickey(1989)推断LTG方法可以避免数值弥散，因为C=0.05的等值线与流线的类型十分相近。LTG与MT3DMS的解之间很好的吻合表明MT3DMS程序能够模拟具有极不规则流场以及野外应用中陡浓度锋面特征的非均质截面中的地下水流和溶质运移。而且，MT3DMS模型模拟20年后的质量均衡误差不到1%。

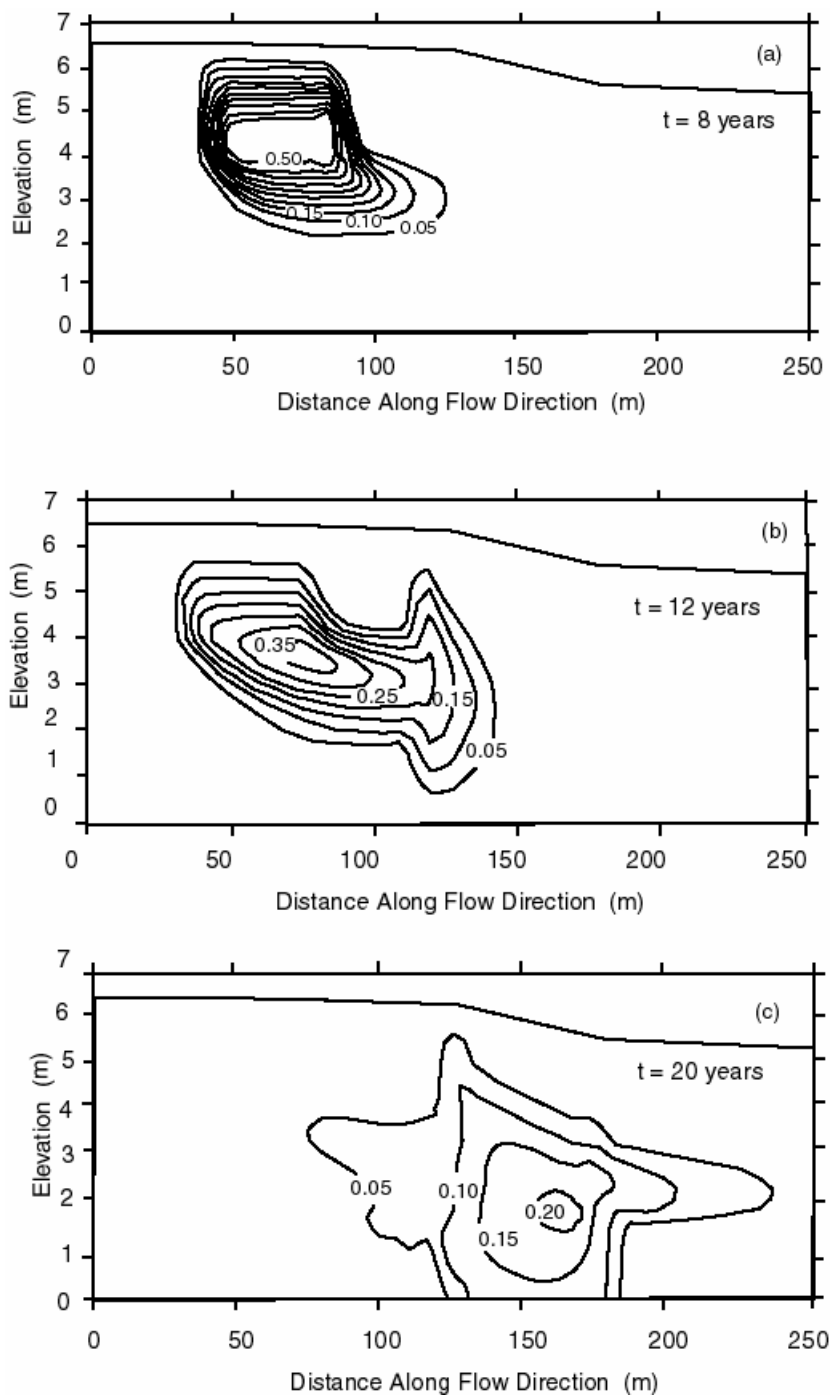


图7.11 基于LTG方法(Sudickey, 1989)的污染羽分布
(a)t=8年; (b)t=12年; (c)t=20年。

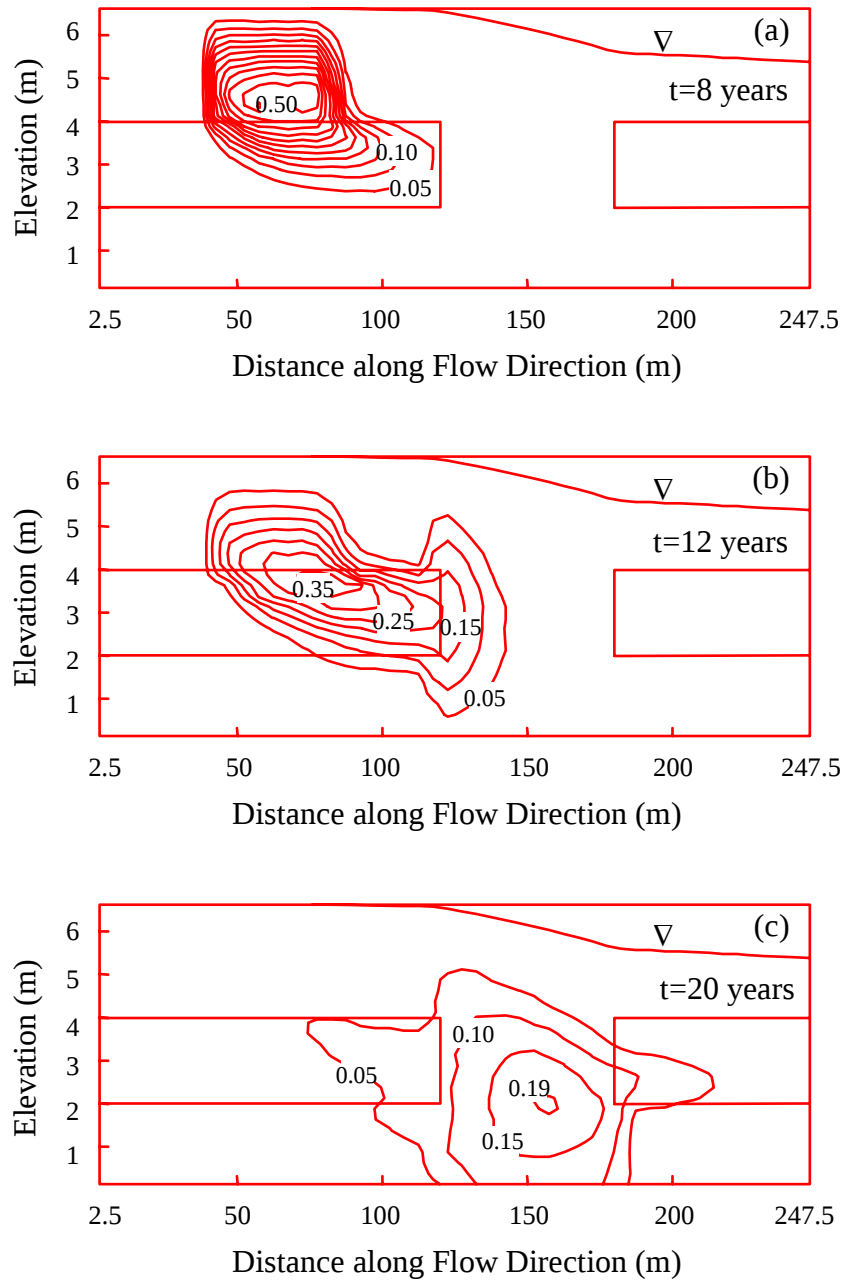


图 7.12 MT3DMS 用 MOC 计算的污染羽分布
(a)t=8 年; (b)t=12 年; (c)t=20 年

7.9 二维应用实例

本节将叙述MT3DMS程序应用于平面二维非均质含水层中的污染物运移的假想问题。这一问题用来比较不同解决方案的应用效果，而这些解法可以被MT3DMS用来模拟不存在解析解的非均质含水层中的溶质运移。

问题的结构如图7.13所示。流场被剖分为14列，18行和1层，所有间隔均为100米。模型的东、西边界为隔水边界；北部为定水头边界，水头恒为250米；南部为给定水头边界，第一列单元格中心的水头为20米(以“+”标注)，并以2.5/100的水力梯度增加，14列处增加至52.5米。一定浓度的水通过完整井注入到含水层中，同时，位于下游的抽水井从含水层中将溶质抽出。在注水井与抽水井之间存在一段水力传导系数较低的区域，如图7.13所示，这段区域的水力传导系数与模拟区其他地区的相比要小三个数量级。模拟过程中所用到的含水层参数如下，并见图7.13:

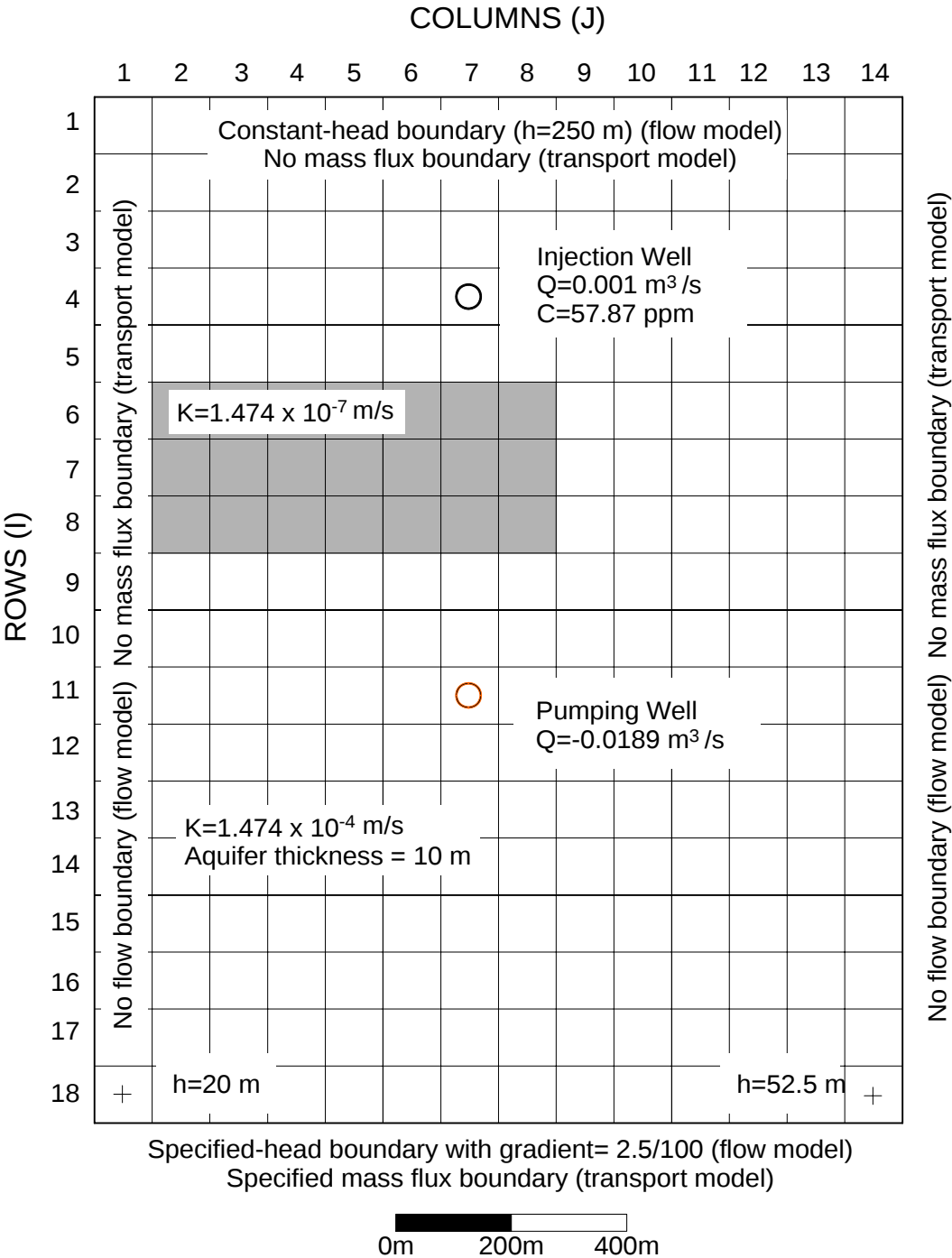


图 7.13 具有较大局部水力梯度的非均质含水层中运移问题的概化

单元格行宽(Δx)=100米 单元格列宽(Δy)=100米
层厚(Δz)=10米 孔隙度(θ)=0.3
纵向弥散度=20米 横纵弥散度比=0.2
模拟期=2年

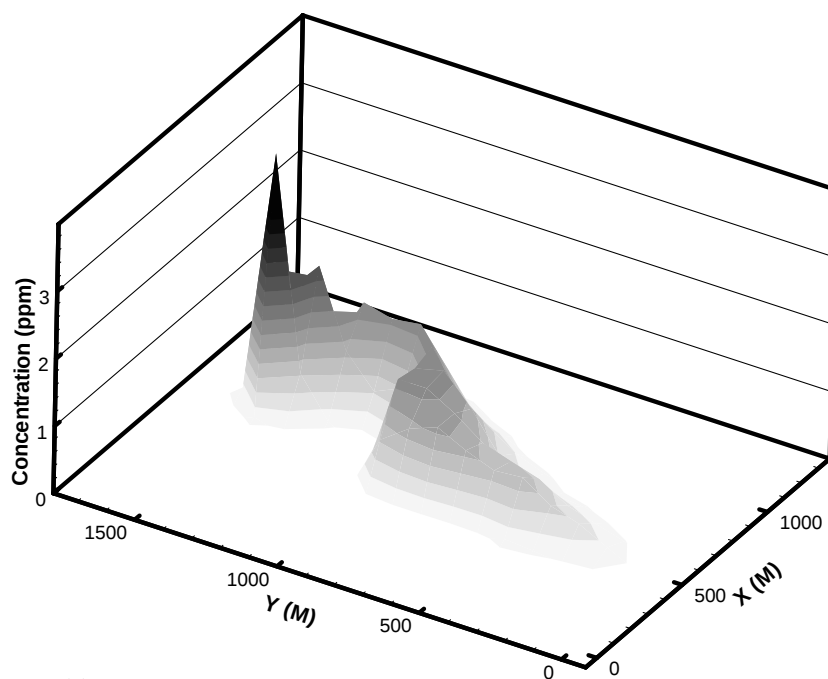
溶质运移模型的边界条件为：模型的东、西以及北部边界为零质量通量边界。南部边界为给定对流质量通量边界，被认为从含水层中抽取质量的点汇组成的线。抽取的质量等于与进入定水头单元格的流量乘以单元的浓度。

含水层假定为承压含水层，流场处于稳定流状态，并且两口井的注水率与抽水率保持恒定，如图7.13所示。注入水的浓度在第一年为57.78ppm，在第二年变为0。由于注水井与抽水井的流量为常数，所以对于水流模型来说只需要一个应力期就足够了。然而，对于运移模型则需要两个应力期。HMOC法和三阶TVD法(ULTIMATE)被用来求解对流项，而弥散与源/汇项则采用收敛标准为 10^{-4} 的GCG解法程序中的隐式有限差分法求解。HMOC解法中所需要的解法控制参数如下：

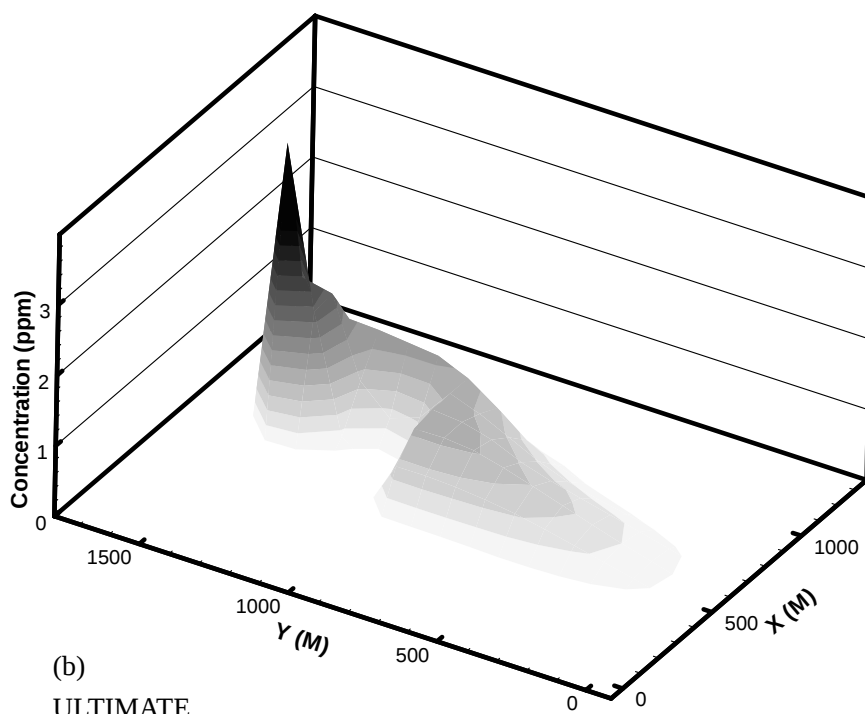
PERCEL=1.0 ITRACK=2 (四阶Runge-Kutta)
DCEPS= 10^{-5} NPLANE=0 (初始粒子随机放置)
NPL=0 NPH=16 NPMIN=0 NPMAx=32

第一年结束时的计算浓度标绘在图7.14中。基于HMOC与ULTIMATE解法的污染羽的整体形状相近，但HMOC解法的结果外形上不如ULTIMATE平滑，这是基于粒子追踪解法的特征。HMOC解法的质量均衡误差会随时间变化，但在模拟结束时可以通过采用各种经验解法参数试算来使其降低至不到1%。而另一方面，ULTIMATE解法在整个模拟期间的质量均衡误差始终控制在0.0001%以下。

图7.15显示了在抽水井处基于不同解法所计算出的浓度值。HMOC解法中基于粒子追踪方法的不连续性由于测试问题中人为剖分网格的过于粗糙而明显的放大了。另一方面，如果不考虑粗糙度，则ULTIMATE与HMOC的解吻合相当好。同时可以明显看出，上游加权有限差分法引入了相当大的数值弥散，而中心加权有限差分法导致了一些振荡。



(a)
HMOC
SCHEME



(b)
ULTIMATE
SCHEME

图 7.14 模拟 1 年后，基于 HMOC 法和三阶 TVD (ULTIMATE) 法的计算浓度值比较

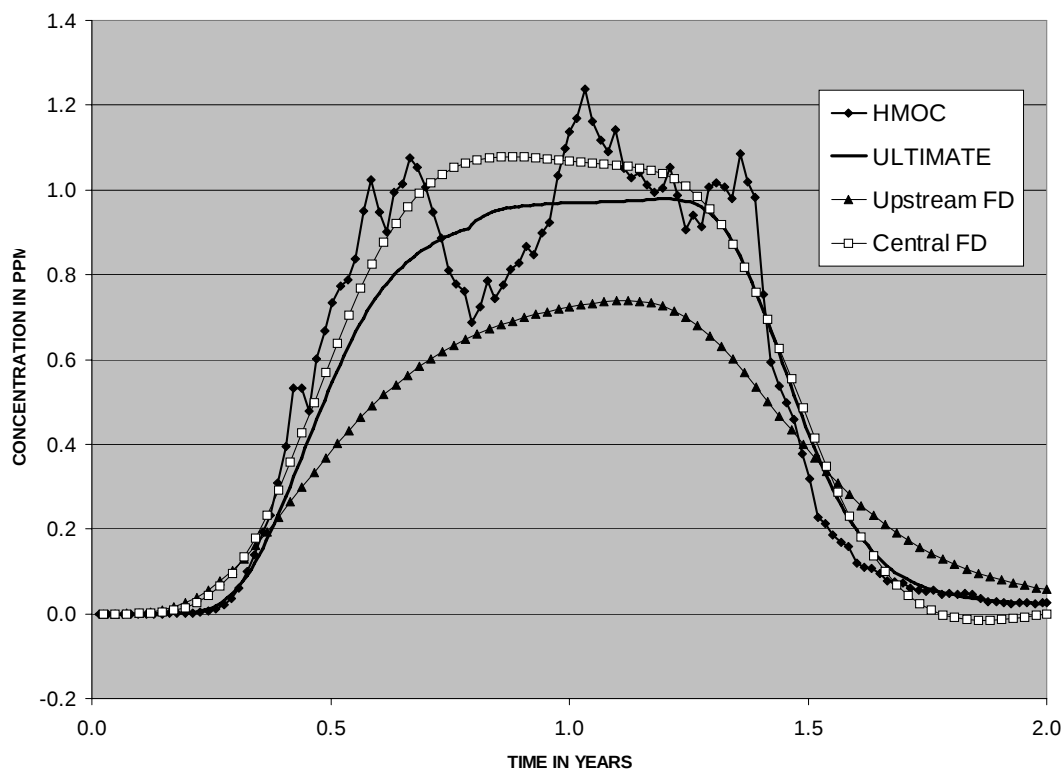


图 7.15 抽水井中基于不同解法的计算浓度历时曲线对比

7.10 三维野外实例研究

本节将叙述MT3DMS程序应用于实际野外问题，对地下水恢复方案的有效性进行评估。讨论将论证MT3DMS程序在解决实际问题时的性能。

7.10.1 场地描述

研究区的地质背景如图7.16所示。场地下的潜水含水层上部为细到中砂，并有非连续的粉砂质透镜体；下部为中至粗砂并含一些砾石。上部和下部的水力传导系数分别大约为60英尺/天和520英尺/天。场地平均地下水补给率约为12.7厘米(5英寸)每年。孔隙度约为30%。其它有关含水层的参数列于表7.1中。场地地下水中可发现一些有机污染物，其中1,2二氯乙烷(1,2-DCA)的污染区域超过670×396m(2200×1300ft)，最大浓度超过200ppb(图7.17)。

表7.1 研究区含水层参数

水力传导系数(中到细砂)	60 ft/day (18 m/day)
水力传导系数(粗砂)	520 ft/day (159 m/day)
垂向与水平方向上水力传导系数之比	0.1
补给率	5 in/yr (12.7 cm/yr)
饱水带厚度	100 ft (30.5 m)
纵向弥散度	10.0 ft (3 m)
横向弥散度	2.0 ft (0.6 m)
孔隙度	0.3
含水层容重	1.7 g/cm ³
分配系数(K_d)	0.176 cm ³ /g

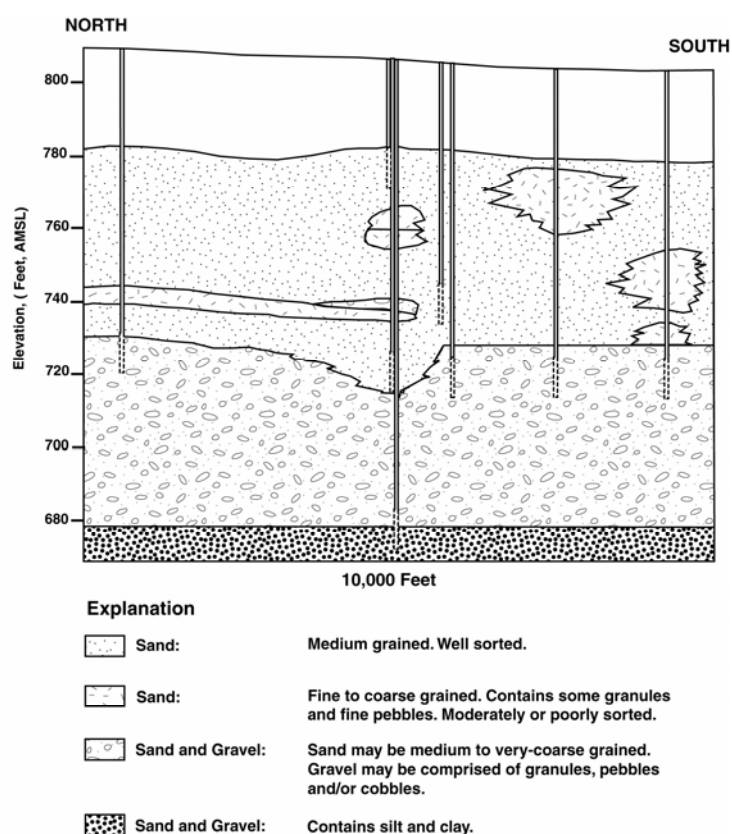


图 7.16 三维野外实例中研究区地质背景

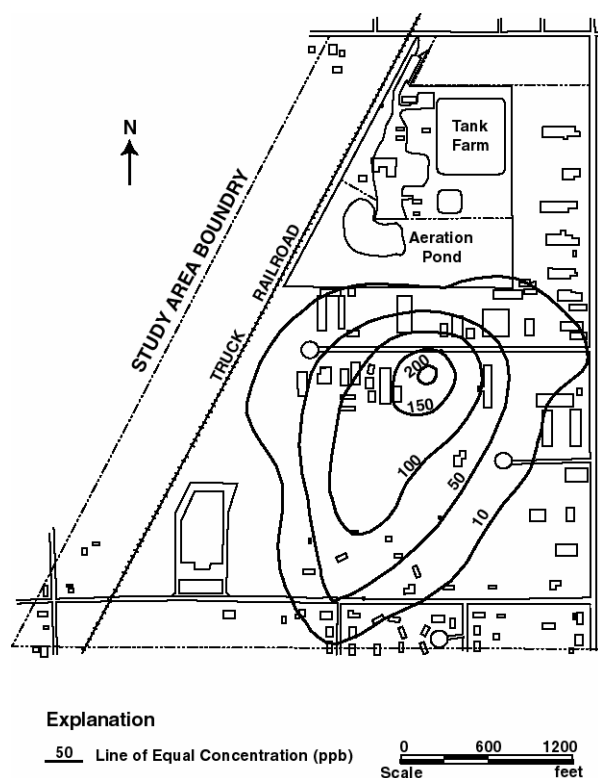


图 7.17 野外实例中研究区地表下约 30 米(100 英尺)处
1,2 二氯乙烷(1,2-DCA)浓度(ppb)原始分布

7.12 水流和运移模型

该场地数值模拟的目的是调查为将存在1,2二氯乙烷(1,2-DCA)污染羽的含水层净化而采取的各种恢复措施的有效性和实际表现。数学模型在垂向上分为4层,如图7.18所示。每一层厚度均为7.62米(25英尺)。平面上,每一层剖分为61行、40列。重点研究区的网格间距为 15.24×15.24 米(50×50 英尺),并向模型的边界逐步增大。水流模型的边界条件:在四周为给定水头边界,底部为隔水边界,在潜水面处有定流量补给。四周边界水头的设置要使局部水力梯度自东向西为 5×10^{-4} ,自北向南为 1×10^{-3} 。运移模型的边界条件:底部为零质量通量边界,其它为给定对流质量通量边界。对流质量通量由通过边界结点流入或流出的流量以及流入或流出水流的浓度(默认情况下流入水流的浓度为0)决定。边界与重点研究区的距离足够远,对重点研究区附近的水流及溶质运移的影响非常微弱。位于污染羽区域内大多数的单元格集中在网格模型的中心部位,以ABCD标注在图7.18中。水流模型只考虑稳定流条件。

检测出的1,2-DCA的浓度可作为任何恢复措施生效前溶质运移模型的初始条件。模型中重点研究区的第三层中初始浓度分布如图7.19(a)所示。第二层中的初始浓度假定为第三层的20%,而顶层与底层最初是洁净的。清除措施之一就是利用如图7.19所示的8口抽水井将被污染的地下水从含水层中抽出并进行处理。8口井的总抽水量大约为 $4.25 \times 10^3 \text{ m}^3/\text{天}$ ($1.5 \times 10^5 \text{ ft}^3/\text{day}$),并且全部取自第三层。

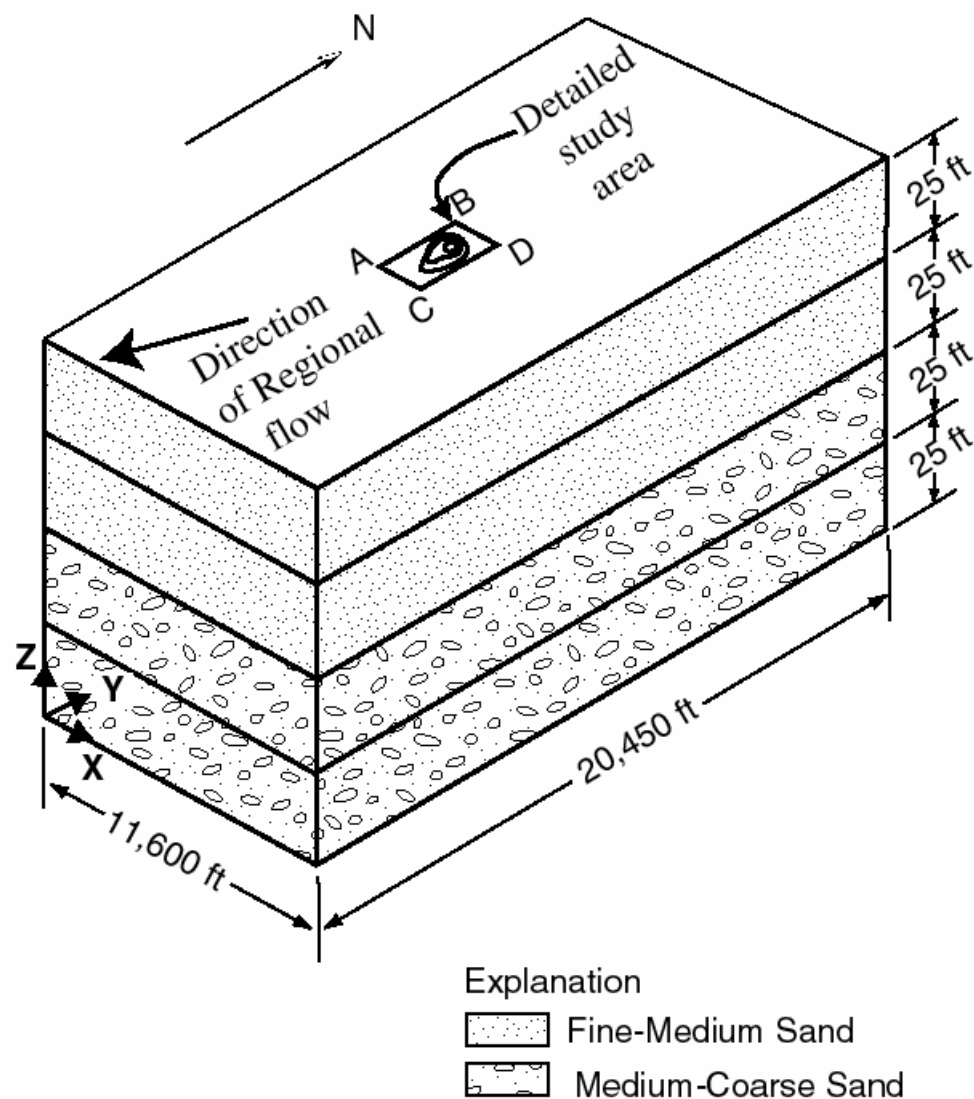


图7.18 野外实例中水流与运移模型结构示意图
(11600 英尺=3535.68 米；20450 英尺=6233 米；25 英尺=7.62 米)

溶质运移模拟中采用平衡控制线性等温吸附线。根据已知的容重及分配系数可求得阻滞因子为2.0。根据阻滞因子2.0，可知含水层中初始物质总质量为溶解质量的2倍。

7.10.3 解法的比较

溶质运移模型用以下几种解法求解：(a) 针对对流项的显式ULTIMATE方法和针对其它项的隐式有限差分法；(b) 针对对流项的基于粒子追踪的 HMOC法与针对其它项的隐式有限差分法；(c) 针对对流项的上游加权全隐式有限差分法。HMOC方法中的解法控制性参数为：DCEPS= 10^{-5} , NPLANE=0, NPL=0, NPH=16, NPMIN=2, NPMAX=32, DCHMOC=0.01。初始粒子以随机模式分布（即

NPLANE=0)。粒子追踪由混合一阶欧拉和四阶Runge-Kutta算法完成。上述三种解法的Courant数都定为1.0。

重点研究区内模型第三层在抽出一处理措施开始后的500天，750天和1000天

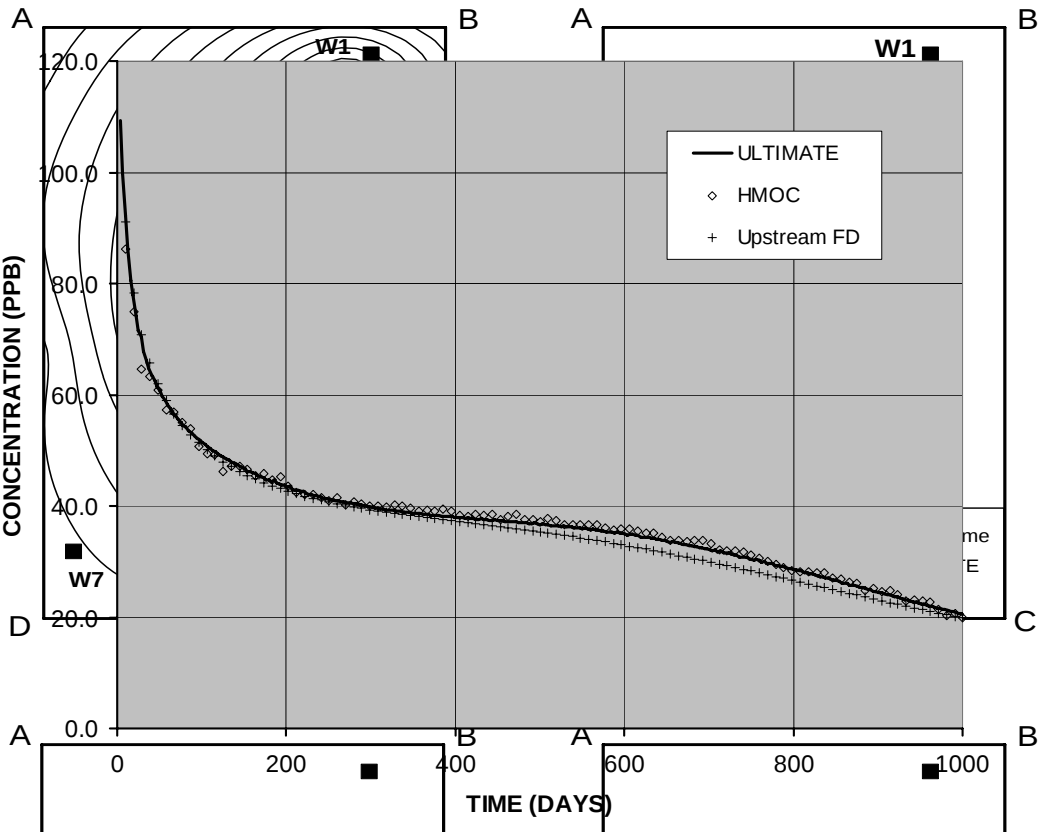


图 7.20 位于初始污染羽中心附近的 W4 号抽水井中使用不同解法计算出的浓度历时曲线

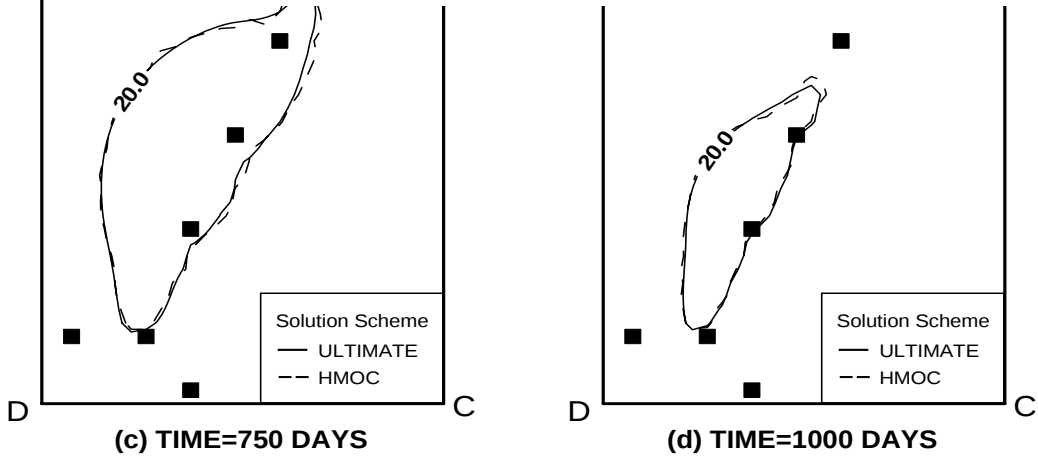


图7.19 模型第三层的初始浓度和不同时间的计算浓度
(ABCD表示标绘在图7.16中的重点研究区)

的计算浓度分布如图7.19(b), (c)和(d)所示。由ULTIMATE与HMOC方法所计算出的浓度结果相互之间吻合地很好,和上游加权隐式有限差分法所计算出的结果也很好吻合(图7.20)。在整个模拟过程中, HMOC解法的质量均衡误差不超过1%。位于初始污染羽中心附近的W4号井中的浓度历时曲线如图7.20所示。三种解法之间吻合地相当好,尤其是ULTIMATE与HMOC解法。

7.10.4 效率与准确性的考虑

对于这一应用实例，全隐式有限差分法的准确性与ULTIMATE及HMOC不相上下。因此，出于计算效率的考虑，使用全隐式有限差分法具有较大的优势。全隐式有限差分法对运移步长大小没有限制，用户可以根据需要采用尽可能少的运移步长来运行模拟程序。然而，随着时间步长增大，运移解的精度就会大幅度降低，因为此时的Courant数将会大大超过1。当为全隐式有限差分法指定运移步长乘数时，应当考虑运移步长的精度要求。

为了说明这一点，用全隐式有限差分法解决同一溶质运移问题，但却用不同的运移步长乘数。为满足各种稳定性约束而具有最大运移步长为2.25天的显式有限差分法被用作基本情况。表7.2中的计算时间为Pentium Pro 200 MHz PC上的计算机时间。GCG解法使用改进的不完全Cholesky预处理器，收敛标准为 10^{-4} 。括号为通过启动集中弥散截项选项而获得的时间。可以看出，尽管使用更大的步长乘数可以大大加快模拟运行的速度，但当以含水层相对于基本情况去除质量的总量来近似衡量时，结果就变得不够精确了。

表7.2 显式与隐式解法中的计算时间对比

显式或 隐式解法	初始运移 步长大小	运移步长 乘数	所需总 步长数	总计算 时间(秒)	相对质量 去除量
显式	2.25	N/a	889	128	1.00
隐式 #1	2.25	1.2	29	64 (24)	0.98
隐式 #2	2.25	1.5	16	38 (16)	0.95
隐式 #3	2.25	2.0	10	26 (11)	0.93
隐式 #4	2000	N/a	1	8 (3)	0.79

7.10.5 非平衡吸附的影响

在已讨论的模拟中，吸附作用是用平衡控制线性等温线来模拟的。为了评估局部平衡假设对建议的恢复措施有效性的影响，MT3DMS可利用动态(非平衡)等温吸附线构建新的模拟，而且只需要一个额外的参数，即一阶动态速率 β 。在此项研究的模拟中，分别用一阶动态速率0.1， 1.5×10^{-4} 及 10^{-6} /天来代表相对快速

的、中速以及慢速的吸附过程。

如图7.21所示，当吸附速率常数为0.1/天时，动态吸附接近平衡吸附。换句话说，先前模拟中使用的局部平衡假设是有效的。然而，当这个速率常数在 1.5×10^{-4} /天附近时，局部平衡假设将导致对质量去除量的过高估计。随着速率常数的进一步减小(即吸附过程相对于迁移过程相当缓慢)，动态吸附将接近于没有吸附的情况。需要注意的是，无吸附作用时质量去除量较少，因为假设没有吸附，含水层初始状态下所含质量就较少。

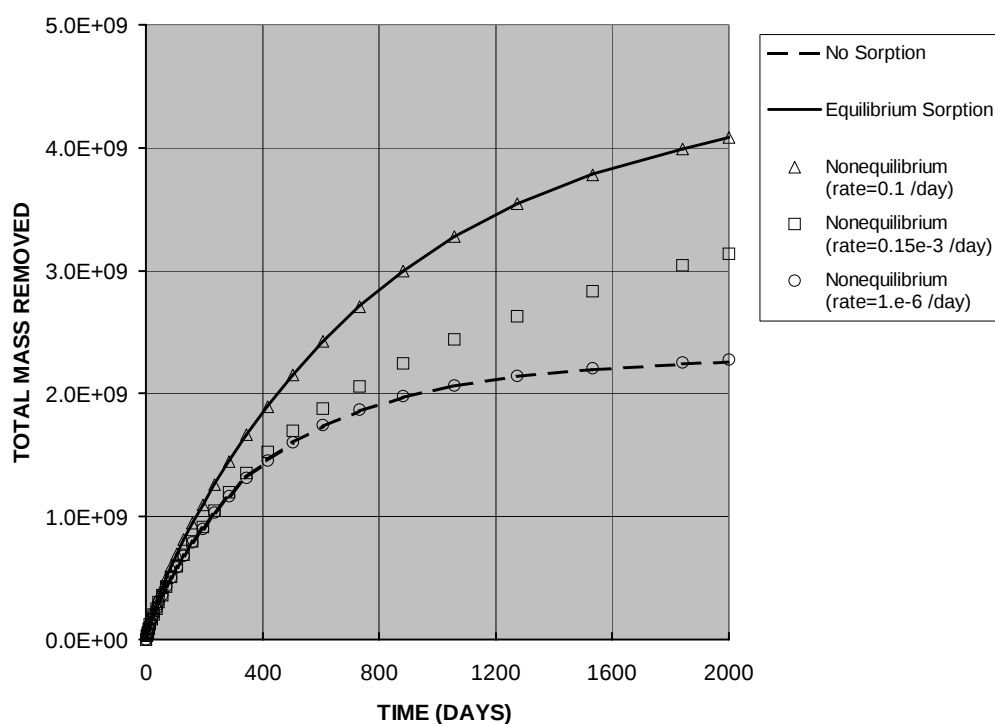


图 7.21 野外实例中动态吸附速率对质量去除量的影响

Appendix A

Description of the Generalized Conjugate Gradient Solver¹

This section describes iterative algorithms in the Generalized Conjugate Gradient Solver (GCG) Package for solving the linear system

$$Au = b \quad (A1)$$

where the coefficient matrix A is a given real nonsingular matrix of order N , b is a given column vector, and vector u is to be determined. The matrix A is assumed to be large and sparse.

The iterative algorithms which we consider include the following components (Young and Mai 1988).²

- a. A basic iterative method.
- b. An acceleration procedure
- c. A stopping procedure.

Basic Iterative Method

A basic iterative method for solving $Au = b$ is a method of the form

$$u^{(n+1)} = Gu^{(n)} + k \quad (A2)$$

where $u^{(0)}$ is arbitrary, G is the iteration matrix defined later, and $k = Q^{-1}b$. It can be shown that a basic iterative method can be defined in terms of a nonsingular matrix Q , referred to as a “splitting” or “preconditioning” matrix. Thus, if A is represented in the form

$$A = Q - (Q - A)$$

¹ This appendix is prepared by T. -Z. Mai, Department of Mathematics, University of Alabama.

² References cited in this appendix are listed in the References at the end of the main text.

the system $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ can be written in the form

$$\mathbf{Q}\mathbf{u} = (\mathbf{Q} - \mathbf{A})\mathbf{u} + \mathbf{b}. \quad (\text{A3})$$

If the iterative method is defined by

$$\mathbf{Q}\mathbf{u}^{(n+1)} = (\mathbf{Q} - \mathbf{A})\mathbf{u}^{(n)} + \mathbf{b} \quad (\text{A4})$$

then the basic form of the iterative method with $\mathbf{G} = \mathbf{I} - \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{A}$, $\mathbf{k} = \mathbf{Q}^{-1}\mathbf{b}$ is obtained.

An ideal choice of the splitting matrix would be $\mathbf{Q} = \mathbf{A}$. In this case, the basic method would converge in one iteration. However, the work involved in carrying out the single iteration would be the same as that required to solve the system $A\mathbf{u} = \mathbf{b}$ itself by a direct method. In practice, $\mathbf{Q}$ is chosen so that the solution of the system $\mathbf{Q}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ for $\mathbf{x}$, given any $\mathbf{y}$, can be easily carried out. For many of the standard iterative methods, $\mathbf{Q}$ is chosen to be a matrix of the form $\mathbf{Q} = \mathbf{L}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}$ where $\mathbf{L}$ and $\mathbf{U}$ are sparse matrices such that $\mathbf{L}$ is a lower triangular, $\mathbf{\Sigma}$ is a diagonal, and $\mathbf{U}$ is an upper triangular matrix. In this case, the solution of the problem $\mathbf{Q}\mathbf{x} = \mathbf{y}$ can be obtained by the following steps:

- a. Solve $\mathbf{L}\mathbf{z} = \mathbf{y}$ for $\mathbf{z}$ by forward substitution.
- b. Solve $\mathbf{\Sigma}\mathbf{w} = \mathbf{z}$ for $\mathbf{w}$.
- c. Solve $\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{w}$ for $\mathbf{x}$ by backward substitution.

The splitting matrices for some standard basic iterative methods, which are involved in the GCG package of MT3DMS, are listed below. Here, $\mathbf{A}$ is represented in the form

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{C}_L - \mathbf{C}_U \quad (\text{A5})$$

where $\mathbf{D}$ is a diagonal matrix, and $\mathbf{C}_L$ and $\mathbf{C}_U$ are strictly lower and strictly upper triangular matrices, respectively.

<u>Method</u>	<u>Splitting Matrix $\mathbf{Q}$</u>
Jacobi	$\mathbf{D}$
Symmetric Successive-Over-Relaxation (SSOR)	$(\omega^{-1}\mathbf{D} - \mathbf{C}_L \left[\left(\frac{2-\omega}{\omega} \right) \mathbf{D} \right]^{-1} (\omega^{-1}\mathbf{D} - \mathbf{C}_U))$
Modified Incomplete Cholesky (MIC) (Gustafsson 1978)	$\mathbf{L}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}$

The real number ω in the SSOR splitting matrix is an iteration parameter (relaxation factor) which is chosen to make the convergence of the basic iterative method as fast as possible. However, the optimum value of the iteration parameter is seldom known in advance; thus, an estimate is needed so that the rate of convergence is reasonable. For the case where the coefficient matrix is

symmetric and positive definite (SPD), a very good approximation of the optimum value of ω is given by

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{2(1 - \rho(\mathbf{B}))}} \quad (\text{A6})$$

where $\rho(\mathbf{B})$ is the spectral radius of the matrix $\mathbf{B} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}$ (Young 1971). It should be noted that there is a complicated algorithm for the estimation of the optimal value of ω adaptively described in Young (1971). It should also be noted that $\rho(\mathbf{B}) = \cos(\pi h)$ for the Laplace equation with central finite-difference discretization with mesh size h . The model considered in this package is more complicated than the Laplace equation; however, the value of ω may be estimated by this formula when the SSOR method is chosen. Fortunately, the SSOR method is not sensitive to the value of ω ; thus the rate of convergence may not be slowed down by the choice of ω .

The matrices $\mathbf{L}$, $\mathbf{\Sigma}$, and $\mathbf{U}$ are obtained from the MIC factorization so that $\mathbf{L}$ and $\mathbf{U}$ are lower and upper triangular matrices, respectively, such that $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U} + \mathbf{R}$, where $\mathbf{R}$ is an error matrix. The procedure for the incomplete Cholesky factorization is based on the Gaussian elimination procedure; however, the sparse pattern of $\mathbf{A}$ must be preserved. The elements of zero value within $\mathbf{A}$ must not be modified. If there is a fill-in, this fill-in must be added to the diagonal element of $\mathbf{A}$ in the same row before the next elimination process can be continued. The algorithm is given below:

for $i = 1, 2, \dots, N$, do

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} d_{kk}$$

for $j = 1, 2, \dots, N$, do

$$d_{ii} l_{ji} = \begin{cases} a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} d_{kk} & (j, i) \notin P \text{ and } j \geq i \\ 0 & (j, i) \in P \text{ and } j < i \end{cases}$$

$$d_{ii} u_{ij} = \begin{cases} a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} d_{kk} & (j, i) \notin P \text{ and } j \geq i \\ 0 & (j, i) \in P \text{ and } j < i \end{cases}$$

$$a_{jj} = a_{jj} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} d_{kk} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} d_{kk} \quad (j, i) \in P$$

where $P = \{(i, j) \mid a_{ij} = 0, \forall i, j = 1, 2, \dots, N\}$ is the sparsity set of $\mathbf{A}$. An example is given:

Suppose that

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

The first step of Gaussian elimination is

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{15}{4} & -\frac{1}{4} & -1 \\ 0 & -\frac{1}{4} & \frac{15}{4} & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

Since the zero pattern should be kept the same as A , the fill-in entries $\frac{1}{4}$ (which were 0 originally) should be discarded before proceeding to the next elimination step. However, for the MIC factorization, the fill-ins are added to the corresponding diagonal elements. Thus the matrix

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{7}{4} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{7}{4} & -1 \\ 0 & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

is to be carried on. Continuing with the procedure yields

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 1 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{4} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{4}{7} & -\frac{4}{7} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & 0 \\ 0 & \frac{7}{4} & 0 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{7}{4} & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{20}{7} \end{bmatrix} = LU = A + R. \quad (A7)$$

Acceleration Procedures

In many cases a basic iterative method can be speeded up using an acceleration procedure. There are two classes of acceleration procedures. One class is for the linear system whose coefficient matrix is SPD, such as the conjugate gradient (CG) method proposed by Hestenes and Stiefel (1952). The other class is for nonsymmetric cases. There are many algorithms in this class; however, they can all be treated as generalized conjugate gradient (GCG) methods. The GCG methods are equivalent to the CG method when the system is symmetric.

Symmetric matrix

First the CG acceleration for the symmetric case, for example the flow case, will be discussed. In the absence of round-off error, the CG method converges to the exact solution in no more than N iterations, where N is the order of the system. The iterates $u^{(n)}$ generated by the CG acceleration satisfy the following condition:

$$u^{(n)} - u^{(0)} \in K_n(\delta^{(0)}, I - G), n = 0, 1, 2, \dots \quad (A8)$$

where $\delta^{(n)} = Q^{-1}(b - Au^{(n)})$ is called pseudo-residual vector and $K_n(\delta^{(0)}, I - G)$ is the Krylov space of $\delta^{(0)}$ of degree n with respect to the matrix $I - G$, and is defined by

$$K_n(\delta^{(0)}, I - G) = \text{span}\{\delta^{(0)}, (I - G)\delta^{(0)}, \dots, (I - G)^{n-1}\delta^{(0)}\} \quad (A9)$$

The error $\epsilon^{(n)} = u^{(n)} - \bar{u}$ satisfies the inequality

$$\|\epsilon^{(n)}\|_{(Z(I-G))^{1/2}} \leq \|u - \bar{u}\|_{(Z(I-G))^{1/2}}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (A10)$$

where the matrix Z is chosen so that $Z(I - G)$ is SPD.

Let (u, v) be the inner product of the vectors u and v , the formula for the CG acceleration is given below:

Formulas for CG acceleration

$u^{(0)}$ is arbitrary

$$\delta^{(0)} = Q^{-1}(b - Au^{(0)})$$

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \lambda_n p^{(n)}, n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\delta^{(n+1)} = \delta^{(n)} - \lambda_n Q^{-1} A p^{(n)}, n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\lambda_n = (\delta^{(n)}, p^{(n)}) / (Q^{-1} A p^{(n)}, A p^{(n)}), n = 0, 1, 2, \dots$$

$$p^{(n)} = \delta^{(n)} + \alpha_n p^{(n-1)}, n \geq 1, p^{(0)} = \delta^{(0)}$$

$$\alpha_n = (\delta^{(n)}, A p^{(n-1)}) / (p^{(n-1)}, A p^{(n-1)}), n = 0, 1, 2, \dots \quad (A11)$$

where $p^{(n)}$ is the A-conjugate direction vectors

Nonsymmetric matrix

The case where A is neither symmetric nor positive definite will now be discussed. If A is similar to an SPD matrix, by the use of an auxiliary matrix, a GCG method can be developed. The GCG method is equivalent to the CG method if the matrix A is an SPD matrix. But, in this package of subroutines, the coefficient matrix of the linear system is derived from an advection and dispersion/diffusion partial differential equation which is in general a nonsymmetric matrix and not similar to an SPD matrix. In such a case there are several consequences: some of the eigenvalues of the iteration matrix G may be complex and/or may have real parts greater than unity; the Jordan canonical form of $I-G$ may not be diagonal and hence there may exist principal vectors of grade greater than one which may slow down the convergence (e.g., Manteuffel 1977). It should be noted that if the eigenvalues of G are distributed over a circle in the complex plane then little or no acceleration of the convergence is possible (Hagman and Young 1981).

Young and Jea (1980) considered the idealized generalized CG acceleration procedure (IGCG acceleration) for speeding up the convergence of a nonsymmetric basic iterative method. The IGCG acceleration is defined by the following two conditions:

$$u^{(n)} - u^{(0)} \in K_n(\mathcal{D}^{(0)}, I-G), n=1,2,3,\dots \quad (\text{A12})$$

and

$$(Z\mathcal{D}^{(n)}, v) = 0, \text{ for all } v \in K_n(\mathcal{D}^{(0)}, I-G). \quad (\text{A13})$$

The first condition simply implies that there is a polynomial acceleration procedure. The second condition is called the Galerkin condition. We should point out that if $Z(I-G)$ is SPD, then the Galerkin condition is equivalent to the minimization condition:

$$\|u^{(n)} - \bar{u}\|_W \leq \|w - \bar{u}\|_W \quad (\text{A14})$$

for all w such that $w - u^{(0)} \in K_n(\mathcal{D}^{(0)}, I-G)$, where $W = (Z(I-G))^{1/2}$.

Young and Jea (1980) considered three forms of the IGCG method including ORTHODIR, ORTHOMIN, and ORTHORES. In the general case, the computation of $u^{(n+1)}$ for all three forms of the IGCG method involves the use of information from all previous iterations. Thus the procedures often require excessive amounts of computational work and computer storage. Truncated forms of the IGCG method, ORTHODIR(s), ORTHOMIN(s), and ORTHORES(s), are often used. The truncated forms are the same as for the IGCG method except that for a given integer s only the information from the last s iteration is required. However, we need to point out that the convergence properties may not hold. The methods may actually break down.

Jea and Young (1983) simplified the IGCG method by introducing an expanded system involving the use of A^T which leads to the Lanczos method.

With a suitable choice of Z , the three forms of the IGCG acceleration (i.e., ORTHODIR, ORTHOMIN, and ORTHORES) applied to the expanded system reduce to ORTHODIR(2), ORTHOMIN(1), and ORTHORES(1), respectively. Thus these simplified procedures are referred to as Lanczos/ORTHODIR, Lanczos/ORTHOMIN, and Lanczos/ORTHORES methods. Details of these methods can be found in Jea and Young (1983). In this package, the Lanczos/ORTHOMIN acceleration procedure is used because its formulas are simpler than the others.

Formulas for Lanczos/ORTHOMIN

$u^{(0)}$ is arbitrary

$$\delta^{(0)} = Q^{-1}(b - Au^{(0)})$$

$$u^{(n+1)} = u^{(n)} + \lambda_n p^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\delta^{(n+1)} = \delta^{(n)} - \lambda_n Q^{-1} A p^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\eta^{(n+1)} = \eta^{(n)} - \lambda_n (Q^{-1} A)^T p^{(n)}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$\lambda_n = (\delta^{(n)}, \eta^{(n)}) / (Q^{-1} A p^{(n)}, q^{(n)}), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

$$p^{(n)} = \delta^{(n)} + \alpha_n p^{(n-1)}, \quad n \geq 1, \quad p^{(0)} = \delta^{(0)}$$

$$q^{(n)} = \eta^{(n)} + \alpha_n Q^{(n-1)}, \quad n \geq 1, \quad q^{(0)} = \delta^{(0)}$$

$$\alpha_n = (\delta^{(n)}, \eta^{(n)}) / (\delta^{(n-1)}, \eta^{(n-1)}), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (A15)$$

In addition to the simple formulas, fast convergence and less computational work have been reported in some applications (Jea 1982 and Saad 1982).

Stopping Procedures

The problem of stopping the iteration procedure involves deciding whether or not the current iterate $u^{(n)}$ is a sufficiently accurate approximation to the true solution $\bar{u}$ of the linear system. If the true solution were known, then it would seem reasonable to accept the approximate solution $u^{(n)}$ if

$$\frac{\|u^{(n)} - \bar{u}\|_\alpha}{\|\bar{u}\|_\alpha} \leq \zeta \quad (A16)$$

Here α is a prescribed norm and ζ is a prescribed tolerance, perhaps 10^{-5} . The above stopping test is called an exact stopping test.

Since the true solution is usually not known in advance, alternative stopping tests must often be used. In a stopping test based on the use of the pseudo-residual vector $\delta^{(n)} = Q^{-1} \varepsilon^{(n)}$, where $\varepsilon^{(n)} = b - Au^{(n)}$, it follows that

$$\varepsilon^{(n)} = (G - I)^{-1} \delta^{(n)} \quad (\text{A17})$$

For any vector norm α and any compatible matrix norm β ,

$$\|\varepsilon^{(n)}\|_{\alpha} \leq \|(G - I)^{-1}\|_{\beta} \|\delta^{(n)}\|_{\alpha} \quad (\text{A18})$$

Therefore the exact stopping test can be replaced by

$$\frac{\|\varepsilon^{(n)}\|_{\alpha}}{\|\bar{u}\|_{\alpha}} \leq \|(G - I)^{-1}\|_{\beta} \frac{\|\delta^{(n)}\|_{\alpha}}{\|\bar{u}\|_{\alpha}} \quad (\text{A19})$$

If $\bar{u}$ is replaced by $u^{(n)}$, the stopping test obtained is

$$\|(G - I)^{-1}\|_{\beta} \frac{\|\delta^{(n)}\|_{\alpha}}{\|u^{(n)}\|_{\alpha}} \leq \varsigma \quad (\text{A20})$$

For the symmetric case, $\|(G - I)^{-1}\|_{\beta}$ may be replaced by $\frac{1}{1 - M(G)}$

where $M(G)$ is the largest eigenvalue of the iteration matrix G . The 2-norm or the ∞ -norm is chosen for the vector norm; thus the stopping test becomes

$$\frac{1}{1 - M(G)} \frac{\|\delta^{(n)}\|_2}{\|u^{(n)}\|_2} \leq \varsigma \quad (\text{A21})$$

This stopping test is adequate for an iterative algorithm. Since $M(G)$ is usually not known, an estimate for $M(G)$ may be used, or it may be set to zero. For the nonsymmetric case, there is no rigorous stopping test. Nevertheless, the test for the nonsymmetric case is used. Since the eigenvalue of G may be complex, $M(G)$ is set to be zero.

It should be noted that the tests presented above are preferable to some other tests such as $\|\delta^{(n)}\|_2 \leq \varsigma$ or $\|b - Au^{(n)}\|_2 \leq \varsigma$ which are sometimes used. In this package the maximum change of the concentration field at each grid point is required. Thus it is suitable to use the infinity norm of two successive iterations:

$$\|u^{(n+1)} - u^{(n)}\|_{\infty} \leq \varsigma \quad (\text{A22})$$

This stopping test can fulfill the maximum change requirement without additional effort.

Description of Subroutines

The iterative solver consists of one driver routine, GCG3AP, and five supporting utility routines, MVPRD, ATVPRD, QSOLVE, QTSLVE, and MIC.

The subroutine GCG3AP performs the iterative algorithms discussed above. There is a flag that allows the selection of CG acceleration for the symmetric system or Lanczos/ORTHOMIN acceleration for the nonsymmetric system. The algorithm flowchart is given in Figure A1.

The utility subroutines only communicate with GCG3AP. They do not interact with other routines in the GCG package. The subroutine MVPRD performs the matrix-vector product. It takes a matrix A and a vector v and returns the result of Av . The subroutine ATVPRD performs the product of the transpose of an input matrix A^T and a vector v , and returns the result of A^Tv .

The subroutine QSOLVE performs $Q^{-1}y$ where Q is the preconditioning matrix in one of the forms discussed above. Since Q^{-1} is not known explicitly, the system $Qx = y$ is solved for x . This subroutine takes the preconditioning matrix Q and a vector y as input and returns the solution x . Similarly, the subroutine QTSLVE solves the system $Q^Tx = y$ for x . Finally, the subroutine MIC performs the modified incomplete Cholesky factorization to obtain the preconditioning matrix Q with the same sparsity as A .

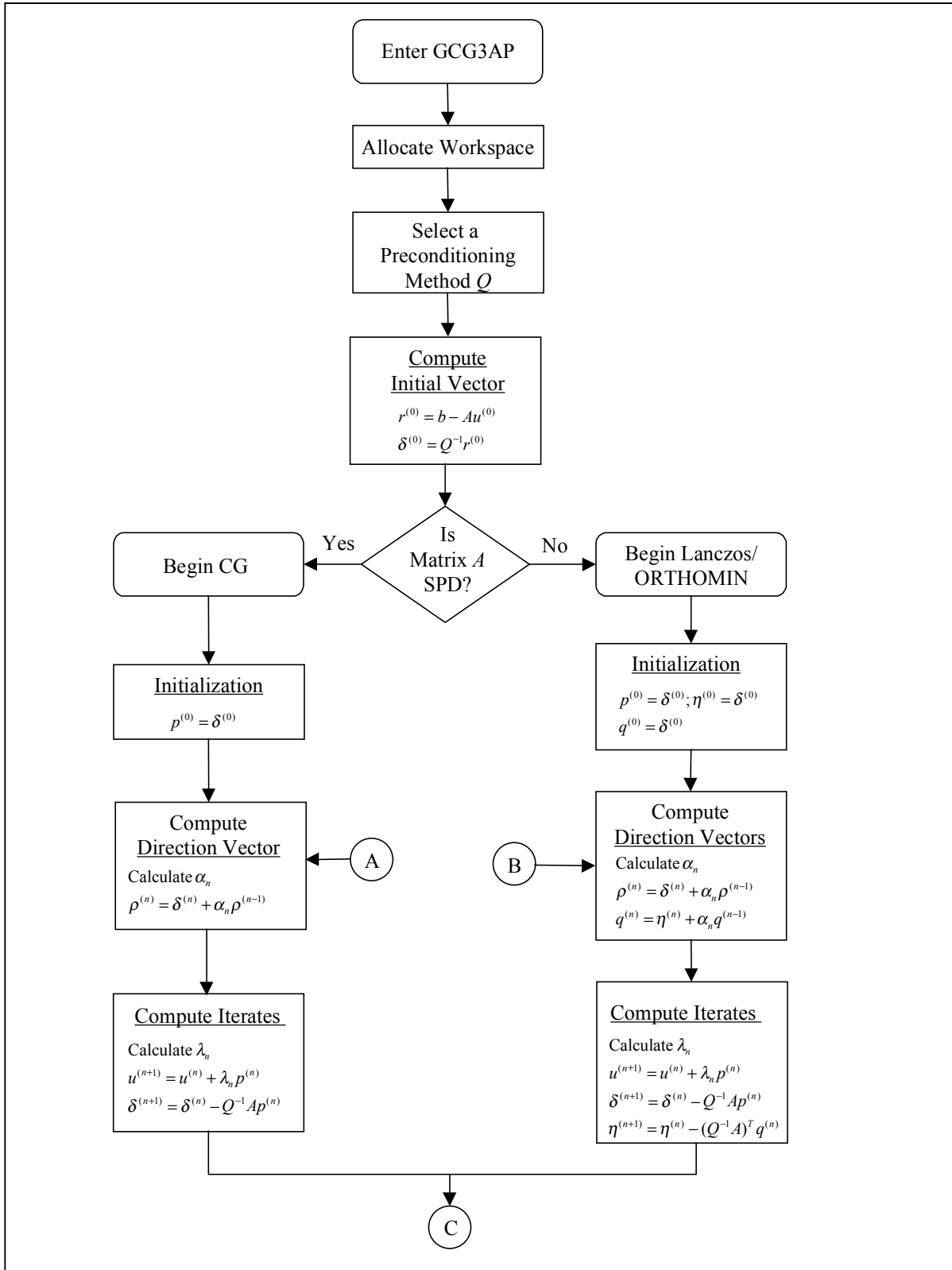


Figure A1. Flowchart for the GCG3AP module of the GCG package (Continued)

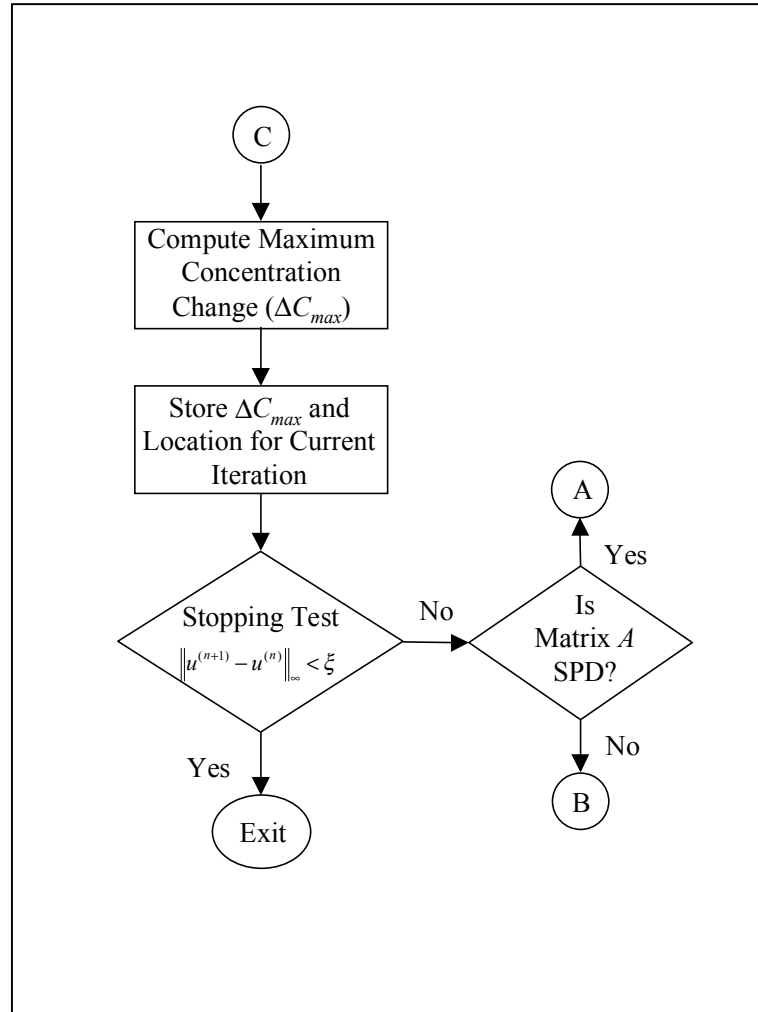


Figure A1. (Concluded)

B 计算机内存要求

每个程序包都需要的 X 和 IX 数组元素在每次模型运行时都要被输出。它们也可以按照下面给出的公式计算，公式中所用变量定义如下：

NCOL=列数；

NROW=行数；

NLAY=层数；

NCOMP=总组分数；

MCOMP=可动组分数；

NODES=NCOL*NROW*NLAY，模型所有节点数；

NCR=NCOL*NROW，模型每层节点数；

MXSS=水流模型中最大点源汇数，包括定水头和一般水头边界单元，但不包括补给和蒸腾单元；

MXPART=所有运动粒子的最大数目；

ND=所给问题的维数（ND=1 表示一维问题，2 表示二维问题，3 表示三维问题）；

MXITER=GCG 解法外部循环的最大数目；

ITER1= GCG 解法内部循环的最大数目。

B1 基本运移程序包（BTN）

I. X 数组

$\text{NODES} \times (5 \times \text{NCOMP} + 10) + 2 \times \text{NROW} + 2 \times \text{NCOL} + \text{NCR}$

II. IX 数组

$\text{NODES} \times \text{NCOMP} + \text{NLAY}$

B2 对流程序包（ADV）

I. X 数组

如果采用基于欧拉—拉格朗日方法的粒子追踪（MIXELM>0）：

$(\text{ND} + 2) \times \text{MXPART} \times \text{MCOMP}$

如果采用 TVD 或有限差分法（MIXELM≤0）

没有

II. IX 数组

如果采用基于欧拉—拉格朗日方法的粒子追踪（MIXELM>0）：

$\text{ND} \times \text{NODES} \times \text{MCOMP}$

如果采用 TVD 或有限差分法（MIXELM≤0）

没有

B3 弥散程序包（DSP）

I. X 数组

$10 \times \text{NODES} + 3 \times \text{NLAY}$

II. IX 数组

没有

B4 源汇混合程序包 (SSM)

I. X 数组

$6 * MXSS * NCOMP$

如果有补给, 加上 $NCR * (NCOMP + 1)$

如果有蒸腾, $NCR * (NCOMP + 1)$

II. IX 数组

如果有补给, NCR

如果有蒸腾, 加上 NCR

B5 化学反应程序包 (RCT)

I. X 数组

如果有吸附, $NODES * (2 * NCOMP + 1)$

如果有一级速率反应, 加上 $2 * NODES * NCOMP$

II. IX 数组

没有

B6 广义共轭梯度程序包 (GCG)

I. X 数组

$8 * NODES + MXITER * ITER1$ 加以下项:

- a) 如果选用 MIC 预处理器 ($ISOLVE=3$) 且系数矩阵中包含完整的弥散张量 ($NCRS=1$):

加上 $38 * NODES$

- b) 如果选用 MIC 预处理器 ($ISOLVE=3$) 且弥散截项被集中在方程等号右侧 ($NCRS=0$):

加上 $14 * NODES$

- c) 如果选用 Jacobi 或 SSOR 预处理器 ($ISOLVE=1$ 或 2) 且系数矩阵中包含完整的弥散张量 ($NCRS=1$):

加上 $19 * NODES$

- d) 如果选用 Jacobi 或 SSOR 预处理器 ($ISOLVE=1$ 或 2) 且弥散截项被集中在方程等号右侧 ($NCRS=0$):

加上 $7 * NODES$

II. IX 数组

$3 * MXITER * ITER1$

C MT3DMS 与水流模型连接

与 MT3DMS 联合使用的水流模型保存有一个无格式的水流—运移连接文件，MT3DMS 的水流模型连接程序包从这个文件读取饱和带厚度，单元界面沿所有方向的流量，各种源和汇的位置和速率。美国地质调查局的模块化水流模型（MODFLOW）用于水流模拟，作为对 MODFLOW 的补充，MT3DMS 的分配文件中包含一个名为 LKMT3（3 表示版本号）的程序包。由 LKMT3 程序包保存的水流—运移连接文件的结构和内容如下。（为了向后兼容，MT3DMS 也可读取由早期版本的 LKMT 程序包保存的无格式水流—运移连接文件）分配给 MT3DMS 的 MODFLOW 也包含 LKMT3 程序包。如果需要不同版本的 MODFLOW，LKMT3 程序包必须加入 MODFLOW 代码，如第 6 章所述。如果有必要将 MT3DMS 与另外水流模型进行连接，这个水流模型必须进行修改来保存与下面所述有相同结构的相同信息。除非另外指定，该无格式水流—运移连接文件中的整形或实形变量都分配四个字节。

对每次模拟：

F0. 记录：VERISON, MTWEL, MTDNR, MTRCH, MTEVT, MTRIV, MTGHB, MTCHD, MTISS, MTNPER

HEADER（11 个字符）—用于 MT3D 指定无格式水流—运移连接的字符串。VERSION= ‘MT3DXXXXXXX’，其中 XXXXXXXX 可以为任何字符。

MTWEL—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含井（WEL 程序包）：
MTWEL>0，MODFLOW 模拟中包含井；
MTWEL=0，MODFLOW 模拟中不包含井。

MTDRN—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含渠道（DRN 程序包）。约定与 MTWEL 相同。

MTRCH—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含补给（RCH 程序包）。约定与 MTWEL 相同。

MTEVT—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含蒸腾（EVT 程序包）。约定与 MTWEL 相同。

MTRIV—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含河（RIV 程序包）或溪流（STR 程序包）。约定与 MTWEL 相同。

MTGHB—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含一般水头边界（GHB 程序包）。约定与 MTWEL 相同。

MTCHD—整形标识，指示 MODFLOW 模拟中是否包含定水头边界单元。约定与 MTWEL 相同。

MTISS—整形标识，指示水流模拟是稳定流还是非稳定流。
MTISS>0，稳定流模拟；
MTISS=0，非稳定流模拟。

MTNPER—水流模拟中的应力期数目。

对水流解的每次时间步长

F1. 记录：KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL

- F2. 记录: THKSAT(NCOL,NROW,NLAY)
KPER—保存单元格饱和带厚度的应力期。
KSTP—保存单元格饱和带厚度的时间步长。
NCOL, NROW, NLAY—列数、行数和层数。
LABEL (16 个字符)—与‘THKSAT’相同的字符串, 饱和带厚度数组标识符。
THKSAT—非承压单元的饱和带厚度。对非活动单元, 该值必须设为 1.E30。对承压单元, 该值必须设为—111。

(如果 NCOL=1, 跳过 F3 和 F4)

- F3. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
F4. 记录: QX(NCOL,NROW,NLAY)
LABEL (16 个字符)—与‘QXX’相同的字符串, QX 数组的标识符。
QX—沿行方向 (x 轴方向) 单元间界面上的体积流速 (L^3T^{-1})。在 J 增加方向上为正值。

(如果 NROW=1, 跳过 F5 和 F6)

- F5. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
F6. 记录: QY(NCOL,NROW,NLAY)
LABEL (16 个字符)—与‘QYY’相同的字符串, QY 数组的标识符。
QY—沿行方向 (y 轴方向) 单元间界面上的体积流速 (L^3T^{-1})。在 I 增加方向上为正值。

(如果 NLAY=1, 跳过 F7 和 F8)

- F7. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
F8. 记录: QZ(NCOL,NROW,NLAY)
LABEL (16 个字符)—与‘QZZ’相同的字符串, QZ 数组的标识符。
QZ—沿行方向 (z 轴方向) 单元间界面上的体积流速 (L^3T^{-1})。在 K 增加方向上为正值。

(如果 MTISS>0, 跳过 F9 和 F10)

- F9. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
F10. 记录: QSTO(NCOL,NROW,NLAY)
LABEL (16 个字符)—与‘STO’相同的字符串, QSTO 数组的标识符。
QSTO—非稳定地下水储存量释放或增加的体积速率 (L^3T^{-1})。释放为正值, 增加为负值。
F11. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL, NCNH
LABEL (16 个字符)—与‘CNH’相同的字符串, 定水头边界的标识符。
NCNH—总定水头边界单元数。

(如果 NCHN>0, 对 F12 必须有 NCNH 条记录)

- F12. 记录: KCNH, ICNH, JCNH, QCNH
KCNH, ICNH, JCNH—每个定水头边界单元的单元索引。
QCNH—进出每个定水头单元的净体积流速 (L^3T^{-1}), 包括定水头单元间

的交换（与 MODFLOW 计算出的定水头单元的净流速不同）。水流流出定水头单元为正值，反之为负值。

（如果水流模型中没有井，跳过 F13 和 F14）

- F13. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL, NWEL
LABEL（16 个字符）—与‘WEL’相同的字符串，井的标识符。
NWEL—井总数。

（如果 NWEL>0，对 F14 必须有 NWEL 条记录）

- F14. 记录: KWEL, IWEL, JWEL, QWEL
KWEL, IWEL, JWEL—每个井的索引。
QWEL—井的体积流速 (L^3T^{-1})。水流进入井为正值，反之为负值。（允许与静态源汇项相同的约定）

（如果水流模型中没有渠道，跳过 F15 和 F16）

- F15. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL, NDRN
LABEL（16 个字符）—与‘DRN’相同的字符串，渠道的标识符。
NDRN—渠道总数。

（如果 NDRN>0，对 F16 必须有 NDRN 条记录）

- F16. 记录: KDRN, IDRN, JDRN, QDRN
KDRN, IDRN, JDRN—渠道的索引。
QDRN—渠道的体积流速 (L^3T^{-1})。

（如果水流模型中没有补给，跳过 F17, F18 和 F19）

- F17. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
LABEL（16 个字符）—与‘RCH’相同的字符串，补给的标识符。
F18. 记录: IRCH(NCOL,NROW)
IRCH—补给流量的层索引。
F19. 记录: RECH(NCOL,NROW)
RECH—体积流速 (L^3T^{-1})。

（如果水流模型中没有蒸腾，跳过 F20, F21 和 F22）

- F20. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL
LABEL（16 个字符）—与‘EVT’相同的字符串，蒸腾的标识符。
F21. 记录: IEVT(NCOL,NROW)
IEVT—蒸腾通量的层索引。
F22. 记录: EVTR(NCOL,NROW)
EVTR—蒸腾体积速率 (L^3T^{-1})。

（如果水流模型中没有河或溪流，跳过 F23 和 F24）

- F23. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL, NRIV
LABEL（16 个字符）—与‘RIV’相同的字符串，河或溪流的标识符。
NRIV—河或溪流总数。

（如果 NRIV>0，对 F24 必须有 NRIV 条记录）

F24. 记录: KRIV, IRIV, JRIV, QRIV

KRIV, IRIV, JRIVN—河或溪流所在单元的索引。

QRIV—河或溪流单元的体积流速 (L^3T^{-1})。

（如果水流模型中没有一般水头边界，跳过 F25 和 F26）

F25. 记录: KPER, KSTP, NCOL, NROW, NLAY, LABEL, NGHB

LABEL（16 个字符）—与‘GHB’相同的字符串，一般水头边界的标识符。

NGHB—一般水头边界单元总数。

（如果 NGHB>0，对 F26 必须有 NGHB 条记录）

F26. 记录: KGHB, IGHb, JGHb, QGHb

KGHB, IGHb, JGHb—一般水头边界单元的单元索引。

QGHb—一般水头边界单元的体积流速 (L^3T^{-1})。

D 后处理程序

MT3DMS 中包括两个后处理程序：1) PostMT3D|MODFLOW，从 MT3DMS 保存的无格式浓度文件（或 MODFLOW 保存的无格式水头/降深文件）产生图形数据文件；2) SAVELAST，从无格式浓度文件提取最后步长的浓度并保存成单独的无格式文件，作为后面运行的初始浓度。在本附录中将介绍这两种程序。

D1 PostMT3D|MODFLOW (PM)

PM 用来在用户指定的窗口中沿一个模型层或横界面（二维）或在用户指定的体积（三维）中于要求时间间隔从 MT3DMS 或其他版本的 MT3D 保存的无格式浓度文件中提取计算浓度。这些指定窗口或体积中的浓度值以相同格式保存，因此它们可被任何商业图像软件利用产生二维或三维的等值线图或其他类型的图形。

要利用 PM，需要两个输入文件。第一个是在合适的输出控制选择完成后由 MT3DMS 或 MODFLOW 保存的无格式文件。第二个为文本文件，包含模型网格的空间结构信息，称为模型结构文件。对于输出，PM 以 POINT 格式（节点空间坐标按照节点处数据值保存）或 ARRAY 格式（可被 Golden Software 的二维等值线绘制程序 Surfer[®]直接读取）产生数据文件。另外，以 POINT 格式保存的数据文件可包含一个可选择的文件头，它适于 Amtec Engineering 的二维和三维可视化软件 Tecplot[®]。

D.1.1 无格式浓度文件

在以前版本的 MT3D 中，无格式浓度文件缺省状态下被命名为 MT3D.UCN。在 MT3DMS 中对于每种组分都保存有一个无格式浓度文件，缺省名为 MT3Dnnn.UCN，nnn 为组分索引号，如 MT3D001.UCN, MT3D002.UCN 等。在 BTN 输入文件中将 SAVUCN 标识设为 T（真）则无格式浓度文件被保存。该无格式浓度文件的结构和内容如下：

MT3Dnnn.UCN（无格式）：

对每个保存的运移步长：

对于三维浓度矩阵的每一层：

记录 1: NTRANS,KSTP,KPER,TIME2,TEXT,NCOL,NROW,ILAY

记录 2: ((CNEW(J,I,ILAY),J=1,NCOL),I=1,NROW)

其中

NTRANS	保存浓度的运移步长；
KSTP	保存浓度的时间步长；
KPER	保存浓度的应力期；
TIME2	保存浓度时总共用的时间；

TEXT	与“CONCENTRATION”相同的字符串（16 个字符）；
NCOL	总列数；
NROW	总行数；
ILAY	保存浓度的层；
CNEW	计算浓度。

D.1.2 模型结构文件

模型结构文件，缺省名为 MT3D.CNF，在将输出标识 SAVUCN 设为 T 后随同 MT3Dnnn.UCN 被自动保存。如果 PM 要在用到 MT3DMS 之前处理 MODFLOW 保存的无格式水头或降深文件，用户需要用文本编辑器人工创建模型结构文件。该模型结构文件的结构和内容如下：

MT3D.CNF（自由格式）：

记录 1: NLAY, NROW, NCOL

记录 2: (DELR(J), J=1,NCOL)

记录 3: (DELC(I),I=1,NROW)

记录 4: ((HTOP(J,I), J=1,NCOL),I=1,NROW)

记录 5: (((DZ(J,I,K), J=1,NCOL),I=1,NROW),K=1,NLAY)

记录 6: CINACT

其中

NLAY 总层数；

DELR 列宽（沿行或 x 轴）；

DELC 行宽（沿列或 y 轴）

HTOP 定义第一层顶板标高的二维数组；

DZ 定义各单元格厚度的三维数组；

CINACT 模型标识非活动单元的值。

模型结构文件中的值以表或自由格式排列。因此，每条记录必须另起一行且一条记录可根据需要占据多行。在记录中可用空格或逗号分隔数据。另外，自由格式输入允许重复计算，格式为 $n*d$ ，其中 n 为一个无符号非零整型常数， $n*d$ 标识连续输入 n 个 d 。HTOP 为二维数组，它的值按照下述顺序排列：从第一列开始，沿第一行从第一列到第 NCOL 列；然后是第二行，第三行...直到第 NROW 行。DZ 是一个三维数组，每一层值的排列与 HTOP 类似，从第一层开始直到第 NLAY 层。注意，如果仅要为某一层在平面上创建数据文件，则不再需要 HTOP 和 DZ，因此可利用重复计算输入一些虚构值。

D.1.3 运行 PM

PM 可以交互式或批处理方式运行。如果是交互式运行，只需在 DOS 命令下输入可执行文件名：

C:\> PM

程序会提示用户各种输入项，用户可通过键盘直接输入。如果以批处理方式运行，按照 PM 要求的格式把所有响应写入一个文本文件，然后通过设置如下命

令使 PM 从响应文件而不是键盘获得响应：

C:\> PM < response.file

其中，**response.file** 是含有所有响应的文本文件，该文件需要用户通过键盘另外输入。

用户可以在要求时刻选择浓度，水头或降深，通过指定 a) 运移步长，时间步长和应力期的数目；或 b) 总共所用时间，这会更方便。（注意运移步长只用于 MT3DMS，MODFLOW 中没有）输入 -1 来获得储存在无格式文件中最后一步的结果。用户也可指定一个二维窗口或三维块体，并通过指定窗口的起始和结束的列 (J)，行 (I) 和层 (K) 索引来获取图形数据文件。

例如，要产生沿第 5 列，从第 20 到 40 行，从第 1 到 10 层的横截面等值线图的数据文件，输入起始 (J,I,K) 索引 5,20,1 和结束 (J,I,K) 索引 5,40,10。类似地，要产生沿第 5 行，从第 20 到 40 列，从第 1 到 10 层的横截面等值线图的数据文件，输入起始 (J,I,K) 索引 20,5,1 和结束索引 40,5,10。此外，要产生第 5 层，从第 20 到 40 列，从第 1 到 10 行的等值线图的数据文件，输入起始 (J,I,K) 索引 20,1,5 和又下角索引 40,10,5。最后，要产生从第 1 到 40 列，从第 1 到 20 行，从第 1 到 5 层的块体内的三维数据文件，输入起始 (J,I,K) 索引 1,1,1 和结束索引 40,20,5。也可以产生潜水面，即，最高活动层而不是指定层的单元上等值线图的数据文件，输入起始 (J,I,K) 索引 20,1,0 和结束索引 40,10,0。

需要指出的是，在 MT3DMS 中，内部坐标系的原点(O_m)在位于第 1 列，第 1 行，第 1 层的单元，即单元 (1, 1, 1) 的左上角。x, y 和 z 轴的正方向为列，

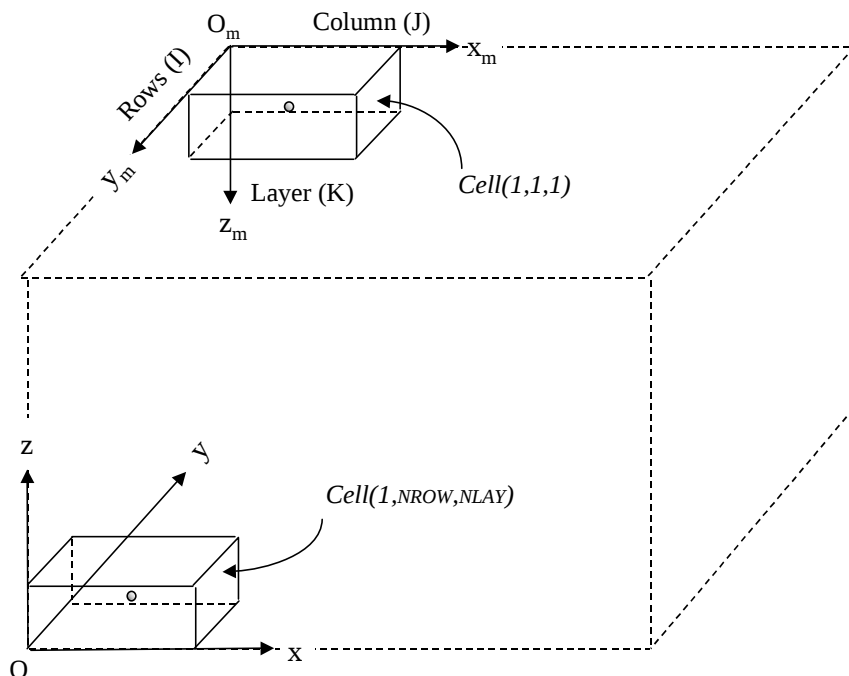


图 D.1 从模型内部坐标系到后处理程序所用坐标系的转变

行和层索引增加的方向（见图 D.1）。然而，在 PM 产生的输出文件中，原点(O)转变成位于第 1 列，最后一行和最后一层的单元，即单元 (1, NROW, NLAY) 的左下角（见见图 D.1），这是大多数图形软件惯用的。结果，MT3DMS 所用的

y 和 z 轴被 PM 翻转了，而 x 轴保持不变。

因此，如果等值线图位于某一层或潜水面（即，x-y 平面）上，图的水平轴沿列（J）索引增加的方向，而垂向轴沿行（I）索引减小的方向。如果等值线图位于沿某一行（即，x-z 平面）上，图的水平轴沿列（J）索引增加的方向，而垂向轴沿层（K）索引减小的方向。如果等值线图位于沿某一列（即，y-z 平面）上，图的水平轴沿行（I）索引增加的方向，而垂向轴沿层（K）索引减小的方向。所有必要的转变由 PM 自动完成。PM 也允许用户设置 x 和 y 方向上相对于原点的偏移量以方便在图上投放数据点。

D.1.4 输出文件

PM 数据文件有两种输出格式，ARRAY 格式（文件扩展名为.GRD）和 POINT 格式（文件扩展名为.DAT）。下面列出的 ARRAY 格式便于利用 Golden Software 的 Surfer[®]等值线绘图软件。它将用户指定的具有规则网格间距的窗口内的浓度，水头或降深保存进输出文件，可被 Surfer[®]直接利用产生等值线图。如果具有不规则网格间距的窗口内的浓度，水头或降深被写成了“.GRD”文件，不能进行差分也就不能绘制等值线。下面列出的 POINT 格式在用户指定的二维窗口或三维块体内沿节点坐标将浓度，水头或降深保存进输出文件。这种格式用于产生有不规则网格间距的数据文件，这中数据文件能被任何等值线绘制软件中的差分程序利用。它也用于产生在某时刻沿某列，行，或层的浓度，水头或降深随距离变化曲线。（某点的浓度随时间变化曲线可从观测数据文件 MT3Dnnn.OBS 产生）一个可选文件头可加入“.DAT”文件使得该文件能被 Amtec Engineering 的二维和三维可视化软件 Tecplot[®]利用。ARRAY 和 POINT 格式如下：

1. ARRAY(Surfer[®] GRD) 文件格式(自由格式):

```
DSAA
NX, NY, XMIN, XMAX, YMIN, YMAX, CMIN, CMAX
CWIN(NX,NY)
```

其中

DSAA	Surfer [®] 需要的字符型关键字；
NX	窗口内水平向上节点数；
NY	窗口内垂向上节点数；
XMIN	窗口内水平向上节点坐标的最小值；
XMAX	窗口内水平向上节点坐标的最大值；
YMIN	窗口内垂向上节点坐标的最小值；
YMAX	窗口内垂向上节点坐标的最大值；
CMIN	窗口内的最小浓度值；
CMAX	窗口内的最大浓度值；
CWIN	含有窗口内计算浓度的二维数组。

2. POINT (DAT) 文件格式，无文件头（自由格式）:

对于指定的二维窗口或三维块体内的每一个活动单元：

X, Y, Z, CXYZ

其中

X x 轴（沿行方向）的节点坐标；
Y y 轴（沿列方向）的节点坐标；
Z z 轴（沿层方向）的节点坐标；
CXYZ 节点 (X,Y,Z) 处的计算浓度。

对于二维窗口的数据文件，一个坐标值为常数。在为形成网格文件利用差分程序时，确保指定合适的列。例如，要绘制 x-z 横截面上的等值线图，y 列应被删除或忽略。

3. POINT (DAT)文件格式，有文件头（自由格式）：

这种文件格式除了增加了包含以下信息的兼容 Tecplot[®]的文件头外，与类型 2 的格式是相同的。

VARIABLES="X" "Y" "Z" "DATA"
ZONE I=NX J=NY K=NZ F=POINT

其中

VARIABLES, ZONE, I, J, K, F, POINT 为 Tecplot[®]所用关键字。

NX 用户指定的二维窗口或三维块体内的列数；

NY 用户指定的二维窗口或三维块体内的行数；

NZ 用户指定的二维窗口或三维块体内的层数；

X, Y, Z 和 DATA 为文件中四个数据列的字符标签。

D.2 SAVELAST

如果需要进行 6.10 中描述连续运行，先前运行过程最后一步的浓度可作为后面运行的初始浓度。组分 #nnn 的浓度保存在无格式浓度文件 MT3Dnnn.UCN 中，该文件可被数组读取器 RARRAY 直接读取。如果 MT3Dnnn.UCN 保存了不止一步的浓度，SAVELAST 可用来提取最后一步的浓度并保存成单独的无格式文件。要运行 SAVELAST，只需在 DOS 命令提示符下键入 SAVELAST 并输入输入和输出文件名。

基本运移程序包

ID	变量名	格式	说明
A1	HEADING(1)	A80	模拟运行标题的第一行
A2	HEADING(2)	A80	标题第二行
A3	NLAY, NROW, NCOL, NPER, NCOMP, MCOMP	6I10	层, 行, 列, 应力期, 总可动组分数
A4	TUNIT, LUNIT, MUNIT	3A4	时间, 长度和质量单位
A5	TRNOP(10)	10L2	运移解法选项 (ADV, DSP, SSM, RCT, GCG)
A6	LAYCON (NLAY)	40I2	模型层类型代码 (=0 承压; >0 非承压或可转化)
A7	DELR (NCOL)	RARRAY	沿行 (或x轴) 的单元宽度
A8	DELC (NROW)	RARRAY	沿列 (或y轴) 的单元宽度
A9	HTOP (NCOL, NROW)	RARRAY	模型第一层顶板高度
A10	DZ (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	单元厚度
A11	PRSITY (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	孔隙度 (或采用双区模型时的可动孔隙度)
A12	ICBUND (NCOL, NROW) (每层一个数组)	IARRAY	各种组分共用的浓度边界条件指示数组
(为每种组分输入A13)			
A13	SCONC (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	初始浓度
A14	CINACT, THKMIN [如果没有指定THKMIN=0.01]	2F10.0	非活动单元标识数值; 相对于总单元厚度的最小饱和厚度, 在这个值以下认为单元是非活动的
A15	IFMTCN, IFMTNP, IFMTRF, IFMTDP, SAVUCN	4I10, L10	输出控制选项
A16	NPRS	I10	打印或保存模拟结果的间隔
(如果NPRS > 0 输入A17)			
A17	TIMPRS (NPRS)	8F10.0	总共所用时间, 此时应打印或保存模拟结果
A18	NOBS, NPROBS	2I10	观测点和输出频率
(如果 NOBS > 0 输入A19次)			
A19	KOBS, IOBS, JOBS	3I10	观测点位置 (层, 行, 列)
A20	CHKMAS, NPRMAS	L10, I10	保存质量运算表和输出频率标识
(为每一应力期重复A21到A23)			
A21	PERLEN, NSTP, TSMULT	F10.0, I10, F10.0	应力期长度, 水流时间步长和步长乘数
(如果 TSMULT < 或= 0 输入A22)			
A22	TSLNGH (NSTP)	8F10.0	模型没有采用等比级数步长时的时间步长
A23	DT0, MXSTRN, TTSMULT, TTSMAX	F10.0, I10, 2F10.0	运移步长大小; 一个水流步长内允许的最大运移步长; 运移步长乘数和最大运移步长大小 (最后两项仅适用于完全隐式有限差分法)

注: 加亮标记部分为MT3DMS的新特点。

对流程程序包

ID	变量名	格式	说明
B1	MIXELM, PERCEL, MXPART, NADVFD	I10, F10.0, 2I10	对流解法选项； 在一个运移步长内允许进行对流的单元数（Courant 数）：运动粒子的最大数目：有限差分的权重方案 MIXELM = 0, 有限差分 = 1, MOC = 2, MMOC = 3, HMOC = -1, 3rd-order TVD (ULTIMATE)
(如果 MIXELM = 1, 2 或 3 输入B2)			
B2	ITRACK, WD	I10, F10	粒子追踪选项，浓度权重因子
(如果 MIXELM=1 或 3 输入B3)			
B3	DCEPS, NPLANE, NPL, NPH, NPMIN, NPMAX	F10.0, 5I10	MOC方法的粒子分布控制参数
(如果 MIXELM=2, 或 3 输入B4)			
B4	INTERP, NLSINK, NPSINK	3I10	MMOC方法的解法标识
(如果 MIXELM=3 输入B5)			
B5	DCHMOC	F10.0	控制选用MOC还是MMOC的临界浓度梯度： 如果DCCELL > DCHMOC，采用MOC 如果DCCELL < 或 = DCHMOC，采用MMOC

注：加亮标记部分为MT3DMS的新特点。

弥散程序包

ID	变量名	格式	说明
C1	AL (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	径向弥散度
C2	TRPT (NLAY) (每层一个数组)	RARRAY	水平弥散度与径向弥散度的比值
C3	TRPV (NLAY) (每层一个数组)	RARRAY	垂向弥散度与径向弥散度的比值
C4	DMCOEF (NLAY) (每层一个数组)	RARRAY	有效分子扩散系数

源汇混合程序包

ID	变量名	格式	说明
D1	FWEL, FDRN, FRCH, FEVT, FRIV, FGHB, X, X, X, X	10L2	井, 渠道, 补给, 蒸腾, 河流 (或溪流), 一般水头边界标识 (X表示为附加源汇项保留的标识)
D2	MXSS	I10	水流模型中允许的最大点源或汇数
(对每一应力期重复D3到D8)			
(如果 FRCH=T 输入D3)			
D3	INCRCH	I10	指示是否应读取补给通量浓度的标识
(如果FRCH=T 且INCRCH > 或 = 0 为每一组分输入D4)			
D4	CRCH (NCOL, NROW)	RARRAY	补给通量浓度
(如果FEVT = T 输入D5)			
D5	INCEVT	I10	指示是否应读取蒸腾通量浓度的标识
(如果FEVT = T 且INCEVT > 或 = 0 为每一组分输入D6)			
D6	CEVT (NCOL, NROW)	RARRAY	蒸腾通量浓度
D7	NSS	I10	指定浓度的点源数量
(如果 NSS > 0 输入D8 NSS次)			
D8	KSS, ISS, JSS, CSS, ITYPE, (CSSMS(n), n=1, NCOMP)	3I10, F10.0, I10, (自由格式)	具有特定浓度的点源的层, 行, 列, 浓度和类型; 各种组分的浓度 ITYPE = 1, 定水头单元 = 2, 井 = 3, 渠道 = 4, 河流 (或溪流) = 5, 一般水头边界单元 = 15, 质量载入源 = -1, 随时间变化的定浓度单元

注: 加亮标记部分为MT3DMS的新特点。

化学反应程序包

ID	变量名	格式	说明
E1	ISOTHM, IREACT, IRCTOP , IGETSC	4I10	指示吸附和一级速率反应类型的标识; 反应程序包数据数组输入选项; 非平衡吸附或非可动相的初始条件标识 ISOTHM = 1, 线性 = 2, Freundlich = 3, Langmuir = 4, 非平衡 = 5, 双区质量迁移 (无吸附) = 6, 双区质量迁移 (有吸附) = 0, 没有 IREACT = 1, 衰变或生物降解 = 0, 没有 注: 设IRCTOP=2以按单元格式设定反应系数, 即每层一个数组; 设IRCTOP=0或1以按层格式设定反应系数, 所有层为一个数组 (这和以前除了MT3D'96外的所有版本的MT3D是一致的)
(如果 ISOTHM = 1, 2, 3, 4, 或 6; 但不等 5 输入E2A)			
E2A	RHOB (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	多孔介质容重
(如果ISOTHM = 5 或 6 输入E2B)			
E2B	PRSITY2 (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	采用双区系统时的非可动区孔隙度
(如果IGETSC>0 为每一组分输入E2C)			
E2C	SRCONC(NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	吸附或不可流动液体相的初始浓度 (假设吸附相和溶解相处于平衡状态, 没有指定SRCONC时不可流动区的浓度为零)
(为每一组分输入E3和E4)			
E3	SP1 (NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	第一个吸附常数 (平衡常数)
E4	SP2 (NCOL, NROW) (每层一个数组r)	RARRAY	第二个吸附常数或 双区质量迁移速率
(如果IREACT > 0 为每一组分输入E5和E6)			
E5	RC1(NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	溶解相的一阶速率反应常数
E6	RC2(NCOL, NROW) (每层一个数组)	RARRAY	吸附相的一阶速率反应常数

注：加亮标记部分为MT3DMS的新特点。

广义共轭梯度（GCG）程序包（新）

ID	变量名	格式	说明
F1	MXITER, ITER1, ISOLVE, NCRS	自由格式	外部循环最大数目；内部循环最大数目；与Lanczos/ORTHOMIN加速方法一起使用的预处理器类型，对弥散截项的处理标识 ISOLVE=1: JACOBI =2: SSOR =3: MIC NCRS=0: 弥散截项集中在右侧 =1: 完整弥散张量
F2	ACCL, CCLOSE, IPRGCG	自由格式	SSOR预处理器的松弛因子；收敛标准；向输出文件打印最大浓度变化的时间间隔