

# 从过程到系统：论地层中水流与输运预测模拟

曾庆孚

(美国加利福尼亚大学, 伯克利劳伦斯国家实验室)

**[摘要]** 人们对地层中溶质流动与输运相关的水力学过程开展了许多研究工作, 包括水动力弥散及其尺度效应、基质扩散、流动管道化以及密度驱动流。但对于诸如环境治理与核废料处置问题等有关的污染物或核素流动与输运的当代研究热点, 不仅需要对这些单独过程有一个更好的理解, 还需要具有对作为一个系统中给定场地的地质介质中溶质输运进行预测的能力。本文将借助于两个实例, 阐述和讨论水力输运预测的有关问题。

**[关键词]** 地质介质, 地下水流动与输运, 模拟

## 1 引言

人们对地层中溶质流动与输运相关的水力学过程开展了许多研究工作, 如水动力弥散及其尺度效应、基质扩散、流动管道化以及密度驱动流。对水动力弥散, 早期的研究着眼于水文地质学, 其中密度驱动流已是明确的确定性问题。解决该问题的主要困难是技术问题, 即如何对三维复杂系统中的水动力弥散过程开展具有足够精度的数值模拟。相对而言, 象流动管道化与基质扩散等其它过程是近年来研究热点, 目前已取得较好的成果。

对当今的水文地质工作者来说, 仅理解每个单独过程是不够的。当代的社会性重要议题, 如核废料地质处置的安全性评价或污染土壤及地下水的治理方案优化选择, 常要求水文地质工作者预测地层系统中溶质运移。从过程到系统特性的预测开辟了一系列目前尚未得到足够重视的研究课题。理解一个过程是确定性问题, 即方程与试验在定义域内受到约束。预测系统特性需要一个关于系统认识的“充分”水平, 而该认识往往很难得到。尽管我们对系统具有一个认识水平, 但还不能简单地照搬成特征参数从而用于系统特性的模型计算。

## 2 系统非均质性

预测系统特性的最大难点之一是地质介质中渗透性与化学特征的非均质性, 即系统中包含裂隙与断层、地层层序变化、后期裂隙及微细空间变化。近年来, 水文地质学的研究热点之一集中在考虑热迁移(地热、储能)与压力场(结构、稳定性与机械影响)叠加的水资源上。压力场与温度场并非受到细微结构的影响。根据现场研究确定的裂隙特征(若这些裂隙被现场测定)可以预测主要裂隙的作用。但沿着流动途径的溶质运移与地球化学反应不仅与大裂隙高度敏感, 而且对那些难以测量的细裂隙也非常敏感。这些微细裂隙的非均质性可用管道流的影响来

本文于1996年3月11日收到。

描述,它是造成现场观测到的部分溶质运移异常快速的原因(Merono 和 Tsang,1994)。

地质系统并非工程系统,它几乎是不可能达到完全详细描述。为了确定地质系统特征,在地层中打了很多钻孔,而如此多钻孔将导致该介质情况与勘探前情况相比已面目全非!因此我们仅能描述主要裂隙和利用随机模拟技术处理微细结构,除非非破坏性的地球物理技术能够方便并足够灵敏地探测和确定这些细微结构的水力学特征。这将直接对地质介质中溶质运移及地球化学变化的预测产生相当程度的不确定性,如确定“明显”的主要裂隙的含义,还不完全清楚是否能够知道明显裂隙的优先次序。此外,显著水平通常依据所需回答的如下问题,即在预测评价时所需测量预测量。

### 3 关于长期预测问题

为了回答非均匀地质介质中溶质输运及变化的长期预测问题,预测时需要考虑三个关键问题。尽管我们知道它们是相互影响的,但为了方便起见分述如下:

**概念模型发展** 这里是指识别地质系统中裂隙和结构的方法,用于评价相关事件与其记载,并确定其中发生的相应过程。通常条件下,一系列过程同时发生。对于每个选定的模型,不仅需要确定大量确定性或描述性(随机)参数及其随空间、时间变化,还需知道这些参数是否是局部参数或它们是否与水力(压力)梯度场有关。如何确定这些参数还不完全清楚。通过假定系统有时是一种有效的方法,但可能存在着一个具有很小尺度效应的辅助参数。一个简单的例子是弥散系数,其重要性将随着高度非均质的详尽刻划而显著降低。后面将介绍 Casas 等人(1990)的工作,即裂隙网络模型被用于模拟系统,弥散对水流与输运仅起很小的作用。实际上,当弥散度自 0.0 m 到 0.8 m 时对系统中水流与输运的影响可忽略。溶质运移受到裂隙网络中选择性流动路径中流速分布的控制。

**现场实验方法** 必须考虑如何利用压力与示踪试验来更好地确定非均质模型,包括在现场所表现出来的各向异性作用。人们需要知道单井试验、双井试验和示踪剂弥散试验的特征测量尺度。在很多情况下需在不同位置进行多次试验。一次试验的相对特征尺度容易知道,例如,可计算出一次短暂压力试验的影响半径,因而由此获得的参数表示影响半径内的平均性质。但不能将这些平均值转换成刻划整个系统非均质性的参数,而这些参数间接地与系统特性的预测有关。这些平均值不仅是测量尺度,同时也是测量方案设计(即多井试验流场模式)的函数,而且描述系统的恰当特征参数的选择可能是人们所寻求预测量的一个函数。

**预测评价** 为了获得成功的预测评价,需要知道如何将所选概念模型的计算结果综合在一起,并都满足现场得到的信息与数据。所选模型与参数范围的不确定性将用于评价整体不确定性或置信水平。由于这些不确定性,没有足够的理由给出一个最好的“期望”值作为预测结果,于是不得不给出预测结果的取值范围或可能分布,这表明我们在预测中的能力状况。公众与决策者应该知道我们的局限性,根据我们最好的和可靠的成果作出决策。除了很粗糙的蒙特卡洛方法之外,目前还不完全清楚如何将所选择概念模型的计算结果与线性叠加相结合,并得到可能的取值范围。

### 4 地层系统中水流与输运的预测实例

根据上述讨论背景,目前我们可以说所有成果还不足以详细研究和评价一个给定场地系

统中的所有预测课题。下面举例来讨论人们试图了解的其中的一些问题。

#### 4.1 例1

例1和例2分别是Cacas等人(1990)与Tsang等人(1993, 1995)的研究成果。前者利用三维裂隙网络模型模拟法国Fanay Augeres现场裂隙岩石中的水流与运输。研究的目的是确定采用何种试验方法和利用何种模型来预测介质中水流与运输特性。收集到4种数据:(1)Fanay Augeres裂隙网络的几何信息;(2)场地单井注入试验得到的180个点的水力特性;(3)由100 m<sup>2</sup>范围内流速和压力水头分布所得出的整体水力特性;(4)钻孔止隔塞间裂隙中的弥散试验,流动距离40 m。

在不同部位,注入试验所测量的流速以其大小8次方数量级变化,其概率分布近似地用平均与标准的对数分布表示。然后,代替于导水系数空间分布的确定性分析,作者利用遍历假定并利用裂隙网络模型的多重实现计算流速来拟合流速的概率分布(图1),由此确定网络的裂隙导水系数的平均与标准偏差。象所涉及的过程一样,流速是直接的势流。而用一个概念模型来预测系统的特性,需要大量位于不同位置的同类(注入试验)测量值(180个)来确定该模型的参数。

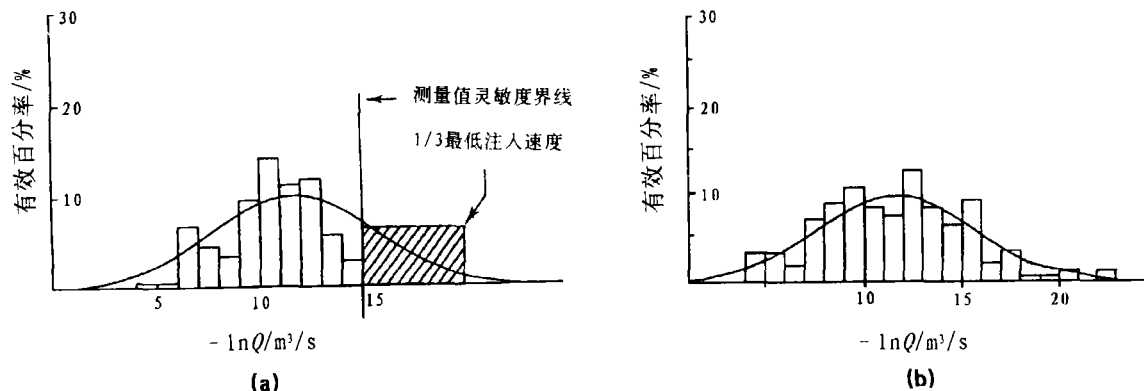


图1 测量流速(a)与模拟流速(b)分布直方图(Cacas等, 1990)

通过钻孔中止隔塞间对现场的一个裂隙带进行了多次示踪剂弥散试验,成功地获得了5条穿透曲线。曲线由两个指标来描述:一是峰值到达时间;二是穿透时间长度。后者定义为示踪剂首次到达时间与具有5%峰值浓度拖尾出现时间的间隔。同时还研究了在确定条件下5条不同穿透曲线的空间变化,作者利用遍历假定研究多次实现的示踪试验,该模型给出了两项指标的概率分布,即峰值到达时间与穿透时间长度;再与观测值相比较(图2与图3),校正模型参数并进行灵敏度计算。在特定条件下,作者发现在每条裂隙带中的弥散度变得不重要了,甚至在弥散度从0.0 m增至0.8 m时对示踪剂穿透曲线的影响可忽略。这说明穿透曲线主要受具有平均导水系数及其标准差变化的裂隙网络控制。

该研究具有如下两个特征:首先,模型预测所需的现场测量是多次测量,因而概率分布可制成图并用于校正模型;其次,模型是统计的又用统计数据校正,预测仍是一种概率。因此预测结果象图2和图3所示,给出预计峰值到达时间和穿透曲线长度的分布。换言之,预测结果将具有一定的平均与标准差,在大小的指数量级上变化。企图获取象大型示踪试验位

置那样的其它数值是困难的。

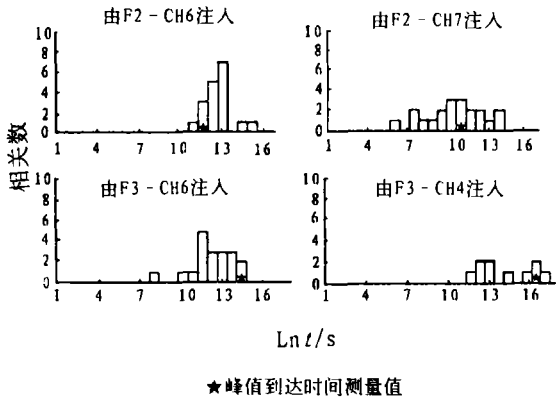


图2 四次示踪剂注入试验(校正后)模拟的峰值到达时间直方图(Cacas等, 1990)

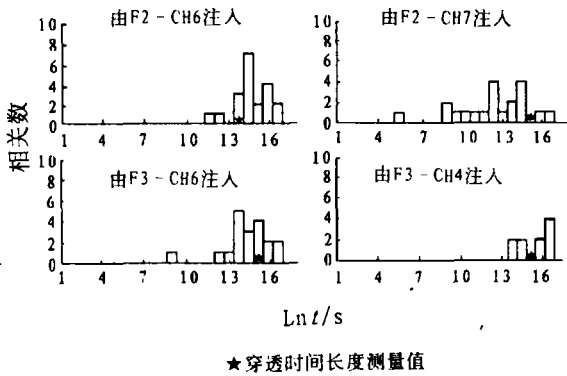
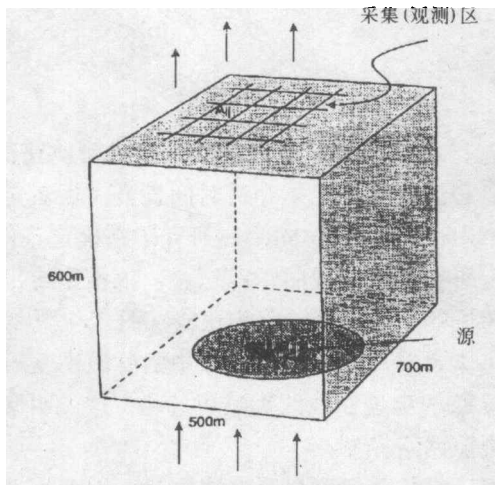


图3 四次示踪剂注入试验的穿透时间长度直方图(Cacas等, 1990)

### 4.2 例2

例2是Tsang等人(1993, 1995)的工作,其中利用统计裂隙连续模型模拟Aspo岩石实验室的数据。该模型将基岩处理为非均匀导水介质,在假设其与强导水系数分布具有强相关性的前题下随机生成,裂隙面的相交线通过重叠而生成。该模型由Aspo钻孔中止隔离间的水压力测量值约束。

图4表示500m×600m×700m已知条件约束的非均质系统中岩块的情况,在其中的裂隙中计算了溶质自底部到上部的运输过程。由于是非均匀介质,水流具有很强的管道流特征(Moreno等,1994),示踪剂穿透曲线特征将强烈地依赖于裂隙空间分布。在500×700m<sup>2</sup>的xy平面上剖分成5×7个100×100m<sup>2</sup>的示踪剂采集面。图5表示在各个采集面上得到的35



在小面积 $A_{ij}$ 上溶质穿透曲线具有很强的空间变化特征(流动管道化)

图4 在四周封闭边界的正交岩块中自底部向顶流动示意图(Tsang等, 1993)

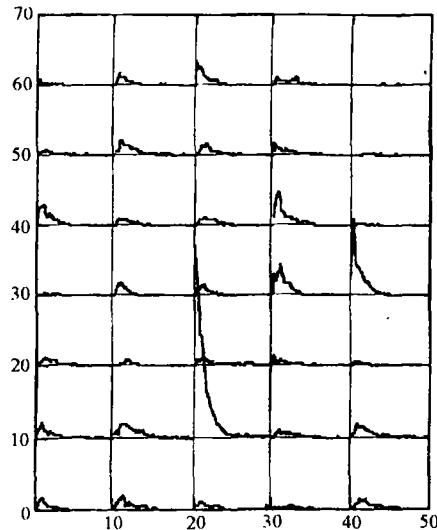


图5 在xy平面上连续的100×100m<sup>2</sup>采集面所测到的35条穿透曲线(Tsang等, 1993)

条示踪剂穿透曲线，坐标尺度均相同，横坐标表示示踪剂到达时间，纵坐标表示采集到的示踪剂比率。值得注意的是，许多穿透曲线具有多峰结构并且不同区间变化很大。单从示踪剂穿透曲线的急剧空间变化看，很难预测每个“小”采集面上示踪剂穿透曲线。另一种方案是检验通过整个采集面  $500 \times 700 \text{ m}^2$  上的浓度穿透曲线。图 6 给出了两种相关结构的结果，右边两条曲线是随机过程的两次实现，该随机过程假设与 NNW 与 NNE 方向上大导水系数（即水流）具有远程相关结构。左边两条曲线所对应随机过程的两次实现是假设与所有导水系数具有近程相关结构。这四次实现均以 Aspo 现场测量的导水系数数值为基础，且四条相应的穿透曲线均绘在相同尺度的坐标上。图上显示出所有曲线在示踪剂到达时间与浓度上均具有相似的数量级。右边曲线显示出示踪剂较早到达并具有较长拖尾现象，这是因为其具有远程相关结构（裂隙带）从而具有较强的管道流特征。左边曲线则显示出对所有导水系数具均一近程相关结构的连续非均匀介质溶质输运特征。

通过一维对流—弥散方程数值模拟的穿透曲线与实测曲线拟合，得出示踪剂平均流速  $v$  和有效弥散系数  $D$ 。象 Cacas 等人 (1990) 的做法一样，将  $v$  与  $D$  绘成图 7 所示的概率分布，其数值可用平均值与标准差来表示。

为了探讨如何将现场测量结果组合在一起用于预测，采用了图 8 所示的理想测量模式。仍是在自底向顶流动的现场，测量

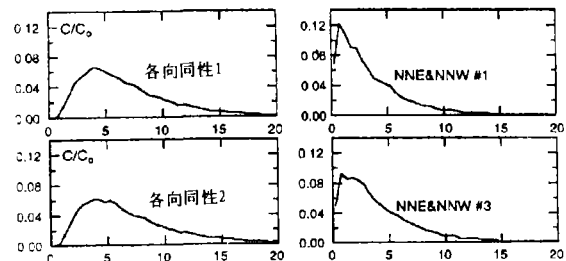


图 6 导水系数四次不同随机实现的示踪剂穿透曲线比较 (Tsang 等, 1993)

结果可能是系统中许多位于不同部位的自然流场试验。在  $100 \times 100 \text{ m}^2$  的平面中注入示踪剂，分别在运移 20 m, 40 m, 60 m, 80 m 和 100 m 的位置并且仍是  $100 \times 100 \text{ m}^2$  范围内测量穿透曲线。当介质是均质时，穿透曲线无疑可用平均到达时间与弥散系数来刻画；当介质非均匀时，穿透曲线多峰且很分散（图 5），这需要定义经验参数。在图 8 所示的天然流场试验中，注入示踪剂不可能全部分布在  $100 \times 100 \text{ m}^2$  的采集面上，采集到的示踪剂将随着输运距离的增加而减小。测量时，观测时间足够长直到穿透曲线尾部已经出现，然后外推尾部曲线，并通过与整体示踪剂质量比较（若时间无限长示踪剂可全部回收）进行预测。定义第一个参数为一半示踪剂所到达时间  $t_{0.5m}$ ，第二个参数为  $d_m = (t_{0.8m} - t_{0.2m}) / t_{0.5m}$ 。后者用于穿透曲线散布的经验值。就均匀介质而言， $d_m$  与 Peclet 数的倒数一一对应。选择  $t_{0.5m}$  用来表示平均滞留时间，用于减小拖尾对穿透曲线的影响。定义  $d_m$  时选择 0.8 m 和 0.2 m 替代 0.9 m 和 0.1 m，是为了避免穿透曲线两个极端的重要影响。非均匀介质中溶质输运具有空间变化特征。象参数值的范围或不确定性一样，为了获得“平均”参数，在 100 个随机选取的地点进行了小尺度自然流场的数值实现。也就是说，在 100 次数值实现中可获得各输运距离的  $t_{0.5m}$  与  $d_m$  值，进而按顺序排列并获得均值和百分数值。图 9 给出了  $t_{0.5m}$  与  $d_m$  的分布图，它们分别表示小尺度试验在 100 m 以内输运距离结果和在底部  $500 \times 700 \text{ m}^2$  整个面积上注入示踪剂并输运 600 m 时的大尺度试验结果。结果显示  $d_m$  在不同输运距离上均稳定，且低百分率的高导水性远程相关并未明显影响穿透曲线的分散情况。相比之下， $t_{0.5m}$  则随着输运距离增加扩展范围很大，因此，即使是各向同性系统，小尺度测量的  $t_{0.5m}$  值线性内插也低于大尺度相应值。

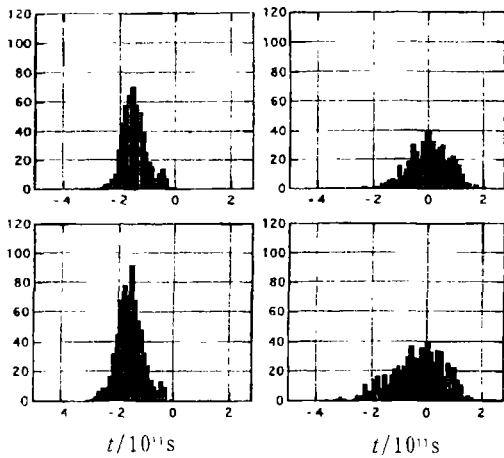


图7 拟合参数分布图:左边是流速  $v$  半对数图,右边是弥散系数  $D$  半对数图;NNE 与 NNW 远程结构,倾角  $90^\circ$ ;上图是单峰拟合结果,下图是多峰拟合结果(Tsang 等,1995)

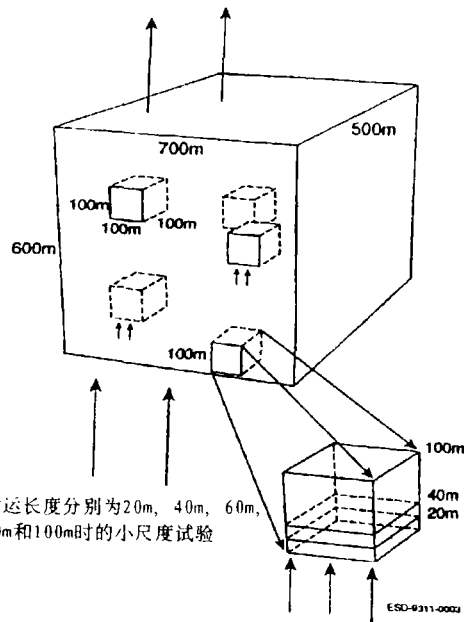


图8  $500 \times 700 \times 600 \text{ m}^3$  正交岩块中小尺度自然流场试验示意图

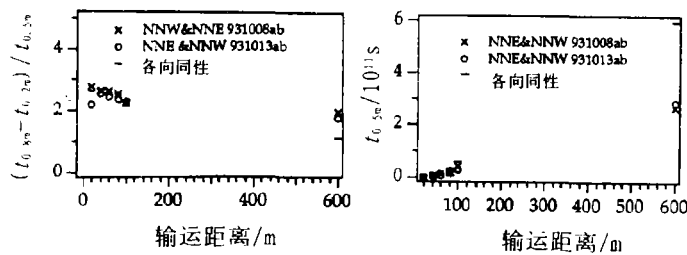


图9 小尺度不同运输距离测量值和整体尺度 600 m 运输距离的  $d_m$  与  $t_{0.35}$  分布 (Tsang 等, 1993)

该研究工作得出如下结果:(1)若测量范围小,在不同部位所计算出的示踪剂穿透曲线变化很大。而对于一个大的测量范围,当其特征长度大于非均质系统的相关空间尺度时,测量结果很稳定。这表明预测量的选择与确定,严格地与预测值和预测量的不确定范围有关。若运输预测是在大范围上的叠加,其置信水平会很高。(2)综合预测值对于概念模型的变化具有很小的灵敏度,故图6所示两个完全不同的概念模型(均受同一单井数据约束)给出了相似的叠加穿透曲线,即相似的时间范围和相对浓度峰值在10%左右变化。(3)Tsang等人(1995)也指出,他们的预测根据两个特征参数  $v$  和  $D$  概率分布(图7),因此预测结果的均值与标准差可以提供给决策者。(4)对于非确定性估计的预测需进行多次测量(图8)从而给出覆盖所有选择概念模型范围的预测。

### 5 结论

从过程到系统是开展地层介质中水流与运输预测的关键环节。事实上,地层系统是非均

质的，它不可能用难于取得的测量值进行确切地描述。本文将该困难归纳为概念模型、现场测量思路和预测评价。通过两个现场数据举例说明了与预测有关的可能尝试与新问题（如叠加预测值选择）。我们已在该研究领域进行了一些工作，并将在今后几年开展更多的工作。

**致谢** 非常感谢合作者 Y. Tsang, I. Neretnieks, L. Moreno 和 F. V. Hale 先生。该研究得到瑞典核能检查机构和美国能源部工程与地球科学局能源研究办公室、基础能源科学办公室的联合资助。

### 参 考 文 献

- [1] Cacas M C, Ledoux E, de Marsily G et al. Modeling Fracture Flow with a Stochastic Discrete Fracture Network; Calibration and Validation, 1, The Flow Model (Paper 89WR00041).
- [2] Cacas M C, Ledoux E, de Marsily G et al. Modeling Fracture Flow with a Stochastic Discrete Fracture Network; Calibration and Validation, 2, The Transport Model (Paper 89WR03133).
- [3] Moreno L, Tsang C F. Flow Channeling in Strongly Heterogeneous Porous Media: A Numerical Study. *Water Resources Research*, 1994, **30** (5): 1421--1430.
- [4] Tsang Y W, Tsang C F, Hale F V et al. Tracer Transport in a Stochastic Continuum Model of Fractures Media. Submitted to *Water Resources Research*, 1995.
- [5] Tsang Y W, Tsang C F. Overview of Medium Heterogeneity and Transport Process. Invited overview paper, Proceedings of International Workshop on Research and Development of Geological Disposal, Tokai, Japan, November 15--18, 1993. Power Reactor and Nuclear Fuel Development Corporation, Japan.

(李国敏 刘丽普译)

## FROM PROCESSES TO SYSTEMS; A DISCUSSION ON PREDICTIVE MODELING OF FLOW AND TRANSPORT IN GEOLOGIC SYSTEMS

Chin-Fu Tsang

(*Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, USA*)

**Abstract** Much research has been done on many hydrological processes related to flow and transport of solutes in geologic formations. Examples of such processes include dispersion and its scale dependence, matrix diffusion, flow channeling, and density driven flows. However, with the recent interest in flow and transport of contaminants or radionuclides in the subsurface as related to environmental remediation and nuclear waste disposal problems, the need is not only for an advanced understanding of these individual processes, but also for the capability of predicting such transport in the geological medium at a given site as a system. This paper will explore and discuss the issues related to the prediction of hydrologic transport, with the help of two field examples.

**Key words** geologic medium, groundwater flow and transport, simulation