

DOI:10.16030/j.cnki.issn.1000-3665.201901032

地下水典型非水相液体污染运移模拟的尺度提升研究

陈梦佳¹, 吴剑锋¹, 孙晓敏², 林 锦², 吴吉春¹

(1. 南京大学地球科学与工程学院水科学系/表生地球化学教育部重点实验室, 江苏 南京 210023;

2. 南京水利科学研究院, 江苏 南京 210029)

摘要: 在地下水数值模拟中, 模型参数的网格尺度一般大于参数的测量尺度, 为此涉及到参数的尺度提升。合理的尺度提升方法既能有效提高计算效率, 又能保证模拟精度。在概略介绍拉普拉斯-外壳法的基础上, 将其引入到地下水典型非水相液体 (non-aqueous phase liquids, NAPLs) 污染运移数值模拟的非均质渗透系数场尺度提升, 并与尺度提升前的小尺度模型及基于算术平均的尺度提升模拟结果进行对比。研究表明: 采用 UTCHEM 建立的典型 NAPLs 污染物运移模型, 无论是单一污染源还是双重污染源, 基于拉普拉斯-外壳法提升尺度后的大尺度模型都能较好地刻画污染羽的空间矩 (包括零阶矩、一阶矩和二阶矩) 随时间的变化, 其零阶矩的模拟相对误差小于 0.25%, 在水流方向上利用拉普拉斯-外壳法建立的模型对质心位置与污染羽范围的估计均优于算术平均尺度提升法所建模型, 且随着含水介质非均质性的增大, 拉普拉斯-外壳法的优越性越为明显; 而且大尺度模型还能大幅减少计算时间, 耗时约为小尺度模型的 3%, 值得推广应用。

关键词: 数值模拟; 污染运移; 尺度提升; 算术平均; 拉普拉斯-外壳

中图分类号: P641.69; X523

文献标识码: A

文章编号: 1000-3665(2020)01-0011-08

Upscaling of PCE transport modeling based on UTCHEM in heterogeneous porous media

CHEN Mengjia¹, WU Jianfeng¹, SUN Xiaomin², LIN Jin², WU Jichun¹

(1. Department of Hydrosiences, School of Earth Sciences and Engineering/Key Laboratory of Surficial Geochemistry, Ministry of Education, Nanjing University, Nanjing, Jiangsu 210023, China;

2. Nanjing Hydraulic Research Institute, Nanjing, Jiangsu 210029, China)

Abstract: Upscaling is often employed in numerical simulation of groundwater flow because the parameters are measured in the field on a support scale, which is much smaller than the discretization scale of the numerical model. A reasonable upscaling method can both improve the calculation efficiency and ensure the simulation accuracy. The method is applied to the upscaling of heterogeneous hydraulic conductivity fields in the numerical contaminant transport model of perchloroethylene (PCE), a typical non-aqueous phase liquid (NAPL) in groundwater, on the basis of the introduction of Laplacian with skin. The simulation results are also compared with those from the fine scale model and the coarse scale model upscaled by arithmetic average. The case study shows that the PCE contaminant transport model established by UTCHEM, which is upscaled by Laplacian with skin, can better describe the spatial moments (including the zero moment, the first moment and the second moment) of the plume over time, whether for the single source situation or dual sources situation. The absolute value of the relative error of the zero moment is less than 0.25%. Moreover, the

收稿日期: 2019-01-10; 修订日期: 2019-03-18

基金项目: 国家重点研发计划“水资源高效开发利用”重点专项项目(2016YFC0402800); 国家自然科学基金资助项目(41772254)

第一作者: 陈梦佳(1995-), 女, 硕士研究生, 主要从事地下水数值模拟研究。E-mail: mg1729070@smail.nju.edu.cn

通讯作者: 吴剑锋(1971-), 男, 教授, 主要从事地下水模拟优化管理方面的研究。E-mail: jfwu@nju.edu.cn

coarse scale model only takes about 3% of the calculation time of the fine scale one, indicating that the methodology of Laplacian with skin is worth promoting in practice.

Keywords: numerical simulation; contaminant transport; upscaling; arithmetic averaging; Laplacian with skin

非水相液体(non-aqueous phase liquids, NAPLs)在工业生产中应用广泛,主要包括煤焦油、氯化溶剂等,是目前地下水污染的主要污染源之一。由于 NAPLs 在水中的溶解度相对较低,一旦发生泄漏,就会形成一个独立自由相^[1]。在饱和带中, NAPLs 常以不连续的形式分布在污染源区,缓慢地溶解于地下水并随之流动扩散,逐渐形成大面积的污染羽^[2-4]。

NAPLs 运移模型可为制定污染修复方案提供关键技术支撑。目前,UTCHEM 是一款广泛用于地下水 NAPLs 运移的多相流数值模拟软件。在复杂的地下水污染运移数值模拟过程中,场地面积、网格大小、运移持续时间等都对计算时间和模拟精度有显著影响^[5]。一般说来,为了尽可能节省计算成本,在地下水数值模拟中尤其涉及到蒙特卡洛随机模拟时,模型的参数网格尺度一般大于实际测量的参数尺度^[6-8]。为此,需要在保证模拟精度的情况下,将小尺度的参数转换为大尺度的等效参数,亦即需要尺度提升。

随着社会的发展,提出的问题变得越来越复杂,范围更大、时间段更长、水文地质条件更为复杂。对于这些问题的计算,传统的地下水数值模拟需要巨大的计算成本来保证解的精度。研究表明,对参数进行尺度提升能够非常有效地减少计算时间^[9-11]。由于渗透系数的确定在地下污染物的运移模拟中起着至关重要的作用,所以尺度提升的重点是将小尺度的渗透系数进行转换,以得到数值模型尺度上的等效参数,使得大尺度模型保持小尺度上的污染羽特征^[12-13]。常用的尺度提升法有简单平均法(simple averaging)、流管法(stream-tube)、简单拉普拉斯法(simple Laplacian)等^[14-16]。拉普拉斯-外壳法(Laplacian with skin)是对简单拉普拉斯法的改进,是一种基于求解流动方程的渗透系数尺度提升方法,而非依靠经验,因此能够运用于各类场地。本文利用拉普拉斯-外壳法对渗透系数场进行尺度提升并建立大尺度地下水典型 NAPLs 数值模型,与尺度提升前的小尺度模型及基于算术平均的尺度提升模拟结果进行对比,评价拉普拉斯-外壳法的提升效果。

1 研究方法

与传统的基于算术平均的尺度提升方法相比,简

单拉普拉斯尺度提升法基于求解流动方程,因此在理论与实际领域都有广泛的应用^[17-20]。但是,简单拉普拉斯尺度提升方法假设所得的等效渗透系数为对角张量,一旦当小尺度的渗透系数产生的总流量不平行于参考轴,则通过这种尺度提升方法得到的模拟结果无法准确描述小尺度模型中的运移行为^[21-22]。因此,针对这一缺陷,Gómez-Hernández^[23]假设等效渗透系数为全张量,提出了拉普拉斯-外壳法;李良平等^[24]将拉普拉斯-外壳法应用到综合实例中,论证了拉普拉斯-外壳法相较于其他尺度提升方法的优势。

渗透系数尺度提升的目的是将小尺度的渗透系数转换为大尺度的等效渗透系数,使其能运用于数值模型中,因此转换需要满足 2 个条件:

(1) 大尺度网格(block)中的水头应等于小尺度网格(cell)中水头的平均:

$$h_v(I, J) = \frac{1}{n_v(i, j) \in V} \sum h(i, j) \quad (1)$$

式中: V ——大尺度网格范围;

n_v ——大尺度网格内小尺度网格的数目;

$h_v(I, J)$ ——大尺度网格内水头/m;

$h(i, j)$ ——小尺度网格内水头/m。

(2) 大尺度网格中的流量应等于小尺度网格中流量的平均:

$$q_v(I, J) = \frac{1}{n_v(i, j) \in V} \sum q(i, j) \quad (2)$$

式中: $q_v(I, J)$ ——大尺度网格内流量/($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$);

$q(i, j)$ ——小尺度网格内流量/($\text{m}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)。

拉普拉斯-外壳法的一个重要特点是使用外壳区域估计实际的大尺度网格的边界条件,而不是拉普拉斯法中简单的人为定义边界条件,因此小尺度渗透系数场的区域大小要比实际含水层模型稍大,以便使模型边界附近的网格也含有外壳。大尺度模型中外壳选取、网格内水头与流量定义见图 1。

对于小尺度网格的多套边界条件,计算小尺度网格中的流动:

$$\begin{Bmatrix} q_x \\ q_y \end{Bmatrix} = - \begin{Bmatrix} K_{xx} & K_{xy} \\ K_{xy} & K_{yy} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \nabla h_x \\ \nabla h_y \end{Bmatrix} \quad (3)$$

将等效渗透系数定义为:

$$\frac{1}{V} \int_V \vec{q} dV = -\vec{K}_V \left(\frac{1}{V} \int_V \nabla h dV \right) \quad (4)$$

式中: $\vec{q}$ ——小尺度网格单宽流量/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$);

∇h ——小尺度网格压力水力梯度;

$\vec{K}_V$ ——等效渗透系数/($\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$)。

运用计算得到大尺度网格中的参数,建立超定系统方程:

$$\begin{pmatrix} \nabla h_{Vx1} & \nabla h_{Vy1} & 0 \\ 0 & \nabla h_{Vx1} & \nabla h_{Vy1} \\ \nabla h_{Vx2} & \nabla h_{Vy2} & 0 \\ 0 & \nabla h_{Vx2} & \nabla h_{Vy2} \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} K_{Vxx} \\ K_{Vxy} \\ K_{Vyy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_{Vx1} \\ q_{Vy1} \\ q_{Vx2} \\ q_{Vy2} \\ \dots \end{pmatrix} \quad (5)$$

式中: K_{xx}, K_{xy}, K_{yy} ——未知的等效渗透系数全张量的成分。

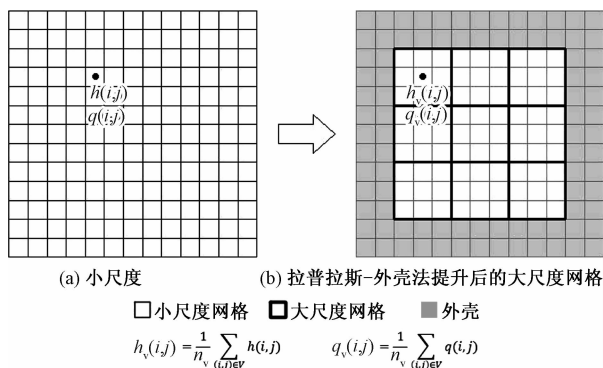


图 1 尺度提升示意图

Fig. 1 Schematic diagram showing the scale-up mechanism

利用最小二乘法^[25]解方程组,可获得尺度提升后各计算网格的等效渗透系数,由此可通过 UTCHEM 代码进一步计算地下水中 NAPLs 污染羽随时间变化的空间分布。

2 算例应用

2.1 算例概述

研究对象为二维非均质承压含水层,含水层面积为 $15\,085\text{ m}^2$,厚度为 5 m ,地下水流方向从左向右,采用序贯高斯模拟生成二维非均质渗透率场^[26-28],渗透率场均值为 10^{-10} m^2 。含水层的有效孔隙度为 0.35 ,水力梯度为 0.001 ,纵向弥散度为 1 m ,横向弥散度为 0.1 m 。模型中涉及的液相参数:水的密度为 1.0 g/cm^3 ,PCE 的密度为 1.63 g/cm^3 ,水的黏滞性为 $0.001\text{ Pa}\cdot\text{s}$,PCE 的黏滞性为 $0.000\,89\text{ Pa}\cdot\text{s}$,PCE 与水的界面张力为 0.045 N/m ,PCE 在水中的溶解度为 240.0 mg/L 。由于某种人为原因,造成 PCE 泄漏,并穿

过弱透水层进入含水层。污染源分别有以下两种情形:

Case 1:单一污染源(单源),PCE 泄漏点(图 2a),泄漏量为 $1.0\text{ m}^3/\text{d}$ 。运移过程在时间上分为两个阶段: $0 \sim 365\text{ d}$ 的 PCE 泄露过程, $366 \sim 730\text{ d}$ 的 PCE 自然运移过程。

Case 2:双重污染源(二源),PCE 泄漏点(图 2b),泄漏量均为 $0.7\text{ m}^3/\text{d}$ 。运移过程与 Case 1 相同。

2.2 模型建立及尺度提升方案

根据参数先建立小尺度数值模型,横向划分为 150 个网格,纵向划分为 85 个网格,垂向为一层,则小尺度离散为 $12\,750$ 个单元格,每个单元格大小为 $x = 1.0\text{ m}$, $y = 1.0\text{ m}$,这与微水试验测量的渗透系数尺度相似。平行于流动方向的边界为隔水边界,垂直于流动方向的边界为定水头边界。

大尺度离散采用非均匀离散,尺度提升方法运用算术平均法和拉普拉斯-外壳法。拉普拉斯-外壳法采用的是网格中心尺度提升, x 轴方向外壳的大小取小尺度的 20 网格, y 轴方向取小尺度的 10 网格。

对单一污染源污染点位置进行非均匀剖分(图 2a)。算术平均尺度提升法将原始的渗透系数网格 $15\,085$ (单元格大小 11) 提升到 $3\,421$,网格数从小尺度单元数 $12\,750$ 提升到大尺度单元数 714 。拉普拉斯-外壳法由于外壳不进行计算,因此将渗透系数网格提升到 $2\,617$,单元数为 442 。

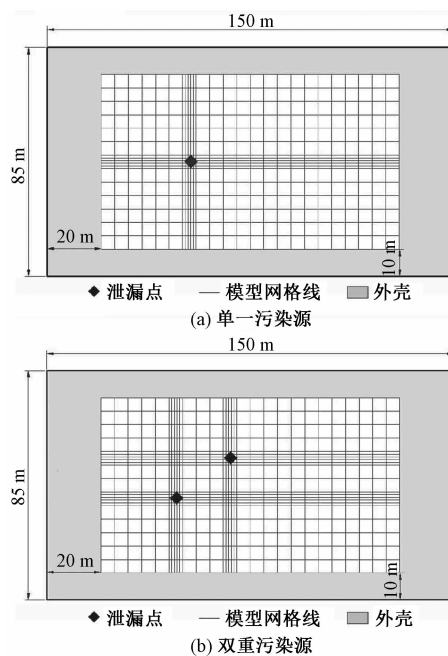


图 2 污染源模型的非均匀剖分

Fig. 2 Non-uniform block discretized model with polluted sources

对双重污染源两个污染点位置分别进行网格加密(图 2b),算术平均法将原始的渗透系数网格 15 085 (单元格大小 11) 尺度提升到 3 825,从小尺度单元数 12 750 提升到大尺度单元数 950,拉普拉斯-外壳法将网格提升到 3 021,单元数为 630。

3 结果与分析

3.1 单一污染源

图 3 为均质渗透系数场下,单源泄漏的 PCE 运行了 2 a(730 d)后,在不同尺度下 UTCHEM 计算出的 PCE 运移结果,表 1 为污染羽的空间矩计算结果。由表 1 可知,在均质情况下,大尺度模型和小尺度模型得到污染羽的二阶矩存在一定误差,但其零阶矩和一阶矩误差很小,表明大尺度模型基本能再现小尺度模型精细刻画污染物的运移情况(图 3),以此可作为非均质情况的对照。

图 4 为单源情况下,不同渗透系数场中,PCE 运行了 2 a(730 d)后,UTCHEM 根据不同网格剖分情况计算出的 PCE 运移结果,表 2 为污染羽的空间矩分析结

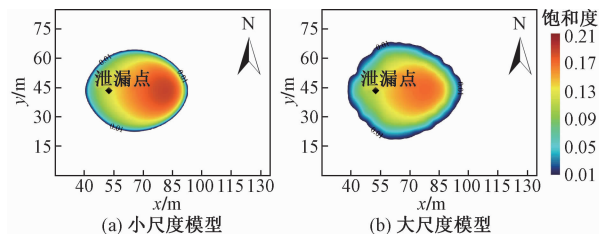


图 3 单一污染源均质渗透系数场中 PCE 污染

Fig. 3 PCE saturation distribution in the homogeneous permeability field under the single source situation, (a) fine scale, and (b) coarse scale

表 1 单一污染源均质渗透系数场中污染羽在空间上的分布特征

Table 1 Spatial characteristics of the contaminant plume in the homogeneous permeability field under the single source situation

空间矩	小尺度	算术平均/拉普拉斯(相对误差)
零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	5.935	5.924 (-0.185%)
一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(68.63, 43.50)	(67.90, 43.70)
二阶矩($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(137.42, 86.32, 0.16)	(145.99, 100.37, 0.67)

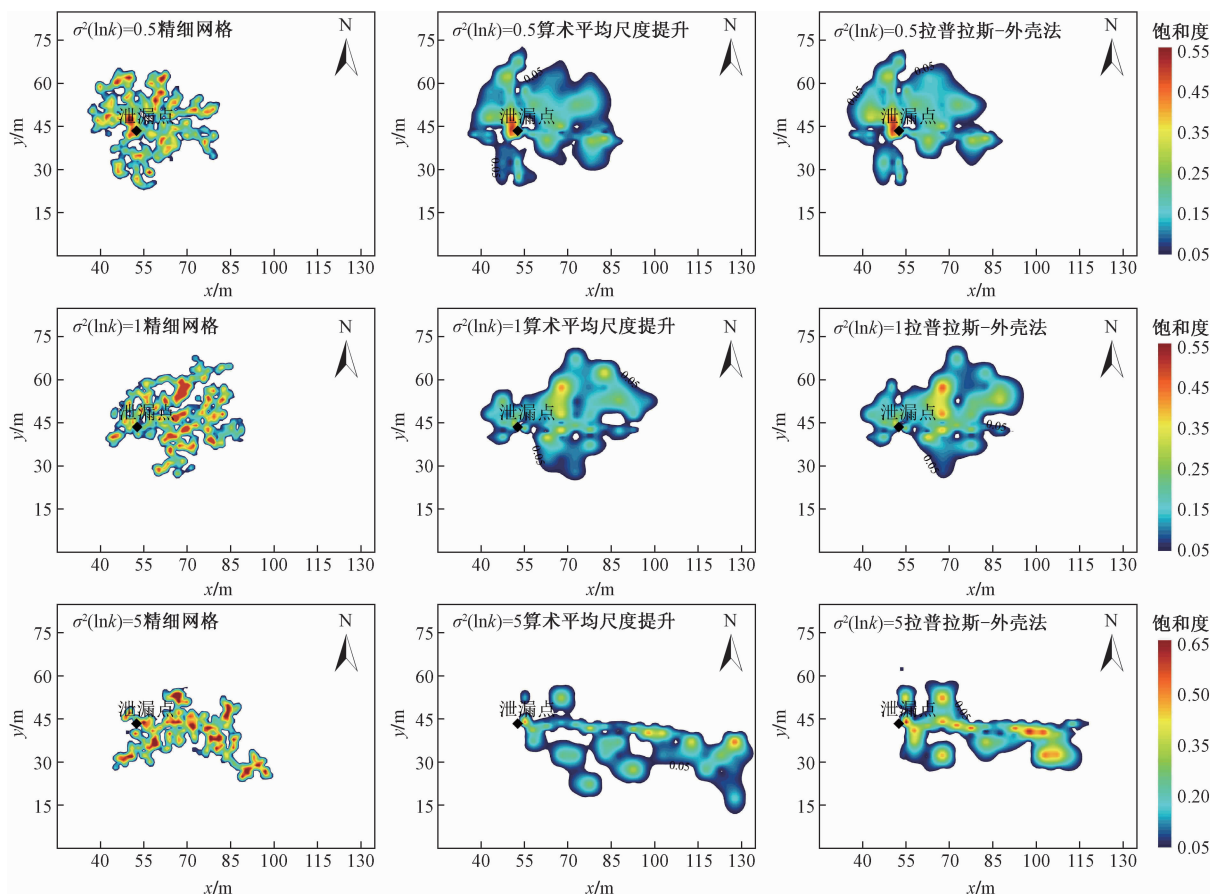


图 4 单一污染源非均质渗透系数场中 PCE 污染

Fig. 4 PCE saturation distribution in the heterogeneous permeability field under the single source situation

表 2 单一污染源非均质渗透系数场中污染羽在空间上的分布特征

Table 2 Spatial characteristics of the contaminant plume in the heterogeneous permeability field under the single source situation

$\sigma^2(\ln k)$	空间矩	小尺度	算术平均(相对误差)	拉普拉斯(相对误差)
0.5	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	5.935	5.916(-0.320%)	5.923(-0.202%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(56.77, 46.84)	(60.52, 47.94)	(57.69, 48.37)
	二阶距($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(108.17, 85.57, -5.68)	(166.55, 99.93, -7.77)	(148.73, 94.36, -8.15)
1.0	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	5.936	5.915(-0.354%)	5.923(-0.219%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(66.77, 47.29)	(71.06, 49.27)	(69.33, 49.51)
	二阶距($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(112.43, 74.83, 11.09)	(169.67, 82.91, 24.30)	(157.25, 69.83, 21.06)
5.0	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	5.939	5.852(-1.465%)	5.925(-0.236%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(71.33, 39.73)	(94.08, 34.81)	(81.09, 40.21)
	二阶距($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(186.33, 52.45, 24.60)	(544.97, 63.97, -73.16)	(350.97, 48.66, -55.69)

果。大尺度模型对于含水层中污染物质量(零阶矩)的估算准确,相对误差绝对值均小于 2%,但随着渗透系数对数方差的增大,误差增大。拉普拉斯-外壳法较算术平均法更为准确,且精确度受渗透系数对数方差的影响较小。对于质心位置(一阶矩)和污染羽在空间上的展布范围(二阶矩),大尺度模型也能较好地刻画小尺度模型中的情形。拉普拉斯-外壳法与算术平均法的结果对比,在垂直水流方向上,两方法得到的效果接近;沿水流方向,拉普拉斯-外壳法能更好地刻画 PCE 的运移情况,各渗透系数场下,不仅质心位置更接近小尺度情况,而且污染物的最远运移距离也更接近。由于进行含水层污染物治理时,多选择在污染羽的上游和下游设井,因此,经过拉普拉斯-外壳法尺度提升后得到的大尺度模型能更好地为含水层修复提供参考。

3.2 双重污染源

图 5 为均质渗透系数场下,双重污染源泄漏的 PCE 运行了 2 a(730 d)后,在不同尺度下由 UTCHEM 模拟的 PCE 运移结果,表 3 为该污染羽的空间矩计算结果。由表 3 可知,同单一污染源情况一样,均质情况下,大尺度模型和小尺度模型得到的污染羽的二阶矩存在一定误差,但其零阶矩和一阶矩误差很小,表明二

源情况下,大尺度模型也能基本再现小尺度模型精细刻画污染物的运移情况(图 5),以此可作为非均质情况的对照。

表 3 双重污染源均质渗透系数场中污染羽在空间上的分布特征

Table 3 Spatial characteristics of the contaminant plume in the homogeneous permeability field under the dual sources situation

空间矩	小尺度	算术平均/拉普拉斯(相对误差)
零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	8.309	8.297(-0.144%)
一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(70.89, 42.99)	(70.07, 43.00)
二阶距($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(220.59, 131.88, 67.07)	(234.29, 140.58, 68.96)

图 6 为双重污染源不同渗透系数场下,PCE 运行了 2 a(730 d)后,UTCHEM 根据不同的网格剖分情况计算出的 PCE 的运移结果,表 4 为该污染羽的空间矩分析结果。与单源情况相比,由于非均匀离散中,双重污染源细化的网格更多,因此在污染物质量估计方面,大尺度模型的准确度都较单源情况有所提升。双重污染源得到的分析结果与单源情况类似,进一步印证了拉普拉斯-外壳法的优越性。因此,在不同污染情况下,拉普拉斯-外壳法提升后的渗透系数场都能更好地等效小尺度渗透系数场情况。

3.3 计算效率

由于算术平均法和拉普拉斯-外壳法进行尺度提升的运算时间均极短,因此将 UTCHEM 模型的运行时间作为计算成本进行对比。本算例采用配置为 Intel(R) Core(TM) i5 处理器、3.2 GHz、3.4 G 内存的计算机,具体运行时间见表 5。

从表 5 中可以看出,尺度提升带来的计算时间减少是很可观的,并且小尺度模型计算时间越长,尺度提升后节约的计算时间越多。利用算术平均进行尺度提升后的模型计算时间为原模型的 2.47%~4.28%,利

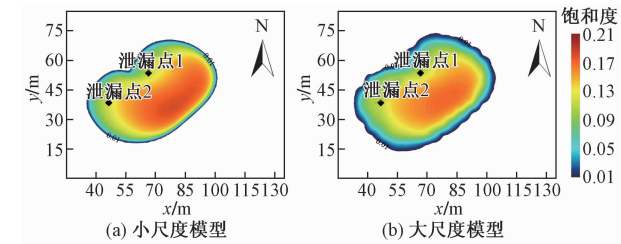


图 5 双重污染源均质渗透系数场中 PCE 污染

Fig.5 PCE saturation distribution in the homogeneous permeability field under the dual sources situation, fine scale and coarse scale

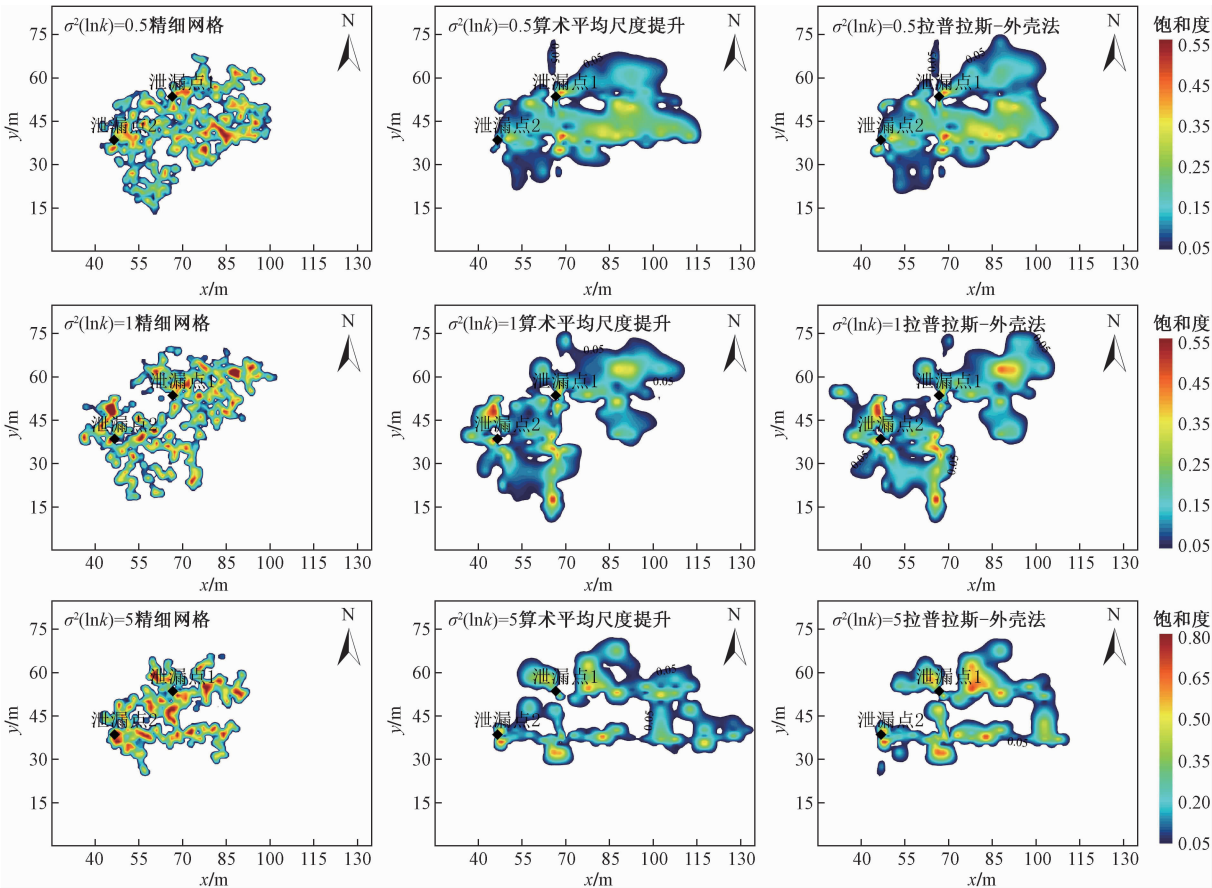


图 6 双重污染源非均质渗透系数场中 PCE 污染

Fig. 6 PCE saturation distribution in the heterogeneous permeability field under the dual sources situation

表 4 双重污染源非均质渗透系数场中污染羽在空间上的分布特征

Table 4 Spatial characteristics of the contaminant plume in the heterogeneous permeability field under the dual sources situation

$\sigma^2(\ln k)$	空间矩	小尺度	算术平均(相对误差)	拉普拉斯(相对误差)
0.5	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	8.309	8.294(−0.181%)	8.299(−0.120%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(71.28, 43.12)	(79.85, 46.14)	(76.41, 46.64)
	二阶矩($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(213.02, 114.76, 62.32)	(288.29, 94.58, 48.16)	(233.30, 116.02, 65.77)
1.0	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	8.306	8.280(−0.313%)	8.292(−0.169%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(66.50, 46.44)	(69.94, 46.69)	(68.52, 46.90)
	二阶矩($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(237.32, 157.96, 94.67)	(343.56, 208.25, 138.45)	(337.92, 213.88, 153.39)
5.0	零阶矩(质量)/ $\times 10^5$ kg	8.317	8.240(−0.926%)	8.298(−0.228%)
	一阶矩($\bar{u}_x, \bar{u}_y$)/m	(66.65, 46.62)	(85.23, 48.85)	(76.41, 48.05)
	二阶矩($\tilde{\sigma}_{xx}, \tilde{\sigma}_{yy}, \tilde{\sigma}_{xy}$)/ m^2	(158.32, 78.09, 34.17)	(447.27, 104.80, −17.45)	(251.24, 115.54, 25.90)

用拉普拉斯-外壳法尺度提升后的模型计算时间为原模型的 1.85% ~ 3.45%。将二者的运行时间进行比较,所有情形下均是拉普拉斯-外壳法尺度提升后的模型计算效率更高,这是由于拉普拉斯-外壳法中外壳区域不用进行计算,因此拉普拉斯-外壳法得到的模型需要计算的网格数更少,从而具备更高的计算效率。计算效率极大的提高表明,渗透系数场的尺度提升对运移模型计算成本的降低是非常有效的。

4 结论

(1)零阶矩的计算结果表明,算术平均法和拉普拉斯-外壳法对渗透系数场进行尺度提升后得到的大尺度运移模型都能准确地估计含水层中污染物质量。相较而言,拉普拉斯-外壳法得到的结果更准确,且含水层非均质性越强,拉普拉斯-外壳法的优越性越明显。

表 5 不同尺度提升方法的模型运行时间对比
Table 5 Comparison of model running time with different upscaling methods

污染源	$\sigma^2(\ln k)$	运行时间/s		
		精细 网格	算术平均尺度 提升(时间比) ^a	拉普拉斯-外壳 法(时间比) ^a
单源	0.5	680	23(3.38%)	20(2.94%)
	1.0	857	26(3.03%)	20(2.33%)
	5.0	1 296	32(2.47%)	24(1.85%)
二源	0.5	724	31(4.28%)	25(3.45%)
	1.0	880	33(3.75%)	25(2.84%)
	5.0	1 584	67(4.23%)	38(2.40%)

注:^a时间比:尺度提升后模型计算时间与尺度提升前模型计算时间的百分比。

(2)一阶矩和二阶矩的计算结果表明,在水流方向上,拉普拉斯-外壳法对质心位置的确定和污染羽的运移范围的计算更准确;在垂直于水流方向上,两种计算方法计算效果类似。因此,经过拉普拉斯-外壳法尺度提升后得到的运移模型刻画小尺度模型更准确,可更好地为后期的含水层污染修复提供参考。

(3)计算时间的对比结果表明,算术平均法和拉普拉斯-外壳法对渗透系数场进行尺度提升都能有效节省计算成本。

参考文献(References):

[1] WU M, CHENG Z, WU J F, et al. Precise simulation of long-term DNAPL migration in heterogeneous porous media based on light transmission micro-tomography [J]. Journal of Environmental Chemical Engineering, 2017, 5 (1): 725 - 734.

[2] LIANG H L, FALTA R W. Modeling field-scale cosolvent flooding for DNAPL source zone remediation [J]. Journal of Contaminant Hydrology, 2008, 96 (1): 1 - 16.

[3] 郑菲, 高燕维, 徐红霞, 等. 非均质性对 DNAPL 污染源区结构特征影响的实验研究 [J]. 水文地质工程地质, 2016, 43 (5): 140 - 148. [ZHENG F, GAO Y W, XU H X, et al. An experimental study of the influence of heterogeneity on the DNAPL source-zone architecture [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2016, 43 (5): 140 - 148. (in Chinese)]

[4] 陶佳辉, 施小清, 康学远, 等. 轻非水相液体污染源区结构的影响因素数值分析 [J]. 水文地质工程地质, 2018, 45 (6): 132 - 140. [TAO J H, SHI X Q, KANG X Y, et al. Numerical analyses of factors affecting the LNAPL source-zone architecture [J].

Hydrogeology & Engineering Geology, 2018, 45 (6): 132 - 140. (in Chinese)]

[5] MOSLEHI M, DE BARROS F P J, EBRAHIMI F, et al. Upscaling of solute transport in disordered porous media by wavelet transformations [J]. Advances in Water Resources, 2016, 96: 180 - 189.

[6] 谢一凡. 改进多尺度有限单元法求解二维地水流问题 [D]. 南京: 南京大学, 2015. [XIE Y F. Modified multiscale finite element method for 2-D groundwater flow problems [D]. Nanjing: Nanjing University, 2015. (in Chinese)]

[7] LOCK P A, JING X D, ZIMMERMAN R W. Comparison of methods for upscaling permeability from the pore scale to the core scale [J]. Journal of Hydraulic Research, 2004, 42 (Sup1): 3 - 8.

[8] 张弛, 仵彦卿, 覃荣高. 渗透系数升尺度对非均质含水层溶质迁移影响研究 [J]. 水文地质工程地质, 2014, 41 (5): 19 - 25. [ZHANG C, WU Y Q, QIN R G. Research on effects of hydraulic conductivity upscaling on groundwater solute transport in heterogeneous aquifer [J]. Hydrogeology & Engineering Geology, 2014, 41 (5): 19 - 25. (in Chinese)]

[9] HOLDEN L, NIELSEN B F. Global Upscaling of permeability in heterogeneous reservoirs: The output least squares (OLS) method [J]. Transport in Porous Media, 2000, 40 (2): 115 - 143.

[10] SUN T, MEHMANI Y, BHAGMANE J, et al. Pore to continuum upscaling of permeability in heterogeneous porous media using mortars [J]. International Journal of Oil Gas and Coal Technology, 2012, 5: 249 - 266.

[11] AHMADOV R, AYDIN A, KARIMI-FARD M, et al. Permeability upscaling of fault zones in the Aztec Sandstone, Valley of Fire State Park, Nevada, with a focus on slip surfaces and slip bands [J]. Hydrogeology Journal, 2007, 15 (7): 1239 - 1250.

[12] GODOY V A, VALENTIN ZUQUETTE L, G6MEZ-HERNÁNDEZ J J. Stochastic analysis of three-dimensional hydraulic conductivity upscaling in a heterogeneous tropical soil [J]. Computers and Geotechnics, 2018, 100: 174 - 187.

[13] SAMOUELIAN A, VOGEL H J, IPPISCH O. Upscaling hydraulic conductivity based on the topology of the sub-scale structure [J]. Advances in Water Resources, 2007, 30 (5): 1179 - 1189.

[14] WEN X H, G6MEZ-HERNÁNDEZ J. Upscaling hydraulic conductivities in heterogeneous media: An

- overview [J]. *Journal of Hydrology*, 1996, 183 (1/2): ix-xxxii, DOI: 10.1016/S0022-1694 (96) 80030-8.
- [15] RENARD P, MARSILY G D, GRAY W G, et al. Calculating equivalent permeability: a review [J]. *Advances in Water Resources*, 2008, 20(56): 253 – 278.
- [16] SANCHEZ-VILA X, GUADAGNINI A, CARRERA J. Representative hydraulic conductivities in saturated groundwater flow [J]. *Reviews of Geophysics*, 2006, 44(3): RG3002.
- [17] SANCHEZ-VILA X, CARRERA J, GIRARDI J P. Scale effects in transmissivity [J]. *Journal of Hydrology*, 1996, 183(1/2): 1 – 22.
- [18] JOURDE H, FLODIN E A, AYDIN A, et al. Computing permeability of fault zones in eolian sandstone from outcrop measurements [J]. *AAPG Bulletin*, 2002, 86(7): 1187 – 1200.
- [19] FERNÁNDEZ-GARCIA D, GÓMEZ-HERNÁNDEZ J J. Impact of upscaling on solute transport: Traveltimes, scale dependence of dispersivity, and propagation of uncertainty [J]. *Water Resources Research*, 2007, 43 (2): W02423. DOI: 10.1029/2005wr004727.
- [20] DANIEL FERNANDEZGARCIA, G LLERARMEZA, J JAIME GOMEZHERNANDEZ. Upscaling transport with mass transfer models: Mean behavior and propagation of uncertainty [J]. *Water Resources Research*, 2009, 45(10): W10411.
- [21] 李良平. 非均质含水层中渗透系数尺度提升方法 [D]. 北京:中国地质大学(北京), 2012. [LI L P. Hydraulic Conductivity Upscaling Method in Heterogeneous Aquifers [D]. Beijing: China University of Geosciences (Beijing), 2012. (in Chinese)]
- [22] 陶佳辉,施小清,康学远,等. 轻非水相液体污染源区结构的影响因素数值分析[J]. *水文地质工程地质*, 2018, 45(6): 132 – 140. [TAO J H, SHI X Q, KANG X Y, et al. Numerical analyses of factors affecting the LNAPL source-zone architecture [J]. *Hydrogeology & Engineering Geology*, 2018, 45(6): 132 – 140. (in Chinese)]
- [23] GÓMEZ-HERNÁNDEZ J J. A stochastic approach to the simulation of block conductivity values conditioned upon data measured at a smaller scale [D]. California: Stanford University, 1991.
- [24] LI L P, ZHOU H Y, GÓMEZ-HERNÁNDEZ J J. Transport upscaling using multi-rate mass transfer in three-dimensional highly heterogeneous porous media [J]. *Advances in Water Resources*, 2011, 34(4): 478 – 489.
- [25] PRESS W H, FLANNERY B P, TEUKOLSKY S A, et al. *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing* [M]. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1992.
- [26] WEST M R, KUEPER B H. Numerical simulation of DNAPL source zone remediation with in situ chemical oxidation (ISCO) [J]. *Advances in Water Resources*, 2012, 44: 126 – 139.
- [27] SCHAEERLAEKENS J, CARMELIET J, FEYEN J. Multi-Objective Optimization of the setup of a surfactant-enhanced DNAPL remediation [J]. *Environmental Science & Technology*, 2005, 39(7): 2327 – 2333.
- [28] LIU L. Modeling for surfactant-enhanced groundwater remediation processes at DNAPLs-contaminated sites [J]. *Journal of Environmental Informatics*, 2005, 5 (2): 42 – 52.

编辑:张若琳