

基于 NSMC 方法的某核工程场地裂隙地下水数值模拟不确定分析

赵敬波¹⁾, 周志超¹⁾, 潘跃龙²⁾, 叶浩³⁾, 吴群²⁾, 郭永海¹⁾, 李杰彪¹⁾, 付馨雨¹⁾

1) 核工业北京地质研究院, 国家原子能机构高放废物地质处置创新中心, 北京, 100029;

2) 深圳中广核工程设计有限公司, 广东深圳, 518000;

3) 长江勘测规划设计研究有限责任公司, 武汉, 430010

内容提要:裂隙介质渗透结构表现为高度的非均质性与各项异性。为了科学有效地预测某核工程场地裂隙地下水的流动规律, 揭示裂隙岩体地下水的渗流特性, 笔者等采用 Pilot Point 调参方法与 null space Monte Carlo 方法 (NSMC), 开展了裂隙岩体渗透结构的不确定性分析研究, 构建了符合实际水文地质条件的多个渗流数值模型集合。结果表明: 该方法获得的各个实现地下水位模拟结果能够与实际观测数据较好吻合, 可反映工程场地裂隙地下水动力特征与流动趋势; 各个实现的参数化渗透结构在空间上存在一定的差异性, 但整体变化趋势是保持一致的, 渗透参数的不确定性表现为在实测数据分布区域相对较低, 钻孔空白区域相对较高; 该方法可以弥补单一、确定性模拟结果在表征裂隙介质渗透结构方面的局限性, 有效地降低模型参数的不确定性与随机性。此方法对进一步提升裂隙岩体渗流模拟精度与预测能力, 深化裂隙地下水迁移规律的认识具有重要的意义。

关键词:裂隙岩体; 渗透结构; NSMC 方法; null space Monte Carlo 方法; 不确定分析; Pilot Point 方法

场地岩体的渗透性对核设施的安全性能评价极为重要。场地岩体由于裂隙的存在, 其渗流特性表现极为显著的非均质、各向异性特征 (张人权等, 2011)。考虑到野外实测数据的有限性, 实际裂隙介质渗透结构的复杂性, 模型结构的高度概化, 现阶段广泛采用的确定性、唯一的模拟结果存在诸多的不确定性 (吴吉春和陆乐, 2011; 曾献奎等, 2012)。因此, 研究地下水模拟的不确定性, 提升地下水数值模拟精度, 科学合理预测裂隙地下水流动规律, 这对裂隙岩体地下工程最终安全性能评价具有重要的应用价值与现实意义。

地下水模拟的不确定性按照来源可分为参数的不确定性、模型结构的不确定性和观测数据的不确定性 3 类。其中, 以参数不确定性研究相对较为广泛 (曾献奎, 2012; 宋凯等, 2018)。目前关于地下水参数不确定性常见的分析方法主要包括通用似然不确定性估计 (GLUE)、马尔科夫链—蒙特卡洛方法 (MCMC)、经典贝叶斯方法、矩方程法等 (Beven and Binley, 1992; Woodbury et al., 2000; 夏强, 2011)。

这类方法原理简单、实用性广、可靠性强, 但计算工作量大, 对于复杂的高维参数问题与高度非线性数值问题 (例如: 地下热水运移、CO₂ 地质储存、污染物迁移与降解等) 适应能力较差 (Pappenberger and Beven, 2006; Yoon et al., 2013; 莫绍星, 2019)。与此同时, 一些学者提出了地质统计相关方法, 包括变异函数方法、转移概率方法等 (Deutsch and Journel, 1995; Carle and Fogg, 1996)。这类方法原理是通过实测数据数理统计规律, 获得成千上万次正演随机模型, 统计所有模拟结果的集合, 分析地下水模拟不确定性 (Rubin et al., 1990; 杨金忠, 2000)。目前该方法在含水层非均质性方面得到了广泛应用, 例如: 美国亚利桑那 Avra 第四系含水层、芬兰与加拿大放射性废物处置及其他相关水力水电工程的裂隙岩体等 (Clifton et al., 1982; Park et al., 2004; Blessent et al., 2011; Chen Yifeng et al., 2018)。对于裂隙介质而言, 这类方法可实现渗透结构的非均质性、各向异性数值表征, 一定程度上能够合理地模拟与预测裂隙地下水流动规律。然而该

注: 本文为核设施退役及放射性废物治理专项项目 (科工二司 [2019] 1496 号) 资助的成果。

收稿日期: 2022-05-09; 改回日期: 2022-09-30; 网络首发: 2022-10-20; 责任编辑: 刘志强。Doi: 10.16509/j.georeview.2022.10.081

作者简介: 赵敬波, 男, 1988 年生, 博士, 高级工程师, 主要从事水文地质与高放废物地质处置相关研究; Email: zhaojingbobriug@outlook.com。通讯作者: 周志超, 男, 1983 年生, 正高级工程师, 主要高放废物地质处置相关研究; Email: zhouzhichao2006@163.com。



方法对模型不确定性分析工作所需的计算量同样相对较大,且对实测数据的空间分布及数量要求相对较高。

为了模拟含水层非均质各向特征,提高模型不确定分析的数值计算效率,部分学者提出了 Pilot Point 调参方法与 null space Monte Carlo 方法 (NSMC) 相结合的方式对地下水模拟不确定分析研究 (Marsily et al., 1984; Christensen et al., 2008; Tonkin et al., 2009)。其原理主要包括两部分内容,首先是在变异函数的基础上,采用 Pilot Point 调参方法与空间插值方法进行模型参数识别与校准,生成符合实际水文地质条件的高度参数化渗透结构模型,用于描述含水介质的非均质各向异性特征,目前已成功应用到不同尺度的地下水流数值模拟研究中 (Carniato et al., 2015; Muhammad et al., 2018)。其次,在上述模拟结果的基础上,基于参数敏感性分析与模型反演的方式,生成一系列的随机实现,调整 Pilot Point 参数值,获得符合实际观测数据地下水模型集合,进行模型不确定性的综合分析判定 (Tonkin et al., 2009; Yoon et al., 2013; Herckenrath et al., 2011)。考虑到该方法在含水层非均质性刻画、参数识别、数值计算效率等方面具有良好的适用性,后续学者研发了集模型参数识别、敏感性分析及不确定分析等功能于一体的数值并程序,例如:PEST、ITOUGH、UCODE 等,其中以 PEST 程序应用最为广泛 (Poeter et al., 1999; Finsterle et al., 2012; Doherty, 2015)。同时基于高性能数值计算平台或者云计算技术,采用该程序可实现上千数量模型参数的数值反演研究,使得该方法在含水层非均质各向异性刻画、污染物扩散模拟、复杂地表与地下水模型耦合模拟等方面得到一定地推广应用 (Hayley et al., 2014; Alberti et al., 2018; Moeck et al., 2019; Moges et al., 2020)。然而此方法目前研究重点更多是侧重于沉积相含水层,未考虑模型参数渗透结构在垂向上变异性特征,且关于裂隙地下水模拟不确定分析的工程案例研究甚少。此外,还存在水力层析、自校正法、集合卡尔曼滤波法等其他数值方法,多数以理论探索为主,实际应用案例研究相对较少 (Wen Xianhuan et al., 1999; Yeh et al., 2000; 周海燕, 2012)。

笔者等以我国滨海地区某核设施花岗岩工程场地为研究对象,通过引入 NSMC 方法,开展裂隙地下水模拟不确定性分析研究,探讨此方法在裂隙介质渗流模拟方面的适用性;基于 PEST 并程序与

Pilot Point 调参方法,获取符合实际水文地质条件多个参数化渗透结构模型,综合评定研究区裂隙地下水流动特征,最终为本工程场地性能评价提供参考依据。同时为水利水电工程、放射性废物处置等其他工程提供技术支撑。

1 研究区概况

1.1 自然地理

研究区处于我国南部沿海地区,年平均气温约为 22.3℃,多年平均降水量约为 2348 mm,降雨呈季节性波动。研究区所在山体呈北东东展布,标高分布在 170.0~265.5 m,南侧为海域,北侧为沟谷,常年存在地表径流的溪水,径流量随季节性波动较为明显。工程场地为典型基岩海蚀地貌 (图 1)。

1.2 地质与水文地质条件

研究区主要岩性以花岗岩为主,沟谷低洼处沉积了第四系松散堆积物和海相沉积物。根据花岗岩矿物成分含量及颗粒大小不同,可划分为粗粒二长花岗岩、斑状花岗岩、中细粒花岗岩及花岗斑岩。第四系沉积物可分为冲洪积砂土与粉质粘土、海相砂土,如图 2 所示。根据目前钻孔揭露的岩性信息可知,基岩垂向上可分为全风化层、强风化层、中风化层及微风化层。全风化厚度一般小于 11.8 m,强风化层厚度一般分布在 1.2~29.8 m,中风化层厚度则为 1.3~59.3 m,目前尚未有钻孔揭穿微风化层。第四系松散沉积物分为人工堆积层与冲洪积层的粉质粘土和砂土、海相沉积的砂土,最大厚度约为 5.0~6.0 m。场地范围内无较大规模的断层穿过。

根据地下水赋存条件,研究区地下水分为第四系松散孔隙水与基岩风化裂隙水。工程场地地下水位受地形影响较为明显,其中地形位置较高处钻孔 CCZK01 揭露的地下水位为 212.0 m,而地形较低处

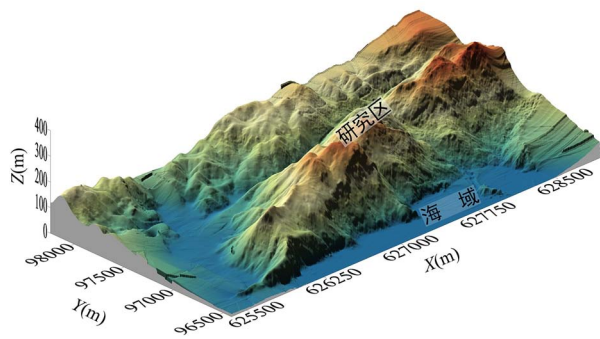


图 1 研究区地形图

Fig. 1 Topographic map of the study area

钻孔 KJZK01 揭露的水位则为 14.6 m,不同钻孔揭露的地下水位相差较大。地下水的补给来源为大气降水,主要的排泄区域为场地山体北侧沟谷与南侧海域,少数地下水以泉的形式排泄,且研究区无人工开采的情景,地下水系统整体处于天然稳定状态。总体而言,工程场地具有相对较为独立完整的地下水系统。

2 NSMC 方法原理

考虑到目标函数的多解性、参数间的补偿作用及随机性,地下水流模拟结果往往存在“异参同效”的现象,模型参数的不确定性分析成为地下水数值模拟研究的重要组成部分。基于此,本研究整体思路是在前期工作的基础上,采用程序 PEST,通过

Pilot Point 调参方法,获得单个确定的、合理的地下水参数化渗透结构模型。据此,根据渗透参数的数理统计规律,采用 NSMC 方法生成一系列随机模型,每个模型都采用 Pilot Point 方式进行识别与验证,选取符合实际水文地质条件多个参数化渗透结构模型集合,以此综合评估工程场地地下水动力场特征。

首选定义观测数据与参数的满足线性关系采用式(1)表示,目标函数 Φ 为计算水位与观测水位之间差值的平方和采用式(2)表示结果如下:

$$h = Xp + \varepsilon \tag{1}$$

$$\Phi = (Xp - h)^T Q_m (Xp - h) \tag{2}$$

式中 p 为模型参数长度为 n 的列向量; h 为观测数据长度为 m 的列向量; X 为雅克比矩阵 ($m \times n$),为水位对参数的导数;矩阵 Q_m 为权重系数的对角线

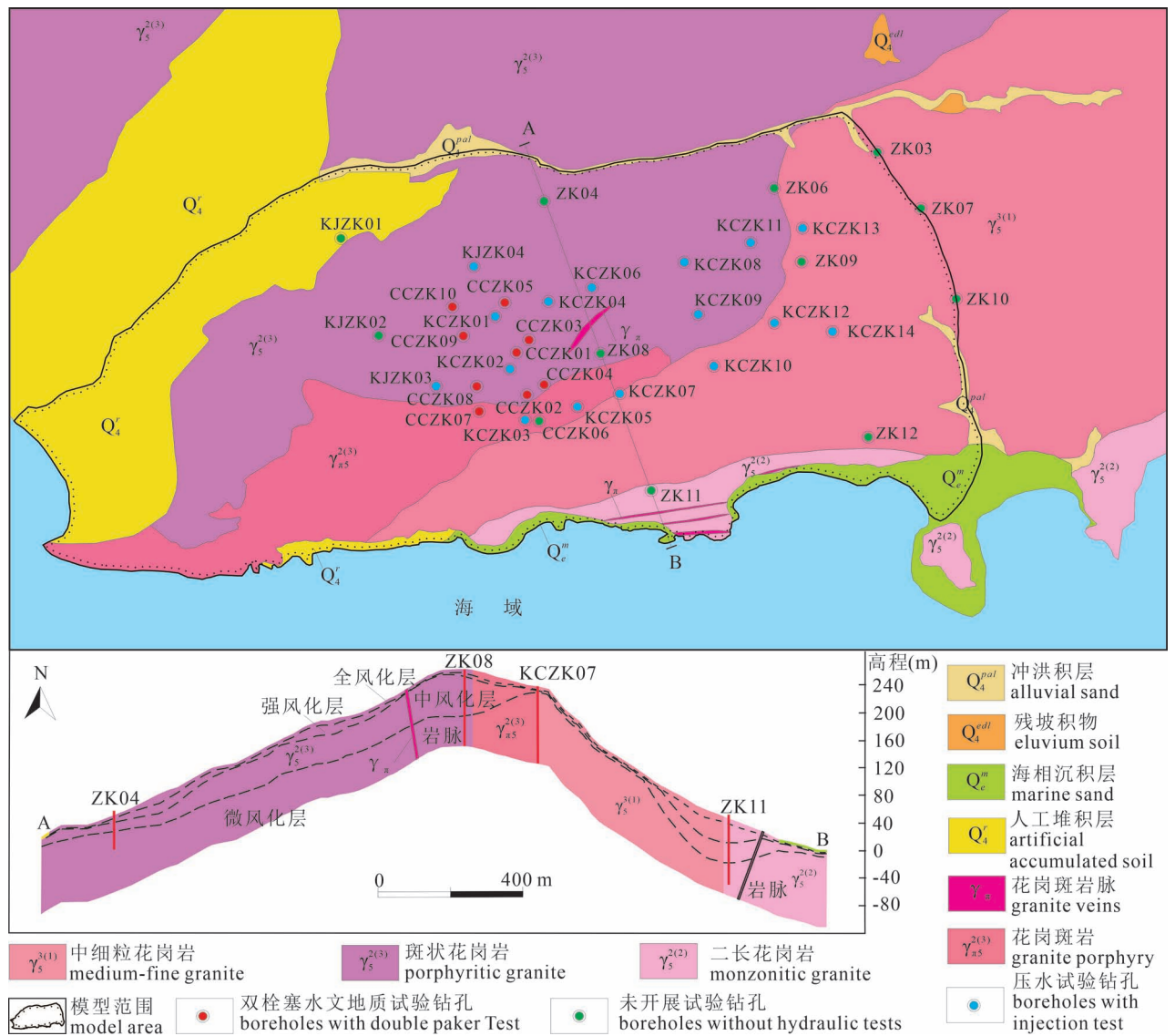


图 2 研究区地质简图与剖面图

Fig. 2 Simplified geological map and profile of the study area

矩阵; ε 为观测数据 h 的测量误差值。

$$p = (X^T Q_m X)^{-1} X^T Q_m h \quad (3)$$

NSMC 不确定分析方法要求式(3)采用截断奇异值分解(SVD-assist 方法)进行求解,以此获得唯一的、确定性结果。其求解思路是为了确保数值计算的稳定性和高效性,划分为对观测水位较为敏感的参数集合和不敏感参数集合两部分进行矩阵的降维求解(Tonkin et al., 2005),针对矩阵 $X^T Q_m X$ 进行奇异值分解可表示为:

$$X^T Q_m X = \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V_1 & V_2 \end{bmatrix}^T \quad (4)$$

式中 E_1 为对角矩阵,对角线的值为矩阵 $X^T Q_m X$ 的较大非零奇异值; E_2 同样也为对角矩阵,其包括较小的奇异值和零值,其 V_1 和 V_2 为与矩阵 E_1 和 E_2 维数相同的幺正矩阵。为了确保数值计算的稳定性和高效性,采用 SVD-assist 方法处理时,考虑到矩阵 E_2 对角线的奇异值接近为 0,这些值都近似设置为零,通过目标函数的最小化,联合式(3)和式(4)即可求解优化待估参数向量 p :

$$p = V_1 E_1^{-1} V_1^T X^T Q_m h = Gh \quad (5)$$

式(5)是用于约束后续生成一系列随机参数值的基础,其次若式(5)考虑观测水位的测量误差 ε ,联合式(1)可得:

$$p = V_1 V_1^T p_r + V_1 E_1^{-1} V_1^T X^T Q_m \varepsilon = R p_r + G \varepsilon \quad (6)$$

式中矩阵 G 为观测数据误差 ε 相关的系数矩阵; p_r 为模型参数真值向量; R 反映是参数真值与估计值之间的误差大小的系数矩阵。根据式(6)反演参数结果,待估参数与真值间的误差可表示为:

$$p_r - p = (I - R) p_r - G \varepsilon \quad (7)$$

式中 I 为单位矩阵。由于模型参数的真值很难获取,采用协方差方式可以估算真值与待估值之间的误差,具体表达式为:

$$C(p_r - p) = (I - R) C(p_r) (I - R)^T + G C(\varepsilon) G^T \quad (8)$$

式中 $C(p_r)$ 为模型参数的协方差函数, $C(p_r - p)$ 为待估值与真值之间误差的协方差, $C(\varepsilon)$ 为观测数据的协方差结果。该方程可反映模型调参过程中对不确定性的量化结果。式中 $C(p_r)$ 为可以通过实测参数的变异函数进行确定。结合式(4),式(8)中矩阵 $(I - R)$ 可变为:

$$I - R = V_2 V_2^T \quad (9)$$

式(9)可以通过程序 PEST 中的 PNULPAR 模块进行估算。通过参数的协方差和概率密度函数可生成

一系列的随机参数值 p_{st} , 该参数值与校准值之间的差值可以表示为:

$$(p - p_{st})' = V_2 V_2^T (p - p_{st}) \quad (10)$$

通过计算每个随机参数中差值 $(p - p_{st})'$ 的值,然后叠加到校准后的模型参数 p 中,重构模型随机参数集合,设置目标函数阈值,采用 SVD-assist 方法对模型参数集合进行优化,获取一系列校准后的模型参数向量,具体思路如图 3 所示。

3 地下水流数值模型

3.1 模型范围与边界

考虑到工程场地紧邻南海海域,根据钻孔 ZK11 的水位与水质监测结果,地下水位为 29.0 m, TDS 约为 110.0 mg/L, 为淡水。通过 Ghyben-Herzberg 公式计算可知,咸淡水界面深度位于海平面之下 1160.4 m 左右,模型暂时不考虑咸淡水界面的影响。本研究采用描述饱和与非饱和过程的 Richard 数学模型,重点模拟饱和带第四系、基岩地下水流动规律,相关参数主要取自经验值(van Genuchten, 1980)。

场地北侧存在上游补给的常年流动溪水,可作为第一类边界条件。西侧与南侧紧邻海域,以海水水位作为模型边界条件,忽略潮汐作用的影响。钻孔 ZK10 南侧出露泉水,形成常年流动的溪水,最终汇

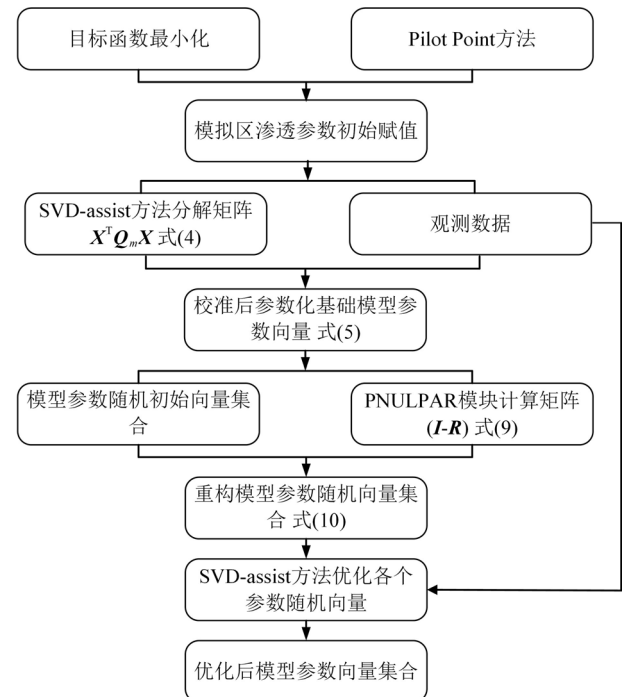


图 3 NSMC 方法基本原理流程图

Fig. 3 Flowchart of inverse iterative NSMC process

入南侧海域,模型东侧以钻孔 ZK3、ZK7 及 ZK10 线性差值获得的地下水位及南侧溪水作为模型边界条件,设置为第一类边界条件,模型范围如图 2 所示。场地接受大气降水入渗补给,上边界设置为第二类边界条件,以净入渗量形式进行参数赋值,入渗系数取自相关经验参数(中国地质调查局,2012)。模型底部以-500 m 标高平面作为下部边界,认为地下水循环深度不超过此深度范围,设置为隔水边界。

3.2 模型参数分区

对于场地基岩的全风化层与强风化层,由于风化程度最高,原岩结构几乎已经完全破坏,绝大多数矿物已风化为黏土,可等效为孔隙结构。中风化层虽然保留一定的原岩结构,但风化裂隙较多,风化程度也相对较高,可认为该层渗透性空间差异性相对较小,也概化为多孔介质。在模型中基岩全风化层、强风化层、中风化层及第四系松散沉积层按照岩性的分布范围采用传统参数分区方式进行设置,渗透系数设定为恒定值,数量为 20 个。对于微风化层则是采用变异函数与 Pilot Point 调参方法,渗透系数采用 3D 克里金插值获取。模型中采用渗透系数的对数形式($\lg K$)及高斯模型进行水平与垂直方式上的变异函数拟合。受限于实测数据有限性,假设渗透系数在三维空间上是各向同性的。岩体渗透结构的非均质性则是通过水平与垂直方向上变异函数进行确定的,计算过程中忽略变异函数在水平方向上的差异性,相关参数的基台值、变程及块金值计算结果见表 1。

表 1 不同方向上变异函数相关参数取值
Table 1 Parameter values of the variogram
in different directions

变异函数方向	基台值	变程	块金值
水平方向	1.76	118.26	0.0
垂向方向	0.58	28.11	0.0

目前研究区已开展了双栓塞水文地质试验与压水试验,相比较而言,压水试验操作过程中由于栓塞止水效果较差,试验数据可靠性较低,故模型中以双栓塞水文地质试验数据的数理统计结果作为模型参数识别与不确定分析的依据。如图 4 所示,基岩渗透系数多数分布在 $10^{-7} \sim 10^{-4}$ m/d,局部岩体渗透性相对较高,大部分岩体渗透性较低。渗透参数($\lg K$)平均值为-5.31,标准差为 1.50。

3.3 地下水流数值建模

研究区地下水流数值建模采用的是德国 WASY

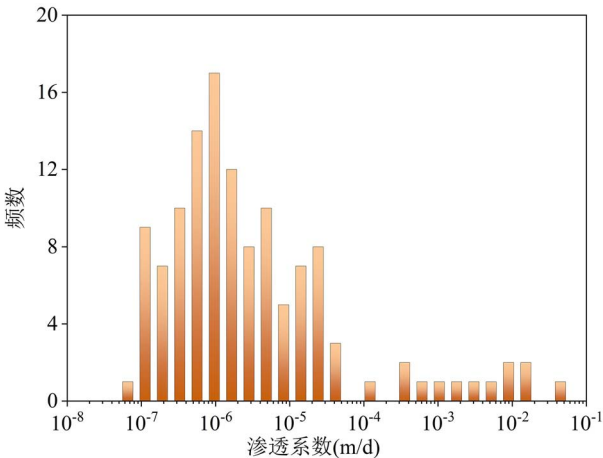


图 4 双栓塞水文地质试验数据直方图
Fig. 4 Histogram graph of hydraulic conductivity based on hydraulic test with double packer equipment

研究所研发的软件 FEFLOW,其是基于有限元数值模拟方法,能够模拟地下水流动、污染物及热量运移等问题,支持三棱柱、六面体、四面体、多面体等网格剖分形式,是目前功能最为齐全的地下水数值模拟软件包之一(杨金忠,2000)。本研究采用软件 FEFLOW 中四面体与五面体混合形式进行网格剖分。基于钻孔揭露的岩性采用反距离加权插值方法进行垂向上风化层分层。模型东西长度约 2.4 km,南北宽度约 1.1 km。垂向上总共分为 15 层,网格单元总数为 131688 个,结点总数为 55650 个。目前工程场地地下水系统处于天然状态,模型设置为地下水稳定流数值问题。模型中微风化层布设的 Pilot Point 调参点主要分为三部分:第一部分为双栓塞水文地质试验点,初始值由试验结果确定,考虑到试验尺度效应,模型在校准过程认为该值在较小范围波动。第二部分为压水试验点,作为参数点的初始值,考虑到压水试验测量误差相对较大,模型参数的取值范围由双栓塞水文地质试验获得的渗透参数最大值与最小值确定。第三部分调参点为自由 Pilot Point,根据模型的范围进行均匀分布的,取值范围与第二部分保持一致,参数初始值是采用实测渗透参数的平均值。调参点空间分布见图 5,合计点数为 504 个。传统的参数分区数量为 20 个,合计模型参数总数为 524 个。模型分别选取 24 个钻孔水位数据,采用 Pilot Point 参数点和 SVD-assist 方法获得校准后的基础模型(赵敬波等,2022)。在此基础上,采用 NSMC 方法进行模型参数不确定分析,设置目标函数的阈值,最终反演得到符合目标函数

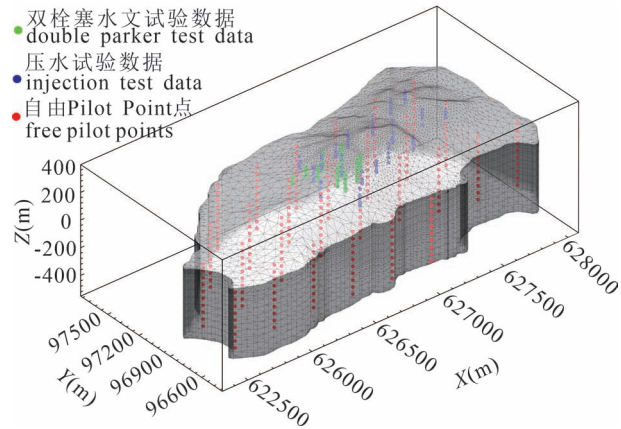


图 5 研究区模型网格剖分与 Pilot Point 参数点分布
Fig. 5 Model grids and Pilot Point locations
of the study area

要求的裂隙渗流数值模型样本 100 个,以此进行裂隙介质地下水流动模型模拟效果的综合评估。

4 结果与讨论

根据工程场地钻孔水位的观测结果可知,水位分布在 14.6~212.1 m,不同位置水位相差较大,拟合难度较高,如图 6 所示。基于 100 个模型模拟结果可知,计算水位与观测水位残差的平均值为 4.85 m,中位数为 4.28 m,标准差为 3.11 m,多数钻孔水位残差平均值是小于 5 m,整体上地下水水位拟合结果相对较为理想,能够较好地反映场地地下水动力场空间分布规律。同时为了定量评价模拟效果,常采用纳什效率系数 (NS, Nash-Sutcliffe efficiency coefficient) 进行模拟结果的评估,如式 (11) 所示。一般情景下该值大于 0.5 则可认为模型的拟合程度相对较好,模型结果是可以接受的 (Anderson et al., 2015)。基于此对上述 100 个模型的纳什效率系数进行统计分析,结果表明该系数最大值为 0.9899,最小值为 0.9512,平均值为 0.9803,整体上选取的各个模型识别满意程度是较好的。其中多数钻孔的模拟水位分布较为集中,个别钻孔的模拟结果偏离观测值较大,且观测水位值越大,模拟结果的波动范围也相应较大。

$$NS = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (Hr_i - Hs_i)^2}{\sum_{i=1}^N (Hr_i - Hs_a)^2} \tag{11}$$

式中, Hr_i 和 Hs_i 分别表示第 i 个孔地下水水位观测值和模拟值; N 为地下水水位观测孔数量; Hs_a 表示观测

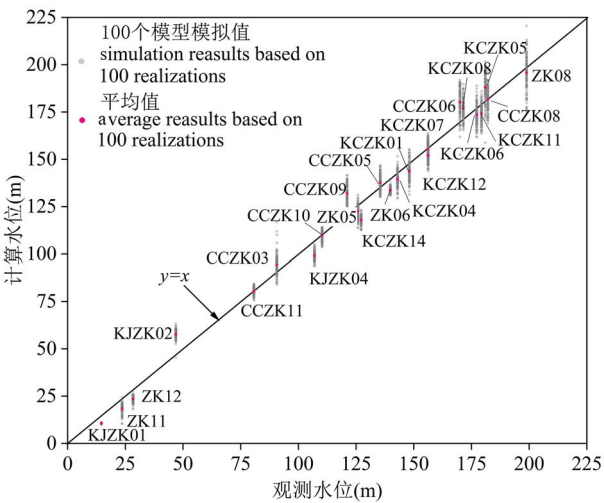


图 6 100 个实现的水位模拟值、平均值与观测值的对比图

Fig. 6 Comparison with simulated and recorded hydraulic heads based on 100 realizations

水位的平均值。

钻孔水位模拟统计图也表明各个钻孔水位的模拟值是相对较为集中的,多数结果是在较小的范围波动(图 7)。其中结果波动幅度最大的钻孔为 ZK08,孔口海拔标高相对较高,水位模拟值分布在 175.0~220.5 m,方差为 88.7,多数模拟值分布在 190.0~204.0 m,占有模拟结果总数的 60%。波动幅度较小的钻孔则是 KJZK01,模拟值都分布在 10.1~11.1 m,模拟结果极为集中,且方差值也相对较小。同时图 7 中各个钻孔模拟水位的方差同样说明了观测水位值越大,模拟结果波动幅度也偏大,反之,波动幅度则偏小。其中波动幅度相对较大的钻孔有 ZK08、KCZK05、CCZK06、CCZK08 等,水位模拟结果方差也较大,波动幅度相对较小的钻孔有 ZK11、ZK12、KJZK01 等,相应水位模拟值方差也偏小。

不同实现地下水模拟结果如图 8 所示,该结果表明研究区的地下水位总体是中间位置偏高,四周偏低,中间区域处存在地表分水岭,地下水位与地形的高低起伏保持较好的一致性。根据图 8 中的切面图可知模拟的场地地下水位浅部高、深部相对较低,地下水从浅部向下流动,然后分别排泄到北侧沟谷溪水与南侧海域,模拟的场地地下水流动规律与水文地质概念模型的认识是保持一致的。其次,通过比较不同实现的模拟结果可知不同实现获得的地下水动力场差异性相对较小,地下水流动趋势是保持

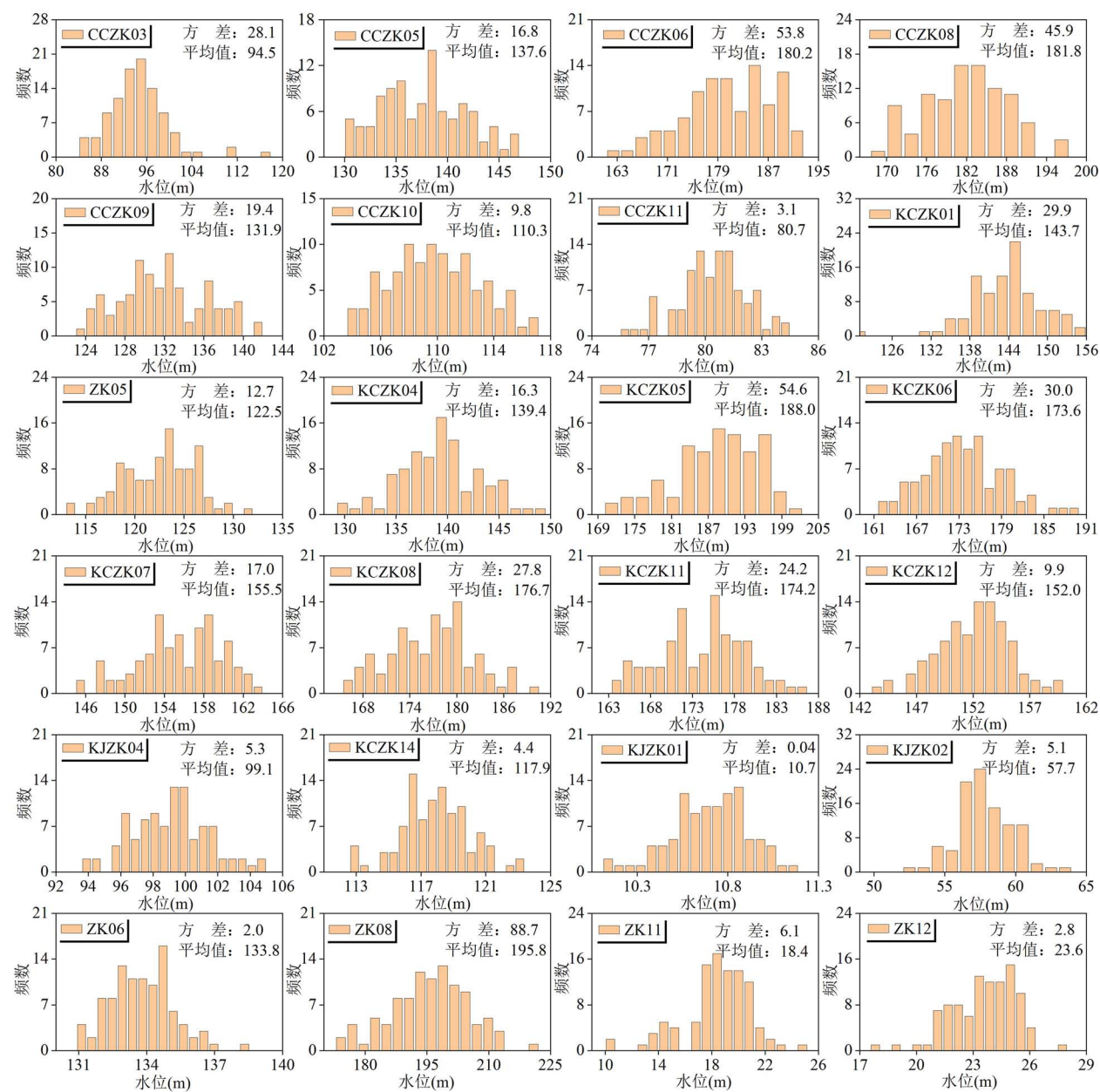


图 7 100 个实现的钻孔模拟水位统计分布图
Fig. 7 Histogram graph of simulated hydraulic heads based on 100 realizations

一致的,这也说明了目标函数存在多解性,地下水流数值模拟结果存在“异参同效”的现象。据此,考虑到裂隙岩体渗流的复杂性,现阶段尚未有成熟的技术或者方法能够准确表征其渗透结构,进一步预测裂隙介质地下水流动规律。笔者等采用 NSMC 方法进行模型参数不确定分析,获得一系列研究区地下水动力场模拟结果的集合,在基础上进行综合统计与分析,这对提升裂隙介质渗流模拟预测的可靠性能是有利的。

图 9 为 100 个实现获得不同岩性的净入渗量和

渗透参数分区模拟结果。整体结果表明地形较高区域分布的岩性为中细粒花岗岩、斑状花岗岩及花岗斑岩,净入渗量模拟结果相对较大,相应的净入渗量对数的平均值分别为-3.975、-3.140 及-3.166。对于地形较低区域,主要分布二长花岗岩、海相砂层、人工堆积层等,然而由于接近地下水的排泄区,净入渗量相对有限,其对数的平均值也相对较小,分别为-6.417、-5.328 及-6.895。同时图 9 的结果还表明中细粒花岗岩、斑状花岗岩及花岗斑岩的净入渗量模拟结果都较为集中,分布在较小范围内。对

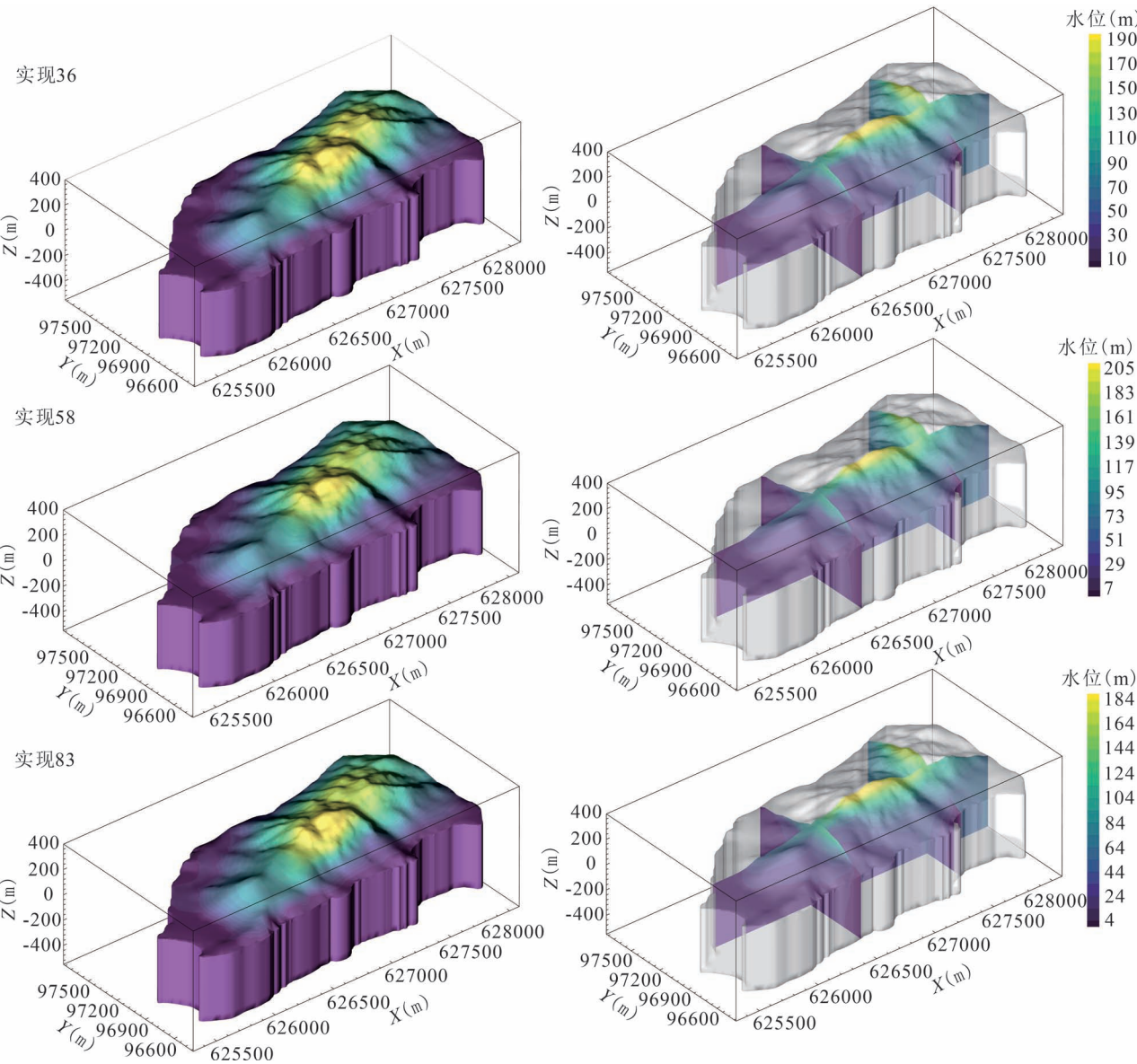


图 8 不同实现地下水位空间分布图

Fig. 8 Spatial distribution of groundwater level of different realizations

于二长花岗岩、海相沉积层、人工堆积层,由于仅钻孔 ZK11、KJZK01 分布在这些参数分区范围内,在模型参数校准过程中观测水位对这三个分区约束相对较小,使得净入渗量在参数识别过程中敏感性较低,获得的结果相对较为离散,方差也相对较大。

全风化层、强风化层、中风化层及第四系松散沉积层渗透参数($\lg K$)数理统计的方差可知不同岩性渗透参数整体上较为集中,波动的范围相对较小,其原因是受模型中调参范围的最大值与最小值影响,使得这些参数的模型不确定分析结果方差值偏低。其次,统计结果还表明基岩风化层自上而下渗透参数是逐步降低,例如:对于斑状花岗岩而言,全风化

层、强风化层及中风化层的渗透参数($\lg K$)的平均值分别为 -0.974 、 -1.221 及 -2.996 。不同岩性渗透参数的数值较为接近,这与实际经验认识也是相符的。例如对全风化层而言,中细粒花岗岩、斑状花岗岩、花岗斑岩及二长花岗岩渗透参数($\lg K$)的平均值分别为 -0.967 、 -0.974 、 -0.865 及 -0.789 ,整体模拟结果是较为接近的。对于第四系海相砂层、人工堆积层数理统计结果与经验值也是相符的,这说明本研究中采用调参方法与模型不确定性分析结果是合理的。

模型微风化层渗透结构是在 Pilot Point 调参点结果的基础上,采用 3D 克里金插值方法生成的。

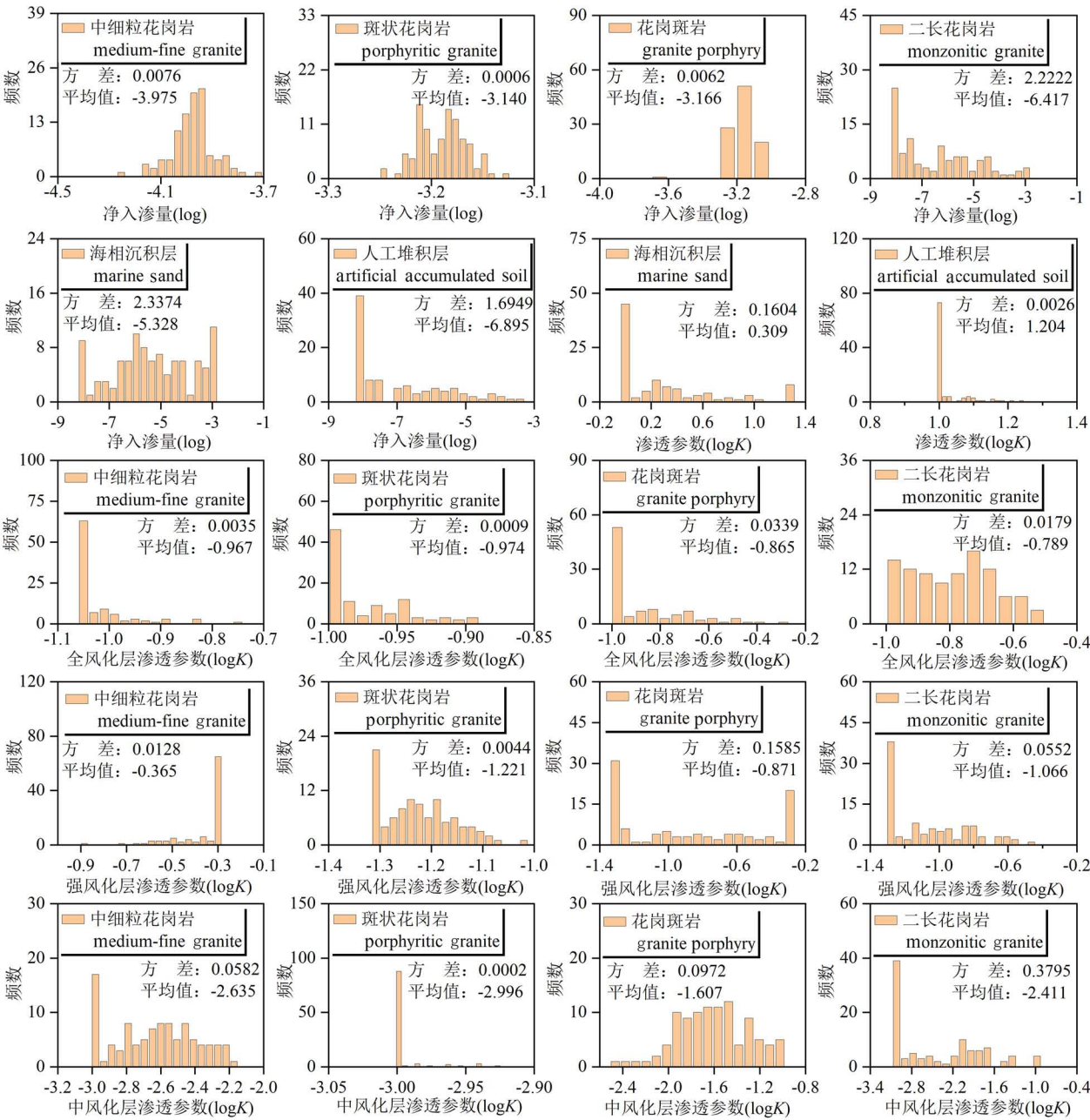


图 9 不同参数分区的净入渗量与渗透参数模拟结果统计图 (净入渗量与渗透系数 K 单位: m/d)

Fig. 9 Histogram graph of net infiltration and hydraulic conductivity for different parameter zones based on 100 realizations (net infiltration and hydraulic conductivity unit: m/d)

据此,考虑模型每个参数不确定性,基于 NSMC 方法生成符合目标函数要求的 100 个实现,在此选取其中 3 个实现不同深度的渗透结构进行讨论分析(图 10)。结果表明基于 Pilot Point 调参方法可以反映裂隙介质渗透结构在三维空间上的差异性,能够识别局部渗透性相对较高与较低的区域,尤其在钻孔周围,且 3 个实现获得渗透结构呈现较好的一致性。通过比较图中三个实现模拟结果可以发现,在海拔标

高为 100 m 处以钻孔 CCZK01~CCZK04 为中心的区域存在渗透性相对较低的区域,钻孔 KCZK04 周边存在渗透性相对较高的区域。由于水文试验数据及变异函数变程的,影响范围在各个实现中表现有所不同,但总体上渗透结构在各个钻孔位置反映较为精细,且在各个实现中都有所体现。在海拔标高为 0 处,由于缺乏钻孔水文试验实测数据,各个实现的渗透结构在这一深度相对差异性较大,这说明模型

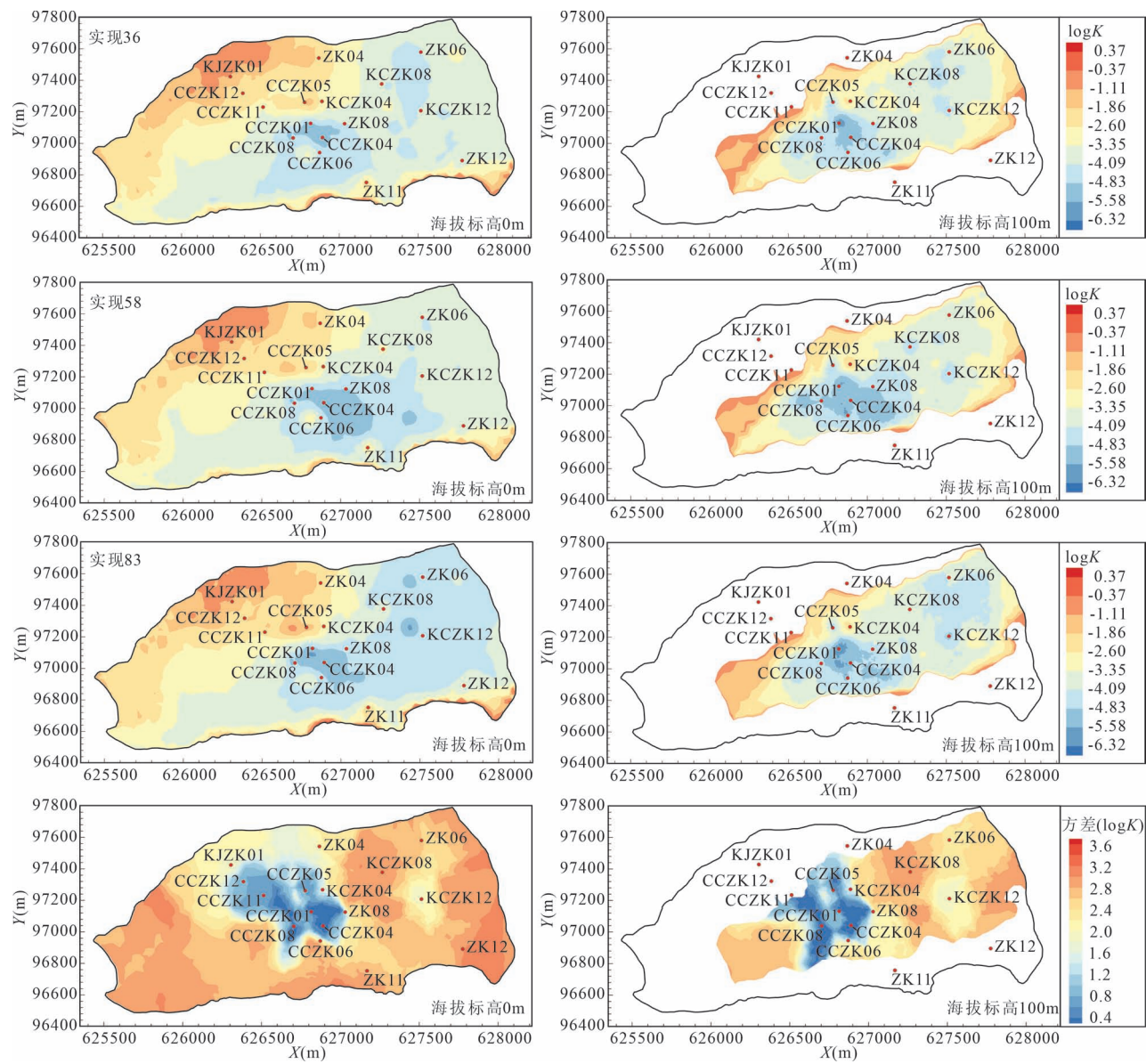


图 10 不同实现的渗透结构模型及其方差图

Fig. 10 Hydraulic conductivity field for three randomly selected realizations and the corresponding variance graph based on 100 realizations

的不确定性相对较高。然而各个实现间的渗透结构在空间变化趋势是保持一致的,北侧渗透性相对较高,南侧渗透性相对较低,在钻孔 CCZK01~CCZK04 附近的渗透性最低。根据图 10 中渗透参数($\lg K$)的方差图可知渗透参数不确定性相对较低区域主要集中在钻孔 CCZK01~CCZK12 附近,这些钻孔相应开展过精度较高的双栓塞水文地质试验,在设置 Pilot Point 参数值,调参的范围相对较小,使得参数反演的结果波动小,相应的参数方差值较低。除此之外,其他区域由于缺乏钻孔数据或者开展钻孔压水试验数据精度相对较低,这些区域参数的不确定性较大,

使得每个实现在这些区域的反演结果差异性较为明显,相应 Pilot Point 参数点模拟值的方差也偏大。同时对比图 9 与图 10 结果可知,整体上 Pilot Point 参数点的方差值高于参数分区,其原因是除了模型调参边界设置的影响之外,参数反演的结果还受观测水位约束。目前观测到地下水位多数为浅部水位,分布在中风化层之上,在各个实现参数识别的过程中,观测水位主要约束的是全风化层、强风化层及中风化层反演结果。对于微风化层的约束相对较弱,尤其是自由 Pilot Point 参数点,相应各个实现中这些参数点识别结果相差较大。

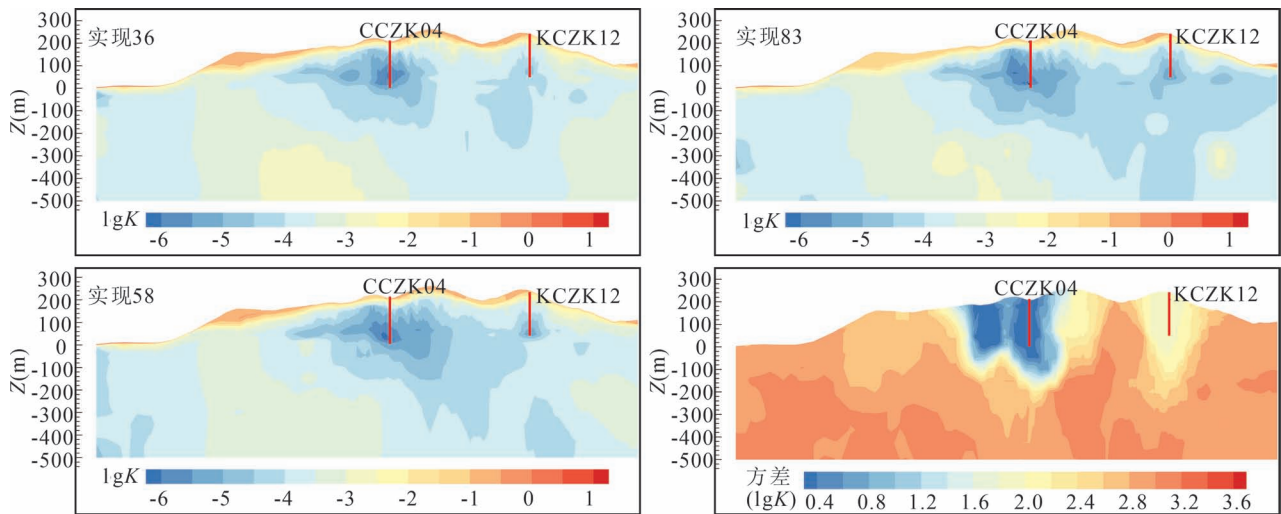


图 11 剖面 CCZK04~KCZK12 的渗透结构模拟结果及其方差图
Fig. 11 Hydraulic conductivity field of profile CCZK04~KCZK12 for three randomly selected realizations and the corresponding variance graph based on 100 realizations

为了进一步分析剖面上不同实现渗透反演结果,在此选择了钻孔 CCZK04 和 KCZK12 通过的剖面进行讨论(图 11)。结果表明实现 36、实现 58 及实现 83 在钻孔 CCZK04 周围的渗透参数($\lg K$)模拟结果较为接近,渗透性整体偏低,但在各个实现中该区域钻孔的实测数据对模拟结果的影响范围略有不同。对于钻孔 KCZK12 周围区域,虽然各个实现的模拟结果也较为接近,但与钻孔 CCZK04 相比,该钻孔实测数据影响范围相差较大。通过方差云图可知,各个渗透参数方差最小的区域分布在钻孔 CCZK04 周边,该区域分布相对较多的双栓塞水文地质试验数据,各个实现在进行模型参数识别过程中受实测数据约束较为明显,相应的方差值较小。其次是钻孔 KCZK12 周围区域,虽然压水试验数据误差较大,但是在一定程度上会对各个实现的模拟结果进行限制。对于无钻孔数据的区域,反演的渗透结构不确定性相对较大,相应的方差值也较大,这与图 10 的模拟结果是保持一致的。

对于本核设施工程而言,最为关注的是裂隙介质的渗透性与场地的水动力条件特征。通过比较各个实现渗透结构反演结果可知,各个实现的渗透系数整体上都较为偏低,数值也较为接近,能够与实测的水文地质试验数据吻合,且各个实现的渗透结构空间变化趋势呈现较好的一致性。多个模型反演结果也表明了场址裂隙介质的渗透性整体偏低,这对核设施工程场地安全性能评价是有利的。其次,各个实现的地下水动力场模拟结果表明(图 8),虽然渗

透结构表现出一定的差异性,但是水动力场模拟结果与流动趋势呈现较好的相似性与一致性,这对本核设施工程地下水渗流规律的正确认识及识别渗流快速通道具有重要意义。

根据 NSMC 方法获得各个实现中 Pilot Point 参数点的反演结果和平均值(图 12)。该结果也说明了开展过精度较高的双栓塞水文地质试验的 Pilot Point 参数点由于设置的调参范围较小,各个实现结果波动较小,这与图 10 中方差的模拟结果是保持一致的。其次,通过对压水试验和自由 Pilot Point 参数点的模拟结果分析可知,这些参数点反演结果多

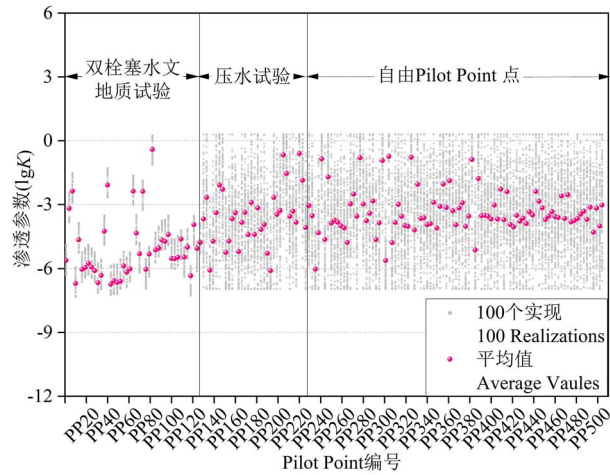


图 12 100 个实现中 Pilot Point 参数点
不确定性分析结果
Fig. 12 Hydraulic conductivity value of each Pilot Point based on 100 realizations

数分布在调参范围的中间区域,部分参数点的反演结果为调参范围的边界值。双栓塞水文地质试验数据参数点的反演结果平均值为 -3.85 ,而各个实现所有渗透参数的平均值为 -3.76 ,两者保持较好的一致性。

考虑到裂隙介质渗透结构高度非均质性,本研究采用 Pilot Point 调参方法是基于 3D 克里金插值的方式获取的,能够反映裂隙介质的空间差异性。对于存在钻孔实测数据的位置,渗透结构在钻孔分布的局部区域反映较为精细,对于无实测数据的区域,渗透结构差异性反映相对较差。然而该方法获得渗透结构在空间上表现的相对较为平滑,模拟结果中每个实现都很难将裂隙介质的非均质这一特性准确地描述出来。同时考虑到基于 Pilot Point 方法获得的确定性、唯一的模拟结果与实际裂隙介质的渗透结构存在一定的差距,模拟结果仍存在诸多的不确定性。在此基础上,采用 NSMC 方法进行模型不确定性分析,获取一系列符合目标函数要求的渗透结构模型的集合的方式,可避免单个实现在表征渗透结构方面具有随机性和不确定性这一特征。总体而言,该方法即可用于描述孔隙与裂隙介质的非均质性,也可用于表征承压含水层与潜水含水层的渗透性。然而该方法常需要和 Pilot Point 调参点方法配套使用,需要一定数量的钻孔试验数据获得场地渗透性的变异函数作为模型输入参数。其次,对于裂隙介质而言,该方法是通过获取大量校准后的渗透结构实现以此提升模拟结果的可靠性,计算量相对较大,且模拟结果与裂隙岩体渗透结构仍存在一定差距。

5 结论与展望

笔者等以我国某核设施花岗岩为研究对象,基于钻孔水文试验数据,采用 Pilot Point 调参方法和 NSMC 方法,反演了裂隙介质参数化渗透结构,获取了符合实际水文地质条件多个地下水流数值模型,提升了裂隙地下水渗流模拟预测能力,结论如下:

(1) 基于 NSMC 方法获得的各个实现地下水位的计算结果与观测数据拟合效果较好,能够合理地模拟工程场地裂隙地下水动力特征与流动趋势,可为本核设施工程场地的水文地质适宜性评价提供技术支撑。

(2) 各个实现获得的全风化层、强风化层及中风化层渗透系数的平均值自上而下是逐渐降低的,对于同一风化程度的基岩,不同岩性渗透系数的平

均值较为接近;各个实现中双栓塞水文地质试验 Pilot Point 参数点的渗透系数平均值与所有 Pilot Point 参数点的平均值保持较好的一致性,场地岩体的渗透性相对较低。

(3) 根据 NSMC 方法获得的各个实现渗透结构在空间上存在一定的差异性,但整体渗透性的空间变化趋势是保持一致的,且渗透参数的不确定性表现为在实测数据分布区域相对较低,钻孔空白区域相对较高。

(4) 基于 NSMC 方法获得的裂隙岩体渗流数值模型集合可以弥补 Pilot Point 调参方法在表征裂隙介质渗透结构方面的局限性,有效地降低模拟结果的不确定性与随机性,这对提高裂隙地下水模拟的精度与预测能力是有利的,也可为其他相关裂隙介质水文地质研究工作提供可借鉴的依据。

现阶段考虑到场地实测数据相对较为有限,模型结果尚存在较大的不确定性。建议后续对开展过压水试验的钻孔补充相应的双栓塞水文地质试验工作,提高试验数据的可靠性。对现阶段模型反演的渗透性较高区域,建议开展水文试验验证工作。对于核设施重点关注的区域和钻孔空白区域,应进一步补充地质、水文地质相关工作,以此加强模型模拟的约束条件,降低模拟结果的不确定性,最终为本核设施的工程方案设计、工程建设及安全性能评价提供技术支撑。

参 考 文 献 / References

(The literature whose publishing year followed by a “&” is in Chinese with English abstract; The literature whose publishing year followed by a “#” is in Chinese without English abstract)

- 莫绍星. 2019. 基于深度学习的地下水模拟高维不确定性分析和反演. 导师: 吴吉春, 施小清. 南京: 南京大学博士学位论文: 1~137.
- 宋凯, 刘丹, 刘建. 2018. 地下水模拟不确定性问题的多模型分析. 西南交通大学学报, 53(3): 574~581.
- 吴吉春, 陆乐. 2011. 地下水模拟不确定性分析. 南京大学学报(自然科学版), 47(3): 227~234.
- 夏强. 2011. 地下水不确定性问题的多模型分析方法及应用. 导师: 万力, 王旭升. 北京: 中国地质大学(北京)博士学位论文: 1~109.
- 杨金忠. 2000. 多孔介质中水分及溶质运移的随机理论. 北京: 科学出版社: 1~284.
- 曾献奎. 2012. 地下水流数值模拟不确定性分析与评价. 导师: 吴吉春. 南京: 南京大学博士学位论文: 1~153.
- 曾献奎, 王栋, 吴吉春. 2012. 地下水流概念模型的不确定性分析. 南京大学学报(自然科学), 48(6): 746~752.
- 张人权, 梁杏, 靳孟贵, 万力, 于青春. 2011. 水文地质学基础(第六版). 北京: 地质出版社: 1~199.
- 中国地质调查局. 2012. 水文地质手册(第2版). 北京: 地质出版

- 社: 1~873.
- 周海燕. 2012. 基于集合卡尔曼滤波法的非高斯含水层参数识别. 导师: 周训. 北京: 中国地质大学(北京)博士学位论文: 1~85.
- 赵敬波, 潘跃龙, 李杰彪, 吴群, 刘羽, 季瑞利, 周志超. 2022. 基于 Pilot Point 方法反演裂隙岩体参数化渗透结构. 地球科学, doi: 10. 3799/dqkx. 2022. 031.
- Alberti L, Colombo L, Formentin G. 2018. Null-space Monte Carlo particle tracking to assess groundwater PCE (Tetrachloroethene) diffuse pollution in north-eastern Milan functional urban area. *Science of the Total Environment*, 621: 326~339.
- Anderson M P, Woessner W W, Hunt R J. 2015. *Applied Ground Water Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport*. Academic Press: 1~564.
- Beven K, Binley A. 1992. The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction. *Hydrological Processes*, 6 (3): 279~298.
- Blessent D, Therrien R, Lemieux J M. 2011. Inverse modeling of hydraulic tests in fractured crystalline rock based on a transition probability geostatistical approach. *Water Resources Research*, 47 (12): 1~19.
- Carniato L, Schoups G, Giesen N, Seuntjens P, Bastiaens L, Sapion H. 2015. Highly parameterized inversion of groundwater reactive transport for a complex field site. *Journal of Contaminant Hydrology*, 173: 38~58.
- Carle S F, Fogg G E. 1996. Transition probability-based indicator geostatistics. *Mathematical Geology*, 28(4): 453~476.
- Chen Yifeng, Ling Xiaoming, Liu Mingming, Ran Hu, Yang Zhibing. 2018. Statistical distribution of hydraulic conductivity of rocks in deep-incised valleys, Southwest China. *Journal of Hydrology*, 566: 216~226.
- China Geological Survey. 2011. *Handbook of Hydrogeology* (2nd edition). Beijing: Geological Publishing House: 1~873.
- Christensen S, Doherty J. 2008. Predictive error dependencies when using pilot points and singular value decomposition in groundwater model calibration. *Advances in Water Resources*, 31(4): 674~700.
- Clifton P M, Neuman S P. 1982. Effects of kriging and inverse modeling on conditional simulation of the Avra Valley Aquifer in southern Arizona. *Water Resources Research*, 18(4): 1215~1234.
- Deutsch C, Journel A. 1995. *GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide*(2nd). Technometrics: 1~363.
- Doherty J. 2015. *Calibration and Uncertainty Analysis for Complex Environmental Models*. Watermark Numerical Computing, Brisbane, Australia, ISBN: 978-0-9943786-0-6: 1~222.
- Finsterle S, Kowalsky M B. 2012. *iTOUGH2-GSLIB User's Guide*. Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, Berkeley CA: 1~26.
- Hayley K, Schumacher J, Macmillan G J, Boutin L C. 2014. Highly parameterized model calibration with cloud computing: an example of regional flow model calibration in northeast Alberta, Canada. *Hydrogeology Journal*, 22(3): 729~737.
- Herckenrath D, Langevin C D, Doherty J. 2011. Predictive uncertainty analysis of a saltwater intrusion model using null-space Monte Carlo. *Water resources research*, 47(5): W05504.
- Marsily G, Lavedan G, Boucher M, Fasanino G. 1984. Interpretation of interference tests in a well field using geostatistical techniques to fit the permeability distribution in a reservoir model. *NATO advanced Study Institute*: 831~849.
- Moeck C, Molson J, Schirmer M. 2019. Pathline density distributions in a null-space monte carlo approach to assess groundwater pathways. *Ground Water*, 58(2): 1~19.
- Moges E, Demissie Y, Li H. 2020. Uncertainty propagation in coupled hydrological models using winding stairs and null-space monte carlo methods. *Journal of Hydrology*, 589(4): 125341.
- Mo Shaoxin. 2019. *Towards efficient high-dimensional uncertainty quantification and inverse analysis in groundwater modeling using deep learning*. Nanjing: Dissertation submitted to Nanjing university for doctoral degree: 1~137.
- Muhammad U, Thomas R, Rudolf L, Azhar A, Christopher C, Shoaib S. 2018. Inverse parametrization of a regional groundwater flow model with the aid of modelling and GIS: Test and application of different approaches. *International Journal of Geo-Information*, 7 (33): 1~27.
- Pappenberger F, Beven K J. 2006. Ignorance is bliss: Or seven reasons not to use uncertainty analysis. *Water Resources Research*, 42(5): W05302.
- Park Y J, Sudicky E A, McLaren R G, Sykes J F. 2004. Analysis of hydraulic and tracer response tests within moderately fractured rock based on a transition probability geostatistical approach. *Water Resources Research*, 40(12): W12404.
- Poeter E P, Hill M C. 1999. UCODE, a computer code for universal inverse modeling. *Computers & Geosciences*, 25(4): 457~462.
- Rubin Y, Gómez-Hernández J J. 1990. A stochastic approach to the problem of upscaling of conductivity in disordered media: theory and unconditional numerical simulations. *Water Resource Research*, 26 (4): 691~701.
- Song Kai, Liu Dan, Liu Jian. 2018. Multiple model analysis for studying groundwater uncertainties. *Journal of Southwest Jiaotong university*, 53(3): 574~581.
- Tonkin M J, Doherty J. 2005. A hybrid regularized inversion methodology for highly parameterized environmental models. *Water Resources Research*, 41(10): 3092~3100.
- Tonkin M, Doherty J. 2009. Calibration-constrained Monte Carlo analysis of highly parameterized models using subspace techniques. *Water Resources Research*, 45(12): W00B10.
- van Genuchten M Th. 1980. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. *Soil Science Society of America Journal*, 44(5): 892~898.
- Wen Xianhuan, Capilla J E, Deutsch C V, Gómez-Hernández J J, Cullick A S. 1999. A program to create permeability fields that honor single-phase flow rate and pressure data. *Computers & Geosciences*, 25(3): 217~230.
- Woodbury A D, Ulrych T J. 2000. A full-Bayesian approach to the groundwater inverse problem for steady state flow. *Water Resources Research*, 36(8): 2081~2093.
- Wu Jiechun, Lu Le. 2011. Uncertainty analysis for groundwater modeling. *Journal of Nanjing university (Natural sciences)*, 47 (3): 227~234.
- Xia Qiang. 2011. *Methods and applications of multiple model analysis on groundwater uncertainties*. Beijing: Dissertation submitted to China University of Geosciences (Beijing) for doctoral degree: 1~109.
- Yang Jinzhong. 2000. *Stochastic Theory of Groundwater and Solute Transport in Porous Media*. Beijing: Science Press: 1~284.
- Yeh T, Liu S. 2000. Hydraulic tomography: Development of a new aquifer test method. *Water Resources Research*, 36(8): 2095~2105.
- Yoon H, Hart D, McKenna S A. 2013. Parameter estimation and predictive uncertainty in stochastic inverse modeling of groundwater

flow; Comparing null-space Monte Carlo and multiple starting point methods. *Water Resources Research*, 49(1): 536~553.

Zeng Xinkui. 2012#. The uncertainty analysis of groundwater flow numerical simulation. Nanjing: Dissertation submitted to Nanjing university for doctoral degree; 1~153.

Zeng Xinkui, Wang Dong, Wu Jiechun. 2012#. Uncertainty analysis of groundwater flow conceptual model. *Journal of Nanjing University (Natural sciences)*, 48(6): 746~752.

Zhang Renquan, Liang Xing, Jin Menggui, Wang Li, Yu Qingchun. 2011#. *Fundamental of Hydrogeology (6th edition)*. Beijing:

Geological Publishing House; 1~199.

Zhou Haiyang. 2012#. Characterizing non - gaussian aquifer model parameters based on the ensemble Kalman Filter. Beijing: Dissertation submitted to China University of Geosciences (Beijing) for doctoral degree; 1~85.

Zhao Jingbo, Pan YueLong, Li Jiebiao, Wu Qun, Liu Yu, Ji Ruili, Zhou Zhichao. 2022#. Inverse modeling of parameterized hydraulic conductivity field in fractured medium based on pilot point method. *Earth Science*, doi: 10. 3799/dqkx. 2022. 031.

Uncertainty analysis for groundwater modeling in fracture rocks for the nuclear facility site based on null space Monte Carlo method

ZHAO Jingbo¹⁾, ZHOU Zhichao¹⁾, PAN Yuelong²⁾, YE Hao³⁾, WU Qun²⁾,
GUO Yonghai¹⁾, LI Jiebiao¹⁾, FU Xinyu¹⁾

- 1) CAEA Innovation Center for Geological Disposal of High Level Radioactive Waste, Beijing Research Institute of Uranium Geology, Beijing, 100029;
- 2) China Nuclear Power Engineering Co., Ltd., Shenzhen, Guangdong, 518000;
- 3) Changjiang Survey, Planning, Design and Research Co. Ltd., Wuhan, 430010

Objectives: The permeability in a fractured rock has obviously heterogeneous and anisotropic properties. To scientifically predict the groundwater flow characteristics of the fractured medium for a nuclear facility site, we put an emphasis on the uncertainty analysis of the hydraulic field in this paper.

Methods: Based on the hydraulic test data, Pilot point calibration technique and null space Monte Carlo method were employed to establish the groundwater flow model. The corresponding uncertainties analysis was conducted to obtain a series of realizations that meet the hydrogeological conditions in support of the safety assessment.

Results: The simulated hydraulic heads of different realizations were in a good agreement with the measured data. The numerical results could well reflect the actual hydrogeological conditions of the site. Besides, the hydraulic conductivity fields of different realizations exist some differences in the space domain. However, the overall change trends are similar. The variance of hydraulic conductivity filed around the boreholes is relatively low and is high in no borehole areas.

Conclusions: NSMC method could well make up for the limitations of single and deterministic numerical model in characterizing the hydraulic conductivity filed in fractured medium, and effectively reduce the uncertainty and randomness of model parameters. It is positive to further improve the groundwater flow prediction ability. The simulations results could deepen the understanding of groundwater migration behavior in fractured rocks.

Keywords: fractured rock mass; hydraulic conductivity filed; null space Monte Carlo method; model uncertainty analysis; pilot point method

Acknowledgements: This study was supported by the Special Project for Decommissioning of Nuclear Facilities and Radioactive Waste Treatment by the State Administration of Science, Technology and Industry for National Defense (No: 2019-1496).

First author: ZHAO Jingbo, male, born in 1988, doctor' s degree, senior engineer, mainly engaged in hydrogeological research and geological disposal of high-level radioactive waste; Email: zhaojingbobriug@outlook.com

Corresponding author: ZHOU Zhichao, male, born in 1983, doctor' s degree, professor, mainly engaged in geological disposal of high-level radioactive waste; Email: zhouzhichao2006@163. com

Manuscript received on: 2022-05-09; Accepted on: 2022-09-30; Network published on: 2022-10-20

Doi: 10. 16509/j. georeview. 2022. 10. 081

Edited by: LIU Zhiqiang

