《**计算地球科学**》**稿件编号**（由编辑填写）

# 网格分辨率导致的人工拓扑变化对裂隙介质中流动与运移的影响

**Aleksandra A. Pachalieva · Matthew R. Sweeney · Hari Viswanathan · Emily Stein · RosieLeone · JeffreyD. Hyman**

收稿日期：日期 / 接受日期：日期

Aleksandra A. Pachalieva 非线性研究中心、理论部及计算地球科学组（EES-16）地球与环境科学部 洛斯阿拉莫斯国家实验室 美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 87544 电子邮箱：apachalieva@lanl.gov

Matthew R. Sweeney 计算地球科学组（EES-16）地球与环境科学部 洛斯阿拉莫斯国家实验室 美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 87544 电子邮箱：msweeney2796@lanl.gov

Hari Viswanathan 计算地球科学组 (EES-16) 地球与环境科学部 洛斯阿拉莫斯国家实验室 美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 87544 电子邮箱：viswana@lanl.gov

Emily Stein 核燃料循环技术 桑迪亚国家实验室 美国新墨西哥州阿尔伯克基，邮编 87123 电子邮箱：ergiamb@sandia.gov

Rosie Leone 核燃料循环技术 桑迪亚国家实验室 美国新墨西哥州阿尔伯克基，邮编 87123 电子邮箱：rleone@sandia.gov

Jeffrey D. Hyman 计算地球科学组（EES-16）地球与环境科学部 洛斯阿拉莫斯国家实验室

arXiv:2302.10994v1 [cs.CE] 6 Feb 2023

**摘要** 我们开展了一系列数值模拟，以表征裂缝网络拓扑、上尺度和网格细化对裂缝性多孔介质中流动与传输性质的相互作用。我们生成了一系列不同密度的通用三维离散裂缝网络，其中裂缝半径从截断幂律分布中抽样，其参数则大致依据现场表征结果确定。我们还考察了五种网络密度，这些密度采用基于渗流理论的无量纲密度定义。生成网络后，我们使用 Sweeney 等人提出的上尺度离散裂缝-基质模型 [52]，将其上尺度为单一连续介质模型。我们考虑了流经各区域的稳态等温压力驱动流动，随后通过向区域内脉冲注入，模拟保守型、衰变型和吸附型示踪剂。对于每次模拟，我们计算了有效渗透率和溶质穿透曲线，作为比较不同网络实现的关注量。我们发现，选择合适的网格分辨率，使上尺度网格的全局拓扑与裂缝网络相匹配至关重要。如果上尺度网格中存在由裂缝（高渗透率）单元构成的连通通道，而裂缝网络中却不存在该通道，那么有效渗透率和溶质突破的估算就会出错。虚假连通无法完全消除，但可以通过针对特定网络选择适当的网格分辨率和细化程度来加以控制。采用八叉树网格划分以实现充分细化，与使用均匀分辨率网格相比，可减少计算单元数量（总单元数最多减少 90%），并能更准确地连续表征真实裂缝网络。

**关键词** 离散裂缝网络 · 连续介质模型 · 地下流动与传输 · 上尺度 · 计算几何 · 网格生成

## 1 引言

表征流体在地下裂缝性多孔介质中的流动，以及溶解化学物质随之发生的运移，是许多工业和土木工程项目的关键步骤，包括地质封存 $CO_2$ [29, 33]，饮用水含水层管理 [39, 55]，受污染裂隙介质的环境修复 [45, 46, 54]，烃类开采 [26, 44]，以及乏核燃料和高放射性废物的永久处置 [20, 34]。模拟裂缝性多孔介质中的流动、运移或热传递，其基石是所采用的系统表征方式：构建计算网格，并在该网格上求解相关控制方程。近年来，裂缝离散表征方法取得了长足进展，例如离散裂缝网络（DFN）和离散裂缝-基质（DFM）模型，大幅提升了我们对真实裂缝网络中的物理和化学过程进行建模的能力，但在若干方面仍存在局限。

美国新墨西哥州洛斯阿拉莫斯，邮编 87544 电子邮件：jhyman@lanl.gov

DFN模型仅表征裂缝，忽略了围岩（即基质）的重要作用；而在多种应用中，例如增强型地热和非常规储层，基质作用可能至关重要。DFM模型无疑是对真实裂缝系统最准确的表征 [6], 但仍受网格剖分算法和控制方程求解难题的限制，而裂缝域与基质域之间的耦合又使问题更加复杂。DFN模型已用于模拟数万条裂缝，而DFM模型仅用于模拟数百条裂缝 [31]。因此，当裂缝数量较多且不能忽略基质过程时，我们常采用连续介质模型，也称为等效连续多孔介质模型（ECPM），将裂缝网络属性上尺度为多孔介质的等效属性。这类模型通常因易于实现且与现有多物理场代码广泛兼容而得到采用。然而，众所周知，它们会模糊重要的长度尺度，而且人们尚未充分了解其精度是否以及如何取决于底层裂缝网络属性与计算网格分辨率之间的关系。Jackson 等人 [32] 此前的研究表明，在再现有效渗透率方面，ECPM能够表征底层DFN。然而，他们只考察了两个连通性较高、密度相对较大的不同DFN，且未考虑基质对流动的贡献。最近，Kottwitz 等人 [37] 系统分析了稳态流动模拟中ECPM网格分辨率与有效渗透率之间的关系。他们发现，随着网格尺寸减小，有效渗透率单调收敛，并提出了连续介质网格中为保留底层网络特征所需的最小和最大单元尺寸，这些尺寸与裂缝尺寸有关。他们研究中的网络具有较高的裂缝强度/密度。Sweeney 等人 [52] 还表明，单条裂缝的上尺度结果不受网格尺寸影响，始终准确。结合以往研究，这些结果表明，在同一裂缝网络中采用不同网格分辨率时，产生差异的原因是有效网络拓扑发生了变化。例如，在较粗的分辨率下，即使两条裂缝在底层网络中并不相交，它们的属性也可能被上尺度到连续介质网格中的同一单元，从而在网络中形成“虚假连通”。尽管拓扑变化至关重要，关系到我们能否有把握地将连续介质模型用于各种离散裂缝网络，而不仅仅是高裂缝强度/密度的网络，但迄今尚未对此类变化开展系统研究。原则上，如果两条裂缝彼此接近但并不相交，就需要选择网格生成参数，使背景单元尺寸小于两条裂缝之间的距离，从而消除虚假连通。然而，在随机生成的裂缝网络中，试图解析这些距离是徒劳的，因为它们很快会小于有限精度算术所能分辨的尺度，无论付出多大努力都无济于事。因此，对随机生成的网络进行上尺度时，虚假连通不可避免。

生成的网络。此外，单个控制体内可能出现多个虚假连接。连续介质网格的连通性/拓扑与裂缝网络的偏差可能会影响网络内部的局部和全局流动与输运。具体而言，如果虚假连接使连续介质网格在流动边界之间形成由裂缝单元组成的连通通道，即发生渗流，而底层离散裂缝网络并未渗流，则可能导致全局拓扑发生变化。然而，迄今尚未系统地表征这些虚假连接的影响，也尚未制定通用准则。

在本研究中，我们评估了所谓的虚假连接对采用等效连续多孔介质模型表示的裂缝系统中流动与输运的精度和收敛性的影响。我们发现，选择合适的网格分辨率，使上尺度网格的全局拓扑与裂缝网络相匹配，至关重要。如果上尺度网格中存在由裂缝（高渗透率）单元构成的连通通道，而裂缝网络中不存在这样的通道，那么有效渗透率和溶质穿透的估算结果将不准确。粗网格导致的裂缝间局部虚假连接会增加溶质弥散，但其影响程度低于全局连通性不匹配所造成的影响，这与先前的研究一致。为此，我们提出了一些基于原理的指导准则。首先，宏观尺度连通性是上尺度连续介质中必须体现的网络属性。同样，虽然无法完全消除虚假连接，但可以针对给定网络选择合适的网格分辨率和细化方案加以控制，从而更准确地估算有效渗透率和穿透曲线特征。这些通用准则还根据基质与裂缝渗透率以及网络密度之间的差异作了进一步细化。

## 2 数值模拟

使用 DFNWORKS 计算套件 [24]进行裂缝网络生成、上尺度以及流动与运移模拟。 DFNWORKS结合了用于网格剖分的特征剔除算法 FRAM [23, 38]、LaGriT 网格划分工具箱 [40], 和并行化的地下流动与反应性运移代码 PFLOTRAN [42]。 FRAM 用于生成三维裂缝网络。LaGriT 用于并行创建离散裂缝网络的计算网格表示。使用 Sweeney 等人 [52]提出的上尺度离散裂缝-基质（UDFM）模型，将网络上尺度为等效连续多孔介质。 PFLOTRAN 用于对控制方程进行数值积分，以获得区域内的稳态流场，随后模拟其中的运移过程。

### 2.1 网络生成

我们生成了一组密度各异的通用三维裂缝网络。这些网络之所以称为通用，是因为它们并不代表某个特定的现

场，但其参数基于断裂晶质岩现场的特征 [9]。这些网络生成于边长为 $L = 50$ 米的立方体域中。所有网络均使用相同的参数生成，只有裂缝数量不同，我们以此控制网络密度。这些网络由单一裂缝族构成。每条裂缝都是长宽比为 1 的平面圆盘，也就是说，每条裂缝都是圆形。裂缝的半径 $r$ 从截断幂律分布中采样，其概率密度函数为

$$p_r(r, r_0, r_u) = \frac{\alpha}{r_0} \frac{(r/r_0)^{-1-\alpha}}{1 - (r_u/r_0)^{-\alpha}}, \tag{1}$$

以及参数：衰减指数 $\alpha = 1.8$、下截止值 $r_0 = 1$和上截止值 $r_u = 10$m。这种 DFN 生成方式称为泊松生成，与裂缝成核并生长的运动学生成相对 [13, 14, 41, 53]。裂缝中心在整个区域内均匀分布。生成网络时，我们将区域向各个方向略微扩展（5 米），以避免区域边界附近出现低密度问题。

裂缝取向在单位球面上均匀分布，这模拟了野外观测到的无序裂缝网络 [22, 35]。取向从三维 von Mises-Fisher 分布中采样，

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \kappa) = \frac{\kappa \exp(\kappa \boldsymbol{\mu}^T \mathbf{x})}{4\pi \sinh(\kappa)} \ . \tag{2}$$

在式 (2) 中， $\boldsymbol{\mu}$ 是裂缝族的平均方向向量， $T$ 表示转置， $\kappa \geq 0$ 是集中参数，用于确定围绕平均方向的聚集程度。 $\kappa$ 接近零时，球面上的点呈均匀分布；值较大时，点与平均方向的偏差较小。为获得均匀随机取向，我们将 $\kappa = 0.1$ 设为零，并将平均法向量设为 (0，0，1)。该分布采用 [57] 中详述的方法进行采样。

通过将每条裂缝的水力开度与其半径设为正相关，来生成裂缝水力性质的变化，具体如下：

$$b = 5.0 \times 10^{-4} \sqrt{r} \, . \tag{3}$$

该关系式的参数基于结晶岩中现场数据 [51],再次获得。裂隙尺寸与水力开度之间这种完全相关的关系是离散裂缝网络模型的常见选择 [8, 15, 18, 25, 34, 56]。在此模型设置下，每条裂缝内部的水力开度保持不变，但不同裂缝之间会有所变化：较大的裂缝具有比较小裂缝更宽的水力开度。我们未将水力开度变异性纳入这些模拟，因为我们的目标是将网络上尺度化为等效连续体，而这类性质会在上尺度化过程中被整合消除。

离散裂缝网络集合按照网络密度排序。我们采用基于 de Dreuzy 等人 [16],提出的渗流参数 $p$ 来定义网络密度，该参数定义为

$$p = \frac{N}{L^2} \int_{r_0}^{r_u} dr \min(r, \alpha L) p_r(r) \ . \tag{4}$$

我们将临界渗流密度值（记为 $p_c$）定义为所需裂缝的最小数量，使得几乎必然存在一个贯穿整个区域的连通裂缝簇；也就是说， $p$ 在式（4）中等于 1 时对应的 $N$ 值 [5, 11, 12, 48]。对于此处考虑的区域尺寸和截断幂律分布参数，$p_c \approx 1000$ 条裂缝。此密度定义提供了一个归一化因子，因此可以使用无量纲渗流参数对网络进行相对比较

$$p' = p/p_c \, , \tag{5}$$

其中， $p$ 是在生成特定网络时的裂缝数量。我们考虑 $p' = 0.5$，0。75，1。0，1。5 和 2。0 这些取值（图 1）。根据半径为裂缝着色，以展示模拟中长度尺度的广泛范围。

对于每个密度值，我们考虑两个子情形。第一种情形考虑所有生成裂缝构成的网络。第二种情形仅考虑与流动条件相关的孤立裂缝和簇；也就是说，只保留连接流入和流出边界的裂缝簇。我们分别将这两种情形称为保留孤立裂缝和移除孤立裂缝。第二种情形（移除孤立裂缝）是离散裂隙网络建模中常见的预处理步骤，用于降低模拟的计算成本。这些孤立子网络不会对网络流动产生贡献，也就是说，在仅包含裂缝网络的区域内模拟流动时，它们并不起作用，因此可以将其移除而不影响模拟。然而，在上尺度系统中移除或保留孤立裂缝所造成的影响尚未得到充分表征，本研究旨在对此进行表征。利用 dfnWorks 中的基于图的算法来识别贯通区域的簇和孤立簇；有关基于图的技术的详情，请参阅 [27] 和 [28]。如果一个网络连接了流入和流出边界，我们就称该网络为渗流；否则，该网络为非渗流。 $p' = 0.5$ 和 0。75 网络为非渗流，而所有其他网络 $p' \geq 1$ 均为渗流。

表 1 报告了无量纲网络密度（$p'$）、初始裂缝数量（$N$）、非孤立裂隙数量（$N$）、连接流入/流出边界的裂缝占裂缝总数的百分比（$N/N$）、保留孤立裂缝时的裂缝强度（$P_{32}$），以及移除孤立裂缝时的裂缝强度（$P_{32}$）。裂缝强度定义为

$$P_{32} = \frac{1}{V} \sum S_f, \tag{6}$$

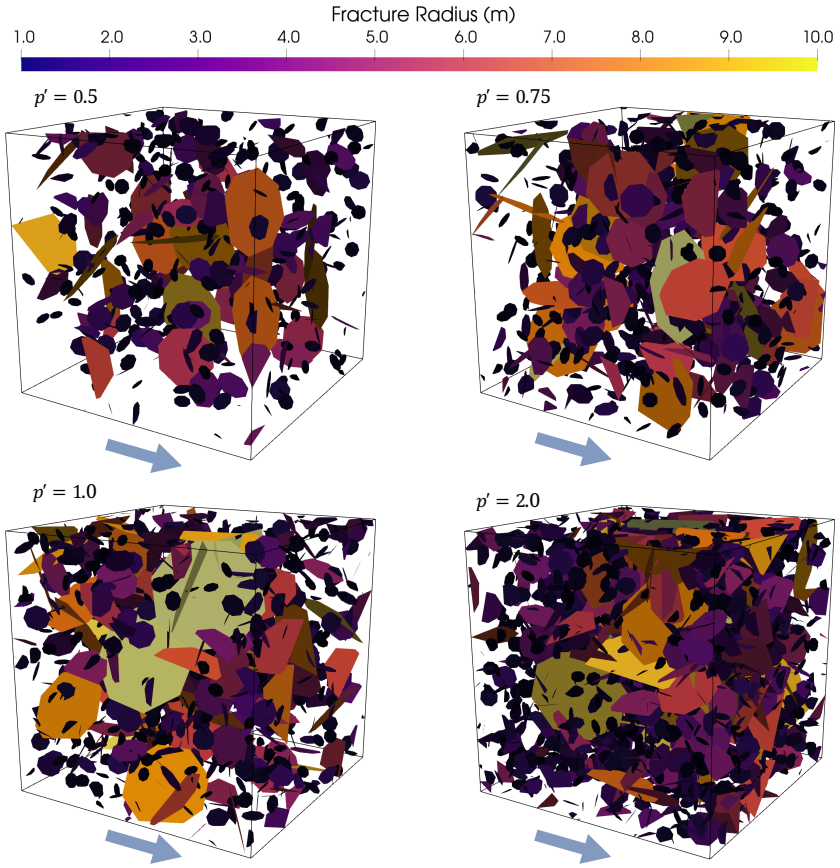



图 1：本文所考虑的各密度下的网络实现（$p' = 0.5$，0。75，1。0 和 2。0）。裂缝半径以颜色编码，以突出模拟中长度尺度的范围。当网络密度低于渗流阈值（$p' < 1$）时，裂缝网络通常无法在流入和流出边界之间连通。对于高于渗流阈值（$p' > 1$）的网络，我们可以清楚地看到至少一条连接流入和流出边界的路径。随着密度增加，裂缝数量增加，因此穿过裂缝网络的可能路径数量也随之增加。

其中， $S_f$ 为裂缝表面积，对网络中的所有裂缝求和；V 为区域总体积。 $P_{32}$ 的单位为 $\mathrm{m}^{-1}$。由于所有网络生成参数均固定，放置在区域内的初始裂缝数量与所选密度成正比增加，参见（5）。对于 $p' = 0.5$ 和 0.75 的情况，移除孤立裂缝后区域内不再有裂缝，且 $P_{32} = 0$。因此，对于这两种密度，我们仅考虑保留所有裂缝的情况，

否则，上尺度后的连续介质将完全由基质单元组成。对于渗流网络，$p' \geq 1$，初始网络中保留下来的比例随密度略有增加，但变化方式并不像最初置于区域中的裂缝总数那样呈线性变化。同样，网络形成渗流后，裂缝强度也会增加。

### 2.2 UDFM

生成网络后，我们使用 Sweeney 等人 [52] 提出的 UDFM 方法，将其上尺度为单一连续介质模型。UDFM 方法主要包括两个步骤：(1) 创建分辨率可变的连续介质网格；(2) 将裂缝的水力属性（例如开度、表面积和体积）与背景基质的渗透率和孔隙度值相结合。下面着重介绍每个步骤的主要内容。模型的完整细节及验证示例见 [52]。

#### *2.2.1* 网格剖分

给定一个离散裂缝网络，UDFM 方法采用八叉树细化，生成空间变化的 Delaunay 四面体网格；网格分辨率取决于网格到离散裂缝网络中裂缝的距离，即越靠近裂缝，网格细化程度越高。裂缝附近较高的分辨率能够表示较小的长度尺度，进而解析流动与运移模拟中的局部梯度，而最大梯度出现在裂缝附近。网格生成的控制参数为初始网格单元的边长（$l$）以及最终连续介质网格所需的细化级别数（$orl$ ）。初始网格尺寸也是区域内最大的。网格划分算法首先生成边长为 $l$ 的均匀六面体网格。初始网格中与离散裂缝网络内裂缝相交的单元标记为裂缝单元，而未与裂缝相交的单元则标记为基质 单元。所有

表 1：网络表征：无量纲网络密度（$p'$），初始$\widehat{\ }$裂缝数量（$N$），非孤立裂缝数量（$N$），连接流入/流出边界的裂缝占总裂缝数量的百分比（$\widehat{\ }$）（$N/N$），保留孤立裂缝时的裂缝强度（$P_{32}$），移除孤立裂缝时的裂缝强度（$\widehat{\ }$）（$P_{32}$）。

| $p'$ | $N$ | $\widehat{N}$ | $\widehat{N}/N$ | $P_{32}$ [米$^{-1}$] | $\widehat{P_{32}}$ [米$^{-1}$] |
|---|---|---|---|---|---|
| 0.50 | 500 | 0 | 0.0 % | 0.128 | 0 |
| 0.75 | 750 | 0 | 0.0 % | 0.211 | 0 |
| 1.00 | 1000 | 68 | 6.8 % | 0.261 | 0.046 |
| 1.50 | 1500 | 213 | 14.2 % | 0.425 | 0.124 |
| 2.00 | 2000 | 286 | 14.3 % | 0.492 | 0.131 |

将裂缝单元及其邻居（与裂缝单元共享一个面的单元）细化为八个边长为 $l/2$ 的子六边形，以创建子网格。此过程递归执行，直到获得所需的$orl$ 。然后将最终细化的六面体网格转换为 Delaunay 四面体网格，其对偶网格为 Voronoi 镶嵌，可用于两点通量模拟代码。

在这些模拟中，我们固定 $l = 5$ m，仅考察$orl$ 取值变化的影响。需要注意的是， $l$ 和$orl$ 的不同取值组合，可能会使裂缝附近具有相同的分辨率。例如，采用 $l = x$ 和 $orl = y$ 生成的网格，其最精细网格分辨率与采用 $l = 2x$ 和 $orl = y + 1$或 $l = x/2$ 和$orl = y - 1$生成的网格相同，但总单元数不一定相同。通常，最好平衡网格剖分与模拟的计算负荷，这意味着用户必须事先确定各参数对分辨率和细化的适当贡献，而这本身也可能因网络而异。根据以往的研究，我们知道，超过$orl = 4$会使网格划分算法出现瓶颈；但若起始的 $l$ 过小，则会使细化失去意义，生成的网格单元过多，超出常见模拟工具的处理能力 [52]。因此，我们选择八叉树细化级别$orl = 1$，2，3，和 4。图 2 展示了 $p' = 1.5$ 网络的网格。随着八叉树细化级别提高，连续介质网格对裂缝的解析更加精细。尽管$orl$ 取值较大时计算开销更高，但能更好地以连续介质表示离散裂缝网络。

### *2.2.2* 虚假连接

将离散裂缝网络映射到 ECPM 时，可能会在裂缝之间产生虚假连接。我们将连续介质网格中的虚假连接定义为：在离散裂缝网络中不相交的两条裂缝，在连续介质网格中被上尺度到同一个控制体单元。图 3 以二维示意图解释了虚假连接。左上子图展示了裂缝原始网络，灰色线条代表裂缝。该网络中，左侧和右侧区域边界之间只有一条通道。右上子图展示了一个连续介质网格，其中网格中的裂缝单元为灰色，基质单元为白色。请注意，为简化示意，此处采用了均匀四边形网格。在这种情况下，上尺度网格保留了离散裂缝网络的底层拓扑。右下子图展示了另一个分辨率较粗的连续介质网格。此时，区域底部产生了一个虚假连接（以红色星号标示），使裂缝流可以沿两条通道流动，而不再只有一条。

UDFM 方法的一个主要设计目标是通过采用空间可变的网格分辨率，尽量减少虚假连接的发生，同时尽量减少网格单元的数量，进而降低模拟的计算成本。这两个目标彼此冲突。选择一个 $orl$ 值可以在一定程度上控制虚假连接的数量，但

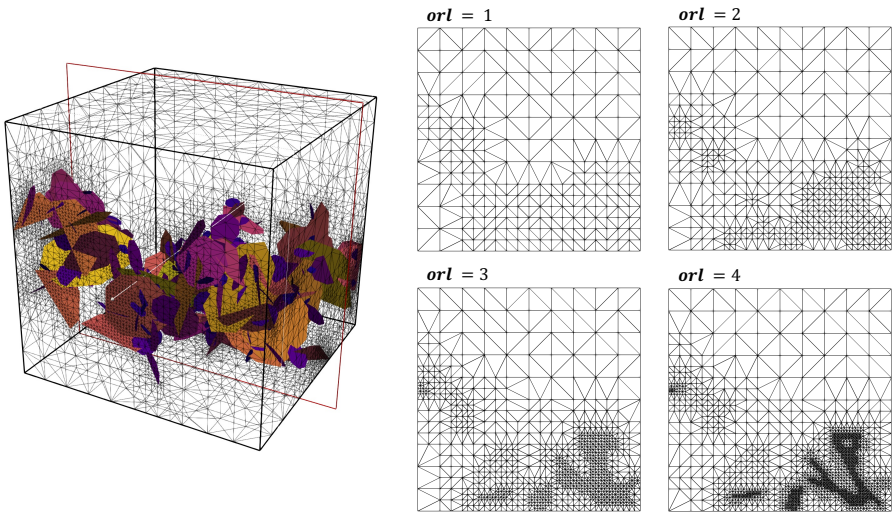



图 2：对密度为$p' = 1.5$的裂缝网络应用的网格细化级别。随着八叉树细化级别的提高，可以看到各条裂缝的分辨效果越来越好。这使网格剖分的计算需求更高，但减少了虚假连接的数量，并能够更准确地表征该系统的流动与传输性质。

无法将其完全消除。与均匀分辨率网格相比，UDFM 方法的优势在于，借助可变细化，在区域内达到相同数量的虚假连接所需的单元要少得多。表 2 汇总了不同细化级别和所有密度值下的虚假连接及网格信息：虚假连接总数（#f）、存在虚假连接的单元数（fc）、Voronoi单元总数（vc）、存在虚假连接的Voronoi单元百分比（fc/vc $\times$ 100）。此外，还列出了等效均匀分辨率六面体网格中的单元数（n），以及计算成本对比（vc/n $\times$ 100），以体现网格单元数量的减少；这进而降低了计算物理模拟中的自由度和总体成本。所谓等效均匀分辨率六面体网格，是指使用尺寸等于八叉树细化级别所生成的最小六面体尺寸的六面体对区域进行网格剖分。等效六面体单元数（$n$）由下式给出

$$n = \left( \frac{L}{\delta x} + 1 \right)^3, \qquad \text{where} \qquad \delta x = \frac{l}{2^{orl}}, \tag{7}$$

其中， $L$是区域边长，L $= 50$。第一个表达式中的加一项是为了计入区域边界的端点。

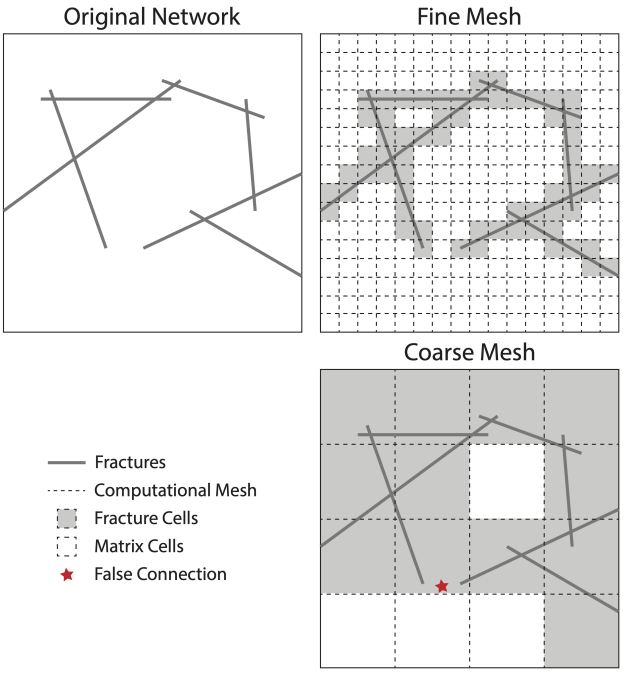



图3：虚假连通如何改变 ECPM网格 中连通性的示例。在原始网络中，只有一条连接左右边界的渗流通道。使用精细的 ECPM网格 表示该网络时，能够保留正确的连通性；而使用较粗的 ECPM网格 表示该网络时，区域下半部会出现一条人工连接。

随着$orl$ 增大，虚假连接的数量如预期般单调递减。随着$orl$ 值增大，相邻$orl$ 值对应的虚假连接数量之差逐渐减小，也就是说，$orl = i$ 与$orl = i + 1$ 之间的差值大于$orl = i + 1$ 与$orl = i + 2$之间的差值。对于所有观测到的密度，无论保留还是移除孤立裂缝，情况均是如此。移除孤立裂缝也会影响虚假连接的数量。与移除孤立裂缝的情况相比，保留孤立裂缝时，包含虚假连接的沃罗诺伊单元所占比例更高。不过，随着$orl$ 增大，两种情况之间的差异会缩小。到$orl = 3$时，两者的数值已十分接近。同样，在$orl$ 值较低时，保留孤立裂缝情况下的 UDFM 网格尺寸与等效六面体网格相当；而移除孤立裂缝时，UDFM 网格尺寸则显著更小。即使在$orl = 1$时，UDFM 网格的单元数量也比等效六面体网格少 50%。随着$orl$ 增大，在这两种情况下，UDFM 网格相对于等效六面体网格的尺寸都会进一步减小。

网络密度还会影响虚假连接的数量以及$orl$ 值。随着密度增加，虚假连接的数量也会增加，这是意料之中的，因为区域中的裂缝更多，并且它们之间的距离可能更近。

表 2：不同网络密度 $p'$下$orl$ 值对应的 UDFM 网格信息，其中 $n$ 表示等效六面体单元数量。虚假连接数量（#f）、存在虚假连接的单元数量（fc）、Voronoi单元总数（v）、存在虚假连接的Voronoi单元百分比（fc/vc[%]），以及与等效六面体网格相比的相对网格尺寸（vc/n[%]）。

| | 保留孤立裂缝 | | | | | 移除孤立裂缝 | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $p'$ | #f | fc | vc | fc/vc[%] | vc/n[%] | #f | fc | vc | fc/vc[%] | vc/n[%] |
| $orl = 1$, $n = 9,261$ | | | | | | | | | | |
| 0.50 | 1277 | 2414 | 9106 | 26.51 | 98.33 | - | - | - | - | - |
| 0.75 | 2892 | 4193 | 9254 | 45.31 | 99.92 | - | - | - | - | - |
| 1.00 | 5051 | 5472 | 9261 | 59.09 | 100.00 | 178 | 546 | 2894 | 18.87 | 31.25 |
| 1.50 | 11693 | 7386 | 9261 | 79.75 | 100.00 | 921 | 1601 | 4796 | 33.38 | 51.79 |
| 2.00 | 19988 | 8313 | 9261 | 89.76 | 100.00 | 1711 | 1817 | 4947 | 36.73 | 53.42 |
| $orl = 2$, $n = 68,921$ | | | | | | | | | | |
| 0.50 | 429 | 2219 | 48173 | 4.61 | 69.90 | - | - | - | - | - |
| 0.75 | 980 | 4723 | 59832 | 7.89 | 86.81 | - | - | - | - | - |
| 1.00 | 1731 | 7771 | 63556 | 12.23 | 92.22 | 68 | 951 | 10344 | 9.19 | 15.01 |
| 1.50 | 4044 | 15423 | 67448 | 22.87 | 97.86 | 377 | 3267 | 22265 | 14.67 | 32.31 |
| 2.00 | 6682 | 21194 | 68621 | 30.89 | 99.56 | 696 | 4198 | 23192 | 18.10 | 33.65 |
| $orl = 3$, $n = 531,441$ | | | | | | | | | | |
| 0.50 | 185 | 2041 | 180748 | 1.13 | 34.01 | - | - | - | - | - |
| 0.75 | 380 | 5052 | 251389 | 2.01 | 47.30 | - | - | - | - | - |
| 1.00 | 674 | 8328 | 291311 | 2.86 | 54.82 | 29 | 1439 | 41962 | 3.43 | 7.90 |
| 1.50 | 1517 | 19700 | 375706 | 5.24 | 70.70 | 175 | 5555 | 101790 | 5.46 | 19.15 |
| 2.00 | 2551 | 28360 | 415901 | 6.82 | 78.26 | 286 | 6868 | 107001 | 6.42 | 20.13 |
| $orl = 4$, $n = 4,173,281$ | | | | | | | | | | |
| 0.50 | 88 | 2372 | 645384 | 0.37 | 15.46 | - | - | - | - | - |
| 0.75 | 188 | 6629 | 957724 | 0.69 | 22.95 | - | - | - | - | - |
| 1.00 | 288 | 10740 | 1152954 | 0.93 | 27.63 | 17 | 2320 | 167433 | 1.39 | 4.01 |
| 1.50 | 669 | 27814 | 1621138 | 2.03 | 38.85 | 84 | 9249 | 433255 | 2.13 | 10.38 |
| 2.00 | 1129 | 37769 | 1856458 | 2.03 | 44.48 | 145 | 10823 | 460370 | 2.35 | 11.03 |

表 2 给出了局部/基于单元的虚假连接测量结果。然而，虚假连接也会影响全局/网络尺度连通性。一系列局部虚假连接可能相互结合，在底层网络并未连通的情况下，形成一条穿过 UDFM 域、连接裂缝单元流入和流出边界的通道；参见图 3 所示粗网格示例中形成的底部通道。创建 UDFM 网格后，我们会查询网格的连通性，以及裂缝单元是否通过该区域发生渗流，即 UDFM 网格中是否存在一组裂缝单元，将流入和

流出边界连接起来。表 3 给出了 UDFM 网格与离散裂缝网络渗流的比较结果。对于渗流网络， $p' \geq 1$，其拓扑性质在所有 $orl$ 值下均匹配。然而，对于非渗流网络， $p'$=0.5、0.75，UDFM 的拓扑仅在最高细化级别 $orl = 4$ 时与离散裂缝网络匹配。

表 3：UDFM 网格与离散裂隙网络渗流的比较。图例：“+”表示 UDFM 发生渗流，“-”表示 UDFM 网格未发生渗流。绿色——对于渗流网络，UDFM 网格拓扑与离散裂隙网络拓扑一致。黄色——对于非渗流网络，UDFM 网格拓扑与离散裂隙网络拓扑一致。红色——UDFM 网格拓扑 **不**与离散裂隙网络拓扑一致。

| 保留孤立裂缝 | | | | | 移除孤立裂缝 | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $p'$ | $orl = 1$ | $orl = 2$ | $orl = 3$ | $orl = 4$ | $p'$ | $orl = 1$ | $orl = 2$ | $orl = 3$ | $orl = 4$ |
| 0.5 | + | + | + | - | 0.5 | | | | |
| 0.75 | + | + | + | - | 0.75 | | | | |
| 1.0 | + | + | + | + | 1.0 | + | + | + | + |
| 1.5 | + | + | + | + | 1.5 | + | + | + | + |
| 2.0 | + | + | + | + | 2.0 | + | + | + | + |

### *2.2.3* 上尺度/等效水力性质

对区域进行网格剖分后，需要确定每个单元的上尺度/等效水力性质、渗透率和孔隙度。在 UDFM 模型中，我们将利用裂隙开度、孔隙度和坐标变换矩阵的线性叠加构造满秩二阶渗透率张量，并取其谱半径作为 Voronoi单元的等效渗透率。每个裂缝单元的渗透率和孔隙度取决于控制体内裂缝的体积，该体积通过计算每个控制体内各裂缝的交面积，以及由其法向量分量定义的裂缝取向来确定。裂缝的开度（$b_f$, [m]）由公式（3）给出，控制体内裂缝的表面积（$a_f$, [m$^2$]）通过计算几何直接测量，单条裂缝的体积（$v_f$, [m$^3$]）由二者的乘积给出

$$v_f = a_f \cdot b_f \,. \tag{8}$$

将 $v_f$ 除以单元总体积（$v_c$, [m$^3$]），即可得到基于单元的裂隙孔隙度（$\phi^f$, [-]）

$$\phi_f = \frac{v_f}{v_c} \,. \tag{9}$$

裂缝法向量的分量 $\mathbf{n_f} = \{n_1, n_2, n_3\}$ 用于定义该裂缝对应的坐标变换张量

$$\mathcal{A}_f = \begin{bmatrix} (n_2)^2 + (n_3)^2 & -n_1 n_2 & -n_3 n_1 \\ -n_1 n_2 & (n_3)^2 + (n_1)^2 & -n_2 n_3 \\ -n_3 n_1 & -n_2 n_3 & (n_1)^2 + (n_2)^2, \end{bmatrix} \tag{10}$$

然后，通过对与该单元相交的所有裂缝的这些项进行线性叠加，在连续介质网格的每个控制体中定义等效裂缝渗透率张量（$\mathbf{K}_F$, $[\mathrm{m}^2]$）

$$\mathbf{K}_F = \frac{1}{12} \sum_{f=1}^{N} \phi_f \mathcal{A}_f b_f^2 \,. \tag{11}$$

请注意，$\mathbf{K}_F$ 是一个 3×3 满秩二阶（并矢）张量，该公式大致基于立方定律。鉴于大多数流动与运移代码无法处理非结构网格上的各向异性渗透率张量，我们取$\mathbf{K}_F$ 的最大特征值（$\lambda$）作为该单元的单一等效裂缝渗透率，

$$K_F = \rho(\mathbf{K}_F), \tag{12}$$

其中， $\rho$（$\mathbf{K}_F$）表示$\mathbf{K}_F$ 的谱半径，定义如下

$$\rho(\mathbf{K}_F) = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, |\lambda_3|\} \,. \tag{13}$$

同样，控制体内相交裂缝的总体积 $v_F$ $N$ 为各个体积之和

$$v_F = \sum_{f=1}^{N} v_f = \sum_{f=1}^{N} a_f \cdot b_f \,, \tag{14}$$

该值用于确定裂缝单元的等效孔隙度（$\phi_F$， [-]）

$$\phi_F = \frac{v_F}{v_c} \,. \tag{15}$$

最后，裂缝单元的等效渗透率是基质渗透率的加权算术平均值 $k_m$ 裂缝和

$$k = (1 - \phi_F) \cdot k_m + k_F, \tag{16}$$

其中，等效孔隙度由 $\phi_F$ 给出。方程 (15) 和 (16) 确保我们能对每个单元的流出体积通量进行正确建模，同时将运移限制在裂缝中。Sweeney 等人 [52] 验证了该方法在概念上与解析解一致。我们采用的基质孔隙度值为 $\phi_m = 0.01$。这些数值处于结晶岩的观测范围内，我们的裂缝网络生成参数也大致以此为依据 [30, 58]。网格中的基质单元直接赋予 $k_m$ 和 $\phi_m$ 的值。

### 2.3 流动与运移模拟

生成带有水力参数的单连续介质网格后，便对流动与运移进行模拟。我们使用大规模并行流动与反应代码 PFLOTRAN 执行这些模拟 [42]。我们模拟溶质在区域内稳态等温流动中的运移。我们通过沿 $x$ 轴施加 0.001 MPa 的压力差，驱动流体流经该区域。侧边界采用诺伊曼无流边界条件，这些模拟中不考虑重力。压力分布采用达西定律建模

$$\mathbf{q} = -\frac{k}{\mu}\nabla P \tag{17}$$

其中，$\mathbf{q}$ 为达西通量 [m/s]，$k$ 为渗透率 [m$^2$]，$\mu$ 为流体黏度 [Pa s]，，$P$ 为流体压力 [Pa]。模拟中流体温度设为 $20^\circ$ C，对应的黏度为 $\mu$ =8.9e $-4$ Pa s，适用于所考虑的压力值。达到稳态后，我们可以对（17）式求逆，从而得到该区块有效渗透率的数值估计

$$k_{\mathrm{eff}} = -\mu\frac{\mathbf{q}}{\nabla P}\,. \tag{18}$$

$k_{\mathrm{eff}}$ 右侧的数值可直接从模拟中观测得到。

我们采用欧拉描述对溶质运移进行建模。我们考虑保守型、衰变型和吸附型示踪剂。浓度为 $C(t,\mathbf{x})$ 的保守型（非反应性）示踪剂，其运动由下式控制

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi C + \boldsymbol{\nabla}\cdot\Big(\boldsymbol{q}C - \varphi D\boldsymbol{\nabla}(C)\Big) = 0, \tag{19}$$

其中，$D$ 为弥散系数，此处仅由分子扩散系数定义，取值为 $10^{-9}$ m$^2$/s。衰变型示踪剂（$\varphi C^*$）的运动由下式控制

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi C^* + \boldsymbol{\nabla}\cdot\Big(\boldsymbol{q}C^* - \varphi D\boldsymbol{\nabla}(C^*)\Big) = -\lambda\varphi C^*, \tag{20}$$

其中，$\lambda$为衰变速率常数 [1/s]，，用于设定100年的半衰期。阻滞系数为（$R$, [-]）的吸附示踪剂（$\varphi C'$）的运移受以下方程控制：

$$\frac{\partial}{\partial t}\varphi C' + \frac{1}{R}\boldsymbol{\nabla}\cdot\Big(\boldsymbol{q}C' - \varphi D\boldsymbol{\nabla}(C')\Big) = 0. \tag{21}$$

阻滞系数 $R$ 表示为

$$R = 1 + \frac{1}{\varphi s_l \rho_w}K^D, \tag{22}$$

其中， $s_l$ 为液体饱和度 [-]， $\rho_w$ 为水密度 [kg/m$^3$], , $K^D$ 为分配系数 [kg/m$^3$]。孔隙度会根据放大后的孔隙度值在区域内变化。分配系数表示吸附相浓度与水相浓度之比。这里，我们将分配系数设为 $R = 4 \cdot 10^3$。

所有示踪剂均遵循以下初始条件和边界条件。初始时，区域内没有示踪剂（$\Omega$）

$$C(0, \mathbf{x}) = 0 \qquad \forall \qquad \mathbf{x} \in \Omega. \tag{23}$$

通过脉冲注入，将示踪剂均匀地注入整个入口面（$\Gamma_I$），使其进入区域

$$C(0, \mathbf{x}) = C_0 \delta(0, \mathbf{x}) \qquad \forall \qquad \mathbf{x} \in \Gamma_I \,, \tag{24}$$

其中， $\delta$(0，x) 是作用于入口面、时间为 $t = 0$ 时的狄拉克δ函数。流入边界采用零梯度边界条件，以防止溶质沿该方向扩散出区域。流出边界（$\Gamma_O$）采用吸附边界条件。所有其他边界均为反射边界。运移模拟持续运行 $10^8$ 年。

我们测量流出边界处示踪剂质量流量（mol/yr）随时间的变化，并将其称为穿透曲线（BTC）。我们用注入系统的初始示踪剂质量（mol）对这些测量值进行归一化。对于保守示踪剂，时间以 BTC 的峰值到达时间为基准进行归一化，适用于$orl = 1$。这些归一化处理便于比较不同示踪剂类型（保守型、衰变型和吸附型）、$orl$ 值、裂隙密度，以及保留或移除孤立裂缝的情况。

## 3 结果

在本节中，我们首先报告有效渗透率的测量结果。接下来，我们讨论在网络集合中获得的穿透曲线。

### 3.1 有效渗透率

我们使用数值解填充公式（18）的右端项，从而获得每个实现的有效渗透率估计值 $k_{\text{eff}}$ 。对于这些样本，我们将基质渗透率设为 $1 \cdot 10^{-16}$ m$^2$。这些数值绘于图4的顶部一行，其中左侧为“保留孤立裂缝”的实现，右侧为“移除孤立裂缝”的实现。每条线对应一个密度值 $p'$。由于将更多具有较高渗透率的裂缝置于区域中， $k_{\text{eff}}$ 的数值会随 $p'$值的增加而增大。在所有情况下， $k_{\text{eff}}$ 的数值都会随$orl$ 值的增加而单调减小。请注意，背景基质渗透率为 $10^{-16}$ m$^2$, , 这为 $k_{\text{eff}}$提供了下界。后续$orl$级别之间的 $k_{\text{eff}}$ 差异

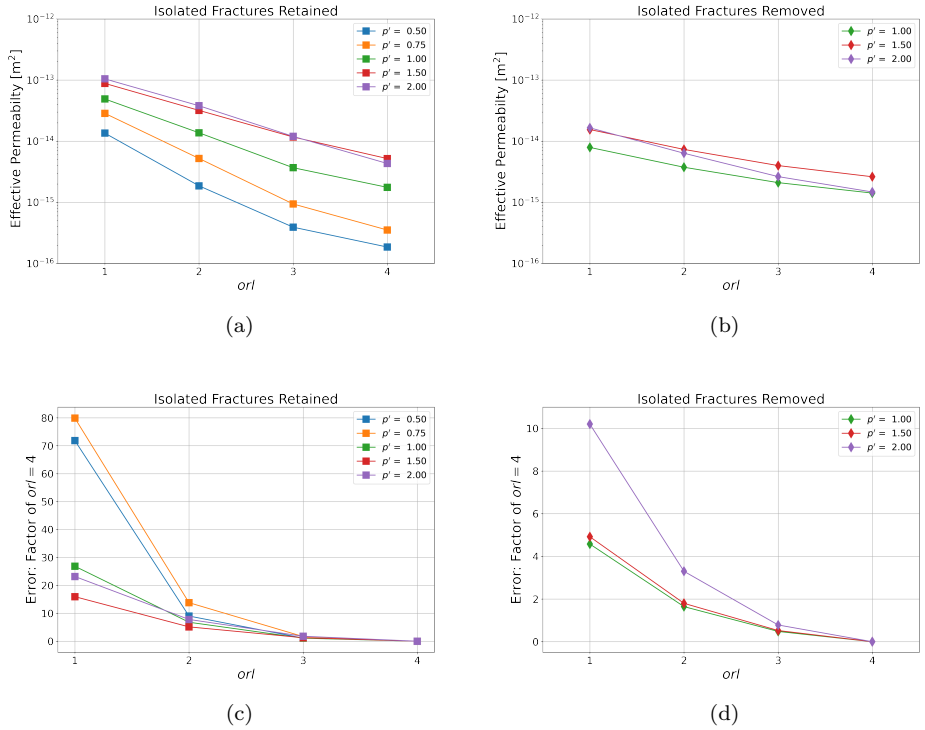



图 4：基质渗透率为 $1 \cdot 10^{-16}\,\mathrm{m}^2$ 时，不同$orl$ 值下样本的有效渗透率。(a) 保留孤立裂缝——有效渗透率 (b) 移除孤立裂缝——有效渗透率 (c) 保留孤立裂缝——有效渗透率的误差因子。(d) 移除孤立裂缝——有效渗透率的相对误差。

会随着$orl$ 的增加而减小，这表明当细化级别足够多时，应会收敛到一个相对稳定的值。由于计算限制，对于较高的密度值 $p'$，无法扩展至更高的$orl$ 以确定该值。尽管如此，我们通过根据定义计算$orl$ =1,2,3相对于使用$orl$ =4 获得的值的相对差异／误差（$e_i$），来考察收敛速率

$$e_i = \left| \frac{k^i_{\text{eff}} - k^4_{\text{eff}}}{k^4_{\text{eff}}} \right|, \tag{25}$$

其中， $k^i_{\text{eff}}$ 表示$orl$ =i处的有效渗透率。这些值绘于图4的下排。对于“保留孤立裂缝”的情况，误差值似乎随$orl$ 值增加而呈指数级下降。报告的$orl$ =1 误差范围为$orl$ = 4误差的 $\approx 15-80$ 倍，其中最高值出现在非渗流网络中，$p' < 1$。随着我们增加数量

的细化级别，误差随之减小；当$orl = 3$时，所有估算值均小于 2。鉴于其绝对值较小，$\mathcal{O}(10^{-14} - 10^{-15})$，这些估算值可能可以接受。对于“移除孤立裂缝”的情况，误差值也随$orl$增加而呈指数级下降。在此，较低$orl$级别下得到的估算值，与“保留孤立裂缝”情况下的对应值相比，更接近$orl = 4$ 值。对于$orl = 3$，这些值小于 1。

图 5 给出了在保留孤立裂缝的情况下，针对 $p' = 0.50$ 和 $p' = 0.75$ 的其他基质渗透率值 $1{\cdot}10^{-12}\,\mathrm{m}^2$、$1{\cdot}10^{-14}\,\mathrm{m}^2$、$1{\cdot}10^{-16}\,\mathrm{m}^2$, 和 $1{\cdot}10^{-18}\,\mathrm{m}^2$ 得到的有效渗透率。我们仅考虑这些样本，因为它们低于渗流阈值，且 UDFM 网格与离散裂缝网络的拓扑不匹配。与前面的样本类似，有效渗透率随$orl$ 值增大而降低。不过，降低速率取决于背景基质渗透率。对于最高的渗透率值，与较低值相比，渗透率随$orl$ 值变化不大。在我们的模型设置中，典型的裂缝渗透率约为 $1 \cdot 10^{-9}\,\mathrm{m}^2$。因此，$k_m = 1 \cdot 10^{-12}\,\mathrm{m}^2$, 的情况中，区域相对均质。然而，对于最低的基质渗透率值，即 $1 \cdot 10^{-18}\,\mathrm{m}^2$, ，区域高度非均质，区域内的渗透率值相差近 10 个数量级。反过来，如果形成宏观尺度虚假连通（如这些情况所示），区域中便会出现一条高渗透率通道。这会导致有效渗透率误差达到 4 个数量级。尤为值得注意的是，$1 \cdot 10^{-18}\,\mathrm{m}^2$ 情况下的有效渗透率并未像其他情况那样趋于稳定。

## 3.2 突破曲线

本节讨论示踪剂随时间穿过区域出口面的突破曲线（BTC）。首先讨论网络无法渗流的两种密度（$p' = 0.5$ 和 0.75），然后讨论能够渗流的三种密度（$p' = 1.0$、1.5 和 2.0）。

### *3.2.1* $p' < 1$

图 6(a) 显示了密度为 $p' = 0.5$ 的裂缝网络中的突破曲线。我们首先描述保守示踪剂，其曲线以实线表示。对于八叉树细化级别 $orl = 1$，首先出现一个峰值，随后是示踪剂缓慢离开区域时形成的平台。对于八叉树细化级别 $orl = 2$ 和 3，会出现两个明显的峰值。第一个峰值对应于示踪剂通过裂缝的运移，随后出现的第二个峰值对应于示踪剂通过基质的运移。在 $orl = 4$ 下，只有一个峰值，其到达时间与 $orl = 2$ 和 3 中的次级峰值相同。回想一下，对于该密度，$orl = 1$、2 和 3 不仅存在大量虚假连接，而且 UDFM 模型的全局拓扑也与 DFN 不一致，即 UDFM 网格中的裂缝单元可以渗流通过整个区域，而 DFN 中的裂缝网络无法渗流通过，参见表 3。因此，

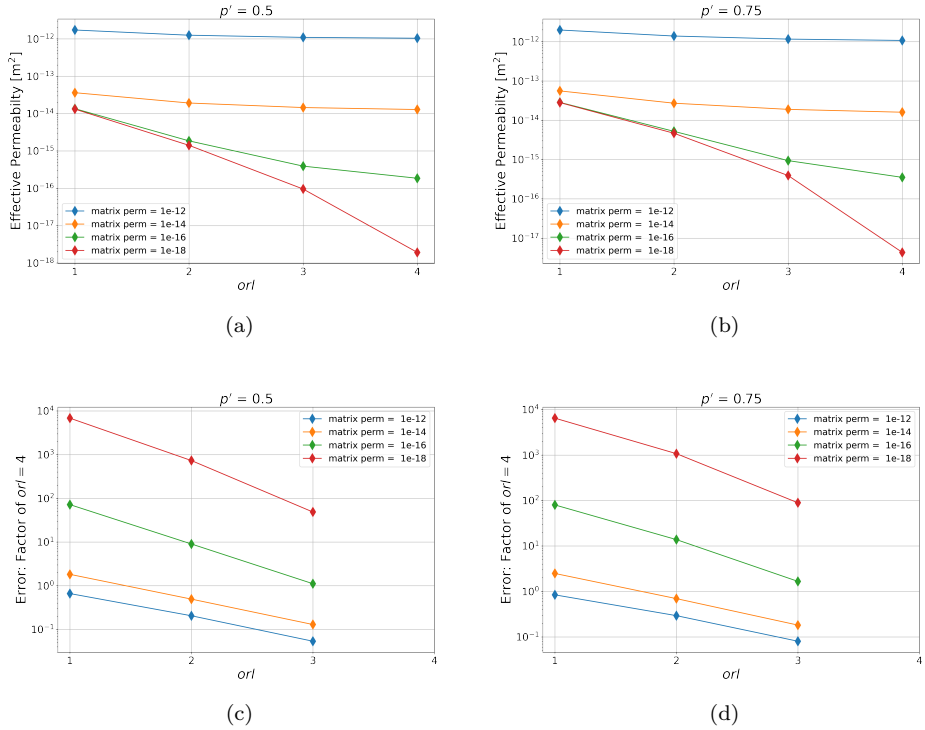
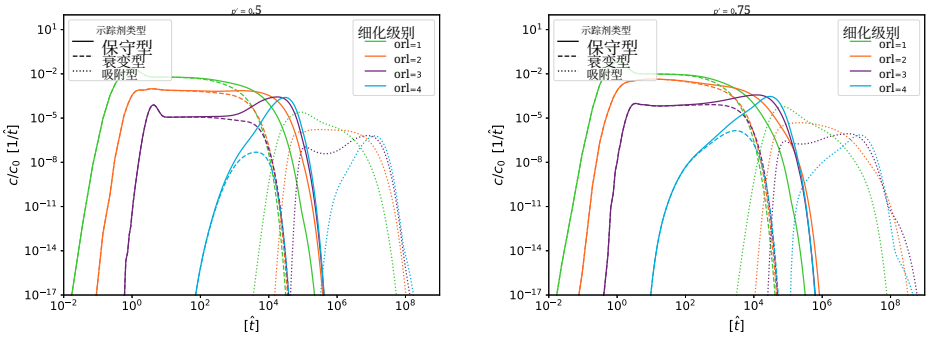



图 5：不同基质渗透率值下样本的有效渗透率。（a） $p'=0.5$ - 有效渗透率。（b） $p'=0.75$ - 有效渗透率。（c） $p'=0.50$ - 有效渗透率的误差因子。（d） $p'=0.75$ - 有效渗透率的误差因子。

对于 $orl$ =1、2 和 3，UDFM 模型中存在由裂缝单元组成的连通通道，从而导致较早出现峰值。然而，从物理角度看，示踪剂必须通过基质运移；对于 $orl$ =4，情况正是如此。对于衰变示踪剂，$orl$ =1、2 和 3 也会因示踪剂通过裂缝单元的运移而在示踪剂浓度曲线上出现初始峰值，但在我们观测到对应于示踪剂通过基质运移的第二个峰值之前，示踪剂已经发生衰变。对于 $orl$ =4，会出现示踪剂通过基质的峰值，但明显有所延迟。吸附性示踪剂的突破曲线大致类似于保守示踪剂曲线，但由于吸附作用而明显延迟，并且比保守示踪剂和衰变示踪剂的曲线更加分散。在通过基质排出时，由于延迟，示踪剂浓度的峰值高度显著降低。

在$orl$ =1时，所有示踪剂的到达时间都存在较大差异。对于移除了孤立裂缝的裂缝网络，当我们将八叉树细化级别从$orl$ =2 提高到$orl$ =4 时，保守型示踪剂的实际行为




(a) (b)

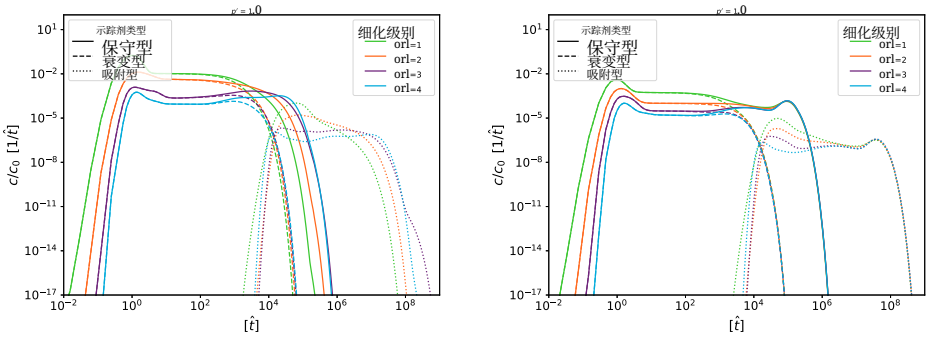
图6：保留孤立裂缝 (a) $p' = 0.50$ 和 (b) $p' = 0.75$。实线表示保守示踪剂，虚线表示衰变示踪剂，点线表示吸附性示踪剂。颜色对应 $orl$ 值：1 - 绿色，2 - 橙色，3 - 紫色，4 - 蓝色。

便显现出来——示踪剂浓度的初始峰值消失了，因为从流入边界到流出边界之间没有裂缝连通。

图6（b）展示了密度为 $p'$= 0.75的裂缝网络的突破曲线。与 $p'$= 0.5类似，DFN 不发生渗流，但$orl$ =1、2 和$orl$ =3UDFM 网格会发生渗流。总体而言，其行为与 $p'$= 0.5网络的观察结果非常相似。一旦 UDFM 模型的渗流结构与 DFN 相匹配，就会观察到基质主导输运。错误地发生渗流的模拟呈现双峰结构，表明初始峰值来自连通裂缝网络中的输运，而出口处的第二个峰值则由基质中的输运造成。吸附性示踪剂的突破曲线有所延迟，且与保守示踪剂存在一定差异，即其峰值不那么明显。

### *3.2.2* $p' \geq 1$

图7展示了 $p' = 1.0$ 的突破曲线：(a) 保留孤立裂缝；(b) 移除孤立裂缝。颜色和线型与图6相同。我们没有看到全局连通性变化导致突破曲线行为发生明显变化，而是观察到了局部连通性和网格细化变化的影响。尽管对于所有 $orl$ 值，UDFM 模型与离散裂缝网络的全局连通性都相对应，但局部虚假连通的数量会随着 $orl$ 值的增加而迅速减少，参见表 2。对于保留孤立裂缝的情况，在 $orl$ =1 时，59% 的控制体存在虚假连通；而在 $orl$ =4 时，这一比例不到 1%。在保留孤立裂缝且 $orl$ =1 的情况下，所有示踪剂类型均呈现单峰到达，并带有长尾。随着 $orl$ 增加，我们看到第二个由基质运移主导的峰开始形成，




(a) (b)

图7：密度为 $p' = 1.0$ 的裂缝网络中欧拉示踪剂的突破曲线。(a) 保留孤立裂缝；(b) 移除孤立裂缝。

这一后续峰很可能是由于网格细化使系统中的通道界定得更加清晰所致。

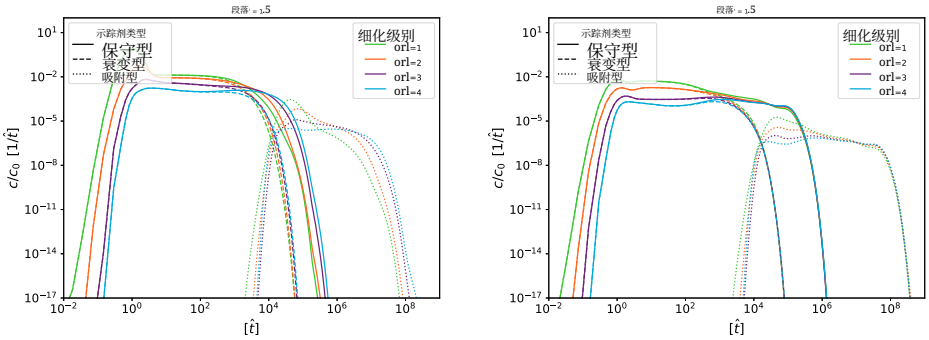
对于移除孤立裂缝的情况，随着$orl$增大，收敛更加明显。基质中的运移尤其如此，分布的尾部彼此重合。请注意，与保留孤立裂缝的情况相比，局部虚假连通的数量要少得多。

图8展示了 $p' = 1.5$ 的突破曲线。这些突破曲线在$orl$值的影响以及是否保留或移除孤立裂缝方面，表现出与图7大致相同的趋势。一个小小的区别是，后一个峰（对应于基质运移）并未出现同样的重合，两个峰之间的谷值也没有出现同样的变化。

图 9 展示了 $p' = 1.5$ 的突破曲线。在这里，随着 $orl$ 增加，突破曲线的收敛性比其他情况更加明显，尤其是在移除孤立裂隙的情况下。尽管保留孤立裂隙的情况总体上包含更多单元，但局部虚假连通和弥散会影响突破曲线的收敛。

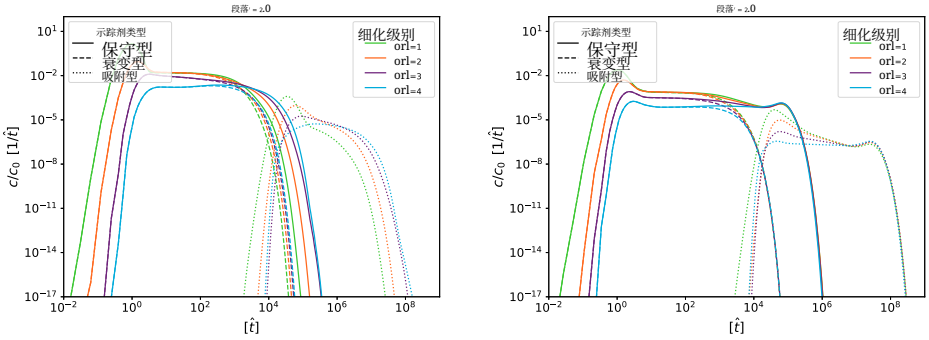
## 4 基质渗透率变化

图 10 和图 11 分别展示了四种基质渗透率值下 $p'= 0.5$ 和 $p'= 0.75$ 的穿透曲线。请注意，$k_m = 10^{-12}\mathrm{m}^2$ 值对应的区域相对均匀，这一点也反映在突破曲线中。这里的突破曲线看起来更像是脉冲穿过低方差多孔介质，而不是穿过裂缝系统。对于$orl = 1$，脉冲较宽，随后随着$orl$升高而变窄。渗透率足够高，因而我们无法看到衰变示踪剂中衰减率的影响。




(a) (b)

图8：密度为 $p' = 1.5$ 的裂缝网络中欧拉示踪剂的穿透曲线。 $c$ 是时刻 $\hat{t}$ 示踪剂的浓度， $c_0$ 是脉冲中的示踪剂总量。我们考察了以下裂缝网络中的溶质运移：（a）保留孤立裂缝；（b）移除孤立裂缝。




(a) (b)

图9：密度为 $p' = 2.0$ 的裂缝网络中欧拉示踪剂的穿透曲线。 $c$ 是时间 $\hat{t}$ 时示踪剂的浓度， $c_0$ 是脉冲中的示踪剂总量。我们考察了以下裂缝网络中的溶质运移：(a) 保留孤立裂缝，以及 (b) 移除孤立裂缝。

随着基质渗透率升高，嵌入式裂缝的影响开始显现，表现为网络尺度虚假渗流导致的虚假早期突破。这些结果表明，不仅拓扑

UDFM 网格很重要，但区域的非均质性与拓扑之间存在相互作用。

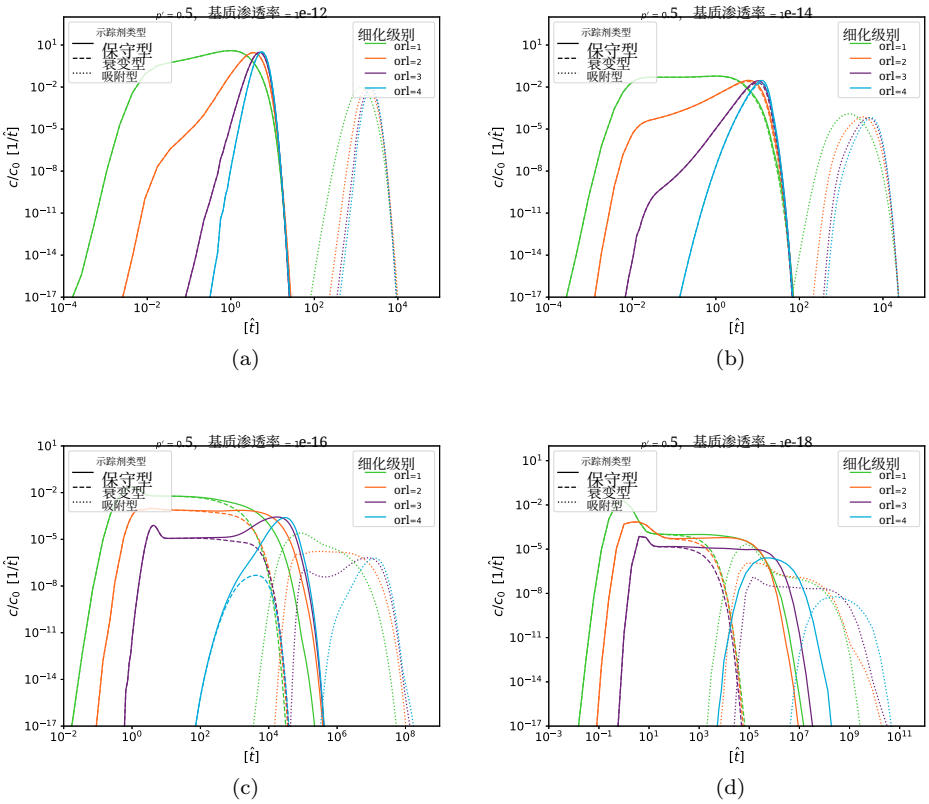



图10：密度为 $p' = 0.5$ 的裂缝网络在不同基质渗透率值下的突破曲线。(a) $k_m = 10^{-12}\text{m}^2$ (b) $k_m = 10^{-14}\text{m}^2$ (c) $k_m = 10^{-16}\text{m}^2$ (d)$k_m = 10^{-18}\text{m}^2$ 。

## 5 总结、讨论与结论

我们提供了一组数值模拟，用于表征网格细化级别对裂缝性多孔介质连续介质表示中流动与传输性质的影响。我们生成了一组不同密度的通用三维裂缝网络，其中裂缝半径取自截断幂律分布，分布参数

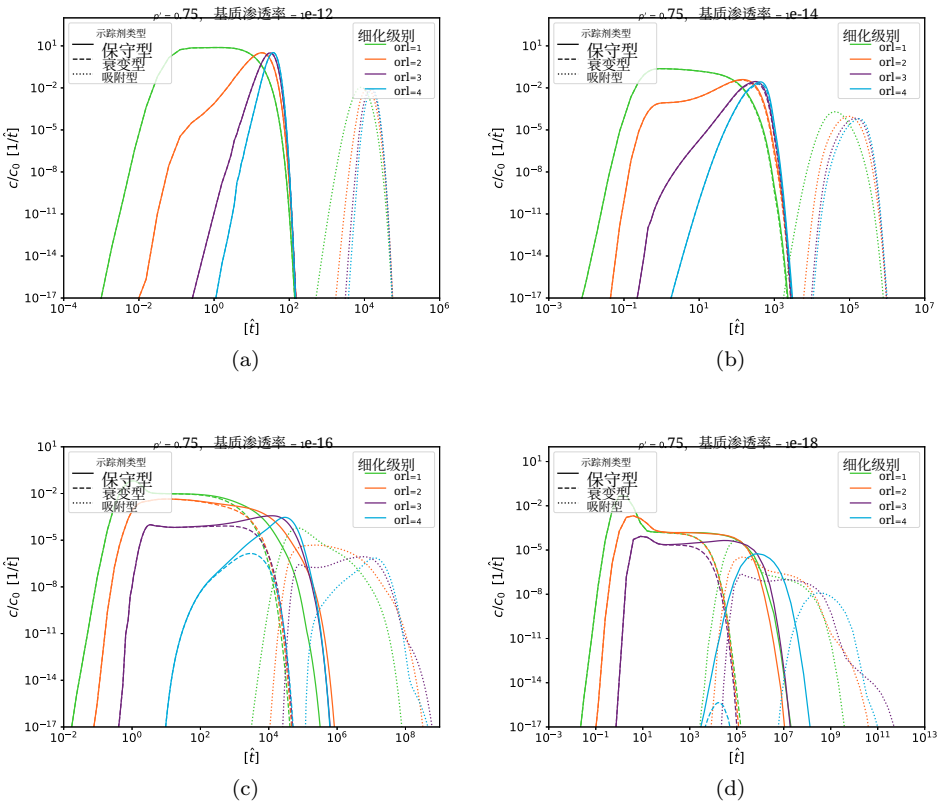



图 11：密度为 $p' = 0.75$ 的裂缝网络在不同基质渗透率值下的突破曲线。(a) $k_m = 10^{-12}\text{m}^2$ (b) $k_m = 10^{-14}\text{m}^2$ (c) $k_m = 10^{-16}\text{m}^2$(d) $k_m = 10^{-18}$ $\text{m}^2$ 。

大致依据现场场地表征确定。我们采用渗流理论定义的无量纲密度，考虑了五种网络密度：两种低于临界渗流值，一种等于该值，两种高于该值。对于每种密度，我们考虑了两个子情形。第一种情形中，我们考虑所有生成的裂缝组成的网络；第二种情形中，我们仅考虑相对于流动条件而言的非孤立裂隙和簇，即只保留连接流入和流出边界的裂缝簇。生成网络后，我们采用 Sweeney 等人提出的 UDFM 方法 [52]，将其上尺度化为单一连续介质模型。我们考虑了四种八叉树细化级别：$orl = 1$、2、3 和 4。我们考虑了每个区域内的稳态等温压力驱动流动，随后通过向区域内脉冲注入，模拟保守型、衰变型和吸附型示踪剂。

与移除孤立裂缝的情况相比，保留孤立裂缝会导致更多虚假连通，因此需要更多细化级别才能解析裂缝网络的真实结构。这在低密度情况下（$p' = 0.5$ 和 $p' = 0.75$）最为明显：我们发现，即使细化级别达到 $orl$ =3，也不足以消除网络中的虚假连通；此时 UDFM 网格发生了渗流，而实际上 DFN 并未渗流。这些全局虚假连通显著影响了有效渗透率的数值。$orl$ =1和 2 得出的估算值比$orl$ =4给出的结果高出多个数量级，而后者并未发生渗流。在 UDFM 模型与 DFN 的拓扑相匹配的情况下，$p' \geq 1$，两者的估算值差异较小。同样，在考察一系列有效渗透率值时，我们发现，UDFM 网格的拓扑固然重要，但区域的非均质性与拓扑之间也存在相互作用。对于基质渗透率较低的情况，有效渗透率估算的误差远高于基质渗透率较高的情况。

在运移方面，$orl$=1,2,3 对于 $p' = 0.5$和 $p' = 0.75$ 的保守示踪剂穿透曲线出现了异常峰值，这是由系统中的人工连接通道造成的。一旦 UDFM 网格的拓扑与 DFN 相匹配，就只会观察到较晚时刻的穿透，这与物理系统相符。随着裂缝网络密度增加，可能的渗流路径数量增多，因此虚假连接对穿透曲线形状的影响减弱。虽然全局拓扑相匹配，但网格的局部连通性仍发生了变化，穿透曲线也表现出更大的弥散。我们观察到双峰结构：第一个峰值略高于第二个峰值；第二个峰值出现时，大部分溶质已离开区域。第一个峰值是裂缝单元中流动与运移所致，而第二个峰值则是基质中运移所致。所有细化级别和密度下的穿透曲线在第二个峰值后均急剧衰减；对于所有高于渗流阈值的裂缝网络，曲线彼此重叠。对于衰变示踪剂，穿透曲线更窄，而且在大多数情况下，示踪剂在预期的基质主导穿透发生之前就已从系统中消失。对于非渗流网络，由于衰减率的影响，衰变示踪剂从未在预期时刻穿过基质。除此之外，衰变示踪剂的表现与保守示踪剂相似。对于渗流网络，与保守示踪剂和衰变示踪剂相比，吸附性示踪剂的首次到达时间有所延迟（约为 $10^4$）。考察非渗流网络时，我们发现首次到达时间随细化级别而显著增加。例如，细化级别为 $orl$ =1 时，首次到达时间约为 $10^4$；而细化级别为 $orl$ =3 和 $orl$ =4 时，首次到达时间最长可达 $10^6$。

在基质渗透率较高的情况下，突破曲线更像是脉冲穿过低方差多孔介质，而非穿过裂缝系统。对于$orl$ = 1，脉冲较宽，随后随着$orl$增大而变窄。随着基质渗透率升高，嵌入式裂缝的影响可从以下方面看出：

网络尺度虚假渗流导致的虚假早期突破。这些结果再次表明，UDFM 网格的拓扑结构不仅十分重要，区域的非均质性与拓扑结构之间也存在相互作用。

模拟结果指出，对裂缝网络进行上尺度处理时需要考虑几个关键因素。首要的是，选择合适的网格分辨率，使上尺度网格的全局拓扑与裂缝网络相匹配。如果上尺度网格中存在由裂缝（高渗透率）单元构成的连通通道，而裂缝网络中却不存在，那么有效渗透率和溶质突破的估算就会不准确。以往研究 ECPM 与离散裂缝网络之间一致性的工作，并未在分析中考虑这些全局拓扑变化 [32, 37]。为避免这种情况，识别裂缝网络和上尺度网格中的渗流通道，是建模过程中的重要环节。利用 networkX 等图论软件，可以轻松完成这类查询 [21], 。局部虚假连通也会影响输运行为，但其影响程度低于全局连通性错误的情况，这与以往研究结果一致 [32, 37]。系统中的这些小型短路会增加溶质羽的弥散；保留孤立裂缝时，这类短路更容易出现。我们没有区分由虚假连通本身造成的弥散与由网格尺寸和数值格式造成的数值弥散，但这一问题值得在未来研究中探讨。虚假连通无法彻底消除，但可以通过网格分辨率加以控制。虽然采用均匀网格分辨率较为简单，但这种方法可能导致小单元数量多到难以处理。另一方面，采用八叉树网格划分以实现足够的细化程度，可以减少计算单元数量（总体单元数最多可减少 90%），但网格生成过程更为繁琐。

裂缝性多孔介质的计算表示仍是地下流动与传输建模中的复杂环节。尽管随着多维离散裂缝模型、kinematicDFN、嵌入式裂缝基质模型以及热-水-力-化学耦合模型的引入，数值模型正迅速发展
[1, 2, 3, 4, 7, 10, 13, 14, 17, 19, 31, 36, 41,43, 47, 49, 50, 53, 55],，但网格生成仍是所有建模工作的关键步骤。因此，除了考察数值格式的标准收敛性之外，持续研究网格剖分技术对物理现象的影响，仍是建模工作不可或缺的一环。未来的研究应着重探讨网格剖分方法的影响如何与各种上尺度技术及上述建模方法相互作用。

**致谢** JDH、MRS 和 HSV 感谢美国能源部（DOE）基础能源科学计划（LANLE3W1）提供支持。JDH、MRS 和 HSV 还衷心感谢洛斯阿拉莫斯国家实验室 LDRD 计划办公室提供的资助，资助编号为 #20220019DR。AP 感谢洛斯阿拉莫斯国家实验室非线性研究中心。洛斯阿拉莫斯国家实验室由 Triad National Security, LLC 代表美国能源部国家核安全管理局运营（合同编号：89233218CNA000001）。本研究部分由美国能源部核能办公室乏燃料与废物科学技术（SFWST）计划资助。

计划。本研究属于美国能源部核能办公室的计划。桑迪亚国家实验室是一所多任务实验室，由桑迪亚国家技术与工程解决方案有限责任公司管理和运营；该公司是霍尼韦尔国际公司全资拥有的子公司，代表美国能源部国家核安全管理局依据合同 DE-NA-0003525 开展工作。本文所表达的观点不一定代表美国能源部或美国政府的观点。编号为 LA-UR-23-20307。

## 6 数据可用性

本研究期间生成和/或分析的数据集，可在合理请求后向通讯作者获取。

## 7 声明

作者声明，与本文内容相关的利益冲突不存在。

## 参考文献

1. Ahmed R、Edwards MG、Lamine S、Huisman BA、Pal M（2015）控制体分布式多点通量近似与低维裂缝模型的耦合。《计算物理学杂志》284：462–489 2. Ahmed R、Edwards MG、Lamine S、Huisman BA、Pal M（2015）三维控制体分布式多点通量近似与低维表面裂缝模型的耦合。《计算物理学杂志》303：470–497 3. Antonietti PF、Formaggia L、Scotti A、Verani M、Verzott N（2016）裂缝性多孔介质中流动的拟协调有限差分近似。ESAIM：数学建模与数值分析 50(3)：809–832 4. Arraras A、Gaspar FJ、Portero L、Rodrigo C（2019）裂缝性多孔介质中单相流的混合维几何多重网格方法。SIAM科学计算杂志 41(5)：B1082–B1114 5. Berkowitz B、Balberg I（1993）渗流理论及其在地下水水文学中的应用。《水资源研究》29(4)：775–794 6. Berre I、Doster F、Keilegavlen E（2019）裂缝性多孔介质中的流动：概念模型与离散方法综述。Transp Porous Media 130(1)：215–236 7. Berrone S、Borio A、Fidelibus C、Pieraccini S、Scialo S、Vicini F（2018）离散裂缝-基质模型中稳态流体流动的高级计算：有限元法–边界元法和虚拟元法–虚拟元法裂缝-块体耦合。GEM-International Journal on Geomathematics 9(2)：377–399

8. Bogdanov I、Mourzenko V、Thovert JF、Adler P（2007）具有幂律裂缝尺寸分布的裂缝性多孔介质的有效渗透率。Physical Review E 76(3)：036309 9. Bonnet E、Bour O、Odling NE、Davy P、Main I、Cowie P、Berkowitz B（2001）地质介质中裂隙系统的尺度律。Reviews of Geophysics 39(3)：347–383 10. Boon WM、Nordbotten JM、Yotov I（2018）裂缝性多孔介质中流动的稳健离散方法。SIAM 数值分析杂志 56(4)：2203–2233 11. Bour O、Davy P（1997）遵循幂律断层长度分布的随机断层网络连通性。《水资源研究》33(7)：1567–1583 12. Bour O、Davy P（1998）三维断层网络的连通性。《水资源研究》34(10)：2611–2622 13. Davy P、Le Goc R、Darcel C、Bour O、De Dreuzy JR、Munier R（2010）可能具有普适性的裂隙尺度律模型及其对地壳水力力学的影响。J Geophys Res-Sol Ea 115(B10) 14. Davy P、Le Goc R、Darcel C（2013）裂缝成核、生长与停止的模型，以及其对裂隙密度和尺度律的影响。J Geophys Res-Sol Ea 118(4)：1393–1407 15. De Dreuzy JR、Davy P、Bour O（2002）遵循幂律长度和开度分布的二维随机裂缝网络的水力学性质。水资源研究 38(12)：12–1 16. de Dreuzy JR、M´eheust Y、Pichot G（2012）裂隙尺度非均质性对三维离散裂缝网络流动性质的影响。J Geophys Res-Sol Ea 117(B11) 17. Flemisch B、Fumagalli A、Scotti A（2016）基于扩展有限元法的裂缝性多孔介质流动近似综述，施普林格国际出版，Cham，第47–76页。DOI 10.1007/978-3-319-41246-7-3 18. Frampton A、Cvetkovic V（2010）利用结晶岩中的流量测井测量推断场尺度裂缝导流能力。水资源研究 46(11) 19. Fumagalli A、Scotti A（2013）非匹配网格下裂缝性多孔介质中流动与输运的降阶模型。载于：Cangiani A、Davidchack RL、Georgoulis E、Gorban AN、Levesley J、Tretyakov MV（编）《数值数学与高级应用 2011》，施普林格柏林海德堡，柏林、海德堡，第499–507页 20. Hadgu T、Karra S、Kalinina E、Makedonska N、Hyman J D、Klise K、Viswanathan HS、Wang Y（2017）比较离散裂缝网络与等效连续介质模型，用于模拟假想核废料处置库结晶围岩远场中的流动与输运。《水文学杂志》553：59–70 21. Hagberg AA、Shult DA、Swart PJ（2008）使用networkX探索网络结构、动力学与功能。载于：SciPy 2008会议录，第11–16页，网址：http://networkx.github.io/

22. Hyman JD，Jim´enez-Mart´ınez J（2018）三维离散裂缝网络中的弥散与混合：结构非均质性与水力非均质性之间的非线性交互作用。《水资源研究》54(5):3243–3258，DOI 10.1029/2018WR022585 23. Hyman JD，Gable CW，Painter SL，Makedonska N（2014）随机生成三维离散裂缝网络的保形德劳内三角剖分：用于网格划分策略的特征剔除算法。《SIAM 科学计算杂志》36(4):A1871–A1894 24. Hyman JD，Karra S，Makedonska N，Gable CW，Painter SL，Viswanathan HS（2015）dfnWorks：用于地下流动与传输建模的离散裂缝网络框架。《计算地球科学》84:10–19 25. Hyman JD，Aldrich G，Viswanathan HS，Makedonska N，Karra S（2016）裂隙尺寸与导水率的相关性：裂隙尺寸遵循截断幂律分布的稀疏三维离散裂隙网络中对运移模拟的影响。《水资源研究》52(8):6472–6489，DOI 10.1002/2016WR018806，URL http://dx.doi.org/10.1002/2016WR018806 26. Hyman JD，Jim´enez-Mart´ınez J，Viswanathan HS，Carey JW，Porter ML，Rougier E，Karra S，Kang Q，Frash L，Chen L，Lei Z，O'Malley D，Make-donska N（2016）理解水力压裂：一个多尺度问题。《英国皇家学会哲学汇刊 A》374(2078):20150426 27. Hyman JD，Hagberg A，Srinivasan G，Mohd-Yusof J，Viswanathan HS（2017）利用基于图的约简预测稀疏离散裂缝网络中的首次通过时间。《Physical Review E》96(1):013304，DOI 10.1103/PhysRevE.96.013304 28. Hyman JD，Hagberg A，Osthus D，Srinivasan S，Viswanathan HS，Srini-vasan G（2018）识别三维离散裂缝网络中的骨架：一种基于二部图的方法。《多尺度建模与仿真》16(4):1948–1968 29. Hyman JD，Jim´enez-Mart´ınez J，Gable CW，Stauffer PH，Pawar RJ（2019）表征裂隙盖层非均质性对超临界 $CO_2$ 共注入影响。《多孔介质中的传输》pp 1–21 30. Hyman JD，Rajaram H，Srinivasan S，Makedonska N，Karra S，Viswanathan HS，Srinivasan G（2019）裂隙介质中的基质扩散：对突破曲线幂律标度的新见解。《地球物理研究快报》46(23):13785–13795，DOI 10.1029/2019GL085454，URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2019GL085454，https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/2019GL085454 31. Hyman JD，Sweeney MR，Gable CW，Svyatsky D，Lipnikov K，Moul-ton JD（2022）在保形多维网格上采用拟协调有限差分的三维离散裂缝-基质模型中的流动与输运。《计算物理学杂志》p 111396 32. Jackson CP，Hoch AR，Todman S（2000）裂隙介质的非均质连续体多孔介质表征的自洽性。《水资源研究》36(1):189–202，DOI

https://doi.org/10.1029/1999WR900249，URL https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/1999WR900249，https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1029/1999WR900249 33. Jenkins C，Chadwick A，Hovorka SD（2015）监测与验证领域的最新进展——十年之后。《国际温室气体控制杂志》40:312–349 34. Joyce S，Hartley L，Applegate D，Hoek J，Jackson P（2014）温带气候条件下的多尺度地下水流建模：拟建高放射性核废料处置库场址福什马克（瑞典）的安全评估。《水文地质学杂志》22(6):1233–1249 35. Klint K，Gravesen P，Rosenbom A，Laroche C，Trenty L，Lethiez P，Sanchez F，Molinelli L，Tsakiroglou C（2004）将裂隙岩体的多尺度表征作为在污染场地中真实模拟污染物迁移路径的方法：案例研究。《水、空气与土壤污染》4(4-5):201–214 36. K¨oppel M，Martin V，Jaffr´e J，Roberts JE（2019）用于多孔介质中流动的离散裂缝模型的拉格朗日乘子法。《计算地球科学》23(2):239–253，DOI 10.1007/s10596-018-9779-8 37. Kottwitz MO，Popov AA，Abe S，Kaus BJP（2021）研究交 intersection 流局部化对离散裂缝网络流动的基于等效连续介质的尺度放大的影响。《固体地球》12(10):2235–2254，DOI 10.5194/se-12-2235-2021，URL https://se.copernicus.org/articles/ 12/2235/2021/ 38. Krotz J，Sweeney MR，Gable CW，Hyman JD，Restrepo JM（2021）用于可变分辨率保形 Delaunay 网格生成的最大泊松盘采样：三维离散裂缝网络及其周围体积的应用。arXiv 预印本 arXiv:210510079 39. Kueper BH，McWhorter DB（1991）高密度非水相液体在裂隙黏土和岩石中的行为。《地下水》29(5):716–728 40. 洛斯阿拉莫斯国家实验室（2013）LaGriT，洛斯阿拉莫斯网格工具箱。https://lagrit.lanl.gov/ 41. Lavoine E，Davy P，Darcel C，Munier R（2020）具有应力驱动成核的离散裂缝网络模型：对聚集、连通性和拓扑的影响。《物理学前沿》8:9 42. Lichtner PC，Hammond GE，Lu C，Karra S，Bisht G，Andre B，Mills RT，Kumar J，Frederick JM（2020）PFLOTRAN 用户手册。技术报告。43. Manzoor S，Edwards MG，Dogru AH，Al-Shaalan TM（2018）内部边界对齐非结构网格生成以及单元中心与顶点中心 CVD-MPFA 的性能比较。《计算地球科学》22(1):195–230 44. Middleton RS，Carey JW，Currier RP，Hyman JD，Kang Q，Karra S，Jim´enez-Mart´ınez J，Porter ML，Viswanathan HS（2015）页岩气与非水压裂液：超临界 $CO_2$的机遇与挑战。《应用能源》147:500–509 45. 美国国家研究委员会（1996）岩石裂缝与流体流动：当代认识与应用。国家科学院出版社

46. Neuman S (2005) 定量描述裂隙岩体中的流动与运移：趋势、前景与挑战。《水文地质学杂志》13(1):124–147 47. Odsæter LH, Kvamsdal T, Larson MG (2019) 一种用于多孔介质中流动与运移耦合问题的简单嵌入式离散裂缝-基质模型。《计算力学与工程方法》343:572 – 601，DOI https://doi.org/10.1016/j.cma.2018.09.003 48. Sahimi M (1994)《渗流理论的应用》。CRC出版社 49. Sandve TH, Berre I, Nordbotten JM (2012) 一种用于离散裂缝-基质模拟的高效多点通量近似方法。《计算物理学杂志》231(9):3784–3800 50. Schwenck N, Flemisch B, Helmig R, Wohlmuth BI (2015) 裂缝性多孔介质中的降维流动模型：交叉点与边界。《计算地球科学》19(6):1219–1230，DOI 10.1007/s10596-015-9536-1 51. Svensk K¨arnbr¨anslehantering AB (2010) SR-site 安全评估数据报告 (TR-10-52)。技术报告，Svensk K¨arnbr¨anslehantering AB 52. Sweeney MR, Gable CW, Karra S, Stauffer PH, Pawar RJ, Hyman JD (2020) 上尺度离散裂缝-基质模型（udfm）：裂缝性多孔介质的八叉树细化连续体表示。《计算地球科学》24(1):293–310 53. Thomas RN, Paluszny A, Zimmerman RW (2020) 演化几何形态和力学缝宽条件下，数值生成的三维地质力学离散裂缝网络的渗透率。《地球物理研究杂志：固体地球》125(4):e2019JB018899 54. VanderKwaak J, Sudicky E (1996) 离散裂隙多孔介质中非水相液体的溶解与水相污染物运移。《污染物水文地质学杂志》23(1-2):45–68 55. Viswanathan HS, Ajo-Franklin J, Birkholzer JT, Carey JW, Guglielmi Y, Hyman JD, Karra S, Pyrak-Nolte LJ, Rajaram H, Srini-vasan G, Tartakovsky DM (2022) 从流体流动到裂隙岩体中的耦合过程：近期进展与新前沿。《地球物理学评论》60(1):e2021RG000744，DOI https://doi.org/10.1029/2021RG000744，e2021RG000744 2021RG000744 56. Wellman TP, Shapiro AM, Hill MC (2009) 简化裂缝网络表示对裂缝控制含水层中惰性化学物质迁移的影响。《水资源研究》45(1) 57. Wood AT (1994) von Mises-Fisher分布的模拟。《统计学与模拟通讯》23(1):157–164 58. Zhou Q, Liu HH, Molz FJ, Zhang Y, Bodvarsson GS (2007) 裂隙岩体的场尺度有效基质扩散系数：文献调查结果。《污染物水文地质学杂志》93(1-4):161–187