

Расчетный код GeRa v.1
РУКОВОДСТВО ПО МОДЕЛЯМ

СОДЕРЖАНИЕ

1	Введение.....	3
2	Используемые обозначения	3
3	Модели фильтрации.....	7
3.1	Модель напорной фильтрации	7
3.2	Насыщенно-ненасыщенная фильтрация.....	8
3.3	Напорно-безнапорная фильтрация.....	10
3.4	Граничные условия для задач фильтрации	13
4	Модели переноса	15
4.1	Модель адвективно-дисперсионно-диффузионного переноса с сорбцией по линейной изотерме и радиоактивным распадом	15
4.2	Модель переноса в зоне аэрации.....	17
4.3	Модель переноса с расчетом химических взаимодействий	17
4.4	Модель переноса с учетом цепочек радиоактивного распада.....	18
4.5	Граничные условия для задач переноса	20
5	Модель плотностной конвекции.....	20
5.1	Реализованная в коде математическая модель	20
5.2	Методика трактовки граничных условий растворения.....	21
	СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	22

1 Введение

Настоящий документ содержит информацию о математических моделях физических и химических процессов, реализованных в расчетном коде GeRa V.1. Дано описание моделей фильтрации и переноса, а также плотностной конвекции. Документ предназначен для квалифицированных пользователей, обладающих базовыми знаниями по математическому моделированию в гидрогеологии, и призван обеспечить понимание уравнений, лежащих в основе реализованных численных моделей, и сделанных модельных допущений.

В дальнейших разделах описаны следующие модели:

- фильтрации в напорной, безнапорной и насыщенно-ненасыщенной постановке;
- адвективно-диффузионно-дисперсионного переноса в насыщенных и ненасыщенных условиях, с учетом радиоактивного распада (в т.ч. по цепочкам), сорбции по изотерме, химических взаимодействий;
- плотностной конвекции.

Также для моделей фильтрации и переноса определены возможные граничные условия.

2 Используемые обозначения

Обозначение	Расшифровка	Размерность	Обозначение в коде
a_f	Показатель степени в изотерме Фрейндлиха	-	freundlich_exponent
C	Концентрация примеси в растворе	ML^{-3}	Ter CONC
C_Q	Концентрация примеси в источнике или стоке	ML^{-3}	well_conc, lake_conc, river_conc
C_S	Концентрация насыщения	ML^{-3}	-
c_a	Массовая доля примеси, сорбированная на породе (в массе породы)	$M^{-1}M (-)$	-

c_s	Максимальная массовая доля примеси, сорбированной на породе	$M^{-1}M$	max_sorption_cap
c_θ	Дифференциальная влагоемкость (также гидрофизическая емкость)	L^{-1}	specific_moisture_capacity
D	Тензор диффузии-дисперсии	L^2T^{-1}	-
d_m	Эффективный коэффициент молекулярной диффузии	L^2T^{-1}	eff_diffusion
f	Массовые источники и стоки	$ML^{-3}T^{-1}$	Ter VOLUME_SOURCE
h	Напор грунтовых вод	L	Water_Head
H	Уровень воды в поверхностном водоеме (абсолютная отметка)	L	river_stage, lake_stage
h_{bot}	Уровень дна поверхностного водоема (абсолютная отметка уровня)	L	bottom
h_{drain}	Уровень дренажа	L	drain_level
$h_{E,min}, h_{E,max}$	Высоты нижней и верхней точек ячейки E , соответственно.	L	-
K	Коэффициент (или тензор) фильтрации	LT^{-1}	permeability
k_d	Коэффициент распределения	$M^{-1}L^3$	distribution
k_f	Константа Фрейндлиха	$M^{-1}L^3$	distribution
k_L	Константа Ленгмюра	$M^{-1}L^3$	distribution
K_r	Относительная проницаемость породы	-	Kr
$K_{r,min}$	Минимальная относительная проницаемость породы в модели безнапорной фильтрации(параметр	-	min_Kr

	модели)		
K_s	Коэффициент фильтрации при насыщении	LT^{-1}	permeability
K_{drain}	Коэффициент сопротивления дренажа	L^2T^{-1}	drain_conduct
\vec{n}	Единичная внешняя нормаль к границе области.	L	-
\vec{n}_e	Единичная внешняя нормаль к грани e .	L	-
n_{vg}	Параметр модели Ван Генухтена отражающий связность пор.	-	vg_n
Q	Удельный на единицу объема расход источников или стоков жидкости (обычно – скважин)	$L^3T^{-1}L^{-3}$	-
q_{well}	Расход скважины объемный	L^3T^{-1}	well_rate
q_{drain}	Расход дренажа	L^3T^{-1}	-
R	Фактор замедления	-	retardation
S	Эффективная насыщенность	-	Saturation, Sat
s_{stor}	Коэффициент упругости	L^{-1}	storage
$s_{s.y.}$	Коэффициент гравитационной водоотдачи	L^{-1}	spec_yield
t	Время	T	time
$t_{1/2}$	Период полураспада радиоизотопа	T	half_life
\vec{u}	Вектор скорости фильтрационного потока (скорость Дарси)	LT^{-1}	Ter WATER_FLUX
α	Коэффициент перетекания между поверхностными водоемами и грунтовыми водами	T^{-1}	riverbed_conduct, lakebed_conduct

α_ϕ	Пороговое значение относительного влагосодержания (по отношению к пористости) для модели безнапорной фильтрации (параметр модели)	-	ThetaR_to_Por
α_θ	Тангенс угла наклона линейной зависимости влагосодержания от напора в модели безнапорной фильтрации (параметр модели)	L^{-1}	Theta_Slope
α_l	Продольная дисперсивность	L	long_dispersion
α_t	Поперечная дисперсивность	L	trans_dispersion
α_{vg}	Параметр модели Ван Генухтена, функция размера пор	L^{-1}	vg_alpha
β_s	Сжимаемость породы	$M^{-1}TL$	-
β_w	Сжимаемость жидкости	$M^{-1}TL$	-
θ	Объемное влагосодержание	L^3L^{-3}	Theta, Moisture_Content
θ_r	Остаточное влагосодержание	L^3L^{-3}	Theta_r
θ_s	Влагосодержание при насыщении	L^3L^{-3}	Theta_s
λ	Константа радиоактивного распада	T^{-1}	-
ρ	Плотность жидкости	ML^{-3}	density
ρ_b	Плотность твердого вещества в расчете на единицу объема, занятого твердой матрицей (без учета пор)	ML^{-3}	bulk_density
ρ_Q	Плотность раствора в источнике или стоке	ML^{-3}	-
ρ_C	Плотность раствора при полном	ML^{-3}	-

	насыщении примесью (при достижении предела растворимости)		
ψ	Высота всасывания	L	-

3 Модели фильтрации

3.1 Модель напорной фильтрации

Процесс напорной фильтрации жидкости описывается законом сохранения массы (уравнением неразрывности) [1]

$$s_{stor} \frac{\partial h}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{u} = Q, \quad (1)$$

где \vec{u} – вектор скорости фильтрационного потока, определяемый законом Дарси:

$$\vec{u} = -K \nabla h. \quad (2)$$

В (1),(2) s_{stor} – коэффициент упругоемкости (storage), определяемый как объем высвободившейся жидкости в единичном объеме насыщенной пористой среды при единичном понижении напора; h – напор; Q – источники и стоки (в коде GeRa ими могут служить скважины и дренажи, $Q = q_{well} + q_{drain}$); K – тензор фильтрации. Возможно четыре варианта определения тензора фильтрации:

- в виде одного коэффициента фильтрации для случая изотропной среды;
- диагонального тензора с двумя различными компонентами: горизонтальной K_{x-y} и вертикальной K_{zz} , – для случая вертикально-горизонтальной анизотропии среды:

$$\begin{pmatrix} K_{x-y} & 0 & 0 \\ 0 & K_{x-y} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{pmatrix};$$

- диагонального тензора с тремя главными компонентами для случая анизотропии в трех направлениях, совпадающих с осями координат:

$$\begin{pmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{pmatrix};$$

– симметричного положительно определенного тензора для случая анизотропной среды с главными осями анизотропии, отличными от осей координат (например, для наклонных анизотропных пластов):

$$\begin{pmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{xy} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{xz} & K_{yz} & K_{zz} \end{pmatrix}.$$

В соответствии с [2] коэффициент упругоэластичности выражается через сжимаемость породы β_s и сжимаемость жидкости β_w :

$$s_{stor} = \rho g (\phi \beta_w + \beta_s) \quad (3)$$

Расход дренажа рассчитывается по формуле (он неположителен, то есть, является стоком):

$$q_{drain} = \begin{cases} K_{drain} (h_{drain} - h) & \text{при } h > h_{drain} \\ 0 & \text{в ином случае.} \end{cases} \quad (4)$$

Здесь K_{drain} – коэффициент сопротивления дренажа, h_{drain} – уровень дренажа. Возможно задание в моделях точечных, линейных и площадных дренажей.

При дискретизации пространственного оператора диффузионного типа (в данном случае $-\nabla K \nabla h$) для данной модели и последующих в GeRa может быть использован один из реализованных методов конечных объемов (МКО):

- схема с двухточечной аппроксимацией потока;
- O-схема с многоточечной аппроксимацией потока [5];
- нелинейная монотонная схема конечных объемов с двухточечной аппроксимацией потока [6].

3.2 Насыщенно-ненасыщенная фильтрация

Модель, реализованная в коде GeRa, основана на уравнении Ричардса, сформулированном с учетом упругостей среды и жидкости, проявляющихся в насыщенном режиме (в терминах влагосодержание-высота всасывания) [2,3]:

$$\frac{\partial \theta(\psi)}{\partial t} + S_{s_{stor}} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla \cdot K(\psi) \nabla (\psi + z) = Q, \quad (5)$$

где θ - объемное влагосодержание, ψ - высота всасывания, связанная с приведенным напором соотношением

$$h = \psi + z. \quad (6)$$

Для зависимости $\theta(\psi)$ использована модель Ван Генухтена [4]:

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{[1 + |\alpha_{vg} \psi|^{n_{vg}}]^{m_{vg}}} & \text{при } \psi < 0 \\ \theta_s & \text{при } \psi \geq 0, \end{cases} \quad (7)$$

а для коэффициента фильтрации – модель Муалема:

$$K(\psi) = K_s K_r(h) = K_s \cdot S^{0.5} [1 - (1 - S^{\frac{1}{m_{vg}}})^{m_{vg}}]^2, \quad (8)$$

$$m_{vg} = 1 - \frac{1}{n_{vg}}. \quad (9)$$

В уравнениях (7)-(9) использованы обозначения:

– θ_r, θ_s - остаточное (т.е. не извлекаемое гравитационным путем) влагосодержание и влагосодержание при полном насыщении.

– S – эффективная насыщенность, определяемая формулой

$$S = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}. \quad (10)$$

– n_{vg} - эмпирический параметр модели, отражающий характеристики пор;

– α_{vg} - параметр модели, функция размера пор, [L⁻¹];

– K_s – коэффициент фильтрации в условиях насыщения;

– $K_r(h)$ – относительная проницаемость.

В GeRa решение задачи производится в терминах напоров, а именно, решается уравнение (5), переписанное относительно одной переменной h :

$$\frac{\partial \theta(h)}{\partial t} + S_{s_{stor}} \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot K(h) \nabla (h) = Q, \quad (11)$$

В расчетном коде GeRa задача (11) решается методом простой итерации (также в литературе данная трактовка метода называется методом Пикара) с линеаризацией влагонасыщенности по напору на каждой итерации. Для этого вводится дифференциальная влагоемкость c_θ (или гидрофизическая емкость), определяемая как

$$c_\theta(h) = \frac{\partial \theta(h)}{\partial h} = \frac{\partial \theta(\psi)}{\partial \psi} . \quad (12)$$

Для обеспечения выполнения закона сохранения массы на каждой итерации дискретизация производной влагосодержания по времени выполняется следующим образом [3]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} \approx c_\theta(h^{n+1,k}) \frac{h^{n+1,k+1} - h^{n+1,k}}{\Delta t} + \frac{\theta(h^{n+1,k}) - \theta^n}{\Delta t} . \quad (13)$$

Индекс k означает номер итерации, индекс n – шаг по времени. Первый член в правой части (13) при сходимости итераций стремится к нулю. Второй член известен с предыдущего шага итераций. Полностью метод простой итерации при неявной дискретизации уравнения (11) определяется как

$$c_\theta(h^{n+1,k}) \frac{h^{n+1,k+1} - h^{n+1,k}}{\Delta t} + \frac{\theta(h^{n+1,k}) - \theta^n}{\Delta t} + S(h^{n+1,k}) s_{stor} \frac{h^{n+1,k+1} - h^n}{\Delta t} - \nabla K(h^{n+1,k}) \nabla (h^{n+1,k+1}) = Q^{n+1} . \quad (14)$$

Отметим, что при вычислении потоков через общую грань двух ячеек сетки необходимо определить, как вычислить K_r для этой грани. Во избежание паразитных осцилляций решения [83] в GeRa используется противопотокное значение K_r , то есть этот коэффициент берется из той ячейки, которая лежит выше по потоку (в которой выше напор). В целях уменьшения эффекта размывания фронта насыщенности в GeRa также реализована возможность построения кусочно-линейного восполнения напора на ячейках сетки (схемой высокого разрешения, по аналогии с лимитерами, используемыми при решении задач переноса [9]) для последующего вычисления относительной проницаемости на гранях, которая может быть включена по желанию пользователя.

3.3 Напорно-безнапорная фильтрация

Модель напорно-безнапорной фильтрации в GeRa является упрощенной версией модели насыщенно-ненасыщенной фильтрации. Для ее параметризации требуется меньше исходных данных по отношению к последней, однако решаемые уравнения – те же,

меняется только вид функций $\theta(h), K(h)$. Модель сформулирована в следующих предположениях:

- коэффициент фильтрации в ненасыщенной зоне мал по отношению к насыщенной (степень малости определяется пользователем).
- для заданной ячейки коэффициент фильтрации меняется линейно от минимального значения (влажность близко к нулю) до максимального (при полном заполнении ячейки водой) с ростом уровня грунтовых вод.

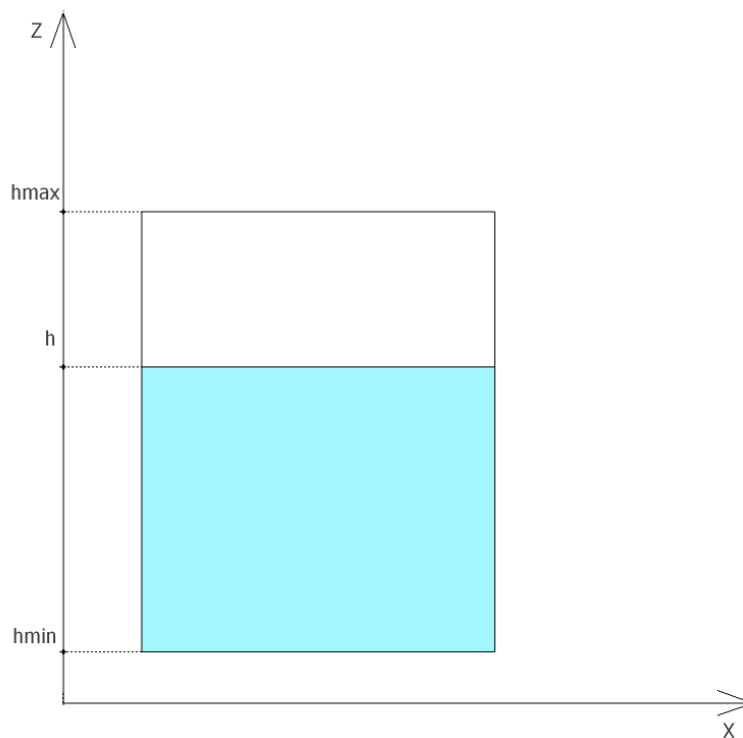


Рисунок 3.1 – Ячейка расчетной сетки, частично заполненная жидкостью

Зависимость влагосодержания от напора в ячейке определена формулой

$$\theta(h) = \begin{cases} \varphi & \text{при } h > h_{max}, \\ \varphi \frac{h - h_{min}}{h_{max} - h_{min}} & \text{при } h_r < h < h_{max}, \\ \alpha_\varphi \varphi - \alpha_\theta (h_r - h) & \text{при } h < h_r. \end{cases} \quad (15)$$

h_{max}, h_{min} – максимальная и минимальная вертикальные координаты точек в ячейке (см. рисунок 3.1), φ – пористость породы. Параметр h_r определяется как величина, при

которой влагосодержание, определяемое по формуле $\theta = \varphi \frac{h - h_{min}}{h_{max} - h_{min}}$ в условиях частичного насыщения, достигает величины $\alpha_\phi \varphi$, а именно

$$h_r = h_{min} + \alpha_\phi (h_{max} - h_{min}). \quad (16)$$

Таким образом, функция $\theta(h)$ имеет три линейных участка:

- При полном насыщении она тождественно равна пористости.
- При частичной насыщенности ячейки и условию $h_r < h < h_{max}$ она приближает отношение объема пор, занятых водой при заданном уровне грунтовых вод, к объему ячейки (см. рисунок 3.1). Для прямоугольных ячеек это приближение является точным, для иных ячеек – аппроксимацией.
- Ниже порогового значения $\alpha_\phi \varphi$ влагосодержание предполагается медленно линейно убывающим с уменьшением h . Параметр α_ϕ должен выбираться достаточно малой величиной, гарантирующей неотрицательность $\theta(h)$, вычисляемой по формуле (15).

Для коэффициента фильтрации принято следующее выражение:

$$K(h) = K_r(h) K_s, \quad (17)$$

где относительная проницаемость определяется выражением

$$K_r(h) = \begin{cases} 1 & \text{при } h > h_{max}, \\ \max\left(\frac{h - h_{min}}{h_{max} - h_{min}}, K_{r,min}\right) & \text{при } h \leq h_{max}. \end{cases} \quad (18)$$

Здесь $K_{r,min}$ – минимальная относительная проницаемость породы, параметр модели. Этот параметр предотвращает обращение коэффициента фильтрации в ноль при осушении, обеспечивая стабильность вычислений. В результате при полном насыщении ячейки коэффициент фильтрации в ней такой, как в насыщенной модели. При осушении ячейки коэффициент линейно падает с падением напора, пока не выходит на некоторую малую величину. Это линейное падение коэффициента характеризует то, что площадь участков боковых граней, через которые течет жидкость, пропорциональна высоте грунтовых вод в ячейке (по аналогии с [7]). Для невертикальных граней такой подход является аппроксимацией аналогично модели ненасыщенной фильтрации.

Для емкостного коэффициента $c_\theta(h)$ дифференцированием (15) по h получаем выражение:

$$c_\theta(h) = \begin{cases} 0 & \text{при } h > h_{max}, \\ \frac{\varphi}{h_{max} - h_{min}} & \text{при } h_r < h < h_{max}, \\ \alpha_\theta & \text{при } h < h_r. \end{cases} \quad (19)$$

Таким образом, реализованная модель напорно-безнапорной фильтрации имеет 3 параметра ($\alpha_\phi, \alpha_\theta, K_{r,min}$), которые должны быть заданы достаточно малыми величинами. При стремлении этих параметров к нулю получается модель, в которой течение происходит только в насыщенной зоне. Введение этих параметров обусловлено необходимостью устойчивого решения задач с инфильтрацией осадков при их прохождении через ненасыщенную зону, задач с возможным образованием зон осушения ниже уровня грунтовых вод, сильным нарушением предположения Дюпюи о постоянстве напоров по вертикали. Близкий подход реализован в коде FEFLOW [10], где также использованы линейные зависимости $\theta(h), K_r(h)$, в котором в качестве примера указаны значения 0,001 для минимальной относительной проницаемости $K_{r,min}$ и минимальное влагосодержание соответствует высоте водного столба в ячейке 1 мм.

3.4 Граничные условия для задач фильтрации

В настоящее время в коде GeRa реализованы следующие типы граничных условий для задачи фильтрации:

- Условие типа Дирихле (I рода). Данное граничное условие определяет напор на участке границы Γ :

$$h(x,t)|_\Gamma = h_\Gamma(x,t) \quad (20)$$

- Условие типа Неймана (II рода). Данное условие позволяет задать поток через границу Γ :

$$\vec{u}(x,t) \cdot \vec{n}|_\Gamma = \vec{q}_\Gamma(x,t). \quad (21)$$

- Условие просачивания, принимающее, в зависимости от условий, одну из формулировок

$$\begin{aligned} \text{I. } h|_{\Gamma} &= z \\ \text{II. } \vec{u} \cdot \vec{n}|_{\Gamma} &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

Это условие означает свободное просачивание жидкости на данной границе при достижении насыщения (см., например, условия Seepage Face в работе [17]). При достижении полного насыщения на границе устанавливается напор, соответствующий высоте z данной точки. При возникновении потока жидкости, направленного внутрь области, на границе ставится нулевой поток. Условие реализуется путем введения двух ограничений:

$$\begin{aligned} h|_{\Gamma} &\leq z, \\ \vec{q} \cdot \vec{n}|_{\Gamma} &\geq 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Переход от одного условия к другому осуществляется при нарушении какого-либо из ограничений в (23), в этом случае нарушенное неравенство из (23) заменяется одним из равенств в (22). Иными словами, переключение между первой и второй формулировкой осуществляется по следующим принципам: если при итерационном приближении к решению с условием II в заданной точке V границы Γ на некоторой итерации возник напор выше z , то устанавливается условие I. Если же в точке V было задано условие I, и на некоторой итерации поток в ней оказался направлен внутрь области, происходит переход на условие II.

Важно отметить здесь, что в том случае, когда одна из граней e какой-либо ячейки граничит с поверхностным водоемом, то скорость потока через этот участок границы определяется выражением

$$\vec{u} = -\alpha(H - \bar{h})\vec{n}_e, \quad (24)$$

где

$$\bar{h} = \begin{cases} h & \text{при } h \geq h_{bot} \text{ (выше уровня дна водоема),} \\ h_{bot} & \text{в ином случае} \end{cases},$$

\vec{n}_e – единичная внешняя нормаль к грани e . α – коэффициент перетекания, определяемый как коэффициент фильтрации донных отложений, деленный на их мощность. Тем самым учитывается возможный отрыв грунтовых вод от дна водоема.

4 Модели переноса

4.1 Модель адвективно-дисперсионно-диффузионного переноса с сорбцией по линейной изотерме и радиоактивным распадом

Данная модель является основной при моделировании процессов геомиграции. Она описывается уравнением

$$R\varphi \frac{\partial C}{\partial t} - \nabla \cdot D \nabla C + \nabla (\bar{u} C) + \lambda \varphi R C = f, \quad (25)$$

где: R – фактор замедления (если используется модель сорбции по изотерме Генри); C – концентрация растворенного вещества (для каждого из переносимых веществ необходимо отдельное уравнение (25)); D – тензор диффузии-дисперсии, определяемый выражением

$$D_C = d_m I + \|\bar{u}\| (\alpha_l E(\bar{u}) + \alpha_t (I - E(\bar{u}))), \quad (26)$$

где d_m – коэффициент молекулярной диффузии, I – единичная матрица размерности 3×3 , \bar{u} – скорость фильтрации Дарси, $E(\bar{u})$ – матрица 3×3 с компонентами $E_{ij}(u) = \frac{u_i u_j}{\|\bar{u}\|^2}, i, j \in \{1, 2, 3\}$. λ – константа распада, связанная с периодом полураспада $t_{1/2}$ соотношением $\lambda = \ln 2 / t_{1/2}$. Отметим, что в насыщенных условиях скорость Дарси связана с действительной скоростью фильтрации \bar{v} соотношением $\bar{u} = \varphi \bar{v}$.

Отдельно стоит рассмотреть правую часть. Она состоит из источников примеси, поступающей (уходящей) с водой, и от источников примеси, не связанных с притоком воды, например, растворением:

$$f = Q C_Q + f_C \quad (27)$$

При дискретизации с помощью МКО правая часть (25) интегрируется по объему ячейки, и важна именно эта интегральная величина. В нее должны войти скважины с расходом q_{well} и концентрацией C_{well} , источники примеси с интенсивностью f_C , отток концентрации в дренажи:

$$\int_E f dV = q_{well} C_{well} + \int_E f_C dV + q_{drain} C \quad (28)$$

В последней формуле для C_{well} используется заданная извне концентрация в скважине, если скважина является нагнетательной ($q_{well} \geq 0$), и просто C , если скважина – разгрузочная ($q_{well} < 0$).

При интегрировании адвективного члена $\nabla(\vec{u}C)$ в случае положительного потока в направлении внешней нормали к границе должна быть использована концентрация в самой ячейке C ; в обратном случае – концентрация во входящем в расчетную область потоке жидкости. Последнее актуально для граничного условия инфильтрации осадков, либо при взаимодействии с поверхностными водоемами (реками и озерами).

Фактор замедления рассчитывается по формуле

$$R = \left(1 + \rho_b \frac{1-\varphi}{\varphi} k_d \right), \quad (29)$$

в которой ρ_b – плотность твердого вещества в расчете на единицу объема, занятого твердой матрицей (без учета пор, solid density), а k_d – коэффициент распределения. Изотерма Генри предполагает линейную зависимость массовой доли c_a сорбированного вещества на породе от концентрации в растворе:

$$c_a = k_d C. \quad (30)$$

В ряде случаев удобно использование эмпирически получаемых соотношений между сорбированным и растворенным веществом, учитывающих зависимость коэффициента распределения от одной из компонент раствора. В расчетном коде GeRa есть возможность задать зависимость k_d в виде табличного файла, в котором указаны значения коэффициента распределения переносимых компонент в зависимости от концентрации одной из этих компонент (она должна стоять в первой колонке, см. рисунок 4.1).

NaNO3	Sr
0	0.0153
0.025	0.0153
0.05	0.0153
0.1	0.0027
0.2	0.0012
0.3	0.00055
0.58	0.

Рисунок 4.1 – Пример создания таблицы зависимости коэффициента распределения стронция от концентрации нитрата натрия в стандартном редакторе

Между табличными значениями строится линейная интерполяция k_d и используется изотерма Генри (30) с переменным коэффициентом k_d . В этом случае фактор замедления выглядит точно так же, как и в случае постоянного коэффициента распределения k_d , однако уравнение становится нелинейным, поскольку R зависит от C :

$$R(C) = \left(1 + \rho_b \frac{1-\phi}{\phi} k_d(C) \right). \quad (31)$$

При моделировании задач переноса в расчетном коде GeRa пользователь может выбрать следующие расчетные схемы:

- явно-неявную схему расщепления по физическим процессам (явная конвекция, неявная диффузия), для адвекции в ней может быть использована низкодиссипативная схема высокого разрешения (MUSCL-типа) с кусочно-линейным восстановлением концентрации на ячейках сетки, либо стандартная схема МКО с кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации;
- полностью неявную схему нелинейного монотонного МКО (с MUSCL-схемой для конвективного члена, либо противопотоковой схемой первого порядка точности);
- полностью неявную схему с кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации, использующая один из линейных МКО для дискретизации диффузионного члена.

4.2 Модель переноса в зоне аэрации

Уравнение переноса в зоне аэрации с учетом сорбции и радиоактивного распада близко к модели (25), но учитывает изменение влагосодержания:

$$\frac{\partial \left((\theta + \rho_b (1-\phi) K_d) C \right)}{\partial t} - \nabla \cdot D \nabla C + \nabla (\bar{u} C) + \lambda (\theta + \rho_b (1-\phi) K_d) C = f \quad (32)$$

4.3 Модель переноса с расчетом химических взаимодействий

В случае прямого моделирования геохимических процессов в уравнении (25) пропадает фактор задержки, так как сорбция моделируется в рамках геохимического

модуля, и добавляются источники/стоки R_{C_i} , обусловленные химическими взаимодействиями [18]:

$$\varphi \frac{\partial C_i}{\partial t} - \nabla \cdot D \nabla C_i + \nabla (\bar{u} C_i) = f + R_{C_i}(C, x, t). \quad (33)$$

В (33) также отсутствует член, отвечающий за радиоактивный распад – он также должен быть включен в реакционный член R_{C_i} . Расчет химических взаимодействий производится с помощью модуля IPHREEQC, интегрированного в код GeRa [19]. При дискретизации задачи используется безытерационная схема расщепления по физическим процессам, предполагающая однократный расчет переноса и химических взаимодействий на каждом шаге по времени.

4.4 Модель переноса с учетом цепочек радиоактивного распада

Данная модель основана на уравнении

$$R\varphi \frac{\partial C_i}{\partial t} - \nabla \cdot D \nabla C_i + \nabla (\bar{u} C_i) = f + R_{C_i}(C, x, t) \quad (34)$$

в котором учтена сорбция, а R_{C_i} включает источники и стоки, обусловленные радиоактивным распадом изотопов и образованием дочерних элементов. Для расчета концентраций или активностей изотопов, меняющихся в результате радиоактивного распада, используются аналитические формулы [20].

Обозначим через N_{10} исходное число ядер материнского изотопа. Число ядер материнского изотопа через время t будет:

$$N_1 = N_{10} \exp(-\lambda_1 t),$$

где λ_1 — постоянная распада этого радионуклида.

Если количество ядер дочернего изотопа в начальный момент времени равнялось нулю, то в момент времени t его можно выразить через исходное количество ядер материнского формулой:

$$N_2 = N_{10} \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} (\exp(-\lambda_1 t) - \exp(-\lambda_2 t)),$$

где λ_2 – постоянная распада дочернего изотопа.

Эта формула учитывает рост числа ядер в результате распада материнского изотопа и сокращение их количества за счет распада дочернего.

В цепочке из трех звеньев количество ядер третьего продукта (при условии, что начальные количества второго и третьего изотопов равны нулю) будет выражаться следующим образом:

$$N_3 = N_{10} \lambda_1 \lambda_2 \left(\frac{\exp(-\lambda_1 t)}{(\lambda_2 - \lambda_1)(\lambda_3 - \lambda_1)} + \frac{\exp(-\lambda_2 t)}{(\lambda_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)} + \frac{\exp(-\lambda_3 t)}{(\lambda_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)} \right).$$

В общем случае для неразветвленной цепочки превращений:

$$N_n = N_{10} \prod_{i=1}^{n-1} \lambda_i \left(\sum_{i=1}^n \frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \right),$$

где λ_i – постоянная распада i -го изотопа.

В том случае, когда требуется общее решение при неравных нулю начальных количествах N_{n0} , где $n > 0$, его можно получить путем добавления к этой формуле аналогичных выражений для более коротких цепочек, начинающихся с соответствующих N_{n0} .

Если цепочка содержит ветвление, т.е. некоторый изотоп в ней имеет более одного дочернего вещества, то выражение для количества вещества дочернего изотопа может быть представлено в виде суммы цепочек, идущих по разным ветвям, при этом в формуле должна быть учтена вероятность перехода p_i :

$$N_n = N_{10} \prod_{i=1}^{n-1} (\lambda_i p_i) \left(\sum_{i=1}^n \frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \right), \quad (13.2)$$

Изменения концентраций изотопов описываются теми же математическими законами, что и их количества (13.2). Аналогичное выражение может быть записано для активностей радионуклида и его дочерних элементов на момент времени t через его начальную активность:

$$A_n = A_{10} \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \prod_{i=1}^{n-1} (\lambda_i p_i) \left(\sum_{i=1}^n \frac{\exp(-\lambda_i t)}{\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n (\lambda_j - \lambda_i)} \right). \quad (13.3)$$

4.5 Граничные условия для задач переноса

В расчетном коде GeRa поддерживаются два типа граничных условий для задач переноса:

- Условие типа Дирихле (I рода):

$$C(x, t)|_{\Gamma} = C_{\Gamma}(x, t). \quad (35)$$

- Условие типа Неймана (II рода):

$$-D \nabla C \cdot \vec{n} = q_{D, \Gamma}, \quad (36)$$

где $q_{D, \Gamma}$ – диффузионный поток примеси через границу Γ . В большинстве случаев данное граничное условие ставится на удаленных, либо непроницаемых границах расчетной области с нулевым значением $q_{D, \Gamma}$.

Заметим, что задача переноса определена некорректно, если на участке границы с фильтрационным потоком, направленным внутрь расчетной области, не задана концентрация примесей во входящем потоке. Для удобства использования кода при такой неверной постановке граничных условий пользователем (использовании условия II рода на входе) в GeRa автоматически условие второго рода заменяется однородным условием первого рода $C(x, t)|_{\Gamma} = 0$.

5 Модель плотностной конвекции

5.1 Реализованная в коде математическая модель

Исходная система уравнений выглядит следующим образом [11,12]:

$$\begin{cases} \frac{\partial(\varphi\rho)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = \rho_s Q, \\ \varphi \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} C_i) - \nabla \cdot (D_i \nabla C_i) = f_i, i = 1 \dots N_{comp} \end{cases} \quad (37)$$

Индекс i отвечает за переносимую химическую компоненту раствора, всего N_{comp} переносимых компонент. Система дополняется выражением для фильтрационного потока (закон Дарси)

$$\vec{u} = -K \left(\nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \quad (38)$$

и зависимостью плотности от концентрации, примем ее простейшей – линейной:

$$\rho = \rho_0 + \sum_{i=1}^{N_{comp}} \kappa_{vol,i} C_i \quad (39)$$

Заметим, что h в данном случае – гидравлический напор, выраженный в терминах высоты столба жидкости с референтной плотностью ρ_0 . $\kappa_{vol,i}$ – коэффициент объемного расширения.

После учета (38),(39) и определения коэффициента упругой емкости $s = \frac{\partial \varphi}{\partial h}$

первое уравнение записывается в терминах напора и результирующая система выглядит следующим образом:

$$\begin{cases} \rho s \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla \cdot \left(\rho K \left(\nabla h + \frac{\rho - \rho_0}{\rho_0} \nabla z \right) \right) = -\varphi \sum_{i=1}^{N_{comp}} \kappa_{vol,i} \frac{\partial C_i}{\partial t} + \rho_Q Q, \\ \varphi \frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla (\vec{u} C_i) - \nabla (D_i \nabla C_i) = f_i, i = 1 \dots N_{comp} \end{cases} \quad (40)$$

Отметим, что традиционно при решении задачи плотностной конвекции пренебрегают изменением пористости породы в силу малости этого изменения.

5.2 Методика трактовки граничных условий растворения

Вопросы корректной постановки граничных условий растворения рассмотрены в классической работе [13], где авторами показано, что при полноценной постановке этого условия диффузионный поток примеси через границу должен сопровождаться обратно направленным потоком жидкости, тем самым позволяя учесть заполнение рассолом высвободившихся в результате растворения вещества пор. Однако обычно при постановке задач (например, задача Элдера [14] или соляного купола [15]) обычно используют гораздо более простую формулировку этого граничного условия – это совокупность нулевого потока для задачи фильтрации и заданной концентрации C_s (концентрации насыщения, пределу растворимости) на границе для задачи переноса:

$$\begin{aligned} \vec{u} \cdot \vec{n}|_{\Gamma} &= 0 \\ C|_{\Gamma} &= C_s \end{aligned} \quad (41)$$

В работе [16] продемонстрировано, что такая постановка граничных условий приводит к следующим нежелательным эффектам:

- нефизичному падению напора в расчетной области, либо полной невозможности решить задачу в случае, когда упругая емкость u среды отсутствует (нулевая).

- противоречащему физике явления притоку жидкости через границы с условием первого рода (продемонстрировано на задаче Элдера в работе [16]).

Причина таких побочных эффектов кроется в том факте, что при такой постановке граничного условия уравнение фильтрации не учитывает притока массы раствора, обусловленного притоком одной только примеси через границу. В статьях [13,16] предложена коррекция данного условия, которая заключается в замене первого из условий в (41) на условие

$$\vec{u} \cdot \vec{n}|_{\Gamma} = \frac{\vec{J} \cdot \vec{n}|_{\Gamma}}{1 - C_s / \rho_s}, \quad (42)$$

в котором \vec{J} – диффузионный поток, определяемый по закону Фика, $\vec{J} = -D\nabla C$. В общем случае аналитического выражения этого потока нет, и в GeRa используется его численная аппроксимация. Такой подход позволяет учесть приток примеси в уравнении баланса массы жидкости и избежать вышеперечисленных проблем в решении фильтрационной задачи.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Румынин В.Г. Геомиграционные модели в гидрогеологии. СПб.: Наука. – 2011. – 1158с.
2. Bear J., Cheng A. H. D. Modeling groundwater flow and contaminant transport. – Springer Science & Business Media, 2010. – Т. 23.
3. Diersch H. J. G., Perrochet P. On the primary variable switching technique for simulating unsaturated–saturated flows //Advances in Water Resources. – 1999. – Vol. 23. – №. 3. – Pp. 271-301.

4. van Genuchten M.Th. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils //Soil Sci. Soc. Am. J. – 1980 – Vol.44 – №5 – Pp.892-898.
5. Aavatsmark I. Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids // Computational Geosciences. 2007. Vol.11, Pp. 199-206.
6. Danilov A.,Vassilevski Yu. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes.// Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009 .Vol. 24, № 3. Pp. 207-227.
7. Г.И. Баренблатт, В.М. Ентов, В.М. Рьжик “Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа”, издательство “Недра” Москва 1972.
8. Forsyth, P. A. & Kropinski, M. C. Monotonicity considerations for saturated-unsaturated subsurface flow. SIAM J. Sci. Comput.,1997, 18(5) 1328-1354.
9. Barth T., Ohlberger M. Finite volume methods: foundation and analysis //Encyclopedia of computational mechanics. – 2004 – 57 p.
10. Diersch H. J. G. Treatment of free surfaces in 2D and 3D groundwater modeling //FEFLOW, White Papers. – 2005. – Т. 1. – С. 67-100.
11. Kolditz O. et al. Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable density flow and transport models // Advances in Water Resources. – 1998. – Vol. 21. – №. 1. – Pp. 27-46.
12. Guo W., Langevin C. D. User's guide to SEAWAT: A computer program for simulation of three-dimensional variable-density ground-water flow. – US Department of the Interior, US Geological Survey, 2002 – 87p.
13. Hassanizadeh S. M., Leijnse T. On the modeling of brine transport in porous media //Water Resources Research. – 1988. – Vol. 24. – No. 3. – Pp. 321-330.
14. Voss C. I., Souza W. R. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone //Water Resources Research. – 1987. – Vol. 23. –No. 10. – Pp. 1851-1866.
15. Younes A., Ackerer P., Mose R. Modeling variable density flow and solute transport in porous medium: 2. Re-evaluation of the salt dome flow problem //Transport in Porous Media. – 1999. – Vol. 35. – №. 3. – Pp. 375-394.
16. Hidalgo J. J., Carrera J., Medina A. Role of salt sources in density-dependent flow //Water resources research. – 2009. – Vol. 45. – No. 5 .

17. Šimůnek J. et al. The HYDRUS-1D software package for simulating the movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media, version 4.0, HYDRUS software series 3 //Department of Environmental Sciences, University of California Riverside, Riverside, California, USA. – 2008. – 315 p.

18. Jacques D., Šimůnek J. User manual of the multicomponent variably-saturated flow and transport model HP1 //Description, Verification and Examples, Version. – 2005. – Vol. 1. – 79 p.

19. Charlton S. R., Parkhurst D. L. Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages //Computers & Geosciences. – 2011. – Vol. 37. – No. 10. – Pp. 1653-1663.

20. В.И. Пляскин, Р.А. Косилов, Справочно-информационная интерактивная система ядерно-физических свойств нуклидов и радиоактивных цепочек распада, Известия вузов. Ядерная энергетика, 1998, №6 с. 45-52.