

УДК 519.688

ВЕРИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ НЕНАСЫЩЕННОЙ ФИЛЬТРАЦИИ И ПЕРЕНОСА В ЗОНЕ АЭРАЦИИ НА ПРИМЕРЕ РАСЧЕТНОГО КОДА GeRa

И. В. Капырин, В. В. Сускин, А. В. Расторгуев, К. Д. Никитин
(ИБРАЭ РАН, ИВМ РАН, г. Москва)

Дается описание математической и численной моделей ненасыщенной фильтрации и переноса в зоне аэрации, реализованных в расчетном коде GeRa. Представлен набор из четырех верификационных тестов и результаты верификации этих моделей. В силу отсутствия аналитических решений верификация проводится путем сравнения результатов расчетов по коду GeRa с результатами, полученными с помощью широко известных кодов FEFLOW, HYDRUS-1D, VS2DT, TOUGH2, а также с экспериментальными данными. Продемонстрирована возможность использования в GeRa схемы противопотоковой аппроксимации насыщенности повышенной точности, позволяющей существенно снизить требования к шагу сетки при моделировании прохождения фронтов насыщения.

Ключевые слова: ненасыщенная фильтрация, перенос в зоне аэрации, верификация, кросс-верификация.

Введение

Необходимость моделирования процессов ненасыщенной фильтрации и переноса в зоне аэрации часто возникает при решении геоэкологических задач, в частности при обосновании безопасности приповерхностных захоронений радиоактивных отходов или оценке влияния различных объектов ядерного наследия на качество подземных вод. Математическая формулировка задачи основывается на уравнении Ричардса [1], которое дополняется зависимостями влагосодержания и относительной проницаемости от высоты всасывания. Соответствующие численные модели достаточно сложны с вычислительной точки зрения: требуется решение нелинейной задачи фильтрации, особенно сложное в случае орошения сухой породы либо в условиях с сильно неоднородными параметрами. Для обеспечения эффективности расчетов разработаны методы замены основной переменной (давления на насыщенность или влагосодержание, см. [2, 3]), а также различные методы решения соответствующих нелинейных задач, обзор которых дан в работе [4].

При разработке и внедрении расчетного кода этапом, предвещающим его применение на практике, является верификация численной модели. Верификация заключается в расчете задач с известными референтными решениями (аналитическими, численными или полученными экспериментальным путем) и последующей оценке соответствия результатов, полученных по верифицируемому коду, референтным. В настоящей работе описана верификация численных моделей расчетного кода GeRa [5, 6], разрабатываемого в ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН в рамках проектного направления "Прорыв" ГК "Росатом", на четырех тестовых задачах ненасыщенной фильтрации и переноса в зоне аэрации. Код GeRa (Геомиграция Радионуклидов) позволяет моделировать процессы геофильтрации и геомиграции в трехмерной постановке. Он основан на дискретизации задач методами конечных объемов на трехмерных неструктурированных многогранных сетках. На первых трех задачах в силу отсутствия аналитических решений проводится кросс-верификация с кодами, получившими широкое признание гидрогеологов: FEFLOW [7], VS2DT [8]. Впервые (насколько известно авторам

статьи) предложена и протестирована численная модель влагопереноса с использованием кусочно-линейного восполнения высоты всасывания в ячейках расчетной сетки. Четвертый тест основан на реальном эксперименте по фильтрации и переносу примеси в лотке, проводится сравнение результатов численного эксперимента с реальными данными. В рамках решения этих тестов, помимо точности, проверяется *робастность* кода — применимость для решения задач с неоднородными параметрами, с образованием насыщенной зоны внутри расчетной области и орошением сухих пород.

Статья построена следующим образом: в первом разделе дана математическая постановка решаемых задач; во втором кратко описаны численные методы, использованные в GeRa для решения задач ненасыщенной фильтрации и переноса; разделы с третьего по шестой посвящены результатам расчета четырех тестовых задач; в Заключении обсуждаются полученные результаты.

1. Математическая модель

Процесс ненасыщенной фильтрации обычно описывается уравнением Ричардса [1]. Сформулируем его здесь с учетом упругости среды [9, 7], проявляющейся в насыщенном режиме (в терминах *влагосодержание — высота всасывания*):

$$\frac{\partial \theta(\psi)}{\partial t} + S(\psi) s_{stor} \frac{\partial \psi}{\partial t} - \nabla K(\psi) \nabla(\psi + z) = Q. \quad (1)$$

Для зависимости $\theta(\psi)$ использована модель Ван Генухтена [10]:

$$\theta(\psi) = \begin{cases} \theta_r + \frac{\theta_s - \theta_r}{(1 + |\alpha\psi|^n)^m} & \text{при } \psi < 0; \\ \theta_s & \text{при } \psi \geq 0, \end{cases} \quad (2)$$

а для коэффициента фильтрации — модель Муалема [11]:

$$K(\psi) = K_s K_r(\psi) = K_s S_e^{0,5} \left[1 - \left(1 - S_e^{1/m} \right)^m \right]^2. \quad (3)$$

В уравнениях (1)–(3) приняты следующие обозначения: θ — объемное влагосодержание; $\psi [L]^*$ — высота всасывания, связанная с приведенным напором h соотношением

$$h = \psi + z; \quad (4)$$

$s_{stor} [L^{-1}]$ — коэффициент упругости; $K [LT^{-1}]$ — коэффициент влагопереноса; θ_r, θ_s — остаточное (т. е. не извлекаемое гравитационным путем) влагосодержание и влагосодержание при полном насыщении; S, S_e — насыщенность и эффективная насыщенность соответственно, определяемые по формулам

$$S = \frac{\theta}{\theta_s}; \quad S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r}; \quad (5)$$

n — эмпирический параметр модели, отражающий характеристики пор; m выражается через n по формуле $m = 1 - 1/n$; $\alpha [L^{-1}]$ — параметр модели, функция размера пор; $K_s [LT^{-1}]$ — коэффициент фильтрации в условиях насыщения; $K_r(\psi)$ — относительная проницаемость; $Q [T^{-1}]$ — удельные объемные источники и стоки. Здесь и далее предполагается, что влагосодержание при полном насыщении θ_s равно пористости и плотность жидкости постоянна.

Уравнение переноса в зоне аэрации с учетом сорбции и радиоактивного распада учитывает изменение влагосодержания, адвекцию, диффузию-дисперсию, сорбцию и радиоактивный распад:

$$\frac{\partial ((\theta + \rho_b K_d) C)}{\partial t} - \nabla D \nabla C + \nabla(\vec{u} C) + \lambda(\theta + \rho_b K_d) C = f, \quad (6)$$

* При обозначении величин, за исключением безразмерных, в квадратных скобках указаны единицы их измерения, где L, T, M — единицы длины, времени и массы соответственно.

где $C [ML^{-3}]$ — концентрация растворенного вещества; $\vec{u} = (u_1, u_2, u_3) [LT^{-1}]$ — скорость Дарси, которая определяется как $\vec{u} = -K(\psi) \nabla(\psi + z)$; $\lambda [T^{-1}]$ — константа радиоактивного распада; $f [ML^{-3}T^{-1}]$ — массовые источники и стоки; $\rho_b [ML^{-3}]$ — плотность породы; $k_d [M^{-1}L^3]$ — коэффициент распределения; D — тензор диффузии-дисперсии, определяемый по формуле

$$D = \theta d_m I + \|\vec{u}\| \left[\alpha_l E(\vec{u}) + \alpha_t (I - E(\vec{u})) \right], \quad E_{ij}(u) = \frac{u_i u_j}{\|\vec{u}\|^2}, \quad i, j \in \{1, 2, 3\}, \quad (7)$$

где $d_m [L^2T^{-1}]$ — коэффициент молекулярной диффузии в пористой среде в жидкой фазе; $\alpha_l, \alpha_t [L]$ — продольная и поперечная дисперсивность соответственно; I — единичная матрица.

2. Численная модель

Для дискретизации задачи фильтрации (1), а также диффузионных задач по пространству в коде GeRa может быть использован один из трех методов конечных объемов (МКО):

- линейная классическая схема с двухточечной аппроксимацией потока;
- О-схема с многоточечной аппроксимацией потока [12];
- нелинейная монотонная схема конечных объемов с двухточечной аппроксимацией потока [13].

Ключевым вопросом является дискретизация уравнения (1) по времени и решение нелинейной системы. В GeRa решение задачи производится в терминах напоров, а именно решается уравнение (1), переписанное относительно одной переменной h :

$$\frac{\partial \theta(h - z)}{\partial t} + S s_{stor} \frac{\partial h}{\partial t} - \nabla K(h - z) \nabla h = Q. \quad (8)$$

Нелинейная задача (8) решается модифицированным методом простой итерации (ММПИ), модификация заключается в линеаризации влагосодержания по напору на каждой итерации. Для этого вводится дифференциальная влагоемкость (или гидрофизическая емкость) c_θ , определяемая как

$$c_\theta(\psi) = \frac{\partial \theta(\psi)}{\partial \psi}. \quad (9)$$

Для обеспечения выполнения закона сохранения массы на каждой итерации дискретизация производной влагосодержания по времени выполняется следующим образом [14]:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} \approx c_\theta(\psi^{n+1,k}) \frac{h^{n+1,k+1} - h^{n+1,k}}{\Delta t} + \frac{\theta(\psi^{n+1,k}) - \theta^n}{\Delta t}. \quad (10)$$

Индекс k означает номер итерации, n — временной индекс; $\psi^{n+1,k}$ вычисляется по формуле (4). Первый член в правой части (10) при сходимости итераций стремится к нулю. Второй член известен с предыдущего шага итераций. Полностью ММПИ при неявной дискретизации уравнения (8) определяется как

$$c_\theta(\psi^{n+1,k}) \frac{h^{n+1,k+1} - h^{n+1,k}}{\Delta t} + \frac{\theta(\psi^{n+1,k}) - \theta^n}{\Delta t} + S(\psi^{n+1,k}) s_{stor} \frac{h^{n+1,k+1} - h^n}{\Delta t} - \nabla K(\psi^{n+1,k}) \nabla h^{n+1,k+1} = Q^{n+1}. \quad (11)$$

Отметим, что при вычислении потоков через общую грань двух ячеек сетки необходимо определить, как вычислять относительную проницаемость K_r для этой грани. Во избежание "паразитных" осцилляций решения [15, 2] в GeRa используется противопотоковое значение K_r , т. е. этот коэффициент берется из той ячейки, которая лежит выше по потоку (в которой выше напор). В целях уменьшения эффекта размывания фронта насыщенности в GeRa реализована возможность построения кусочно-линейного восполнения высоты всасывания в ячейках сетки (по аналогии с

лимитерами, используемыми при решении задач переноса [16, 17]) для последующего вычисления относительной проницаемости на гранях, которое может быть включено по желанию пользователя. При этом в каждой ячейке сетки точно либо приближенно решается оптимизационная задача поиска градиента напора, обеспечивающего минимальное среднеквадратичное отклонение линейной функции, аппроксимирующей напор, от значений напора в соседних ячейках. Ограничением для градиента при этом является недопущение образования локальных максимумов функции на гранях сетки.

Для дискретизации задачи переноса могут применяться как полностью неявные схемы МКО, так и явно-неявная схема с явной аппроксимацией адвекции и неявной аппроксимацией диффузии, которая и используется далее в тестах. В явно-неявной схеме для дискретизации оператора адвекции используется схема высокого порядка, кусочно-линейное восполнение в которой строится путем либо точного решения оптимизационной задачи [18], либо ее приближенного решения [16].

При моделировании возможны два ограничения на шаг по времени. Первое связано со сходимостью решения нелинейной задачи с помощью ММПИ, второе — с устойчивостью дискретизации задачи переноса при использовании явных схем (сеточное число Куранта не превышает 1). При решении нелинейной задачи шаг по времени выбирается динамически: при отсутствии сходимости ММПИ шаг по времени уменьшается; при многократном успешном решении нелинейной задачи за достаточно малое число итераций (определяется пользователем) шаг увеличивается.

3. Одномерная ненасыщенная фильтрация в сухой грунт

Данный тест был предложен М. Селиа и др. [14]. Впоследствии он стал стандартным для тестирования задач ненасыщенной фильтрации [2, 19]. Исследуется фильтрация в вертикальной колонке глубиной 100 см. Расчетное время — 1 сутки. Начальная высота всасывания в исследуемом столбце — 1 000 см. Граничные условия: в нижней точке высота всасывания равна — 1 000 см, в верхней точке — 75 см. Параметры задачи приведены в табл. 1.

Начальные условия задачи соответствуют практически сухому грунту. При принятых параметрах водно-физической модели распространение влаги по вертикали происходит с очень крутым фронтом, для воспроизведения которого, как показала работа [7], нужна подробная пространственная дискретизация.

В процессе расчетов оценивается зависимость полученных результатов от пространственной дискретизации: сравниваются зависимости высоты всасывания от вертикальной координаты (глубины) в момент времени $t = 1$ сут.

Данный тест был рассчитан с использованием кода GeRa на двух сетках: с шагом по вертикальной координате $\Delta z = 0,5$ см и $\Delta z = 2,5$ см. Значение шага по времени изменялось от 0,0009375 до 0,01 суток. На рис. 1 показаны профили высоты всасывания в момент времени $t = 1$ сут, полученные на этих сетках по схемам противопотоковой аппроксимации насыщенности с кусочно-линейным восполнением и без него. Схема, в которой относительная проницаемость определяется значением насыщенности в ячейке выше по потоку без использования кусочно-линейного восполнения высоты всасывания, демонстрирует большее расстояние прохождения фронта насыщенности, нежели схема с кусочно-линейным восполнением. При измельчении шага сетки фронт смещается влево, к решению по схеме с кусочно-линейным восполнением.

На рис. 2 приведено сопоставление результатов, полученных по кодам GeRa и FEFLOW на одинаковой сетке ($\Delta z = 0,5$ см), откуда видно их близкое совпадение. Добиться результатов, аналогичных полученным по FEFLOW, удается только при использовании схемы с кусочно-линейным восполнением. Отсюда можно сделать вывод, что высокое качество переноса фронтов насыщенности достигается путем использования специальных техник аппроксима-

Таблица 1

Параметры задачи одномерной ненасыщенной фильтрации

Параметр	Значение
Коэффициент фильтрации	0,00922 см/с
Пористость θ_s	0,368
Минимальная влажность θ_r	0,102
Параметр уравнения состояния n	2
Параметр уравнения состояния α	0,0335 см ⁻¹

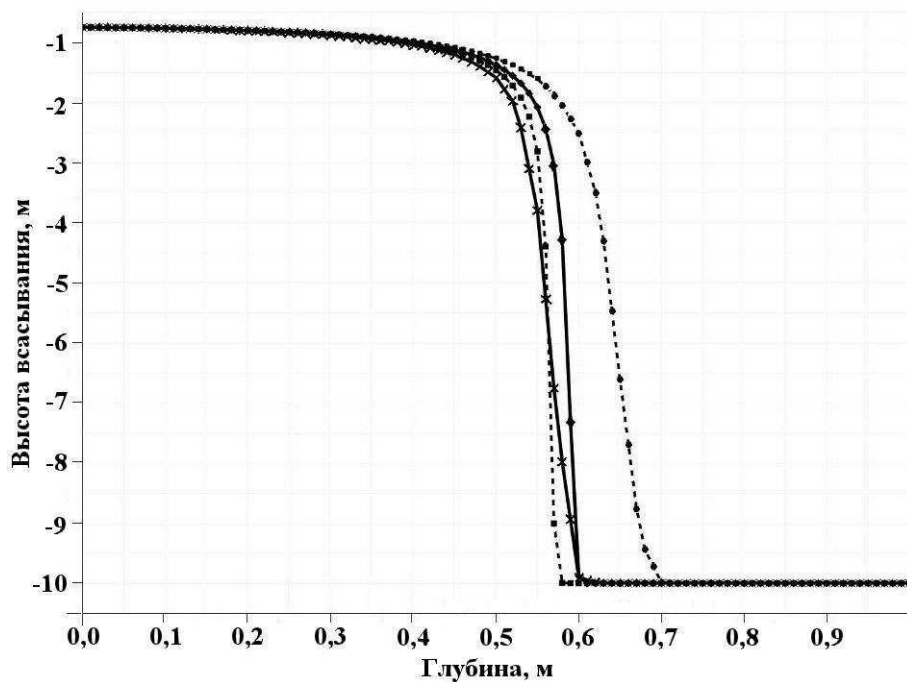


Рис. 1. Высота всасывания в колонке при $t = 1$ сут, полученная по коду GeRa: $\text{---}\times\text{---}$ с кусочно-линейным восполнением, $\Delta z = 2,5$ см; $\text{---}\blacksquare\text{---}$ с кусочно-линейным восполнением, $\Delta z = 0,5$ см; $\text{---}\bullet\text{---}$ без кусочно-линейного восполнения, $\Delta z = 2,5$ см; $\text{---}\blacklozenge\text{---}$ без кусочно-линейного восполнения, $\Delta z = 0,5$ см

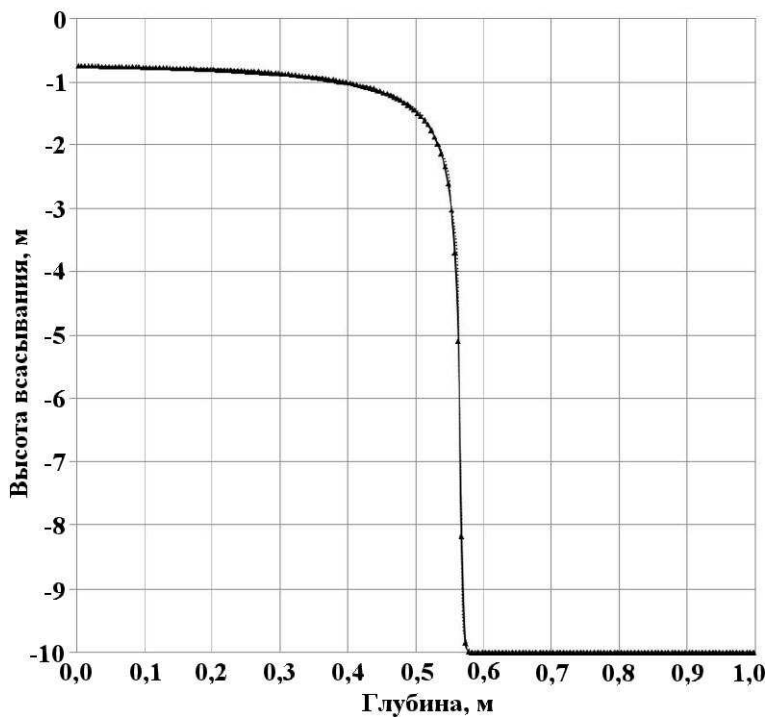


Рис. 2. Сравнение высоты всасывания в колонке при $t = 1$ сут, полученной по коду FEFLOW ($\text{---}\bullet\text{---}$) и по коду GeRa ($\text{---}\blacktriangle\text{---}$) с использованием противотоковой аппроксимации насыщенности с кусочно-линейным восполнением ($\Delta z = 0,5$ см)

ции насыщенности при вычислении относительной проницаемости. Такие методы применяются как в FEFLOW (см. разд. 7 работы [2]), так и в GeRa.

4. Задача о капиллярном барьере

Данная задача была впервые решена Ольденбургом и Пруссом в работе [20] для тестирования кода TOUGH2, однако их результаты значительно расходились с аналитическими. Позднее Веббом была использована противопотоковая аппроксимация насыщенности в коде TOUGH2, а формула Росса [21] модифицирована для учета уравнения состояния Ван Генухтена. В итоге численные результаты показали близкое совпадение с аналитическим решением [22]. Позднее данная задача была использована при верификации кода FEFLOW [7].

При тестировании сравнивается расчетное расстояние отклонения потока капиллярным барьером с аналитическим решением и проводится кросс-верификация с кодами FEFLOW и TOUGH2. Также тест позволяет проверить возможности решения задач орошения сильно осушенных грунтов, что обычно вызывает большие трудности с вычислительной точки зрения, задач с сильно неоднородными гидравлическими параметрами, с образованием насыщенной зоны внутри расчетной области.

В литературе известна формула Росса [21], дающая аналитическое выражение *расстояния отклонения потока барьером*. Физически это означает следующее. С ростом абсциссы в некоторый момент начинается просачивание жидкости через барьер, и в некоторой точке оно сравнивается с инфильтрационным потоком. В этой точке достигается максимально возможный поток через верхний пласт в направлении его простираения, который не может быть увеличен в дальнейшем, и весь вновь поступающий сверху поток компенсируется оттоком вниз. Абсцисса данной точки называется расстоянием отклонения потока барьером, для данной задачи она рассчитана в [7] и составляет 32,6 м.

Капиллярные барьеры образуются в *ненасыщенных* условиях, когда слой мелкозернистых пород лежит на слое крупнозернистых отложений. Барьер возникает из-за разной проницаемости мелко- и крупнозернистых пород в ненасыщенных условиях. На рис. 3 представлены графики зависимости коэффициентов фильтрации мелкозернистого песка и гравия от высоты всасывания. Из приведенного графика следует, что при одной и той же высоте всасывания, близкой к значению в условиях полного насыщения (например, $\psi = -5$ см), коэффициенты фильтрации песка и гравия различаются на четыре порядка. При этом в гравии коэффициент фильтрации при ненасыщенных условиях меньше. Это дает основание использовать капиллярные барьеры для изоляции отходов.

В расчетной области задачи о капиллярном барьере присутствуют два наклонных пласта мощностью 0,5 м каждый (рис. 4). Верхний пласт сложен мелкозернистым песком, нижний — гравием. Угол наклона капиллярного барьера составляет 5%. Гидравлические параметры пластов приведены в табл. 2.

На верхней границе задано инфильтрационное питание 0,0048 м/сут. На левой границе задано нулевое условие второго рода (непротекание), на нижней и правой границах — нулевое условие первого рода для напора h ($h = \psi + z = 0$). При этом правый нижний угол соответствует уровню подземных вод с $\psi = 0$. Начальные условия в пределах модели — нулевой напор ($h = 0$). Тогда в соответствии с конфигурацией области высота всасывания

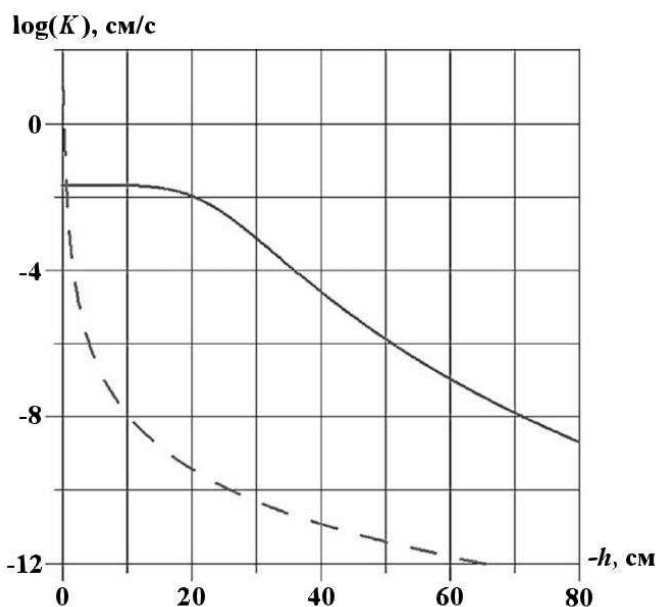


Рис. 3. Зависимость коэффициента фильтрации от всасывающего давления: — — песок; - - - - гравий

Гидравлические параметры пластов в задаче о капиллярном барьере

Параметр	Верхний слой (мелкозернистый песок)	Нижний слой (гравий)
Влагосодержание при полном насыщении θ_s	0,39	0,42
Остаточное влагосодержание θ_r	0,154	0,012
Коэффициент фильтрации при полном насыщении K_s , см/с	0,021	10,1
Параметр уравнения состояния n	5,74	2,19
Параметр уравнения состояния α , см ⁻¹	0,039	4,9

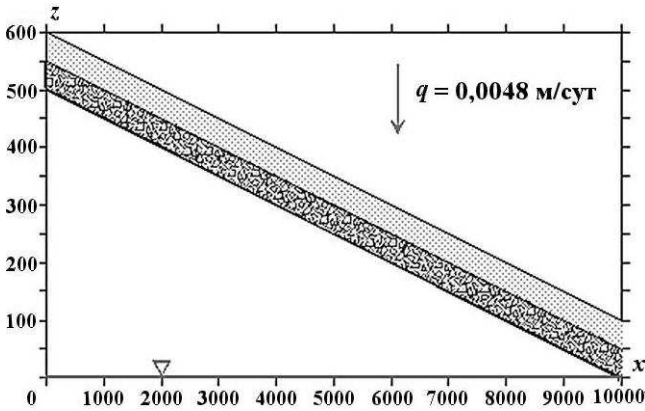


Рис. 4. Постановка задачи о капиллярном барьере

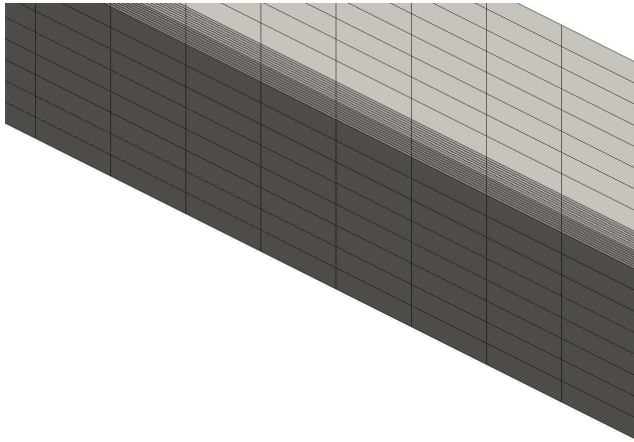


Рис. 5. Фрагмент сетки в плоскости XOZ со сгущением к поверхности раздела пластов

в левом верхнем углу $\psi = -600$ см, что соответствует сильно осушенному грунту. Расчет проводится до $t = 100$ сут (шаг по времени изменяется от 0,00530674 до 0,0240529 сут); аналогично работе [7] считается, что этого времени достаточно для установления решения.

В коде FEFLOW [7] расчеты проводились на конечно-элементной модели. Минимальное расстояние между узлами в вертикальном направлении вблизи границы слоев составляло 0,5 см. При моделировании с помощью кода GeRa использовалась гексаэдральная сетка, содержащая 1600 ячеек. При построении сетки в коде GeRa расчетная область была разделена на четыре пласта (рис. 5): верхний и нижний мощностью 0,45 м и два средних мощностью по 0,05 м. Для дискретизации каждого из них используется одинаковое количество сеточных слоев по вертикали — 8. С учетом результатов предшествующих работ использованы сетки с адаптивным измельчением к поверхности раздела пластов. Характеристики сетки следующие: шаг по оси X — 2 м; шаг по оси Z во 2-м и 3-м слоях — 0,00625 м, в 1-м и 4-м слоях — 0,05625 м.

Задача решалась с помощью всех трех реализованных схем дискретизации фильтрационной задачи: двухточечной, O-схемы и нелинейной схемы. Результаты, полученные по ним, практически совпадают — отличия находятся в пределах нескольких процентов. На рис. 6 (см. также цветную вкладку) представлены результаты расчета насыщенности по коду GeRa. Их сравнение с результатами, полученными по FEFLOW в [7],

демонстрирует близкое совпадение структур насыщенности в расчетной области. Для понимания структуры потока на рис. 7 (см. также цветную вкладку) показано распределение напора в расчетной области, рассчитанное с помощью GeRa. На рис. 8 показано рассчитанное отношение γ потока через барьер (поверхность раздела мелкозернистой и крупнозернистой пород) к инфильтрации. Можно констатировать качественное соответствие результатов расчетов аналитическому значению расстояния отклонения потока барьером и количественное — результатам, полученным с помощью FEFLOW в [7] и TOUGH2 в [22]. Заметим, что в то время как в решении FEFLOW наблюдаются осцилляции (см. рис. 10.34 в [7]), решение GeRa демонстрирует монотонность.

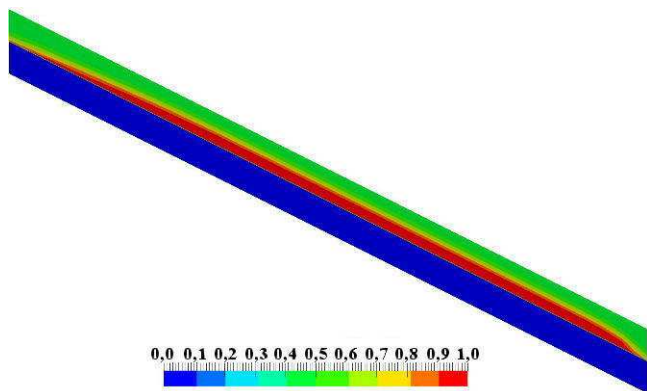


Рис. 6. Насыщенность, рассчитанная по коду GeRa (двухточечная схема)

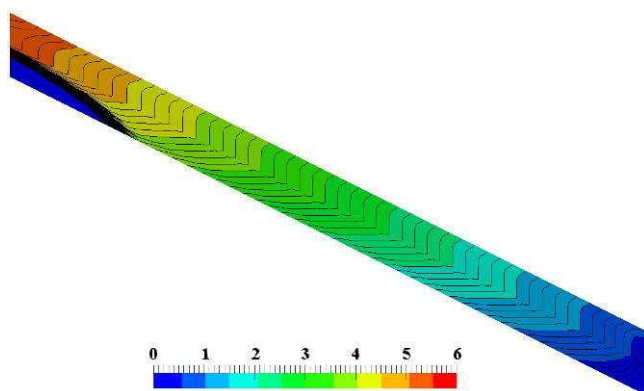


Рис. 7. Распределение гидравлического напора в расчетной области

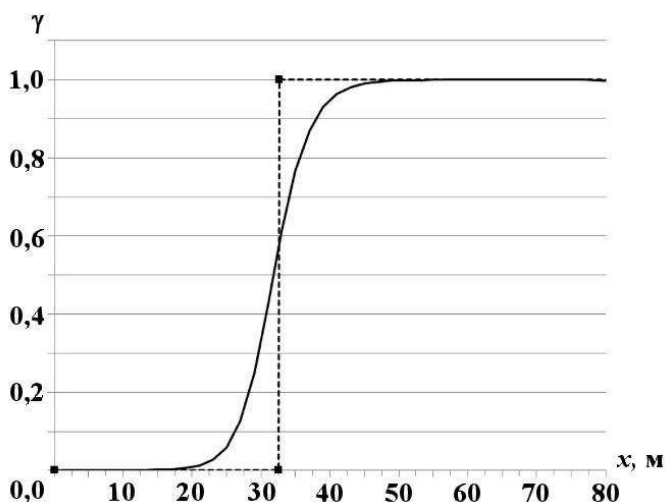


Рис. 8. Отношение просачивания через барьер к инфильтрации: --■-- по формуле Росса; — по коду GeRa, двухточечная схема

5. Двумерная насыщенно-ненасыщенная фильтрация и адвективно-дисперсионный перенос в неоднородной зоне аэрации с учетом радиоактивного распада

Данная задача используется в качестве обучающей для программы VS2DT [8]. Особенностью теста является неоднородность параметров среды. Расчетный разрез тестовой задачи и дискретизация модели, реализованной в VS2DT, показаны на рис. 9, на котором представлена расчетная область, имеющая размеры $6,47\text{ м} \times 4,06\text{ м}$. Большая часть расчетной области заполнена хорошо проницаемым песком, однако в ней присутствует линза из менее проницаемого пылеватого грунта. Необходимые параметры приведены в табл. 3.

На боковых границах ниже отметки $-4,5\text{ м}$ задано граничное условие первого рода с напором $H = -4,5\text{ м}$, выше этой отметки — условие просачивания (seep), формулируемое следующим образом: в ненасыщенных условиях фильтрационный поток q через данный участок границы равен нулю; в насыщенных условиях высота всасывания равна нулю. Это условие реализуется на практике путем переключения на итерациях ММПИ с условия непротекания ($q = 0$) на условие заданного напора ($H = z$) при достижении полного насыщения и обратно в случае отрицательного значения фильтрационного потока через границу.

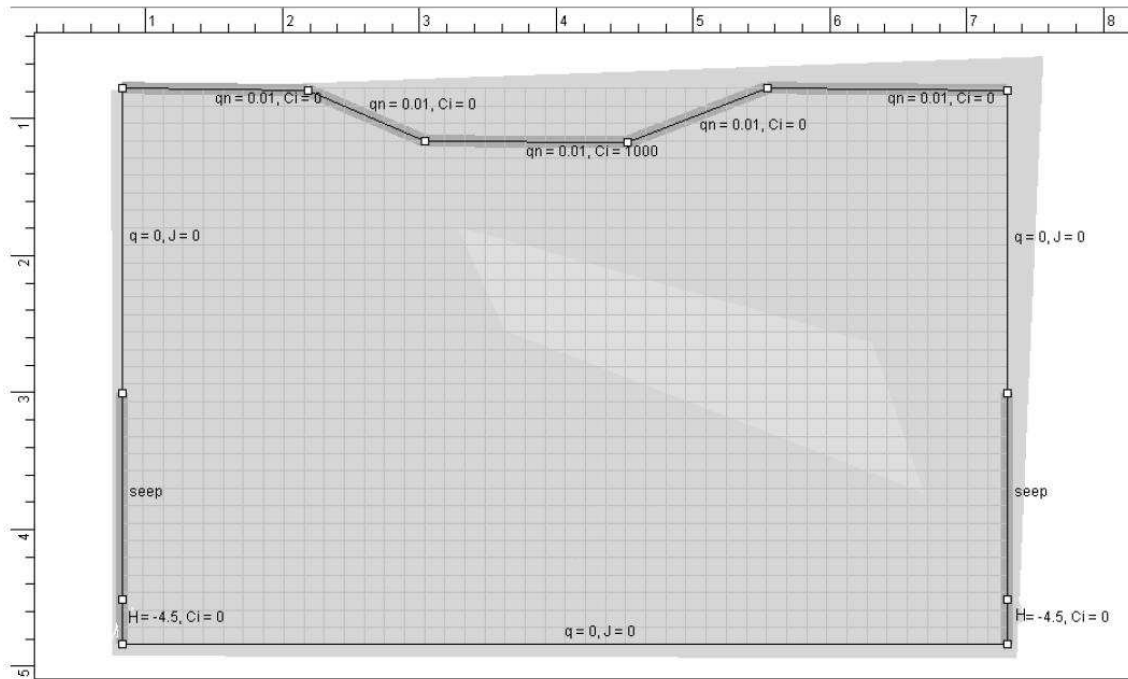


Рис. 9. Дискретизация к задаче двумерной фильтрации, реализованная с помощью кода VS2DT [8]

Таблица 3

Параметры к двумерной задаче фильтрации и массопереноса

Параметр	Песок	Пылеватый грунт
Коэффициент фильтрации при полном насыщении, м/сут	12,4	0,7
Влагоудержание при полном насыщении θ_s	0,39	0,4
Остаточное влагоудержание θ_r	0,06	0,14
Параметр уравнения состояния n	5,8	7,0
Параметр уравнения состояния α , м ⁻¹	2,3	0,25
Продольная дисперсивность α_L , м	0,1	0,1
Поперечная дисперсивность α_T , м	0,01	0,01
Константа распада λ , сут ⁻¹	0,03	0,03

Отметка $-4,5$ м соответствует нулевой высоте всасывания, и выше этой отметки начальная высота всасывания задана из условия гидростатики. На верхней границе задано инфильтрационное питание $q_n = 0,01$ м/сут. В углублении, которое можно интерпретировать как хранилище отходов, концентрация инфильтрата C_i составляет 1000 мг/л, в остальной области на верхней границе она равна нулю. Расчетное время — 110 суток.

Референтные расчеты были выполнены по коду VS2DT на сетке из 44×32 ячеек (см. рис. 9) с размером ячейки $0,13$ м \times $0,15$ м. Для моделирования данного теста с использованием кода GeRa бралась треугольно-призматическая расчетная сетка со средним шагом $0,1$ м в плоскости XOZ , содержащая 4522 ячейки (рис. 10, см. также цветную вкладку). Моделирование потребовало 1809 шагов по времени, шаг увеличивался от $0,000125$ сут в начале расчета до 1 сут в конце расчета (шаг был ограничен сверху 1 сутками).

Отметим, что параметры (в частности, α) пылеватого грунта таковы, что с самого начала моделирования область, занятая им, близка к насыщению. В процессе моделирования именно эта зона становится наиболее проводящей благодаря высокому насыщению пор водой, несмотря на более высокие фильтрационные свойства песка в насыщенном состоянии. Зона пылеватых грунтов становится проводящим коллектором, направляя основную часть потока в правую часть области.

При этом на нижней границе пылеватого грунта и песка образуется капиллярный барьер, препятствующий прохождению жидкости непосредственно под зону, занятую пылеватым грунтом.

На рис. 10 (см. также цветную вкладку) показано влагосодержание в расчетной области, полученное по коду GeRa, которое соответствует насыщенности, рассчитанной в VS2DT и представленной на рис. 11 (см. также цветную вкладку). Можно сравнить результаты моделирования в GeRa и VS2DT на момент времени $t = 110$ сут:

- давление на рис. 12, а, б (см. также цветную вкладку);
- концентрацию загрязнителя без учета распада на рис. 13, а, б (см. также цветную вкладку);
- концентрацию загрязнителя с учетом распада на рис. 14, а, б (см. также цветную вкладку).

По результатам сравнения можно сделать вывод, что решения фильтрационной и миграционной задач с помощью двух кодов близки между собой. Однако в расчетах по коду GeRa расстояние, на которое мигрировал загрязнитель, несколько меньше, чем расстояние, рассчитанное по коду VS2DT. В коде VS2DT, по-видимому, из-за неверной трактовки дисперсионного процесса оно завышается (этот эффект наблюдался и при решении одномерных задач, в которых результаты GeRa совпадали с результатами HYDRUS-1D, а код VS2DT демонстрировал излишнюю дисперсию). Кроме того, в GeRa использована более мелкая сетка в совокупности с низкодиссипативной схемой дискретизации оператора переноса, что также снижает численную диффузию.

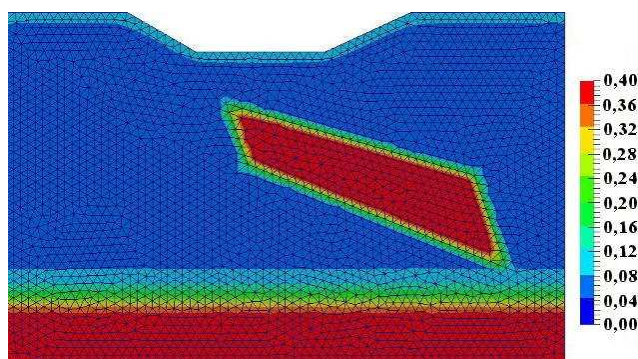


Рис. 10. Расчетная сетка и распределение влагосодержания при $t = 110$ сут, код GeRa

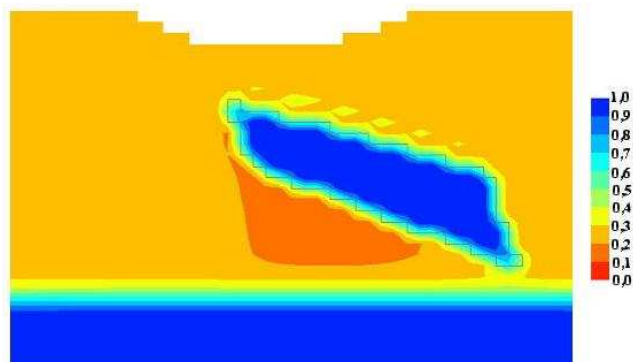
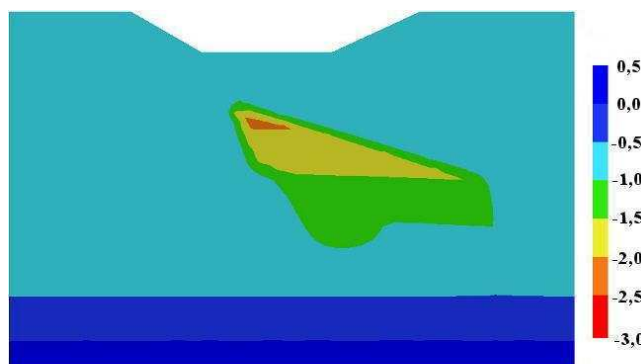
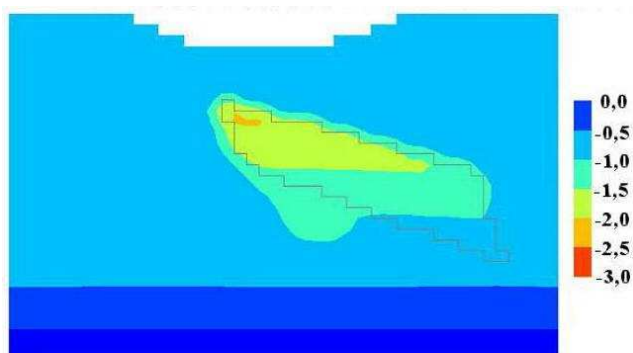


Рис. 11. Расчетное распределение насыщенности при $t = 110$ сут, код VS2DT



а



б

Рис. 12. Распределение давления при $t = 110$ сут: а — расчет по GeRa; б — расчет по VS2DT

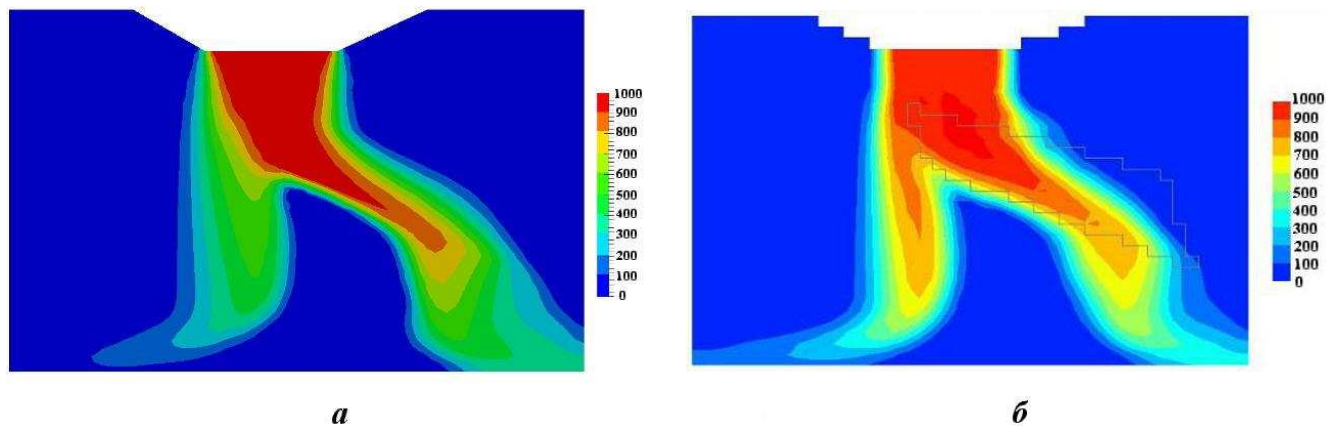


Рис. 13. Распределение концентрации загрязнителя в расчетной области при $t = 110$ сут без учета распада: *a* — расчет по GeRa; *б* — расчет по VS2DT

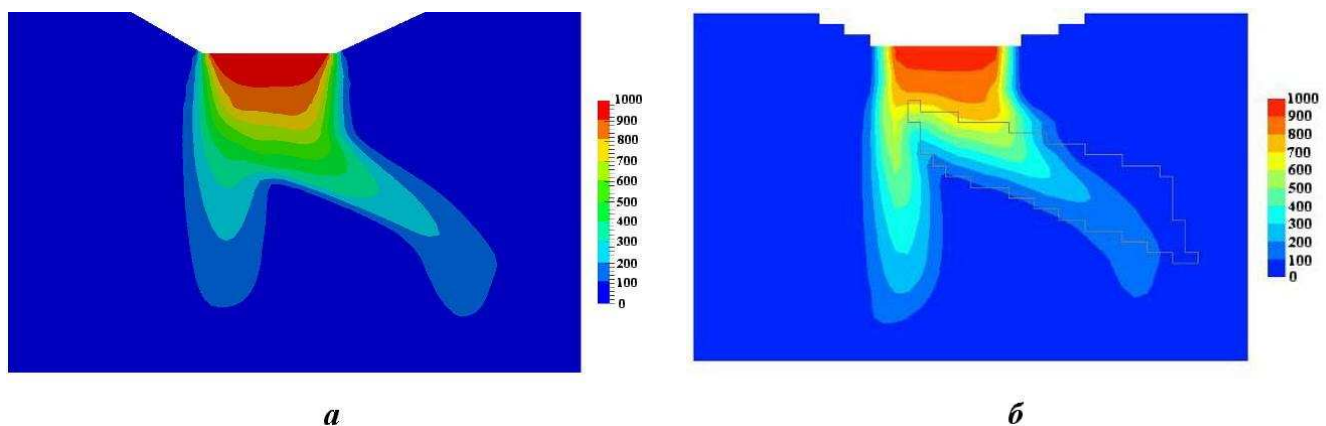


Рис. 14. Распределение концентрации загрязнителя в расчетной области при $t = 110$ сут с учетом распада: *a* — расчет по GeRa; *б* — расчет по VS2DT

6. Фильтрация и массоперенос в дренированной насыщенно-ненасыщенной области

При подготовке диссертационной работы [23] во Франции была создана установка для исследования процессов насыщенно-ненасыщенной фильтрации и переноса в зоне аэрации. В частности, на этой установке проводился опыт по оценке фильтрационного потока к дренажу в насыщенно-ненасыщенных условиях. Установка представляет собой лоток с песком размером $2\text{ м} \times 0,5\text{ м} \times 1\text{ м}$. В установке были смонтированы устройства для измерения давления (тензометры) как в насыщенной, так и ненасыщенной области; с помощью них определялся и уровень свободной поверхности (где давление жидкости равно нулю).

Расчетная область является прямоугольником длиной $2,0\text{ м}$ и высотой $1,0\text{ м}$ (рис. 15). Параметры модели приведены в табл. 4. Граничные условия заданы следующим образом:

- на окружности диаметром 5 см в правом нижнем углу, соответствующей дрене, — условие просачивания;
- на верхней границе, расположенной на высоте $1,0\text{ м}$, — инфильтрационное питание (приток жидкости) с интенсивностью $w = 0,18\text{ см/ч}$;
- все остальные границы — непроницаемые.

Модель основана на уравнении Ричардса. Расчеты проводились до получения стационарного решения.

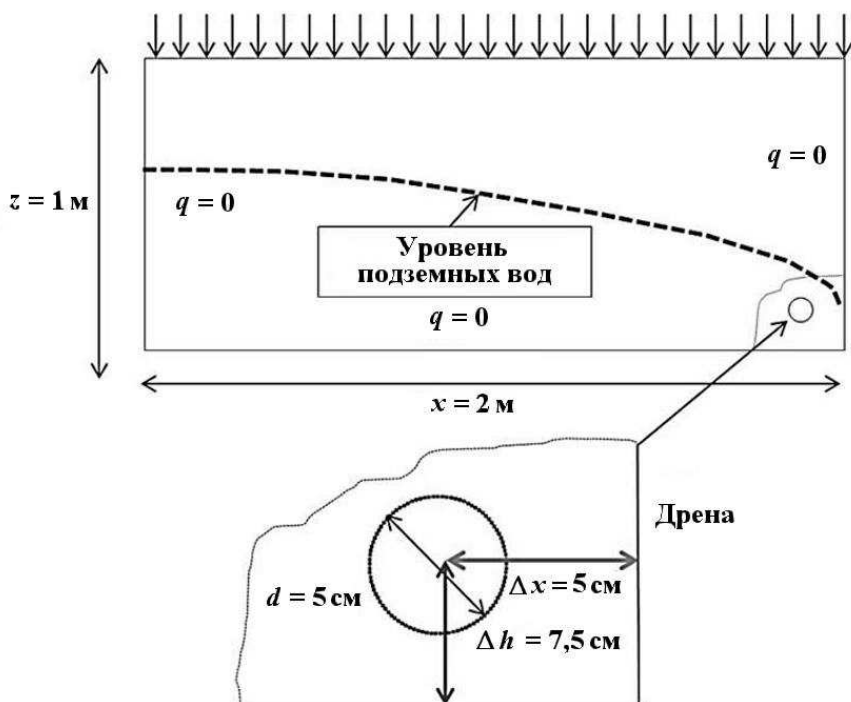


Рис. 15. Схема насыщенно-ненасыщенной фильтрации к задаче с дренажом [23]

Таблица 4

Параметры модели

Параметр	Значение
Коэффициент фильтрации в насыщенных условиях в горизонтальном направлении $K_{xx} = K_{yy}$	9,6 см/ч
Коэффициент фильтрации в насыщенных условиях в вертикальном направлении K_{zz}	6 см/ч
Пористость θ_s	0,43
Минимальная влажность θ_r	0,12
Параметр уравнения состояния n	1,8
Параметр уравнения состояния α	0,012 см ⁻¹

Данный тест позволил сопоставить результаты численного моделирования насыщенно-ненасыщенной фильтрации с результатами, полученными в реальном эксперименте. Сопоставление проводилось по распределению напоров и положению свободной поверхности жидкости.

При проведении расчетов по коду GeRa использовались два типа сеток. Первая состоит из призм с треугольным сечением в плоскости XOZ , вторая — из прямоугольных параллелепипедов (по оси Y все сетки содержат один слой). В случае треугольно-призматической сетки круглая дрена приближалась восьмиугольником, в случае квадратной сетки — квадратом со стороной 4 см (периметр квадрата в этом случае близок к длине исходной окружности).

Сопоставление изолиний напоров и свободной поверхности, полученных на разных сетках с помощью расчетного кода GeRa и на экспериментальной установке, приведено на рис. 16. Лучшее соответствие получено на треугольно-призматической сетке.

В части массопереноса моделировались процессы адвекции и гидродинамической дисперсии. Моделировались два натуральных эксперимента.

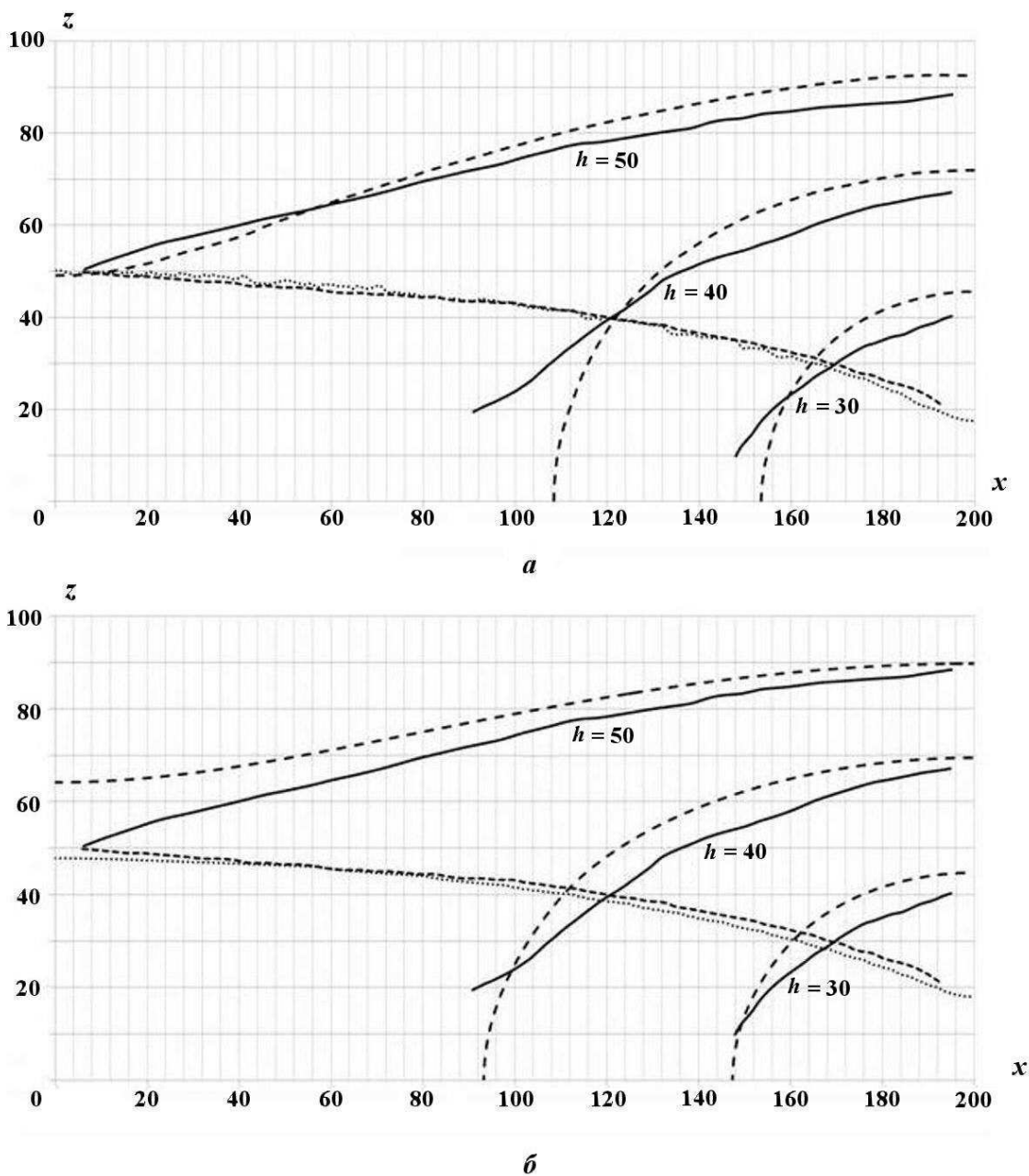


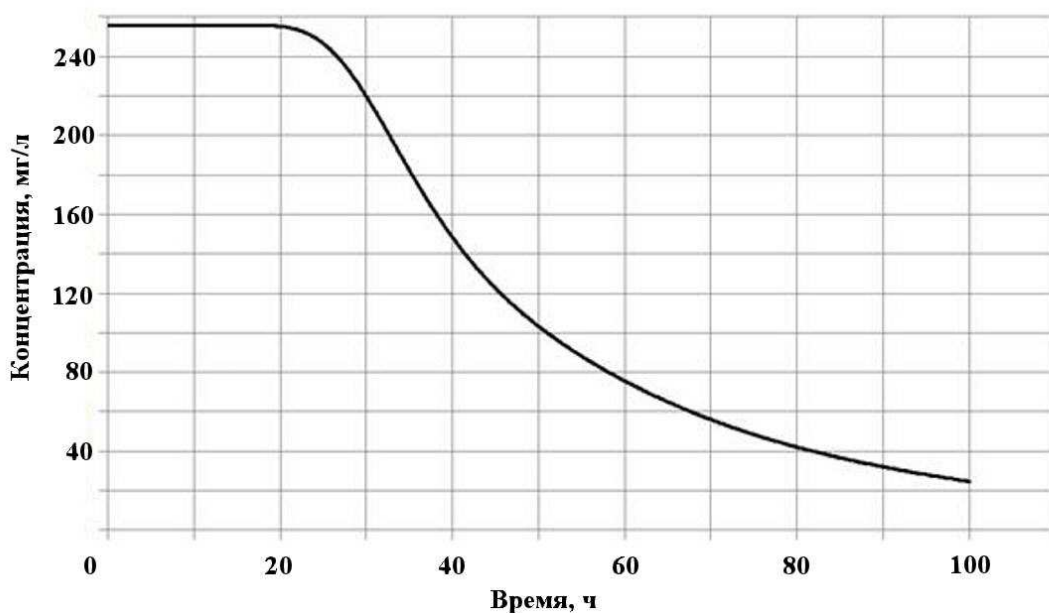
Рис. 16. Сопоставление изолиний напоров и свободной поверхности, полученных в плоскости XOZ с помощью кода GeRa и на экспериментальной установке [23]: a — на треугольно-призматической сетке; b — на гексаэдральной сетке; --- — изолинии напоров, GeRa; — — изолинии напоров, эксперимент; — свободная поверхность, GeRa; -.-.- — свободная поверхность, эксперимент

В первом эксперименте изначально лоток заполнен раствором с концентрацией примеси (хлорид калия KCl) 256 мг/л. Верхняя граница орошается чистой водой в течение 100 часов, интенсивность орошения 0,75 см/ч (граничное условие на верхней границе).

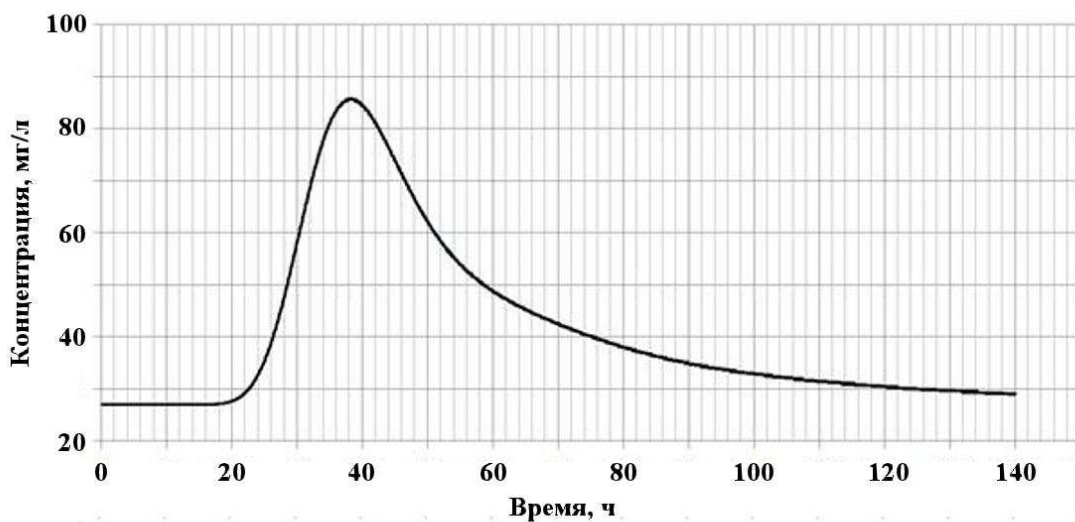
Во втором эксперименте в растворе, изначально заполняющем лоток, присутствует фоновое значение концентрации примеси 27 мг/л. Концентрация в подаваемом на верхней границе растворе меняется: первые 9 часов производится орошение раствором с концентрацией примеси 256 мг/л, затем — раствором с фоновой концентрацией 27 мг/л. Интенсивность орошения на верхней границе также поддерживается на уровне 0,75 см/ч. Общее расчетное время — 140 часов.

Результаты расчетов двух экспериментов с помощью кода GeRa приведены на рис. 17 и могут быть сопоставлены с приведенными в работе [23]. В первом эксперименте сравниваются времена начала падения концентрации в дрене. По результатам моделирования в [23] это время составляет $\sim 19,8$ часа (0,44 объема пор на графике IV-6 из [23]; 1 объем пор соответствует 45 часам орошения), в GeRa — 19,6 часа (см. рис. 17, *a*). Через 90 часов концентрация становится равной ~ 32 мг/л и в эксперименте (см. [23]), и при моделировании по коду GeRa.

Во втором эксперименте сравнивается время прихода пика концентрации в дрене. По результатам моделирования в [23] это время равно 39,2 часа (примерно 0,7 объема пор на графике V-12 из [23]; 1 объем пор соответствует 56 часам орошения), а при расчетах по коду GeRa — приблизительно 38,5 часа (см. рис. 17, *б*).



a



б

Рис. 17. Концентрация примеси в дрене: *a* — расчет первого эксперимента; *б* — расчет второго эксперимента

Заключение

В настоящей работе подобраны четыре теста для верификации и кросс-верификации моделей ненасыщенной фильтрации. Моделирование этих задач с помощью кода GeRa показало хорошее совпадение полученных результатов с референтными, в качестве которых выступают численные решения по другим кодам, получившим широкое признание, и аналитические решения. Показана эффективность применения новой методики противопотоковой аппроксимации насыщенности на базе кусочно-линейного восполнения высоты всасывания на ячейках сетки. Опытным путем показано, что именно применение специальных техник аппроксимации насыщенности при вычислении относительной проницаемости позволяет добиться высокого качества переноса фронтов насыщенности, не прибегая к чрезмерному измельчению расчетной сетки. Результаты экспериментов показали робастность используемых в GeRa численных схем в условиях неоднородности параметров сред и в случае орошения сильно осушенных пород.

Работа частично поддержана Федеральной целевой программой "Ядерные энерготехнологии нового поколения на период 2010—2015 годов и на перспективу до 2020 года" и грантом Российского фонда фундаментальных исследований 15-35-20991.

Список литературы

1. *Richards L. A.* Capillary conduction of liquids through porous mediums // *J. Appl. Phys.* 1931. Vol. 1, No 5. P. 318—333.
2. *Diersch H.-J. G., Perrochet P.* On the primary variable switching technique for simulating unsaturated-saturated flows // *Adv. Water Resour.* 1999. Vol. 23. P. 271—301.
3. *Liu X.* Parallel modeling of three-dimensional variably saturated ground water flows with unstructured mesh using open source finite volume platform Openfoam // *Eng. Appl. Comp. Fluid Mech.* 2013. Vol. 7, No 2. P. 223—238.
4. *Lipnikov K., Moulton D., Svyatskiy D.* New preconditioning strategy for Jacobian-free solvers for variably saturated flows with Richards' equation // *Adv. Water Resour.* 2016. Vol. 94. P. 11—22.
5. *Капырин И. В., Иванов В. А., Копытов Г. В., Уткин С. С.* Интегральный код GeRa для обоснования безопасности захоронения РАО // *Горный журнал.* 2015. № 10. С. 44—50.
6. *Капырин И. В., Уткин С. С., Василевский Ю. В.* Концепция разработки и использования расчетного комплекса GeRa для обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов.* 2014. Вып. 4. С. 44—54.
7. *Diersch H.-J. G.* FEFLOW: Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media. Springer Science & Business Media, 2013.
8. *Healy R. W.* Simulation of Solute Transport in Variably Saturated Porous Media with Supplemental Information on Modifications to the U. S. Geological Survey's Computer Program VS2D. U. S. Geological Survey Water-Resources Investigations. Report 90-4025, 1990.
9. *Bear J., Cheng A. H. D.* Theory and Applications of Transport in Porous Media. Vol. 23: Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport. Dordrecht, Heidelberg, London, New York: Springer, 2010.
10. *van Genuchten M. Th.* A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils // *Soil Sci. Soc. Am. J.* 1980. Vol. 44. P. 892—898.
11. *Mualem Y.* A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media // *Water Resour. Res.* 1976. Vol. 12 (3). P. 513—522.
12. *Aavatsmark I., Barkve T., Boe O., Mannseth T.* Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part I: Derivation of the methods // *SIAM. J. Sci. Comp.* 1998. Vol. 19, No 5. P. 1700—1716.

13. Danilov A., Vassilevski Yu. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes // Rus. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009. Vol. 24, No 3. P. 207–227.
14. Celia M. A., Bouloutas E. J., Zabra R. L. A general mass conservative numerical solution for unsaturated flow equation // Water Resour. Res. 1990. Vol. 26 (7). P. 1483–1496.
15. Forsyth P. A., Kropinski M. C. Monotonicity considerations for saturated-unsaturated subsurface flow // SIAM J. Sci. Comp. 1997. Vol. 18 (5). P. 1328–1354.
16. Barth T., Ohlberger M. Finite volume methods: foundation and analysis // Encyclopedia of computational mechanics. Vol. 1. N.-Y.: John Wiley & Sons, 2004. P. 439–470.
17. Hubbard M. E. Multidimensional slope limiters for MUSCL-type finite volume schemes on unstructured grids // J. Comp. Phys. 1999. Vol. 155, No 1. P. 54–74.
18. Hoteit H., Ackerer Ph., Mose R. et al. New two-dimensional slope limiters for discontinuous Galerkin methods on arbitrary meshes // Int. J. Num. Meth. Eng. 2004. Vol. 61, No 14. P. 2566–2593.
19. Forsyth P. A., Wu Y. S., Pruess K. Robust numerical methods for saturated-unsaturated flow with dry initial conditions in heterogeneous media // Adv. Water Resour. 1995. Vol. 18. P. 25–38.
20. Oldenburg C. M., Pruess K. On numerical modeling of capillary barriers // Water Resour. Res. 1993. Vol. 29 (4). P. 1045–1056.
21. Ross B. The diversion capacity of capillary barriers // Ibid. 1990. Vol. 26, No 10. P. 2625–2629.
22. Webb S. W. Generalization of Ross' tilted capillary barrier diversion formula for different two-phase characteristic curves // Ibid. 1997. Vol. 33, No 8. P. 1855–1859.
23. Anguela T. P. Etude du Transfert d'Eau et de Solutés dans un Sol à Nappe Superficielle Drainée Artificiellement. Thesis under the dir. of Daniel Zimmer, 2004. <https://pastel.archives-ouvertes.fr/pastel-00001043/document>.

Статья поступила в редакцию 12.09.16.

VERIFICATION OF MODELS OF UNSATURATED FLOW AND TRANSPORT IN UNSATURATED ZONE BY EXAMPLE OF CODE GeRa / I. V. Kapyrin, V. V. Suskin, A. V. Rastorguev, K. D. Nikitin (IBRAE RAS, ICM RAS, Moscow)

The paper presents the analytical and numerical models implemented in the GeRa code and describing the unsaturated flow and transport processes in unsaturated zone. A set of four verification tests and verification results for the models are given. Since there are no analytical solutions the verification is performed by comparing the GeRa simulation results with the results obtained using the well-known codes FEFLOW, HYDRUS-1D, VS2DT, TOUGH2, as well as data of experiments. There has been demonstrated a possibility of using in the GeRa code the upwind saturation approximation scheme of a higher accuracy that allows significantly reducing requirements to the grid during the simulation of the saturation front motion.

Keywords: unsaturated flow, transport in unsaturated zone, verification, cross-verification.
