

МОДУЛЬ НАСЫЩЕННО-НЕНАСЫЩЕННОЙ И НАПОРНО-БЕЗНАПОРНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ В КОМПЛЕКСЕ ПРОГРАММ «НИМФА»

А. Н. Бахаев, В. В. Горев, М. Л. Сидоров, П. А. Машенькин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Программный комплекс «НИМФА» (ПК «Нимфа») [1] создан в ходе реализации проекта «Развитие суперкомпьютеров и грид-технологий», выполненного в рамках Комиссии при Президенте Российской Федерации по модернизации и технологическому развитию экономики России в 2010–2012 годах.

ПК «НИМФА» разрабатывается в РФЯЦ-ВНИИЭФ для моделирования многокомпонентной многофазной фильтрации и переноса примесей подземными водами в подземном пространстве со сложной геологической структурой. Программа ориентирована на решение задач с помощью полномасштабного комплексного моделирования на современных высокопараллельных супер-ЭВМ (десятки тысяч процессоров).

В ПК «НИМФА» моделируются следующие процессы: однофазная, двухфазная и трехфазная фильтрация; анизотропная среда, модель трещиновато-пористой среды; конвективный перенос потоком многокомпонентной примеси; гидродинамическая дисперсия, адсорбция, химическая кинетика; плотностная и тепловая конвекция; модель поверхностного стока, неньютоновские течения, модель эвапотранспирации.

С 2014 года ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» совместно с ФГБУ «Гидроспещгеология» по инициативе ГК «Росатом» реализует программу доработки и внедрения импортозамещающего инновационного программного продукта «НИМФА» в практику геоэкологических расчетов на объектах «Росатома» в качестве отраслевого стандартного программного продукта.

15 июня 2017 г. экспертный совет по аттестации программных средств при Ростехнадзоре (НТЦ ЯРБ) утвердил аттестационный паспорт ПК «НИМФА». Таким образом, ПК «НИМФА» стал первым в стране аттестованным программным продуктом для моделирования территорий размещения ядерных радиационно-опасных объектов (ЯРОО) ГК «Росатом». Ранее для этих целей использовались импортные программные продукты.

25 мая 2017 г. подписан договор № 12463-Д с ГК «Росатом». В рамках договора по ПК «НИМФА» впервые проведены расчеты гидрологической модели участка «Водоем-9» ФГУП «ПО «Маяк». Разработаны алгоритмы и программы для гид-

рологического модуля (паводки, поверхностный сток, сток по реке), а также модели насыщенно-ненасыщенной и напорно-безнапорной фильтрации. Комплексная модель такой сложности создана впервые в стране.

Обеспечение высокой достоверности прогнозов распространения радионуклидов в грунтах и грунтовых водах при обосновании безопасности ЯРОО и вывода из эксплуатации пунктов хранения ядерных материалов и хранилищ радиоактивных отходов.

Внедрение ПК «НИМФА» на экологически значимых объектах ГК «Росатом», оказывающих масштабное влияние на окружающую среду (4 объекта), включающее передачу ПК и разработанных геофильтрационных и геомиграционных моделей на предприятия и проведение обучающих семинаров для пользователей.

За последние десятилетия в связи с интенсивным воздействием человека на гидросферу произошло существенное нарушение естественного гидродинамического и гидротехнического режимов подземных вод – одного из важнейших компонентов окружающей среды.

В связи с этим возникала необходимость при выполнении различных мероприятий оценивать последствия такого воздействия. Мелиорация, добыча полезных ископаемых, откачка воды из водоносных горизонтов, создание новых плотин на реках, изменение уровня воды в существующих водохранилищах и целый ряд других факторов приводит к масштабному изменению состояния почвы и подземных вод. 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. При этом натурные наблюдения и целенаправленные эксперименты, выполняемые для оценки антропогенного влияния, оказываются весьма дорогостоящими и трудновыполнимыми. Поэтому актуальным становится использование численных расчетов и теоретических подходов с применением математических моделей рассматриваемых процессов.

В ПК «НИМФА» для расчета гидродинамики подземных вод была реализована модель напорной фильтрации (все поры породы заполнены водой). Однако на практике большой класс течений подземных вод плохо описывается моделью напорной фильтрации (образование депрессионных воронок вблизи карьеров и откачивающих скважин, сезонные изменения уровня грунтовых вод и т. д.). Для расчета таких течений используются две модели: насыщенно-ненасыщенная фильтрация, напорно-безнапорная фильтрация.

Модель насыщенно-ненасыщенной фильтрации используют, когда включают зону, в которой часть пор заполнена водой, а часть воздухом.

Модель напорно-безнапорной фильтрации представляет собой упрощение модели насыщенно-ненасыщенной фильтрации (зоны с водой и воздухом нет, а между сухой и мокрой зоной существует четкая граница).

Для реализации этих моделей в ПК «НИМФА» были разработаны численные методы, проведена модификация препроцессора. Внедрение этих моделей в ПК «НИМФА» существенно расширяет класс решаемых задач по этому пакету.

Основные иностранные программные продукты, которые получили признание гидрогеологов:

– VS2D [2] (Simulation of solute transport in variably saturated porous media with supplemental information on modifications to the U.S. Geological Survey's computer program VS2D);

– HYDRUS [3] (The HYDRUS Code for Simulating the One- and Two- and Three-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media);

– FEFLOW [4] (Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media);

– MODFLOW [5] (Variably Saturated Flow VSF Process for MODFLOW);

– SUTRA [6] (A Model for Saturated-Unsaturated, Variable-Density Ground-Water Flow with Solute or Energy Transport).

При разработке расчетного кода этапом, предваряющим применение кода на практике, является верификация численной модели. Верификация заключается в сравнении с известными референтными решениями (аналитическими, численными или полученными экспериментальным путем).

Математическая модель насыщенно-ненасыщенной фильтрации жидкости в пористой среде является упрощением двухфазной модели фильтрации [7] (при определенных допущениях). Вводится в рассмотрение система уравнений, описывающих двухфазную изотермическую фильтрацию в пористом пласте, примененную к характерному объему.

Система уравнений, описывающая процесс двухфазной изотермической фильтрации базируется на законе сохранения массы веществ и обобщенном законе Дарси, который устанавливает зависимость

между скоростью фильтрации фаз и градиентами давления в фазах. То есть, система уравнений содержит два уравнения баланса массы, записанной для каждой из фаз – воды и воздуха, два уравнения, выражающих закон Дарси и соотношение, связывающее насыщенности фаз. При определенных допущениях [7], данную систему можно серьезно упростить. При температуре около 20 градусов Цельсия вязкость воздуха в 55 раз меньше вязкости воды. Из этого факта следует, что подвижность воздуха намного больше подвижности воды, если относительные проницаемости флюидов одинаковы. Таким образом, предполагается, что изменение давления в воздушной фазе уравнивается намного быстрее, чем в водной фазе. С другой стороны можно предположить, что воздушная фаза непрерывна в поровом пространстве и связана с атмосферой. Из-за отмеченных сверху свойств можно полагать, что давление в воздушной фазе равно атмосферному давлению. Это предположение исключает уравнение для воздушной фазы из системы уравнений, описывающую двухфазную фильтрацию. Отметим так же, что капиллярное давление определяется однозначно с помощью давления воды. Для удобства полагается, что атмосферное давление равно нулю.

Соответственно, насыщенность воды и относительная проницаемость воды могут быть определены как функции, зависящие от давления воды. Если давление воды меньше нуля, то насыщенность и проницаемость вычисляются с помощью аналитических моделей. Таким образом, вместо системы уравнений, имеем одно уравнение, записанное относительно давления воды. То есть, математическая формулировка задачи основывается на уравнении Ричардса [7], которое дополняется зависимостями влагосодержания и относительной проницаемости от высоты всасывания.

Иными словами, математическая модель изотермической фильтрации жидкости в насыщенно-ненасыщенных пористых средах формулируется в терминах высоты всасывания и влагосодержания. Они определяются из дифференциального уравнения Ричардса, который выражает закон сохранения массы и закон Дарси. Для численного решения уравнения Ричардса необходимы замыкающие соотношения, для этого используют алгебраические уравнения связи высоты всасывания с влагосодержанием, называемые капиллярными соотношениями. Так же необходимы соотношения, связывающие тензор фильтрации и высоту всасывания.

Модель напорно-безнапорной фильтрации является упрощенной версией модели насыщенно-ненасыщенной фильтрации. Для её задания требуется меньше исходных данных в отличие от модели насыщенно-ненасыщенной фильтрации, однако, решаемые уравнения те же самые. Отличие состоит в виде алгебраических функций связи влагосодержания от высоты всасывания и тензора фильтрации от высоты всасывания. Вводится в рассмотрение термин псевдонасыщенность, смысл которого связан

непосредственно с актуальными геометрическими условиями в ячейке. Возможны три случая наполнения ячейки:

- ячейка полностью насыщена;
- ячейка частично насыщена;
- ячейка полностью ненасыщенная (сухая).

Предположения, касающиеся коэффициента фильтрации:

– в ненасыщенной зоне коэффициент фильтрации является малой величиной по отношению к насыщенной зоне (степень малости задается пользователем);

– для заданной ячейки коэффициент фильтрации меняется линейно от минимального значения (влажность близко к нулю) до максимального (полное заполнение водой ячейки) по мере роста уровня грунтовых вод.

Одномерная нестационарная ненасыщенная фильтрация в вертикальном столбе сухого грунта (Celia et al.'s problem)

Рассматривается стандартный одномерный тест, предложенный Celia M.A [8], который предназначен для тестирования задач ненасыщенной фильтрации. Исследуется одномерная фильтрация воды в вертикальном столбе сухого грунта высотой 1 м. Расчетное время задачи составляет 1 сутки. Относительная погрешность (зависимость высоты всасывания от высоты столба) между численными решениями FEFLOW и ПК «НИМФА» составила не более 0,27 %.

Задача о верховодном уровне грунтовых вод (Perched water table problem)

Приводится двумерная задача, предложенная Kirkland [9], связанная с развивающимся верховодным уровнем грунтовых вод в ненасыщенном (сухом) пористом пласте. Эта тестовая задача, необходима, чтобы показать работоспособность модели в насыщенной и ненасыщенных зонах. Расчетное время 1 сутки. Временной шаг равнялся 0,01 суток. В расчете использовалась регулярная сетка с шагом 5 см. Максимальный дисбаланс по ячейкам не превысил 0,001 [кг/сутки].

Инфильтрация в большом кессоне (Infiltration in a large caisson)

Данный тест [4] используется для верификации программы FEFLOW. Исследуется инфильтрационный процесс в большом кессоне, который заполнен однородным материалом и в котором начальные условия соответствуют сухому грунту. Все границы кессона непроницаемы, за исключением зоны инфильтрации сверху. Задано начальное поле высоты всасывания. Расчетное время задачи 30 суток. Отно-

сительная погрешность (изолинии насыщенности) между численными решениями FEFLOW и ПК «НИМФА» составляет не более 2,7 %.

Задача о капиллярном барьере (Capillary barrier modeling)

Капиллярные барьеры образуются в ненасыщенных условиях, когда слой мелкозернистых пород лежит на слое крупнозернистых отложений. Барьер возникает из-за разной проницаемости мелкозернистых и крупнозернистых пород в ненасыщенных условиях. При одних и тех же значениях высоты всасывания, близкого к условиям полного насыщения, коэффициент фильтрации песков и гравия отличается на 4 порядка. Однако, в гравии коэффициент фильтрации в ненасыщенных условиях меньше. Это всё дает основание, чтобы использовать механизм капиллярных барьеров для изоляции отходов.

В расчетной области присутствуют два наклонных пласта мощностью 0,5 м каждый. Верхний пласт состоит из мелкозернистых песков, а нижний – из крупнозернистых песков. Угол наклона капиллярного барьера составляет 5 %. На верхней границе задано инфильтрационное питание 0,0048 м/сут. Граница слева – непроницаемая. Данная задача позволяет протестировать следующие вопросы:

- орошение сильно осушенных грунтов, что обычно вызывает большие трудности с вычислительной точки зрения;
- сильная неоднородность гидравлических параметров пластов;
- образование насыщенной зоны внутри расчетной области

Аналитическим решением для данной задачи является формула Росса [4], которая дает выражение расстояния отклонения потока капиллярным барьером. Иными словами это означает, что с ростом абсциссы в некоторый момент начинается просачивание жидкости через барьер, которое в некоторой точке сравнивается с инфильтрационным потоком. Абсцисса этой точки называется расстоянием отклонения потока капиллярным барьером. Для данного теста эта абсцисса рассчитана в [4] и составляет 32,6 м.

По результатам моделирования можно констатировать качественное соответствие результатов аналитическому значению расстояния отклонения и количественное – результатам, полученным с помощью программ FEFLOW и HYDRUS. Причем, в сравнении с кодом FEFLOW решение по программе НИМФА проявляет монотонный характер, в то время как в решении FEFLOW наблюдаются осцилляции.

Задача Баренблатта о растекании бугра жидкости в безнапорном сухом пласте [10]

Одним из примеров задач гидравлической безнапорной фильтрации является формирование водонасыщенной зоны в безнапорном сухом пласте при

растекании бугра подземных вод. Рассматривается одномерное движение подземных вод в области фильтрации, лежащей на горизонтальном непроницаемом водоупоре. Данная задача была предложена и решена Баренблаттом [10].

Тест о растекании бугра позволит:

– проверить способность численной модели рассчитывать движение фронта насыщенной зоны и распределение напоров в области фильтрации;

– оценить симметричность решения относительно нулевой линии абсцисс;

– оценить сходимость численных расчетов к аналитическому решению.

В работе [10] описано, что данный тест относится к одной из наиболее тяжелых проблем, характерных для задач однофазной фильтрации в безнапорном режиме, связанной с изменением во времени границ области, в которой происходит движение подземных вод, описываемое уравнением Бусинеска.

Численные результаты, полученные с помощью ПК «НИМФА» демонстрируют устойчивую работу нелинейных алгоритмов, используемых в напорно-безнапорной модели, полученные результаты совпадают с аналитическим решением, наблюдается сходимость к аналитическому решению.

Задача Полубариновой-Кочиной о безнапорной фильтрации через тело дамбы [11]

Данная задача относится к классу гидродинамических задач и хорошо изучена отечественными гидродинамиками. При решении данной задачи в программе НИМФА необходимо определить:

- расход в нижнем бьефе;
- положение свободной поверхности;
- размер участка высачивания.

Коэффициент фильтрации грунта тела перемычки равен 0,864 м/сут. Расход в нижнем бьефе и величину участка высачивания необходимо сравнить с аналитическими оценками.

Данная задача является стационарной, в ПК «НИМФА» она рассчитывалась методом установления. Максимальная погрешность (на самой грубой сетке 10*10) по расходу жидкости через перемычку составляет 0,88 %, а на сетке 40*40 погрешность составляет 0,33 %. Из полученных результатов следует, что более подробная дискретизация сетки дает лучшую сходимость численных и аналитических расчетов. Высота высачивания по ПК «НИМФА» на сетке 40*40 составила порядка 2,25 м, что выше оценки по номограммам, составляющей 2 м, на 12,5 %.

Двумерная насыщенно-ненасыщенная фильтрация и адвективно-дисперсионный перенос в неоднородной зоне аэрации с учетом радиоактивного распада [2]

Данная задача используется в качестве обучающей для программы VS2D. Расчетная область имеет

следующие геометрические размеры: 6,47 метров ширина области и 4,06 метров высота области. Зона аэрации неоднородна, она состоит из двух типов грунтов – хорошо проницаемых песков и менее проницаемых пылеватых грунтов. В задаче используется модель Genuchten – Mualem [4].

До глубины 4.5 метра задано нулевые значения пьезометрической высоты, что соответствует уровню грунтовых вод, а выше этой отметки задано гидростатическое распределение. На верхней границе задано инфильтрационное питание 0,01 [м/сут]. Хранилище отходов моделируется в углублении, в котором задана концентрация инфильтрата 1000 [мг/л]. На нижних участках левой и правой границы задано граничное условие первого рода, напор равен – 4,5 метра. Расчетное время задачи составляет 110 суток. Полученные результаты фильтрационной задачи с помощью ПК «НИМФА» и программы VS2D близки. Результаты моделирования по миграции также близки между собой.

Верификация ПК «НИМФА» в части насыщенно-ненасыщенной фильтрации на геофильтрационной модели объектов ИХЗ ФГУП «ГХК»

Данная задача была поставлена и решена в рамках договора между ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и ФГУП «ГХК». В рамках данных работ проводилось создание средствами ПК «НИМФА» геофильтрационной и геомиграционной модели объектов изотопно-химического завода федерального государственного бюджетного учреждения «Горно-химический комбинат».

В данной задаче стресс-период для расчета фильтрации составляет 73000 суток, по достижении которого устанавливается стационарное распределение давлений, напоров, влагонасыщенности. Стресс-период для расчета миграции составляет 11688 суток. В задаче используется модель van Genuchten-Mualem.

Максимальная относительная разность решений, полученных с помощью ПК «НИМФА» и VS2D, по высоте всасывания и влагонасыщенности не превысила 1,9 %, а по концентрации не превысила 3,11 %.

Литература

1. «Программный комплекс НИМФА для решения геофильтрационных и геомиграционных задач» Отчёт о НИР/ВНИИЭФ, О. И. Бутнев, В. В. Горев, И. В. Горев, Пронин В. А., Сидоров М. Л., Машенькин П. А. и др. инв. № 8/26530 нс, Саров, 2016.

2. 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, 125 p., 1990.

3. Šimůnek, J., M. Šejna, H. Saito, M. Sakai, and M. Th. van Genuchten, The Hydrus-1D Software Pack-

age 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, pp. 315, 2008.

4. Diersch H. J. G. Finite Element Modeling of Flow, Mass and Heat Transport in Porous and Fractured Media. Springer. 2014.

5. McDonald, M. C. and A. W. Harbaugh. MODFLOW, A modular three-dimensional finite difference ground-water flow model, U. S. Geological Survey, Open-file report 83-875, 1988.

6. Voss C. I., Provost A.M., Sutra, A model for saturated-unsaturated variable-density ground-water flow with solute of energy transport; U.S. Geological

Survey Water-Resources Investigations Report 84-4369, USA, 2010.

7. Szymkiewics A. Modeling water flow in unsaturated porous media. Springer. 2013.

8. Celia M.A., Bouloutas E.J, ZabraR.L. A General mass conservative numerical solution for unsaturated flow equation. Water Resources Research. 1990, 26(7), 1483-96.

9. Kirkland M. R., Hills R. G., Wierenga P. J. Algorithms for solving Richard's equation for variably saturated soils. Water Resour. Res., 1992, 28(8) 2049-2058.

10. Баренблатт Г. И., Енгов В. М., Рыжик В. М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: "Недра", 1972.

11. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. М. Наука. 1977, С. 664.