

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ НИМФА. МЕТОДИКА РЕШЕНИЯ НЕЛИНЕЙНОЙ ОДНОФАЗНОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ЖИДКОСТИ И ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ПОРИСТЫХ СРЕДАХ

*В. А. Пронин, О. И. Бутнев, И. В. Горев, Ю. Н. Дерюгин, М. Л. Сидоров,
П. А. Машенькин, С. С. Колесников, М. В. Журавлева, Е. Н. Лысова*

Российский Федеральный Ядерный Центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, г. Саров

Введение

Важнейшей проблемой развития атомной отрасли страны является обеспечение безопасного функционирования объектов атомной промышленности. В этой связи актуальным вопросом, имеющим значительный общественный резонанс, является получение достоверной информации о воздействии ядерных и радиационно-опасных объектов (ЯРОО) и хранилищ радиоактивных отходов (РАО) на грунты, грунтовые и поверхностные воды. Основным методом, позволяющим получить количественные пространственно-временные характеристики воздействия ЯРОО на природные среды и, в частности, на недра, является компьютерное моделирование процесса движения подземных вод (геофильтрации) и связанного с ним подземного массопереноса (геомиграции). Математическое моделирование процессов миграции подземных вод требует специальных программных средств, позволяющих учесть широкий спектр физико-химических процессов и ориентированных на пользователя-гидрогеолога-геоэколога. В настоящее время в Российской Федерации математическое моделирование процессов подземного тепло-массопереноса на практике осуществляется, в основном, с использованием импортных программных продуктов. Чаще всего для этой цели используются вычислительные программы семейства «MODFLOW» (разработчики – Геологическая служба США и Университет штата Алабама, США) и программный комплекс «TOUGH-2» (разработчик – Национальная лаборатория Лоуренса Беркли, США).

Эти программные продукты имеют ряд недостатков, ограничивающих возможности их применения:

- ориентировка преимущественно на персональные компьютеры и связанное с этим значительное время счета, особенно при решении геомиграционных задач;
- невозможность использования на современных отечественных высокопараллельных СуперЭВМ;
- отсутствие возможности оперативного внесения изменений;
- не обеспечивают необходимых требований к конфиденциальности при работе с базами данных, содержащими, в том числе, информацию, имеющую статус «для служебного пользования».

В нашей стране также велись и ведутся разработки аналогичных программ, но отечественные продукты пока не получили широкого распространения.

В 2013 г. генеральным директором Госкорпорации «Росатом» С. В. Кириенко утверждена «Программа доработки и внедрения инновационного отечественного программного продукта «Программный комплекс «НИМФА» на период 2013–2016 годы» [1]. Целью Программы является доработка ПК «НИМФА» [2] в соответствии с современными требованиями и его аттестация в НТЦ ЯРБ для последующего внедрения в качестве отраслевого стандартного программного продукта в практику работ по оценке воздействия ЯРОО Госкорпорации «Росатом» на подземные, поверхностные воды и грунты (моделирование геофильтрации и геомиграции), с применением современных высокопараллельных суперЭВМ.

В 2015 г. генеральным директором Госкорпорации «Росатом» С. В. Кириенко утверждена «Актуализированная программа доработки и внедрения импортозамещающего инновационного отечественного программного продукта «Программный комплекс «НИМФА» на период 2014–2017 го-

ды» [2]. Необходимость актуализации Программы обусловлена расширением спектра задач, решаемых при обосновании безопасной эксплуатации и вывода из эксплуатации ЯРОО, в частности, необходимостью получения количественных оценок переноса загрязнения с поверхностными водами.

В соответствии с Программой в период с 2014 по 2015 годы были выполнены работы по верификации и адаптации программного продукта «НИМФА» в части решения геофильтрационных и геомиграционных задач на основе математических моделей объектов ГК «Росатом».

Описание методики и комплекса программ НИМФА

Комплекс программ НИМФА предназначен для численного моделирования нестационарных трехмерных неизотермических геофильтрационных и геомиграционных потоков локального и регионального масштаба в напорных водоносных горизонтах, неоднородных по физическим свойствам.

При моделировании учитывается взаимодействие геофильтрационного и геомиграционного потоков с поверхностными водоемами и водотоками, а также опосредованно с атмосферными водными потоками (посредством задания на модели инфильтрационного питания и эвапотранспирации грунтовых вод).

Миграция растворенных радиоактивных и химических компонент (специй) рассматривается с учетом молекулярной диффузии, гидродинамической дисперсии, радиоактивного распада, а также задержки за счет обратимой сорбции на водовмещающих породах. При расчетах геофильтрации и геомиграции учитываются также плотностная дифференциация флюида в потоке, которая может быть обусловлена как тепловой, так и солевой конвекцией.

Программный комплекс НИМФА предназначен для проведения геофильтрационных и геомиграционных расчетов в геологической среде на участках размещения ЯРОО и прилегающих к ним территориях. Основными задачами численного моделирования, выполняемого с помощью программного комплекса НИМФА, являются

- расчет поля напоров, скоростей и траекторий геофильтрационного потока;
- расчет ореолов химического и радиоактивного загрязнения, распространяющегося в геофильтрационном потоке от ЯРОО, а также от других потенциальных источников загрязнения подземных вод (свалок ТБО, промышленных водоемов-накопителей, полей фильтрации и т. д.).

Источники загрязнения подземных вод и грунтов могут быть приурочены к разливам загрязняющих веществ на поверхность, к поверхностным водоемам и водотокам (в том числе технологическим), к нагнетательным скважинам и к участкам выщелачивания радиоактивных отходов из мотильников и т. д.

Программный комплекс НИМФА не включает непосредственно модели источников загрязнения. Последние учитываются при моделировании как граничные условия и источники-стоки геофильтрационного и геомиграционного потоков и требуют специального обоснования при геофильтрационной и геомиграционной схематизации.

Основной метод, применяемый в комплексе программ НИМФА – это расщепление по процессам системы уравнений фильтрации, массопереноса, теплопроводности в напорных подземных акваториях. Основными величинами, рассчитываемыми методом конечных объемов, являются давление, концентрации примесей и температура в больших многослойных гидрогеологических системах. Время моделирования процессов может достигать до тысячи лет. Исходные дифференциальные уравнения являются нелинейными. Они могут быть связаны между собой через скорость фильтрации, плотность и вязкость жидкости. Также учитывается зависимость пористости пород от давления. Алгоритм решения системы основан на линеаризации системы разностных уравнений и последовательном решении соответствующего уравнения для каждого процесса и компонент отдельно друг от друга (метод SEQ). Линеаризация системы разностных уравнений производится относительно приращения давления, приращения концентраций и приращения температуры. При этом в процессе счета образуются распределенные разреженные матрицы порядка $N + N_{\text{wells}}$ для фильтрации, N для миграции и N для теплопроводности (N – число ячеек сетки, N_{wells} – число скважин). СЛАУ решается в параллельном режиме методами, реализованными в библиотеке LParSol, разработанной

во ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ». Сходимость итераций обеспечивается автоматическим выбором шага по времени. В общем случае решаются трехмерные задачи. В частном случае можно решать плановые задачи в плоскости (x, y) и задачи в вертикальном разрезе (x, z) .

Геометрическая модель акватории представляет собой слоистую систему, ограниченную произвольным не самопересекающимся контуром. Поверхности раздела слоев задаются через цифровые карты. Также могут быть дополнительные вертикальные разбиения слоев. Сеточная модель акватории строится в несколько этапов в параллельном режиме. Вначале строится двумерная неструктурированная сетка. Затем производится ее передекомпозиция по процессорам, она экструдируется по оси аппликат каждым процессором, после чего производится финальная передекомпозиция. Каждый процессор рассчитывает величины на своей сетке (параобласть), производя обмены между соседними параобластями в случае необходимости.

Модель мигрирующего раствора включает в себя множество компонент. Подверженность радиоактивному распаду, сорбции, диффузии и влияние на плотность и вязкость раствора задается для конкретных компонент. Программа учитывает неоднородность водной системы по всем фильтрационно-емкостным параметрам и по тензору дисперсии. Гидродисперсия учитывается для всех компонент, а диффузия, сорбция и распад может назначаться для конкретной компоненты.

Математическая формулировка трехмерной модели

Модель фильтрации и миграции

Система уравнений фильтрации и миграции веществ в пористой среде описывает закон сохранения массы флюида (1.1), закон Дарси, связывающий скорость фильтрации с перепадом давлений, закон сохранения массы каждого компонента в фазе:

$$\frac{\partial(m\rho)}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho\bar{V}) = q, \quad (1)$$

$$\bar{V} = -\frac{K}{\mu}(\operatorname{grad}P - \rho\bar{g}), \quad (2)$$

$$\frac{\partial(mC)}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{V}C - (D + I\chi)\operatorname{grad}C) = q_C + W_S, \quad (3)$$

где m – пористость, ρ – плотность флюида, t – время, q – массовый источник флюида, \bar{V} – скорость фильтрации, K – тензор абсолютной проницаемости породы, μ – динамическая вязкость флюида, P – давление, \bar{g} – вектор ускорения свободного падения, C – концентрация вещества, D – тензор суммарной дисперсии, I – единичный тензор, χ – коэффициент молекулярной диффузии, q_C – массовый источник концентрации, W_S – объемная интенсивность источников поглощения/выделения вещества.

Модель теплопроводности

В случае необходимости учета тепловых эффектов к системе уравнений (1)–(3) необходимо добавить уравнение переноса тепла:

$$\frac{\partial}{\partial t}((m\rho C_P + (1-m)\rho_S C_S)T) + \nabla(\rho\bar{V}C_P T - \chi\nabla T) = q_T, \quad (2)$$

где C_S , C_P – удельная теплоемкость породы и флюида соответственно, ρ_S – плотность породы, T – температура, χ – суммарная теплопроводность, q_T – источник тепла.

В пакете НИМФА применяется однотемпературная модель распространения тепла. Объясняется данное приближение тем, что скорость фильтрации в пластовых системах небольшая, а поверхность пористых каналов, на которых происходит теплообмен с водой, проходящей через эти поры, большая. Время выравнивания температуры в воде и на скелете породы пренебрежимо мало по сравнению с характерным временем фильтрации.

Модель распада и сорбции

Распад и сорбция описываются следующим уравнением:

$$W_S = -\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} - \lambda_1 m C - \lambda_2 \rho_b \bar{C},$$

где \bar{C} – концентрация вещества на породе (в единичном ее объеме), ρ_b – плотность породы.

Зачастую можно считать, что мигрант сорбируется на породу мгновенно в масштабах скорости переноса. В этом случае можно считать что $\bar{C} = f(C)$. Функция $\bar{C} = F(C)$ называется изотермой сорбции. Существуют различные функции этих изотерм, среди которых распространены следующие:

$$\bar{C} = K_d \rho_b C \text{ – изотерма Генри;}$$

$$\bar{C} = K_f \rho_b C^\alpha \text{ – изотерма Фрейндлиха;}$$

$$\bar{C} = \frac{K_l \rho_b \bar{S} C}{1 + K_l C} \text{ – изотерма Лэнгмюра.}$$

Учитывая, что производную $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t}$ можно представить в виде $\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} = \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} \frac{\partial C}{\partial t}$, то в уравнении (3)

вклад в W_S от сорбции будет следующий:

$$W_S = -K_d \rho_b \frac{\partial C}{\partial t} \text{ – для изотермы Генри;}$$

$$W_S = -K_f \rho_b \alpha C^{\alpha-1} \frac{\partial C}{\partial t} \text{ – для изотермы Фрейндлиха;}$$

$$W_S = -\frac{K_l \rho_b \bar{S}}{(1 + K_l C)^2} \frac{\partial C}{\partial t} \text{ – для изотермы Лэнгмюра.}$$

При этом, в случае постоянной пористости (отсутствия сжимаемости породы), вклад от сорбции можно интерпретировать как изменение активной пористости на эффективную. Отношение эффективной пористости к активной (фактор замедления) можно выразить следующим образом:

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{m} \text{ – для изотермы Генри;}$$

$$R = 1 + \frac{K_f \rho_b}{m} \alpha C^{\alpha-1} \text{ – для изотермы Фрейндлиха;}$$

$$R = 1 + \frac{K_l \rho_b \bar{S}}{m} \frac{1}{(1 + K_l C)^2} \text{ – для изотермы Лэнгмюра.}$$

Уравнение (3) в данном случае будет иметь следующий вид:

$$Rm \frac{\partial C}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{V}C - (D + I\chi)\operatorname{grad}C) = q_C.$$

Модель плотностной конвекции

Учет распространения различных веществ в недрах, как и учет распространения тепла, может по-разному влиять на динамику подземных вод. Случаи, когда состав воды и ее температура не влияют на динамические характеристики, являются самыми простыми. Уравнение состояния для данной математической модели очевидно: $\rho, \mu = \text{const}$. Часто встречаются случаи, когда плотность меняется в зависимости от концентрации вещества и температуры флюида. Будем называть данную модель «термогалинной конвекцией». Плотность в данном случае описывается зависимостью $\rho = \rho(C, T)$. В этом случае становится необходимым решать систему (1)–(4) совместно.

Начальные условия

Начальные условия, по умолчанию, задаются в виде

$$H(x, y, z, t = 0) = 0,$$

$$C_i(x, y, z, t = 0) = 0,$$

$$T(x, y, z, t = 0) = 0,$$

где H – пьезометрический напор пресной воды, C_i – концентрации веществ, T – температура.

Так как уравнения (1–2) записаны относительно давления, то напор пресной воды в каждой ячейке переводится в давление по формуле $P = (H - z)\rho g$.

Отметим, что в избранных зонах начальные условия могут быть отличны от нуля.

Граничные условия

Граничные условия, по умолчанию, задаются на кровле, подошве и боковой поверхности области моделирования. Это условия 1-го и 2-го рода, зависящие от координат и времени. По умолчанию, на всех границах и для всех моделируемых процессов задано условие не протекания (условие 2-го рода – производная по нормали от величины равна нулю).

Геологические объекты задаются и трактуются по-другому, в отличие от граничных условий.

Внутренние условия

На границах между ячейками имеет место непрерывность давления, концентрация/активности и нормальных компонент потоков этих величин. Дополнительно внутренним граничным условием может выступать горизонтальный барьер.

Уравнения состояния

В комплексе программ НИМФА реализованы следующие уравнения состояния.

Зависимость пористости от давления:

$$m(p) = m_0 + \beta(p - p_0).$$

Зависимость плотности от давления, температуры и концентраций веществ:

$$\rho(p, T, \bar{C}) = \rho_0 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \rho}{\partial C^i} \right)^i (C^i - C_0^i) + \frac{\partial \rho}{\partial T} (T - T_0) + \frac{\partial \rho}{\partial p} (p - p_0).$$

Для вязкости реализованы четыре различных уравнения состояния в зависимости от свойств жидкости:

$$\mu(T, \bar{C}) = \begin{cases} \mu_0 + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mu}{\partial C} \right)^i (C^i + C_0^i) + \frac{\partial \mu}{\partial T} (T - T_0), \\ A_0 A_1 \left(\frac{A_2}{T + A_3} \right), \\ A_0 (A_1 + A_2 (T + A_3))^{A_4}, \\ A_0 T^{A_4}, \end{cases}$$

где A_0, A_1, A_2, A_3, A_4 – некоторые эмпирические константы.

Для тестирования программного комплекса НИМФА использовались следующие тестовые задачи:

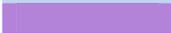
- имеющие аналитическое решение,
- не имеющие аналитического решения, но численно исследованные ранее с помощью некоторых комплексов программ.

В табл. 1 приведена матрица верификации.

Таблица 1

Матрица верификации

Номер теста	Фильтрация	Адвекция	Дисперсия	Диффузия	Переменная плотность	Сорбция	Распад	Тепло
1								
2								
3								
4								
5								
6								
7								
8								
9								
10								
11								
12								
13								
14								
15								
16								
17								
18								
19								
20								
21								

Здесь  – стационарная фильтрация,
 – нестационарная фильтрация.

Для дискретизации области использовались следующие виды плановых сеток: регулярная четырехугольная (рис. 1,а), неструктурированная треугольная (рис. 1,б), неструктурированная многоугольная (рис. 1,в). Вдоль оси OZ применялась экструзия плановых сеток на 1 слой (если не оговаривается иное).

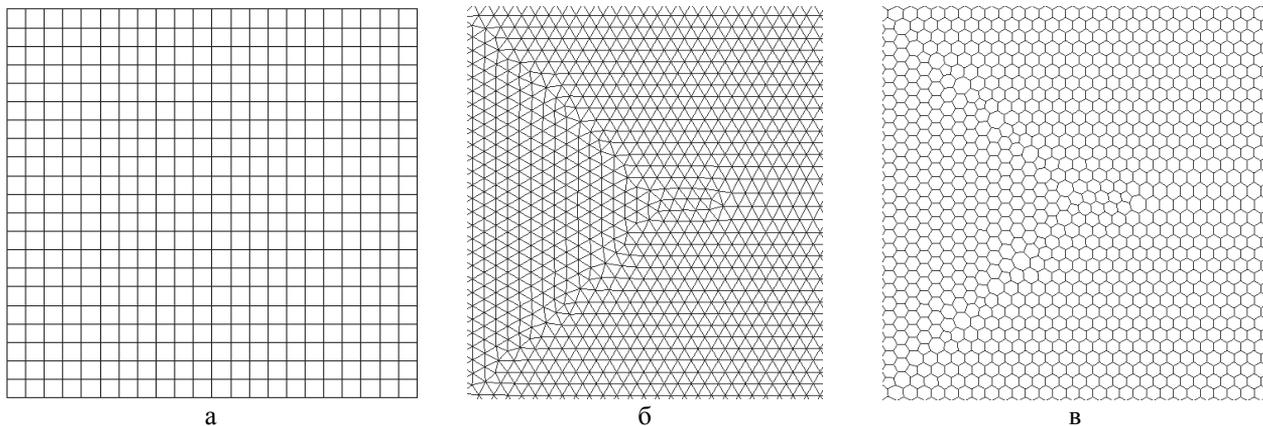


Рис. 1. Виды сеток, используемых в расчетах

Сравнение результатов для тестов с аналитическим решением проводилось в норме L_1 , рассчитываемой по формуле

$$L_1 = \frac{\sum_i |f_i^{analit} - f_i^{calc}|}{\sum_i |f_i^{analit}|} 100\%,$$

где суммирование проводится по всем точкам области, L_1 – норма интегрального отклонения. Для задач, не имеющих аналитического решения, сравнение проводилось по результатам расчетов задач по другим программным комплексам. В табл. 2 приведены значения интегрального отклонения для тестов с аналитическим решением.

Таблица 2

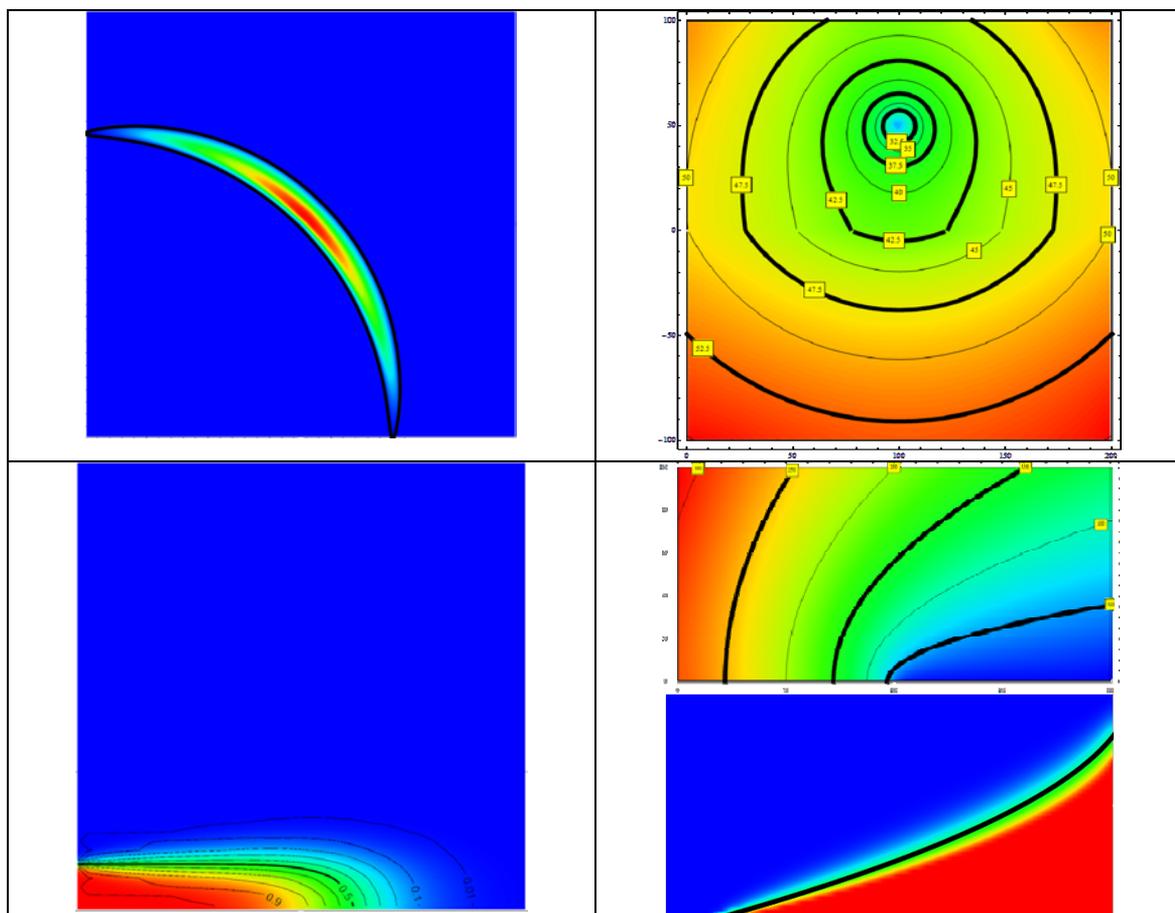
Значения интегральных отклонений для тестов с аналитическим решением

Тесты, имеющие аналитическое решение	Интегральное отклонение
1	3,3 %
2	2,7 %
3	4,4 %
4	5,6 %
5	0,7 %
6	1,6 %
7	4,8 %
8	1,2 %
9	1,9 %
10	4,7 %
11	3 %
12	2,9 %
13	2 %
14	0,1 %
16	5,2 %
17	3,6 %
18	2,5 %

В табл. 3 приведены рассчитанные поля величин и изолинии точного решения, наложенные друг на друга для некоторых тестовых задач.

Таблица 3

Рассчитанные поля величин и соответствующие изолинии точного решения



Тесты **15, 19, 20, 21** аналитического решения не имеют. Сравнение по этим задачам производилось с решениями, получаемыми по другим комплексам (GEON-3DM, SEAWAT 2000 v4, MODLOW).

Тест **15** – тест о тепловой конвекции (**задача Элдера**). Результаты демонстрируют хорошее согласие с результатами по SEAWAT 2000 V_4. На рис. 2 приведены изолинии температуры на время $T = 20$ лет, полученного по комплексу НИМФА (красная кривая), и решения, полученного по SEAWAT 2000 V_4 (зеленая кривая). Из рис. 2 видно качественное согласие результатов.

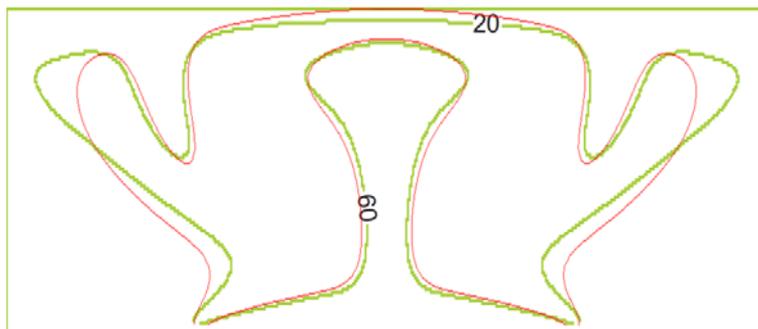


Рис. 2. Изолинии температуры на $T = 20$ лет

Тест **19** – тест о гравитационной конвекции (эксперимент Шинкариола и Шварца). Результаты демонстрируют хорошее согласие с результатами по GEON-3DM. На рис. 3 приведено поле концентрации на время $T = 1$ сутки. Черной линией показаны экспериментальные данные, градиацией цвета показан результат, полученный по комплексу НИМФА, а синей линией – результат, полученный по GEON-3DM. Видно качественное согласие результатов.

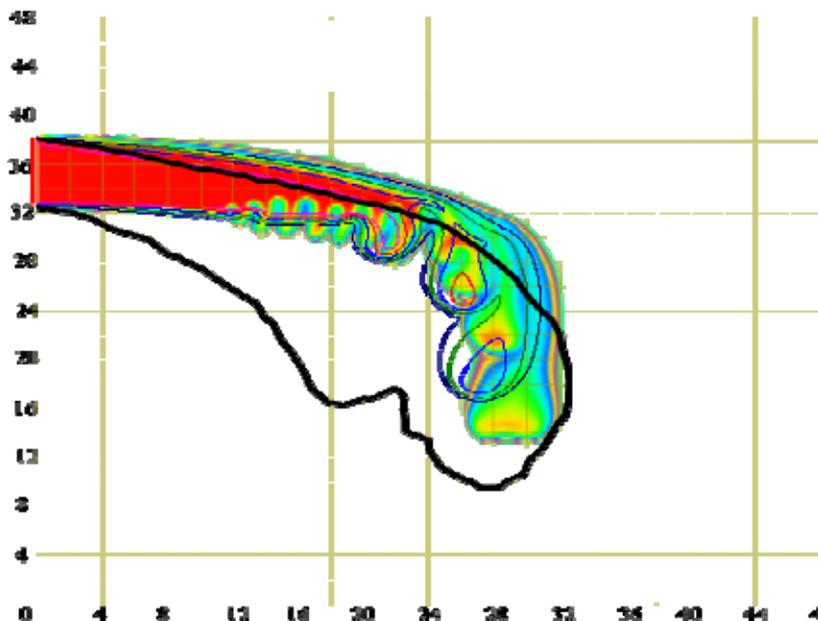


Рис. 3. Результаты теста Шинкариола и Шварца на время $T = 1$ сутки

Заключение

Таким образом, в настоящий момент в комплексе программ НИМФА реализована методика решения нелинейной однофазной фильтрации жидкости и тепломассопереноса в пористых средах. Для комплекса НИМФА разработана матрица верификации. На рассчитанных тестах с аналитическим решением показано, что погрешность не превосходит 6 %, на тестах не имеющих аналитического решения, показано качественное и количественное согласие с другими программными комплексами.

Литература

1. Программа доработки и внедрения инновационного отечественного программного продукта «Программный комплекс «НИМФА» на период 2013–2016 годы». М.: Фонды ФГУП «Гидроспецгеология», 2013.
2. Бутнев О. И., Пронин В. А., Сидоров М. Л., Колесников С. С., Кузнецов В. Ю. Пакет программ НИМФА-2 для решения задач многофазной фильтрации с применением суперкомпьютерных технологий // XIV Международная конференция «Супервычисления и математическое моделирование»: сб. докл. Саров. 2012. С.112-119.
3. Актуализированная программа доработки и внедрения инновационного отечественного программного продукта «Программный комплекс «НИМФА» на период 2014–2017 годы». М.: Фонды ФГУП «Гидроспецгеология», 2015.