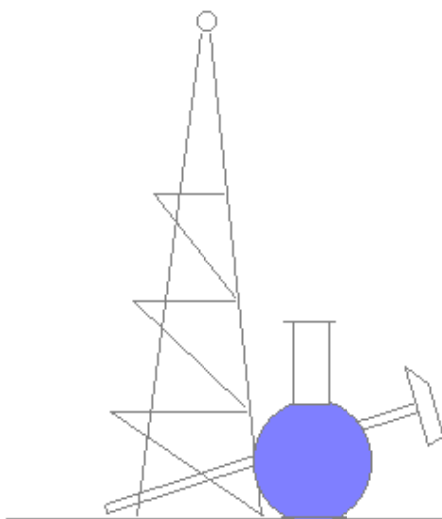


Томский политехнический университет

Букаты М.Б.

Численные методы моделирования геомиграции радионуклидов

Методические указания к выполнению лабораторных работ для студентов
направления магистерской подготовки
«Урановая геология»



Томск, 2008

УДК 550.46

Букаты М.Б. Численные методы моделирования геомиграции радионуклидов: Метод. указания к выполнению лабор. работ. - Томск: Изд. ТПУ, 2008. - 68 с.

В методических указаниях рассматривается содержание лабораторных и самостоятельных работ по дисциплине «Численные методы моделирования геомиграции радионуклидов», приводится общая характеристика и особенности практического применения программного комплекса HydroGeo, используемого при их выполнении.

Для студентов направления магистерской подготовки «Урановая геология», а также студентов и специалистов других специальностей, занимающихся вопросами численного моделирования геомиграции.

Печатается по постановлению Редакционно-издательского Совета Томского политехнического университета

Рецензент: Покровский Д.С., доктор геолого-минералогических наук, профессор Томского государственного архитектурно-строительного университета

© М.Б. Букаты, 2008

© Томский политехнический университет, 2008

Оглавление

1. Содержание работ	4
2. Использование ПК HydroGeo	9
2.1. Интерактивные ссылки.....	9
2.2. Общие сведения	9
2.3. Применяемые методы и алгоритмы.....	11
2.4. Основные публикации по методике и применению ПК	14
2.5. Использование ПК	16
2.6. Главное меню	18
2.6.1. Файл.....	18
2.6.2. Фильтрация	21
2.6.3. Гидрогеохимия.....	36
2.6.4. Окно	64
2.6.5. Помощь.....	64
2.7. Главное окно	65
2.8. Окно протокола	65
2.9. Всплывающее меню	65
3. Номограммы	67
4. Основные единицы измерения	70
Рекомендуемая литература	71

1. Содержание работ

Настоящие методические указания призваны помочь студентам направления магистерской подготовки «Урановая геология» в выполнении лабораторных работ по курсу «Численные методы моделирования геомиграции радионуклидов».

Перечень типовых лабораторных работ (28 часов)

п/п	Темы работ	Количество часов	
		Ауд.	Самост.
1.	Использование баз термодинамических данных, обоснование системы моделирования	2	1
2.	Пересчеты состава воды, породы и газа	2	1
3.	Моделирование изменения ТР-условий, смешения, распада, дегградации и сорбции	2	1
4.	Моделирование взаимодействия раствор-порода-газ	2	1
	Рубежная контрольная работа № 1	-	3
5.	3D сеточная дискретизация, определение и расчет геофильтрационной модели	2	1
6.	Преобразование геофильтрационной 3D модели в геомиграционную, моделирование поведения «инертного» компонента	2	1
7.	Моделирование 3D геомиграции, включая физико-химические взаимодействия в системе вода-порода	4	2
8.	Визуализация и геохимическая интерпретация результатов сеточного моделирования	2	1
	Рубежная контрольная работа № 2	-	3

Студентам могут быть предложены исследовательские или реферативно-аналитические курсовые работы по следующим темам:

- Моделирование формирования гидротермальной урановой минерализации.
- Моделирование опытно-промышленной эксплуатации месторождения урана методом подземного выщелачивания.
- Исследование процессов выщелачивания урана из руд кислыми и/или щелочными растворами.

- Моделирование мероприятий по реабилитации продуктивных водоносных горизонтов.

Тема региональной компоненты

- Возможности моделирования геомиграции при поисках урана на конкретных участках Западной Сибири.

Темы университетской компоненты

- Оценка геохимической эффективности методов и технологий подземного и кучного выщелачивания урана водными рабочими растворами.
- Проверка точности и достоверности численных моделей геомиграции урана по данным натуральных наблюдений.

Структура самостоятельной познавательной деятельности (72 часа) студента включает следующие виды работ:

- Углубленная самостоятельная работа над лекционным материалом.
- Самостоятельная проработка материала по теме курсовой работы.
- Ответы на контрольные вопросы к лабораторным работам и составление отчета.
- Подготовка к двум рубежным контрольным работам.

Самостоятельная подготовка к экзаменам выносится за рамки плановых часов в семестре, т.к. на это в сессию выделяется отдельное время.

Текущий и итоговый контроль результатов изучения дисциплины включает:

1. В дисциплине предусматривается контроль всех этапов самостоятельной познавательной деятельности студента, указанных в разделе 5: текущий, рубежный и итоговый (дифзачет и экзамен).

2. Структура оценок итогов работы (знаний и умений) студента может быть обычная с оценками в четырехбалльной системе за каждый раздел этапа (лабораторную, контрольную, курсовую работу) или в системе рейтинговых баллов. Примерное распределение баллов за каждый вид самостоятельной познавательной деятельности студента показано в рейтинг-листе.

Рейтинг-лист

Вся дисциплина (без курсовой работы) оценивается в 1000 баллов, из них по максимуму отводится:

- на посещение лекции, ведение конспектов и работу с учебной литературой (17 лекций по 20 баллов)

340

- на подготовку к лабораторной работе, ответы на контрольные вопросы и оформление отчетов (9 работ по 40 баллов)	360
- на подготовку к 2 рубежным контрольным работам (по 50 баллов)	100
- на сдачу экзамена (максимальный балл)	200

В зависимости от количества набранных баллов студент может в итоге претендовать на следующую оценку:

875-1000 - отлично,

775-850 - хорошо,

525 - 750 - удовлетворительно.

Поскольку курсовая работа имеет свою итоговую оценку, то на неё составляется отдельный рейтинг-лист по этапам ее выполнения, максимальный итог - 1000 баллов. Примерное распределение баллов по этапам может быть следующим:

- получение и согласование темы работы	50
- составление списка литературы	50
- разработка структуры работы (оглавления)	50
- сбор и анализ материала по разделам	200
- написание основных разделов работы	300
- оформление графиков, рисунков	100
- составление чистового варианта текста	150
- оформление работы в целом	50
- подготовка доклада к защите	50

Образцы контролирующих материалов

Текущего контроля

Контрольные вопросы к лабораторной работе «Использование баз термодинамических данных (ТБД), обоснование системы моделирования»:

- поясните, какие компоненты системы выбраны в качестве базовых и почему?
- уточните, как изменится характер взаимодействия минерала с раствором, если в ТБД отсутствуют данные по изменению энтропии, теплоемкости или мольного объема минерала или составляющих его базовых частиц?
- поясните, как определить изменение энергии Гиббса и энтропии, используя данные о растворимости?
- как поступить, если в ТБД отсутствуют данные по компонентам, поведение которых в системе требуется изучить?

- рассчитайте, с какой точностью будет определена константа равновесия кальцита, если точность энергии Гиббса его образования составляет ± 0.1 Дж/моль?
- как изменится растворимость минерала, если увеличить или уменьшить величину изменения энергии Гиббса его образования?
- о чем свидетельствует величина периода полураспада?
- почему в ТБД не обязательно задавать плотность минерала?

Контрольные вопросы к лабораторной работе «Моделирование изменения ТР-условий, смешения, распада, дегградации и сорбции»:

- почему растворимость одних минералов при повышении температуры возрастает, а других уменьшается?
- поясните, как нужно изменять пропорции смешения, если требуется выяснить, не происходит ли выпадения минералов из смеси двух растворов?
- какую величину составляет активность урана 235 в растворе в Бк/л, если его концентрация в нем составляет 5 мкг/л?
- чем определяется значение константы сорбции компонента раствора и ёмкость обмена породы?
- чем с точки зрения математического описания отличаются радиоактивный распад и биодегградация?
- какие методы расчета коэффициентов активности следует выбрать при ионной силе раствора 0.1 и 3.2?
- какие процессы могут возникнуть при смешении растворов различного состава?
- почему незаряженные частицы раствора тоже могут сорбироваться породой?

Вопросы для рубежных контрольных работ:

- Способы определения активности компонентов раствора.
- Закон действия масс и его применение при моделировании геохимических взаимодействий.
- Как связаны объем памяти, занимаемый моделью, и быстроедействие расчетов? Как ими можно управлять?
- Основные виды граничных условий при гидродинамическом и геохимическом 3D моделировании. Способы их задания.
- Составьте сценарий численного моделирования опытной эксплуатации месторождения урана.

Итогового контроля

Билет №1

1. Из каких процедур состоит моделирование геомиграции.
2. Способы визуализации результатов численного моделирования.
3. Единицы измерения активности, концентрации, рН и Eh.

Билет № 2

1. Виды ионных ассоциатов и расчет комплексообразования.
2. Способы решения систем уравнений баланса масс.
3. Особенности моделирования окислительно-восстановительных процессов.

Темы выполняемых лабораторных и курсовых работ предполагается определять каждому слушателю индивидуально, в зависимости от его специализации на производстве и предполагаемых направлений деятельности. Основным инструментом моделирования, используемым в ходе лабораторных занятий, для всех студентов станет программный комплекс (ПК) HydroGeo. Исключением будет лишь тема, посвященная ознакомлению с другими отечественными и зарубежными моделирующими программными средствами, доступными для демонстрации.

Содержание данных методических указаний, в этой связи, посвящено детальной характеристике ПК HydroGeo и особенностям его практического применения. Фактически оно представляет собой развернутое «Руководство пользователя» данного ПК, без ознакомления с которым прохождение курса лабораторных работ малоэффективно, а в большинстве случаев и вообще невозможно.

2. Использование ПК HydroGeo

(Руководство пользователя)

2.1. Интерактивные ссылки

[Основные сведения](#)

[Использование ПК HG](#)

[Применяемые методы и алгоритмы](#)

2.2. Общие сведения

Программный комплекс HydroGeo - «Инженерные гидродинамические и гидрогеохимические расчеты, моделирование»

Вид окна "О программе ...":



Текущая версия программного комплекса HydroGeo (ПК HG) включает в настоящее время 27 специализированных и служебных программных модулей. Он может рассматриваться как одна из версий автоматизированного рабочего места специалистов гидрогеологов и гидрогеологов-нефтянников и предназначен для выполнения:

- научных и прикладных расчетов по оценке фильтрационно-ёмкостных свойств пород по результатам опытно-фильтрационных исследований в горных выработках различного назначения (обработка данных откачек/наливов, нагнетаний/опытных выпусков, испытания в колонне и

опробования с помощью испытателей пластов в обычных и глубоких скважинах)

- оценки эксплуатационных запасов подземных вод и расчёта воронки депрессии/репрессии скважинных и других, сводимых к системе взаимодействующих источников/стоков, водозаборов или систем нагнетания, в том числе в условиях ступенчатой аппроксимации изменений дебита, автоматической оптимизации дебитов и размещения эксплуатационных скважин
- научных и прикладных расчетов по составу природных водных растворов и пород (пересчёты результатов химического анализа воды и пород, расчеты рН, Eh, форм миграции-комплексобразования, смешения, испарения, сорбции, химического взаимодействия с минералами, кинетики, при заданных РТ-условиях)
- научных и прикладных расчетов по составу, газонасыщенности и свойствам свободных и водорастворенных газов и моделированию водно-газовых равновесий
- 1, 2 и 3D сеточного численного моделирования геомиграции (геофильтрации + геохимического взаимодействия воды с породами, или только геофильтрации)

ПК реализован в виде модульной 32-разрядной программы (software), работающей в среде MS Windows. Практически все его модули прошли апробацию при проведении производственных работ и научных исследований, а также в процессе обучения студентов. Общей особенностью всех программных процедур комплекса является отсутствие принципиальных ограничений применяемых методов в зависимости от температуры, давления, минерализации и состава природных поверхностных и подземных вод, находящихся в жидкой фазе, и учёт специфики исследования глубоких скважин, что позволяет широкое использование ПК, как при традиционных гидрогеологических работах, так и в нефтегазовой гидрогеологии.

Разработан в лицензионной системе программирования Borland Turbo Delphi 2006, на языке Delphi Pascal (около 22-23 тыс. строк, 30-35 тыс. операторов) и представляет собой сервисное Windows-приложение, функционирующее в операционной среде Windows 95-XP-Vista-2003-2008 на x86, и совместимых с ними ПЭВМ и рабочих станциях. В нем применяются динамическое распределение памяти и технология параллельных вычислений (при расчете наиболее ресурсоемких сеточных гидрогеохимических моделей - Threads). ПК обеспечивает переключение русского/английского языков интерфейса (реализация не завершена), вызов Help-системы и использование всплывающих подсказок.

Исполняемый файл имеет размеры 2.2-2.6 Мб в зависимости от варианта компиляции. В комплект ПК входит база справочных термодинамических параметров (ТБД) в формате Access, доступ к которой из программных модулей осуществляется автоматически, и файлы сохранения и восстановления настроек. Файлы инсталляции занимают 4.2-4.6 Мб (4-5 трехдюймовых дискет), в зависимости от компоновки.

Установка ПК НГ требует наличия IBM-совместимой ПЭВМ с процессором не ниже 80386 и дисплеем VGA или SVGA. Рекомендуются Intel/AMD процессоры с частотой не ниже 1.5-2 ГГц (желательно 2-4 ядерные), 256-1024 Мб RAM и выше, не менее 20 Гб на жестком диске и сравнительно быстрой графической подсистемой.

В собственно программный комплекс НГ входят исполняемые модули Hydrogeo.exe, HG_mid.exe и HG_min.exe, ТБД - файл db_HG.mdb, справочные и настроечные служебные файлы.

Пользователь должен обладать правом чтения и записи в папке, где установлен ПК.

Охраняется Законами Российской Федерации и нормами международного права, действующими на территории РФ. Номер гос. регистрации алгоритмов и программ во Всероссийском научно-техническом информационном центре (ВНТИЦ) № 50200500605.

Отмечен медалью конкурса "Сибирские Афины" в номинации "Новые научные разработки и технологии" 3-го Сибирского форума недропользователей и предприятий ТЭК (Томск, 2007) и Дипломом оргкомитета 5-й международной выставки "Недра - 2008. Изучение. Разведка. Добыча" (Москва, 2008).

Контактные данные: Букаты Михаил Болеславович, тел. +7 (3822) 491-382, +7 903-950-2521, тел./факс 426-167, e-mail: bukaty@igng.tsc.ru, UIN 207-590-186

2.3. Применяемые методы и алгоритмы

Области применения и ограничения ПК определяются используемыми в нем методами и алгоритмами (см. [список основных публикаций](#)).

Алгоритм определения фильтрационно-ёмкостных параметров совмещает возможность использования стандартных графоаналитических способов обработки кривых притока (КП) и восстановления давления (КВД), полученных при гидрогеологических откачках/нагнетаниях или испытании скважин. В расчетах используются методы Тейса-Джейкоба и Хорнера-Сейза (с автоматическим выделением на графиках областей квазистационарной

фильтрации и влияния ёмкости ствола скважин) и специальная аналитическая методика, базирующаяся на численном интегрировании КП и КВД на основе принципа суперпозиций (наложения течений). Применение второго из этих методов позволяет учесть одновременное изменение дебита и забойного давления в ходе обычных опытно-фильтрационных работ или испытания глубоких скважин. Особый алгоритм, основанный на графоаналитической обработке индикаторных прямых, применен для обработки данных испытания скважин по методу установившихся отборов (режимах выпуска флюида на устье скважины, нормированных по дебиту с помощью сменных штуцеров и др.).

Список определяемых параметров включает обычно коэффициенты фильтрации, проницаемости, пьезо- и уровнепроводности, пластовое давление/статический напор, скин-эффект, коэффициент продуктивности. В ряде случаев возможна оценка давления насыщения жидкой фазы газом, возможен расчет плотности воды и газа в пластовых условиях по их составу, сжимаемости пористой среды и др.

Опция **аналитического расчета систем взаимодействующих скважин (водозаборов/систем нагнетания)** позволяет проводить расчеты эксплуатационных изменений уровня вод, как в напорных, так и в безнапорных условиях, с учетом до четырех условно-прямолинейных границ первого и второго рода. Она позволяет также выполнять автоматизированную оптимизацию размещения и дебита скважин водозаборов/систем нагнетания и проводить моделирование их работы в условиях ступенчатого изменения дебита.

Для **численного моделирования 1-3х мерной геофильтрации** в ПК применена конечно-разностная форма дифференциального уравнения нестационарной фильтрации. Его решение осуществляется путем равномерной (в текущей версии используется квадратная форма блоков в плане и произвольная их мощность) разбивки области фильтрации на сеть элементарных блоков/узлов и записи для каждого блока уравнения баланса воды. Для вычислений использован сравнительно простой, но достаточно эффективный подход, предусматривающий итерационный расчет поля напоров/давлений с применением метода релаксации и изменения направления прогонки итераций. Используемая модель позволяет задать в каждом из расчетных блоков действие внешних (инфильтрация/испарение) и внутренних (откачка/нагнетание) источников/стоков и выполнять расчеты применительно к напорно-безнапорным условиям.

При **совместном численном моделировании гидродинамических и гидрогеохимических процессов:**

Для расчета гидродинамической дисперсии использован подход, который заключается в применении модели двойной пористости. В этом случае общая

пустотность породы (открытая пористость) условно разделяется на проточную (эффективная или динамическая пористость) и непроточную (разность открытой и эффективной пористости) составляющие, а расчет сводится к замещению части проточной пустотности расчетного блока втекающим раствором, конвективному смешению содержащихся в проточной части блока добавившегося и оставшегося растворов и диффузионному смешению растворов проточной и непроточной зон. Ввиду крайне медленного протекания в большинстве реальных ситуаций молекулярной диффузии, её самостоятельный вклад в суммарную дисперсию пока не учитывается. Для каждого расчетного блока учитывается действие как внешних по отношению к системе источников/стоков вещества (например, привнос вместе с закачиваемым в скважину раствором или инфильтрующимися атмосферными осадками), так и внутренних, главным среди которых является физико-химическое взаимодействие раствора с вмещающими породами.

В основу **моделирования внутренних источников/стоков вещества** в соответствии с применяемым в ПК НГ методом "констант равновесия" положено понятие элементарных реакций, совокупность которых способна исчерпывающе описать анализируемые природные процессы, а также методы равновесной термодинамики и химической кинетики. **Расчет коэффициентов активности** компонентов раствора и активности растворителя-воды осуществляется по выбору: либо по методике Питцера, либо по формуле Девис.

При этом в качестве параметров элементарных процессов рассматриваются **мольные изменения термодинамических параметров при заданных и стандартных ТР-условиях, термодинамические константы равновесия и произведения активностей компонентов раствора и минерала**, участвующих в реакции, получаемые в соответствии с законом действия масс.

Учет кинетики осуществляется на основе использования относительных скоростей реакций, оцениваемых по справочным значениям их удельных начальных скоростей. В случае включения опции перехода к шкале реального времени, для одной из реакций, выбираемой в качестве опорной, задается величина действительного времени достижения равновесного состояния. В расчете времени взаимодействия принимается, что логарифм произведения активности реакций по мере приближения к равновесию изменяется пропорционально времени, а максимальная продолжительность взаимодействия раствора с заданным минералом обратно пропорциональна скорости диффузионного переноса в растворе (удельным начальным скоростям реакций). Ввиду преобладания в реальных природных системах условий недонасыщения и равновесия, осаждение в текущей версии ПК условно рассматривается как "мгновенное".

Ионообменная сорбция катионов моделируется на основе использования

констант фазового распределения, которые должны быть определены для каждой конкретной породы экспериментально или оценены по литературным данным.

Радиоактивный распад рассчитывается по соответствующему экспоненциальному закону, для чего используется время полураспада, приведенное в ТБД.

Расчет модели комплексообразования, необходимый для изучения форм миграции и определения действительных (а не валовых, получаемых при химическом анализе) концентраций компонентов раствора, проводится по формулам равновесной термодинамики на основе гипотезы о его внутренне равновесном состоянии. При этом текущие содержания иона водорода, гидроксил-иона и условная активность электронов, используемая при моделировании окислительно-восстановительных взаимодействий, определяются с использованием принципа электронейтральности и расчета изменения E_h в ходе протекания геохимических процессов.

Моделирование растворения-осаждения проводится путем пошагового приближения системы к состоянию равновесия с учетом безразмерного (или "реального", если включен учет кинетики) времени и приоритета элементарных реакций в зависимости от их относительной скорости протекания, которая оценивается по приближенным зависимостям.

Аналогичный подход применяется и для **расчета водно-газовых равновесий**, в том числе при совместном моделировании геохимических процессов в системе вода-газ-порода, но в этом случае вместо обычных термодинамических зависимостей используется система уравнений регрессии, полученная на основе эмпирических (экспериментальных) данных по растворимости газов в водных растворах.

2.4. Основные публикации по методике и применению ПК

Букаты М.Б. Шварцев С.Л. Методы обработки гидрогеохимической информации. - Томск: Изд. ТПИ, 1987. - 95 с.

Букаты М.Б., Зуев В.А. Обработка и интерпретация данных в нефтегазопроисковой гидрогеологии. - Томск: Изд. ТПИ, 1990. - 95 с.

Букаты М.Б. Методика моделирования водно-газовых равновесий в связи с прогнозом нефтегазоносности. - Геология нефти и газа. - 1992. - № 1. - с. 7-9.

Букаты М.Б. Механизмы формирования рудопроявлений стронция в пределах западной части Сибирской платформы. - Геология и геофизика. - 1995. - № 2. - 105-114.

Букаты М.Б. Прогнозирование нефтегазоносности рифей-нижнекембрийских отложений западной части Сибирской платформы на основе изучения водно-газовых равновесий. // Геология нефти и газа - 1997. - N11. - с. 18-24.

Букаты М.Б. Разработка программного обеспечения в области нефтегазовой гидрогеологии. - Разведка и охрана недр. - 1997. - № 2. - с. 37-39.

Букаты М.Б. Равновесие подземных рассолов Тунгусского бассейна с минералами эвапоритовых и терригенных фаций // Геология и геофизика. - 1999. - Т. 40. - N 5. - с. 750-763.

Букаты М.Б. Рекламно-техническое описание программного комплекса HydrGeo. - М.: ВНТИЦ, 1999. - 5 с. - Номер гос. регистрации алгоритмов и программ во Всероссийском научно-техническом информационном центре (ВНТИЦ) № 50980000051 ПК.

Букаты М.Б. Роль доломитизации в формировании химического состава высокоминерализованных подземных рассолов // Гидрогеология и инженерная геология на рубеже веков. Девятые Толстихинские чтения. Материалы научно-методической конференции. - СПб.: СПбГИ(У), 2000. - с. 45-49.

Букаты М.Б. Численное моделирование гидрогеохимических процессов в фильтрационном потоке подземных вод // Гидрогеология и инженерная геология. Геоэкология и мониторинг геологической среды: Материалы международной научно-технической конференции "Горно-геологическое образование в Сибири. 100 лет на службе науки и производства". - Томск: Изд-во ТПУ, 2001. - с. 10-13.

Букаты М.Б. Геоинформационные системы и математическое моделирование. Учебное пособие. - Томск: Изд. ТПУ, 2002. - 75 с.

Букаты М.Б. Проблема качества численных физико-химических моделей системы рассол-порода. // Геология, поиски и разведка месторождений рудных полезных ископаемых. Межвузовский сборник научных трудов. - Иркутск: ИрГТУ, 2002. - с. 142-153.

Букаты М.Б. Разработка программного обеспечения для решения гидрогеологических задач // Известия ТПУ. Геология поиски и разведка полезных ископаемых Сибири. - 2002. - Т. 305. - Вып. 6. - с. 348-365.

Рассказов Н.М., Букаты М.Б. Оценка ресурсов и запасов подземных вод: Учебное пособие. - Томск: Изд. ТПУ, 2002. - 48 с.

Замана Л.В., Букаты М.Б. Формы миграции фтора в кислых дренажных водах вольфрамовых месторождений Восточного Забайкалья // ДАН - 2004. - т. 396. - №2. - с. 235-238.

Букаты М.Б., Юрчик И.И., Зуев В.А., Сергеева Л.М. Перспективы использования природных вод разных химических типов при разработке

месторождений нефти и газа в условиях Сибирской платформы (на примере Юрубченского месторождения) // Геология, геофизика и разработка нефтяных и газовых месторождений, 2005, № 7. - с. 37-49.

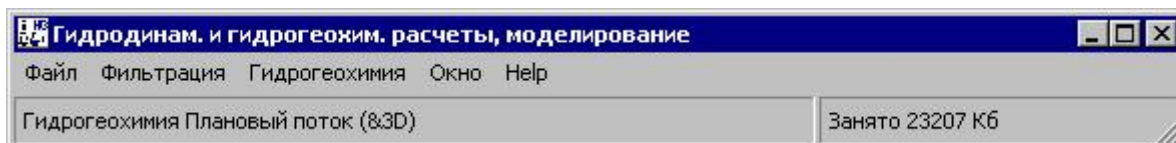
Букаты М.Б. Разделы: 6.5. Моделирование геомиграции, 6.6. Возможности практического решения гидрогеохимических задач, 6.7. Проблемы качества численных моделей системы вода-порода // Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода-порода. Т.1. Система вода-порода в земной коре: взаимодействие, кинетика, равновесие, моделирование. / Гл. ред. С.Л. Шварцев. - Новосибирск: Изд. СО РАН, 2005, с. 243-332.

Букаты М.Б. Рекламно-техническое описание программного комплекса HydroGeo. Номер гос. регистрации алгоритмов и программ во Всероссийском научно-техническом информационном центре (ВНТИЦ) № 50200500605. - М.: ВНТИЦ, 2005. - 7 с.

Букаты М.Б., Жукова А.В., Курчиков А.Р., Плавник А.Г. Особенности вытеснения нефти водой в сложнопостроенных коллекторах по данным численного эксперимента // Сборник 75 лет каф ГИГЭ - Томск. 2005, с. 32-36.

2.5. Использование ПК

Запуск исполняемого модуля программного комплекса HydroGeo (Windows приложение ПК HG) сопровождается появлением его основного окна:



Основное окно включает главное меню и информационные панели, на которых отражаются вид выполняемой в текущий момент работы и объем занимаемой памяти.

Использование ПК осуществляется активизацией элементов:

- [главного меню](#),
- [вложенных подменю](#) в его составе и
- [всплывающих меню](#),
- [элементов управления](#) и ввода данных в рабочих окнах.

Общие особенности управления работой и ввода данных

При вводе ИД в основном применяются единицы измерения, наиболее часто используемые на практике, а при выводе результатов единицы СИ и

допускаемые ГОСТ внесистемные единицы. Некоторые из величин могут быть приближенно оценены с помощью вспомогательных номограмм.

Управление созданием/закрытием, размещением и размерами рабочих окон ПК происходит обычным для интерфейса MS Windows образом.

Перемещение по опциям главного и вложенных меню, а также управление вводом данных, стандартно производится с помощью мыши (одинарным и в некоторых случаях двойным нажатием её левой клавиши), но может осуществляться и с применением клавиатуры (клавиши табуляции, управления курсором: "вверх", "вниз", "вправо", "влево", и клавиши ввода).

Задержка указателя мыши над основными элементами управления и ввода данных сопровождается появлением всплывающих подсказок (Hint).

Всплывающие меню (там где они предусмотрены) появляются при нажатии правой кнопки мыши. В зависимости от размещения курсора (над обычными или графическими объектами окна), опции всплывающего меню различаются.

В полях ввода ИД обычно применимы стандартные способы редактирования текстовой информации, включая перемещение курсора, копирование, вырезание и вставку. При вводе данных, как правило, используются программные фильтры, исключающие ввод недопустимых символов или значений.

В большинстве случаев, при перемещении фокуса с одного элемента управления или ввода данных на другой или при смене страниц отображения в пределах окна, либо при переносе фокуса между окнами, необходимая обработка информации выполняется автоматически.

В ПК для чтения-записи ИД в файл для разных типов данных предусмотрено использование расширений:

Filter Name	Filter
Все файлы	*.*
Текстовый файл	*.txt
Список ассоциатов модели	*.ass
Список минералов модели	*.min
ИД по раствору	*.an
ИД по породе	*.por
ИД ленты тока	*.len
ИД плановой модели	*.pln
ИД по газу	*.gas

ИД расчета водозабора	*.vdz
ИД откачки-восст. уровня	*.otk
ИД опред. ФЕС (уст. отбор)	*.otb
Список ионов модели	*.ion
ИП данные по КП и КВД	*.ip
Данные притока в колонне	*.col
Данные сорбции	*.srb
ИД слоя план. модели	*.sln
Сценарий	*.scn

2.6. Главное меню

Управление работой ПК осуществляется с помощью: [главного меню](#), находящегося в основном окне:

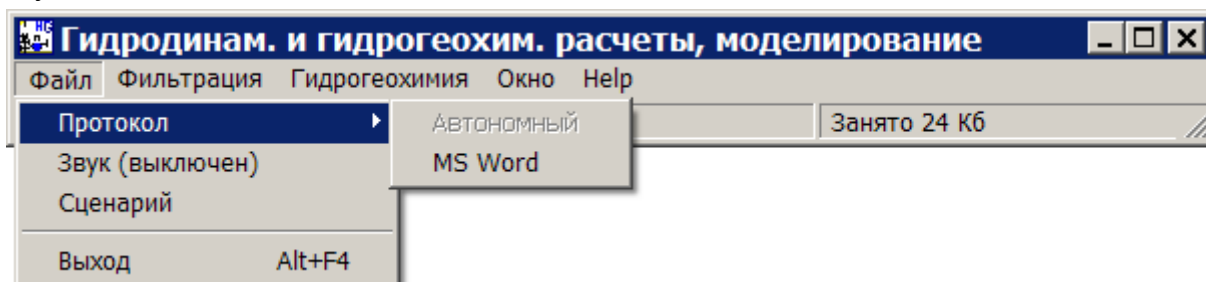
Файл Фильтрация Гидрогеохимия Окно Help

- [Файл](#) - включает опции: протокол, звук и выход
- [Фильтрация](#) - расчеты фильтрационно-ёмкостных параметров по данным откачек, испытания и опробования скважин, расчёт и оптимизация водозаборов
- [Гидрогеохимия](#) - гидрогеохимические расчёты и гидродинамическое и гидрогеохимическое моделирование
- [Окно](#) - навигация (перемещение) между одновременно открытыми окнами
- [Help](#) (помощь) - пояснения по работе с приложением, сведения о нём, переключение языка интерфейса (в данной версии реализация не завершена).

всплывающих меню.


2.6.1. Файл

Пункт главного меню:



Предусматривает опции:

- **Протокол** - выбор способа вывода протокола счета в собственный редактор, либо в автоматически создаваемый документ MS Word. Выбор сохраняется в файле настроек
- **Звук** - включение и выключение звукового сигнала, используемого при завершении расчетов, которые могут занимать много времени. Выбор сохраняется в файле настроек
- **Сценарий** - вызов окна, предназначенного для формирования и выполнения predetermined сценариев работы с сеточными моделями
- **Выход** - стандартное завершение работы программного комплекса HydroGeo и освобождение памяти

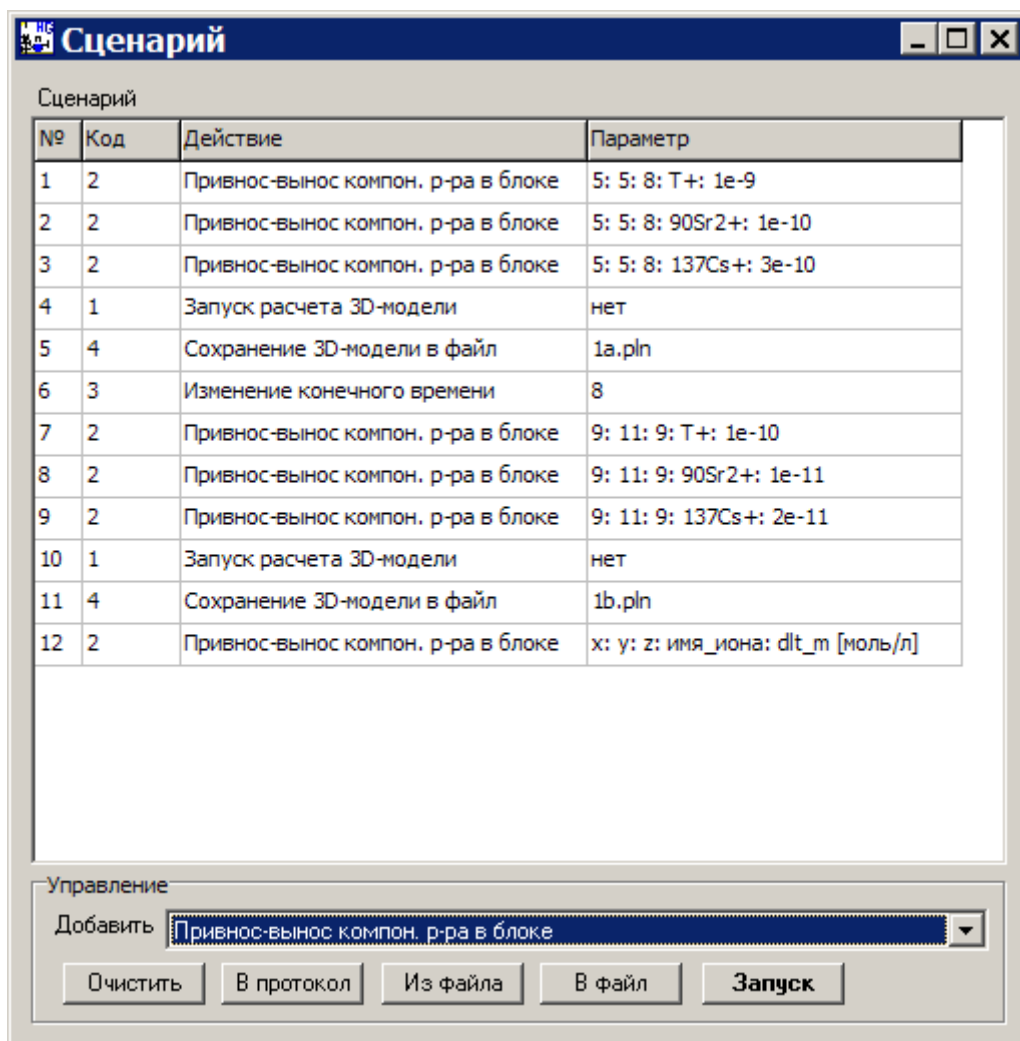
Функцию аналогичную опции "Выход" выполняет кнопка  в правом верхнем углу главного окна приложения. Эта же кнопка используется для закрытия дочерних окон.

Сценарий

Пункт меню **Файл** - > **Сценарий** предназначен для формирования и выполнения сценариев работы с сеточными моделями.

Сценарий составляется из predetermined списка команд, выбираемых из выпадающего списка поля "Добавить" в области "Управление". Поле "Параметр" содержит шаблоны, которые перед запуском сценария нужно заменить требуемыми значениями. Двоеточия в этом поле используются в качестве разделителей подпараметров, передаваемых соответствующему действию. Пробелы между подпараметрами и внутри символьных параметров служат для удобства восприятия и при выполнении сценария не учитываются.

Открывает окно:



Пример шаблона приведен в последней добавленной строке 12 сценария, показанного на рисунке. Его отредактированный вид, готовый для запуска, содержат строки 1, 2, 3 и 7, 8, 9 (значения x, y и z здесь отвечают порядковым номерам блоков по соответствующим осям координат).

Запуск сценария на выполнение осуществляется клавишей "Запуск". Остальные элементы управления используются обычным образом.

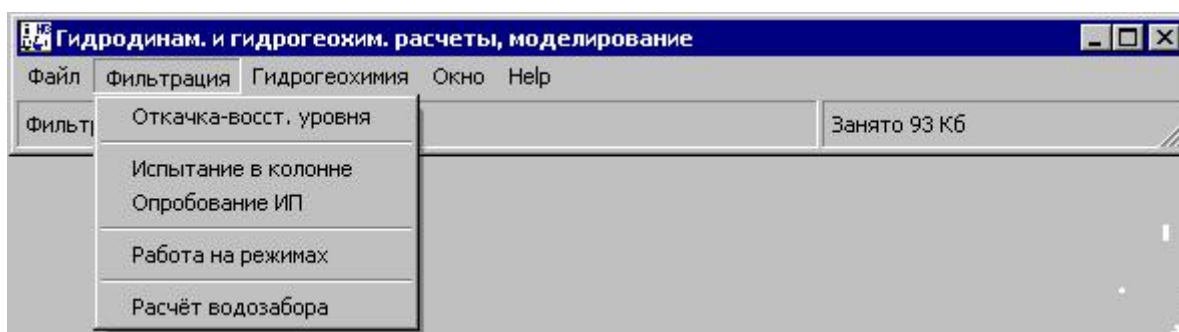
Важно.

1) Сценарий выполняется применительно к текущему состоянию модели, загруженной в окне "Плановый поток (3D)". Оно должно быть заранее полностью подготовлено.

2) Читаемые сценарием файлы должны находиться в той же директории, где находится последний прочитанный перед его запуском файл. Туда же будут помещены и сохраняемые сценарием файлы.

2.6.2. Фильтрация

Пункт [главного меню](#). Предназначен для выполнения гидродинамических расчётов аналитическими методами.



Основные опции:

- [Откачка-восст. уровня](#) - определение ФЕС водоносных горизонтов по данным пробных, опытных и опытно-эксплуатационных откачек или нагнетаний в гидрогеологических скважинах
- [Испытание в колонне](#) - расчёт ФЕС водоносных или нефтеносных горизонтов по данным испытания глубоких скважин в колонне
- [Опробование ИП](#) - обработка результатов опробования пластов в глубоких скважинах с помощью испытателя пласта (расчёт ФЕС и др.)
- [Работа на режимах](#) - расчёт ФЕС водоносных, нефтеносных или газоносных горизонтов по данным исследований на установившихся режимах
- [Расчёт водозабора](#) - расчёт и оптимизация работы водозаборов на заданный срок эксплуатации
- [Несоверш. скважин](#) - определение несовершенства водозаборных/нагнетательных скважин

При вводе ИД в основном применяются единицы измерения, наиболее часто используемые на практике, а при выводе результатов единицы СИ и допускаемые ГОСТ внесистемные единицы.

Откачка-восстановление уровня

Пункт меню: [Фильтрация](#) -> [Откачка-восст. уровня](#). Предназначен для обработки результатов опытно-фильтрационных работ, проведенных в гидрогеологических или иных опытных скважинах.

Рабочее окно содержит страницы:

- **Ввод исходных данных** - содержит разделы "Управление расчетом" и "Ввод данных"

№	Время	Дебит
1	1.0000	2.6700
2	10.0000	2.7000
3	20.0000	2.7400
4	90.0000	2.7400
5	120.0000	2.7800
6	300.0000	2.7800
7	360.0000	2.7400
8	420.0000	2.7800
9	480.0000	2.8200
10	540.0000	2.8200
11	600.0000	2.8600
12	780.0000	2.8600
13	840.0000	2.7800

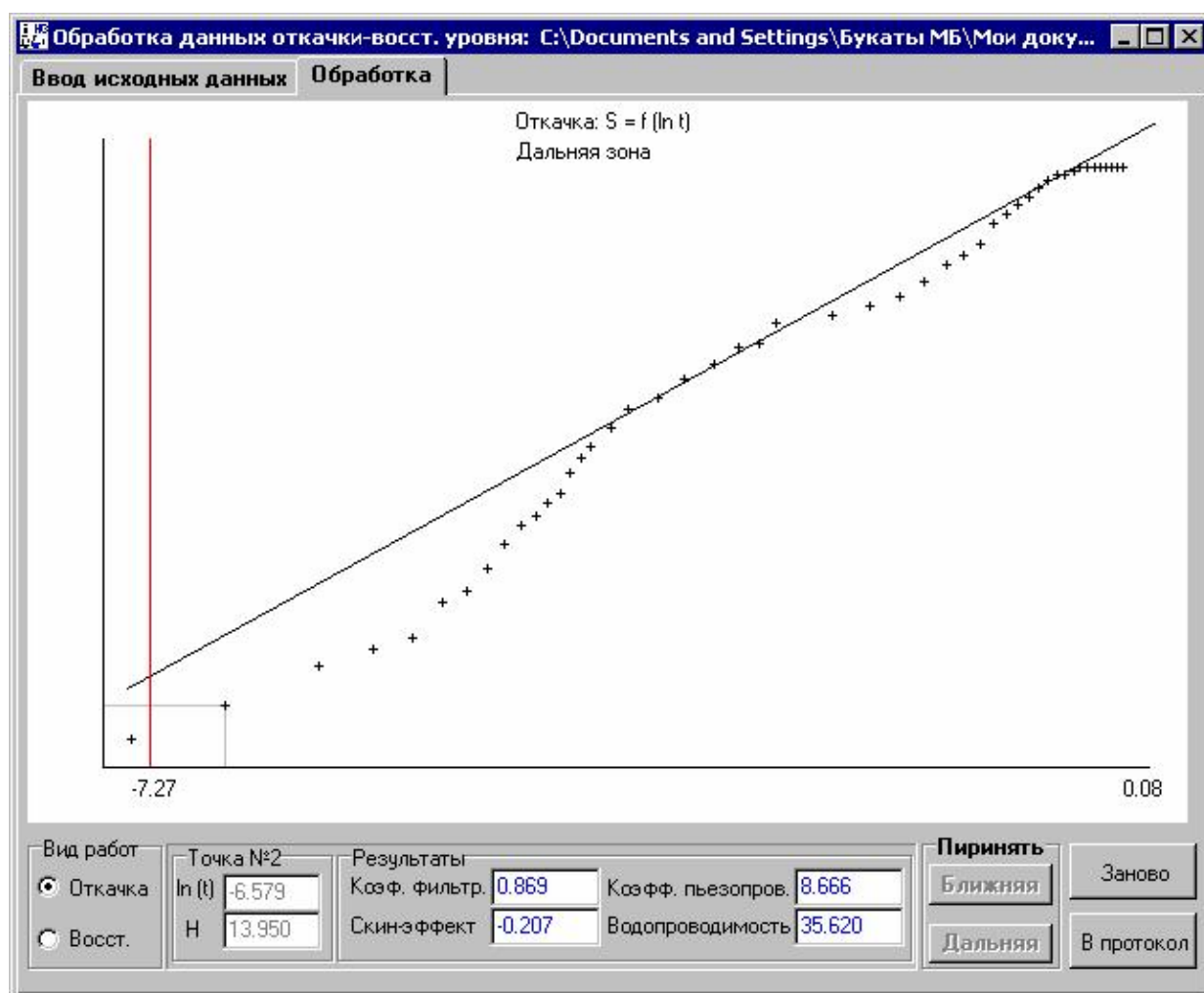
Раздел управления расчетом служит для назначения вида работ (откачка и/или восстановление уровня) и выбора режима фильтрации (напорный или безнапорный), вида скважины (опытная или наблюдательная) и режима опыта (при постоянном дебите или постоянном понижении уровня). Раздел ввода данных включает поля ввода параметров, характеризующих объект опыта, кнопки чтения исходных данных из файла и их сохранения в файле, а также кнопку "Ввод ИД", с помощью которой вызывается вспомогательное окно с таблицей ввода результатов прослеживания за ходом опыта, и кнопку "В протокол", служащую для вывода ИД в протокол счета.

Окно ввода ИД имеет вид, показанный во втором окне.

Здесь должен быть выбран вид серии исходных данных (замеры дебита или напора/давления при откачке или восстановлении уровня), единицы измерения вводимых в таблицу значений (для времени: с, мин, час и сут); для дебита: л/с, м3/час или м3/сут; для напора/давления: м, ат или МПа), введены число строк и сами табличные данные.

Каждая из серий ввода данных прослеживания, введенных в этом вспомогательном окне, должна быть независимо принята для использования в дальнейшей обработке с помощью кнопки "Принять".

- **Обработка** - служит для определения ФЕС пород графоаналитическим методом



Страница содержит область построения стандартного графика временного прослеживания уровня при откачке и/или его восстановлении, средства управления обработкой и визуализации текущих результатов. При инициализации текущего графика аппроксимирующая прямая проводится по всем точкам наблюдений с использованием метода наименьших квадратов. При этом подразумевается, что для каждой серии наблюдений пользователь будет вести обработку сначала для "ближней", а затем для "дальней" зоны фильтрации (что отражается в наименовании графика).

Используемые при построении графиков переменные: S - понижение уровня в ходе откачки (растет во времени), H - глубина залегания уровня при его восстановлении (уменьшается в ходе опыта), t - время от начала опыта, данные по которому обрабатываются, T - длительность откачки, предшествующей восстановлению уровня.

При обработке данных откачки справа, а данных восстановления уровня слева (рост времени в этом случае к началу координат) от точек начальной части графика, не удовлетворяющих условию наступления квазистационарного режима,

автоматически отрисовывается вертикальная линия красного цвета (при установке аппроксимирующей прямой такие точки должны игнорироваться).

Кроме того, точки замуров, в которых влияние ёмкости ствола скважины является существенным, отрисовываются серым цветом (их также лучше не учитывать).

При щелчке по точке мышью данные по ней выводятся в разделе "Точка №..." в нижней части страницы, слева от результатов обработки.

Собственно обработка проводится в следующем порядке:

1) щелчком мыши прямая на графике переводится в режим редактирования и перемещается (с помощью мыши) с тем, чтобы её новое положение характеризовало "ближнюю" (призобойную) зону опробуемого пласта;

2) в области "Принять" нажимается кнопка "Ближняя" (при этом становится доступной кнопка "Дальняя");

3) положение прямой на графике изменяется с тем, чтобы теперь она характеризовала "дальнюю" (удаленную) зону пласта, не измененную в процессе бурения;

4) принимаются параметры дальней зоны и результаты (при необходимости) выводятся в протокол счета;

5) если требуется, изменяется метка вида работ и все повторяется для второго вида наблюдений (если, конечно, он имеется).

После установки каждой прямой, полученные изображения графиков могут быть сохранены с помощью всплывающего меню, вызываемого нажатием правой кнопки мыши.

Испытание в колонне

Пункт меню: [Фильтрация](#)->Испытание в колонне. Предназначен для расчёта ФЕС водоносных или нефтеносных горизонтов по данным испытания глубоких скважин в колонне.

Плотность воды в зависимости от её состава и РТ-условий может быть рассчитана в опции "Пересчеты состава раствора", а вязкость воды и газа приближенно оценены с помощью вспомогательных номограмм.

Данные о временном прослеживании за уровнем флюида в колонне заносятся в форме "Ввод данных", вызываемой нажатием кнопки "Исходные данные", находящейся на странице "Ввод исходных данных".

После внесения всех данных в таблицу, необходимо принять данные, путем нажатия соответствующей кнопки. Нажатие кнопки «Обнулить» приводит к удалению, введенных значений в таблице.

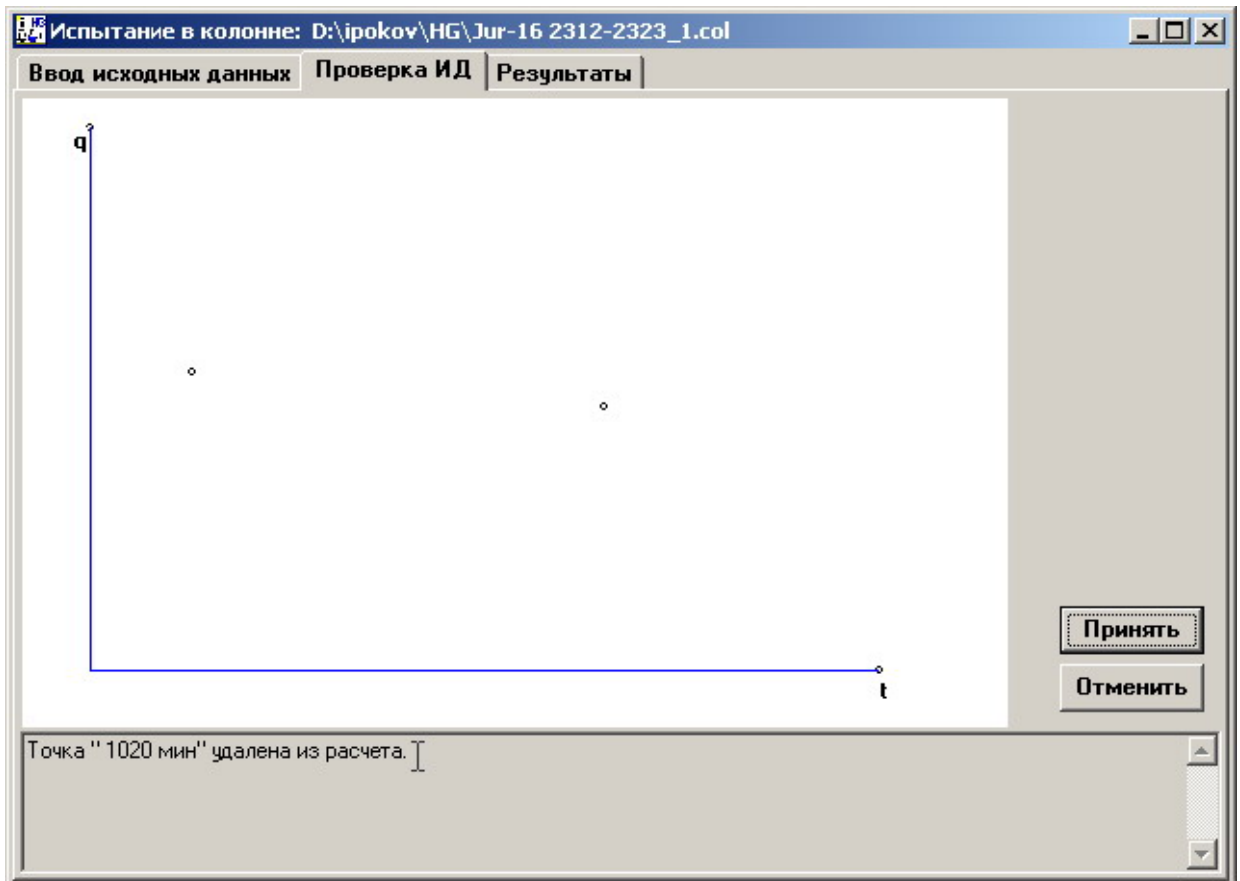
На странице «Ввод исходных данных» можно сохранить проект с расширением *****.col**, устанавливаемым по умолчанию для обработки данных этого типа работ. Также внесенные исходные данные (ИД) можно вывести в протокол, нажатием соответствующей кнопки.

На странице «Проверка ИД» отображается условный график с вынесенными удельными дебитами пластового флюида, каждое последующее значение удельного дебита, для корректной обработки, должно быть меньше предыдущего.

Это достигается путем удаления соответствующих точек на графике, выбивающихся из отмеченной тенденции. Удаление осуществляется «щелчком» на соответствующей точке, значения которых отображаются в компоненте, находящемся в нижней части страницы. Двойной щелчок на этом компоненте отправляет содержимое в протокол.

После редактирования данных, необходимо нажать кнопку «Принять», после чего она становится недоступной до нажатия кнопки «Отменить», которая восстанавливает первоначальные параметры.

На странице «Результаты» отображаются расчетные параметры исследуемого объекта, которые также можно вывести в протокол.



Испытание в колонне: D:\iprokov\HG\Jur-16 2312-2323_1.col

Ввод исходных данных | Проверка ИД | Результаты

Характеристика притока

№	t, мин	Pз, МПа	Q, м3/сут	q, м3/(сут*МПа)
1	0	9.0837	0.0	0.0
2	180	10.5488	17.3962	0.631845
3	900	13.7802	9.5921	0.380878
4	1380	15.6767	8.44443	0.373313

Фильтрационно-емкостные параметры

№	<t, мин	t, мин>	Kл, мкм2	a, м2/сут	Скинэф.	Pпл, МПа
1	0	900	0.00372288	2890	0	37.3487
2	180	1380	0.000794166	616.497	-1.85175	37.3487

Kл= 7.942E-04 мкм2; Kф= 2.793E-04 м/сут; T=Kф*m= 3.072E-03 м2/сут;

В протокол

Опробование ИП

Пункт меню: [Фильтрация](#)->Опробование ИП. Используется для обработки результатов опробования пластов в глубоких скважинах (расчёт ФЕС и др.) с помощью испытателя пласта (ИП).

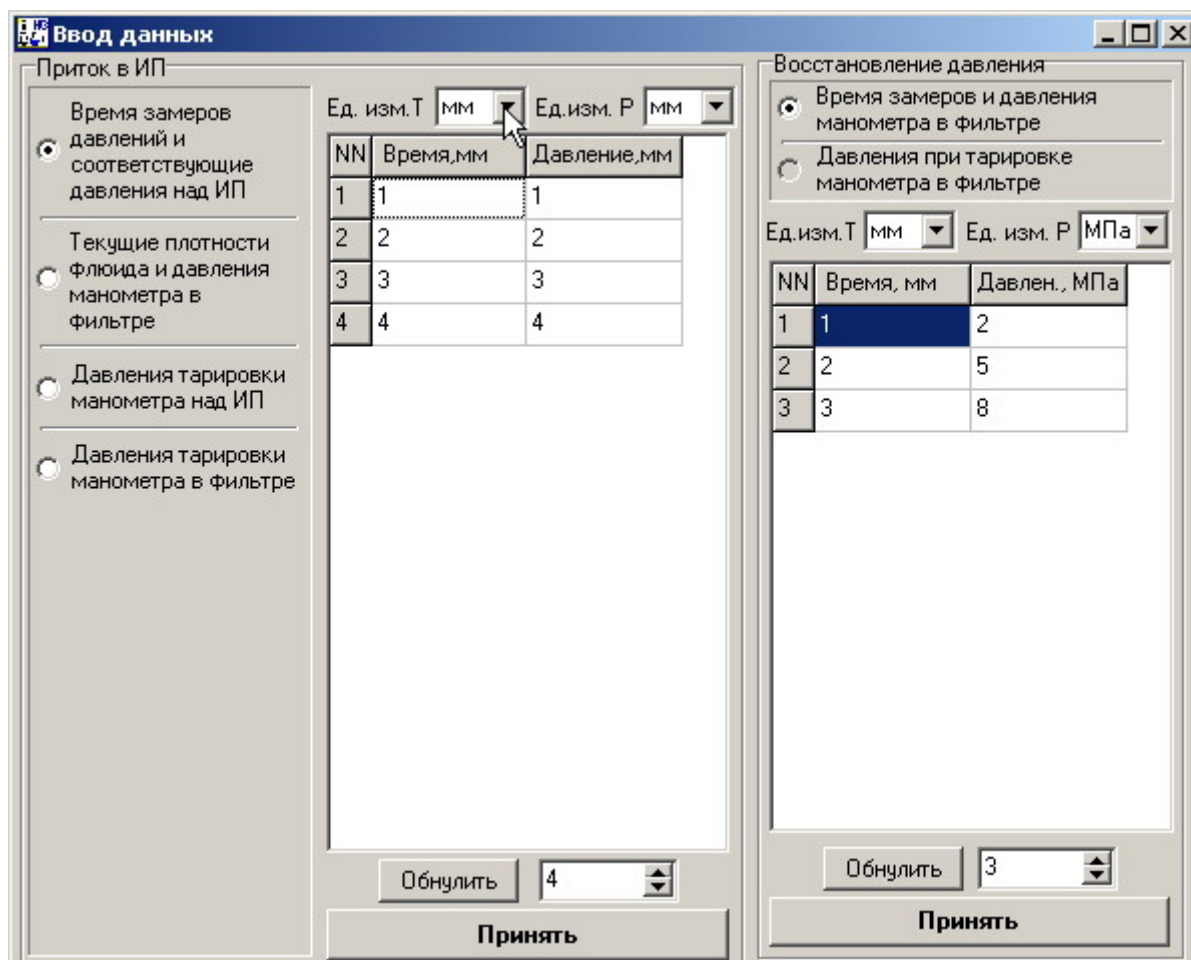
Плотность воды в зависимости от её состава и РТ-условий может быть рассчитана в опции "Пересчеты состава раствора", а вязкость воды и газа приближенно оценены с помощью вспомогательных номограмм.

Модуль может обрабатывать данные ИП и КВД, для чего нужно установить флажки в соответствующей области на странице «Ввод исходных данных».

Общие данные	
Диаметр ствола скв., мм	190
Мощность пласта, м	10
Вязкость флюида, Па*с	0.0014
Прористость пласта, %	10
Продолж. притока, мин	60
Соотв. дл. записи притока, мм	62
Средняя плотность флюида, кг/м ³	1000
Получено флюида из пласта, м	250
Внутр. диаметр INSTR. над ИП, мм	94
Козфф. сжимаем. флюида, 1/Па	3e-10

Данные временного прослеживания давления в ИП и КВД заносятся в табличном виде в форме «Ввод данных», вызываемой кнопкой «Исходные данные». В левой части формы располагается переключатель, определяющий ввод данных в «верхний» и «нижний» манометры и ввод соответственной тарировочной характеристики. Единицы измерения времени и давления выбираются из компонентов, расположенных над таблицей; это могут быть для времени: «мм», «сек», «мин», «час», «сут», для давления: «мм», «МПа», «атм», «Па». Значения давлений должно увеличиваться во времени, как для ИП, так и для КВД. Число строк в таблице регулируется компонентом, расположенном непосредственно под ней. После заполнения таблицы, при каждом из положении переключателя, необходимо принимать данные, нажатием соответственной кнопки. После введения и принятия всех данных, можно просматривать их, перемещаясь при помощи переключателя, если обнаружена ошибка при вводе и после ее исправления, также необходимо нажать кнопку «Принять». Нажатие

кнопки «Обнулить» приведет к удалению всех внесенных данных в таблице, соответствующих позиции переключателя.



На странице «Ввод исходных данных» находится кнопка сохранения проекта «В файл», данные сохраняются с расширением *****.ip**, установленным по умолчанию, для данных этого типа работ.

На странице [«Проверка ИД»](#) осуществляется контроль удельных дебитов.

На странице [«Результаты»](#) выводятся параметры исследуемого объекта.

Обработка КВД аналогична обработке [«Восстановлению уровня»](#).

Работа на режимах

Пункт меню Пункт меню: [Фильтрация](#)->Работа на режимах. Предназначен для обработки результатов гидродинамических исследований по методам выпуска или нагнетания флюида на устье скважины при установившемся режиме фильтрации ("метод установившихся отборов").

Открывает рабочее окно:

Имя объекта: Собинская 21, 2581-2590, вн-5, газ

Данные по объекту

Параметр	Значение
Диаметр скважины (зоны притока), мм	190
Мощность пласта, м	9
Открытая пористость, д.е.	0,14
Плотность перфорации, отв./м колонны	18
Диаметр отверстий перфорации, мм	3
Плотность флюида притока, кг/м ³	280,05
Вязкость флюида притока, Па·с	0,000034
P стат. "пласт." в точке замера, ат	317,26
Режим 1. Дебит, м ³ /сут	295460

газ

газ текущий

Z сверхж., б/р: 0,972

t (гр.С): 32

Из файла

В файл

Режим +

Режим -

Учет скинэфф. Вывести в протокол

Окно работы на режимах включает три страницы: **Ввод ИД**, **Расчет параметров** и **Индикаторная диаграмма**.

Ввод ИД. На странице содержатся:

- ✓ поле ввода имени объекта,
- ✓ поля выбора вида флюида и назначения его характеристик

В зависимости от выбора вида флюида (вода, нефть или газ) состав полей для назначения характеристик меняется. Наиболее полным он является для притока свободного газа. Включение метки "газ текущий" приводит к заимствованию текущих характеристик из формы расчета по газам (если она открыта и в ней проведен пересчет состава свободного газа).

- ✓ **таблица** для ввода ИД по объекту,

При заимствовании текущих характеристик газа, в таблицу переносится только его плотность. Вязкость должна быть введена вручную, используя соответствующие номограммы (см. ниже).

- ✓ **кнопки** для сохранения ИД в файл и чтения ранее сохраненных ИД из файла
- ✓ **кнопки**, которыми можно добавить и удалить Q-P режим исследования и вывести ИД в протокол счета

Добавляемый режим вставляется перед текущим (в одном из полей которого находится курсор) без нумерации. Удаляется также текущий режим. При отсутствии состояния текущего режима (фокус в табл ИД на любой строке перед перечнем режимов), вставка и удаление производятся в конце списка с продолжением нумерации режимов.

- ✓ **метка**, позволяющая учесть скин-эффект графоаналитическим методом (по индикаторному графику).

Метка становится активной после первого расчета параметров и только для воды и нефти, при наличии данных не менее, чем по 2-м установленным режимам. При выполнении расчетов, если в таблице ИД в полях "плотность перфорации" и "диаметр отверстий перфорации" стоят ненулевые значения, расчет скин-эффекта выполняется по упрощенной формуле Щурова (учитывает только качество вскрытия), а если там хотя бы в одной из строк ноль и метка включена, то скин-эффект будет рассчитан графоаналитическим методом (более надежен).

Плотность воды в зависимости от её состава и РТ-условий может быть рассчитана в опции "Пересчеты состава раствора", а вязкость воды и газа приближенно оценены с помощью вспомогательных номограмм.

При нарушении ограничений, установленных для вводимых значений ИД, может появиться предупреждение: "Ошибка ввода!", после чего ошибочное значение нужно заменить на допустимое.

Расчет параметров. При переходе на страницу происходит выполнение расчёта ФЕС и визуализация результатов в виде итоговой таблицы фильтрационных свойств. Результаты могут быть скопированы в протокол счета, который можно в любое время на протяжении сеанса работы просмотреть и при необходимости сократить или отредактировать, а также сохранить в виде текстового файла или же вывести на печать.

Здесь также может появиться предупреждение: "Для заданных условий расчет ФЕС сомнителен или невозможен!". В последнем случае в таблице результатов, вместо рассчитываемых значений, будут выведены нули.

Индикаторная диаграмма. На графической странице выводится индикаторный график $Q = f(P)$, с помощью которого оценивается скачек давления за счёт скин-эффекта. Нажатием правой клавиши мыши можно, как обычно, передать текущее изображение графика в буфер обмена для вставки в протокол счета или записать его в виде растрового файла формата bmp.

Примечания:

Таким образом, расчет параметров, если пластовый флюид является жидкостью, может быть выполнен в 3-х вариантах: без учета скин-эффекта, с его учетом аналитическим методом по приближенной формуле Щурова и графоаналитическим способом, по скачку давления на индикаторной диаграмме. Для пород, насыщенных свободным газом, могут быть применены только первые два метода.

При вводе ненулевых значений плотности перфорации и диаметра отверстий перфорации величина скин-эффекта рассчитывается аналитически по эмпирической формуле В.И. Щурова. В этом случае прямая индикаторного графика выводится с учетом его рассчитанного значения, а её положение позволяет оценить качество выполненного таким образом расчета скин-эффекта.

Для определения скин-эффекта графоаналитическим методом необходимо отключить использование формулы Щурова вводом нулевых значений в полях "плотность перфорации" и/или "диаметр отверстий перфорации". В этом случае расчет ФЕС проводится дважды: 1) с выключенной меткой расчета скин-эффекта на первой странице и 2) повторно, с включенной меткой его учета (индикаторный график при этом перестраивается в откорректированном виде, учитывающем вычисленное значение скин-эффекта).

Расчет водозабора

Опция меню: Фильтрация/Расчет водозабора. Предназначена для расчёта воронки депрессии/репрессии скважинных и других, сводимых к системе взаимодействующих источников/стоков, водозаборов или систем нагнетания, в т.ч. оценки эксплуатационных запасов подземных вод гидродинамическим методом. Позволяет учитывать до 4-х прямолинейных границ постоянного напора (например, совершенный водоток) или нулевого расхода (например, выклинивание пласта).

Рабочее окно включает 2 страницы:

- ИД** - ввод ИД, задание пошагового изменения дебита эксплуатационных скважин (при необходимости) и управляющих параметров

Содержит поля:

- ✓ **имени** объекта (привязки),
- ✓ **срока** эксплуатации,
- ✓ **допустимого понижения**
- ✓ **задания координат** планшета для визуализации размещения скважин на стр. 2,
- ✓ **переключатель** выбора напорного или безнапорного режимов фильтрации,
- ✓ **поля-счетчики** для определения числа скважин (ограничено лишь имеющейся памятью) и
- ✓ режимов-шагов изменения дебита скважин (в данной версии установлена возможность задания до 50 шагов дебита).

Расчет водозабора

ИД | Расчет

Привязка (имя объекта) "Условный водозабор"

Срок экспл. (от пуска 1-й скв.), сут 10000 Допустимое понижение, м 10

Углы схемы, м: левый-верхний -50 100 , правый-нижний 100 -50

Режим фильтрации
 Напорный
 Безнапорный

Данные по скважинам

№скв	Запуск(сут)	X(м)	Y(м)	Q(м3/сут)	Мощность	Кф(м/сут)	a(м2/сут)	D(мм)
12	30	50	0	120	10	0.7	10000	295
6	60	0	50	192	5	0.5	50000	295
1	0	0	0	192	9	1.0	100000	295
8	10	50	50	288	11	2.0	500000	295

Из файла
В файл
В протокол

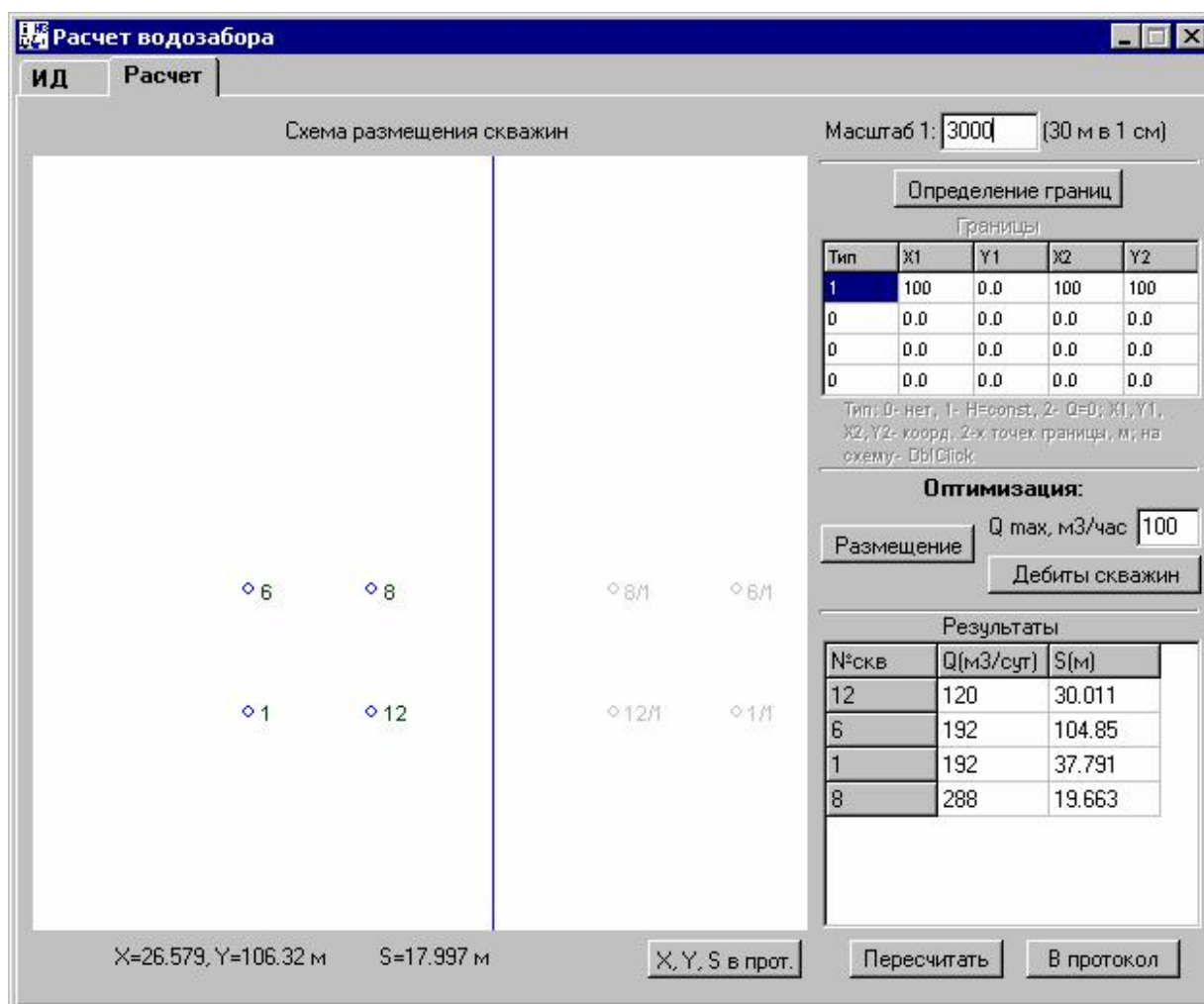
Очистить

Число скважин: 4 Режимы (шаги) Q: 1

При добавлении шага срок эксплуатации должен последовательно возрастать; при уменьшении значения счетчика происходит возврат к соответствующему шагу с сохранением данных последующих шагов; расчет всегда осуществляется до конца срока эксплуатации водозабора, отвечающего концу установленного в данном поле номера режима).

На этой странице также имеются:

- ✓ **кнопка** сохранения ИД в файле,
 - ✓ **кнопка** их чтения из файла,
 - ✓ **кнопка** вывода ИД в протокол счета,
 - ✓ **кнопка** очистки таблицы ИД.
- визуализация результатов, управление граничными и другими условиями расчета, включая оптимизацию размещения и дебитов эксплуатационных скважин



Содержит:

- ✓ **планшет** со схемой графического отображения размещения расчетных объектов,
- ✓ **поле** текущего масштаба схемы,
- ✓ **кнопку** активизации определения фильтрационных границ,
- ✓ **таблицу** задания или отображения координат двух точек, определяющих размещение каждой из 4-х возможных границ,
- ✓ **кнопку** активизации оптимизации размещения скважин, а также
- ✓ **кнопку** автоматической оптимизации дебитов эксплуатационных скважин с учетом введенной в поле "Q max" их предельной водоприемной способности,
- ✓ **таблицу** результатов расчета эксплуатационных понижений уровня на конец установленного срока эксплуатации (при нескольких режимах дебита в ней отображаются только конечные его значения),
- ✓ **кнопку** вывода координат и понижений уровня в выбранных точках графического поля в протокол счета (для последующей визуализации в виде карт изолиний с помощью, например, Surfer),

- ✓ кнопку пересчета таблицы результатов и
- ✓ кнопку её вывода в протокол счета.

Особенности использования элементов управления и отображения

На схеме отображаются:

- ✓ **скважины** (синий кружок) и их номера (в соответствии с табл. ИД),
- ✓ **границы**: $H=\text{const}$ (постоянного напора; сплошная линия), $Q=0$ (непроницаемая; пунктирная линия),
- ✓ **отраженные скважины** и их номера (бледно серым цветом; к номеру через слэш добавляется номер отражения),
- ✓ **точки** вывода расчетных понижений уровня в протокол счета (при включенной кнопке "X, Y, S в прот.").

Автоматически заданное значение поля текущего *масштаба* схемы может быть изменено на ближайшее округленное значение (ввод нового значения + нажатие Enter).

Определение фильтрационных границ проводится при нажатой кнопке "Определение границ". Оно может быть выполнено двумя способами: графически -> в очередной строке таблицы ввести 1 или 2, в зависимости от типа границы (значение 0 удаляет расчетную границу), перенести фокус на строку другой границы и вернуть на определяемую, провести мышью линию границы на схеме, либо с помощью заполнения строки в таблице -> заполнить строку, введя тип границы и координаты 2-х лежащих на ней точек, двойной щелчек левой кнопкой мыши по таблице или отжатие клавиши определения границ. После задания границ кнопка "Определение границ" д.б. отжата.

Для оптимизации размещения скважин нужно нажать кнопку "Размещение" и перетащить мышью любую из скважин на схеме на новое место (не переходя имеющихся границ!). Изменение расчетного понижения в ней и во всех остальных скважинах во время перетаскивания динамически отображается в таблице результатов. По завершению оптимизации кнопка "Размещение" д.б. отжата.

Оптимизация по дебитам осуществляется автоматически при нажатии кнопки "Дебиты скважин". Необходимо учитывать, что она во всех случаях проводится только применительно к дебитам, заданным для первого режима Q, определенного в ИД на первой странице!

Понижение уровня в любой точке схемы может быть определено щелчком левой клавиши мыши в нужном месте, при этом под схемой размещения объектов отображаются координаты и расчетное понижение уровня в выбранной

точке. Если при этом нажата кнопка "X, Y, S в прот.", то значения координат и понижений уровня одновременно выводятся в протокол счета, из которого они могут быть переданы для построения карты изолиний величины понижений уровня, используя Surfer или другую подобную программу. В этом случае точки нажатия мыши сохраняются на схеме до отжатия кнопки вывода, что позволяет при необходимости сгустить их в областях наибольшей изменчивости понижения уровня.

При выполнении расчетов с несколькими режимами дебита водозаборных или нагнетательных скважин необходимо:

1. ввести на странице ИД данные по первому режиму;
2. перейти на страницу Расчет, задать там граничные условия; если нужно, вывести результаты;
3. вернуться на страницу ИД; при необходимости вывести ИД в протокол счета; сохранить данные по текущему режиму, если предполагается их использование в дальнейшем, в файл; перейти на следующий режим работы водозабора, задать для него новое конечное время и ввести новые дебиты скважин;
4. повторить пп. 2 и 3 до завершения расчета всех требуемых режимов.

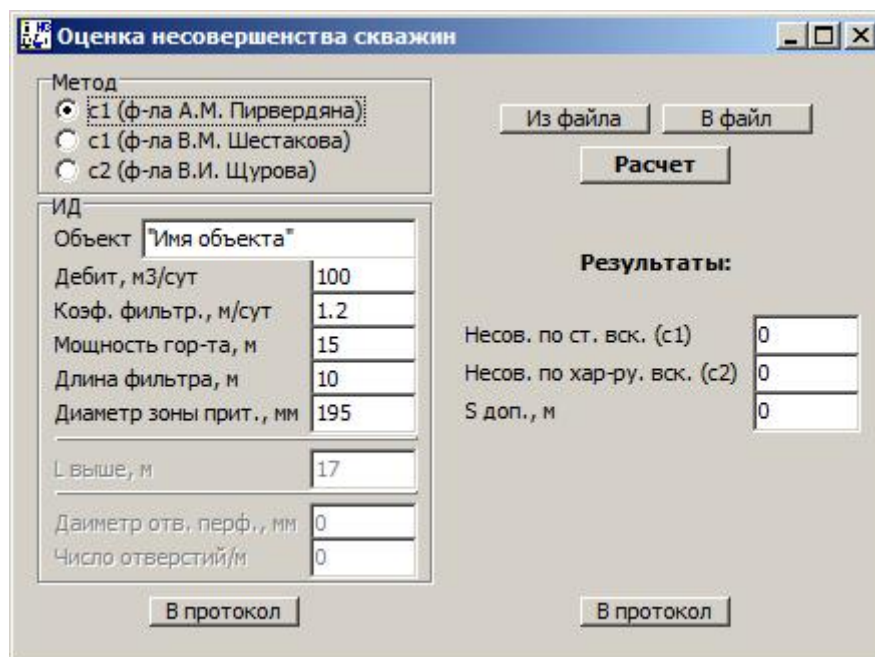
Сохранение ИД в файл осуществляется (см. п. 3) каждый раз для всей серии просчитанных режимов, включая последний (т.е. реж. 1, реж. 1-2, реж. 1-3 и т.д.), соответственно последующие пересчеты могут быть выполнены также только сразу для всей серии режимов, введенной из файла.

Определение граничных условий осуществляется на странице Расчет, а вывод ИД в протокол счета или в файл на странице ИД. Поэтому выводить или сохранять ИД лучше уже после ввода или корректировки граничных условий на странице Расчет, вернувшись для этого на страницу ИД.

Несовершенство скважин

Опция меню: Фильтрация/Несоверш. скважин. Предназначена для расчёта параметров несовершенства скважин по степени и характеру вскрытия пласта. Несовершенство по степени вскрытия рассчитывается по формулам А.М. Пирвердяна и В.М. Шестакова, по характеру вскрытия - по формуле В.И. Щурова (по данным о перфорации вскрытого интервала).

Открывает рабочее окно:

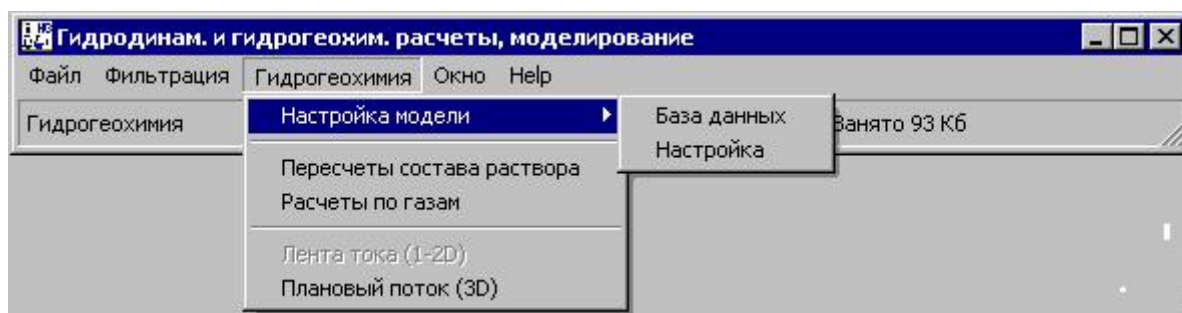


Рабочее окно включает разделы:

- Метод** - группа радиокнопок для выбора используемого метода
- ИД** - панель ввода исходных данных (набор доступных полей определяется выбранным методом оценки несовершенства)
- Результаты** - поля визуализации результатов расчета
- Управляющие кнопки** - активизируют соответствующие действия ("В протокол" - выводят в протокол ИД или результаты, соответственно; "Из файла" и "В файл" - служат для чтения ИД из файла и их записи в файл; "Расчет" - выполняет расчеты в соответствии с выбранным методом)

2.6.3. Гидрогеохимия

Пункт [главного меню](#), предназначенный для выполнения гидрогеохимических расчётов.



Основные опции:

- [Настройки модели](#) - редактирование используемых в модели термодинамических данных, выбор участвующих в расчётах компонентов водного раствора и минералов породы
 - [Пересчёты состава раствора и породы](#) - первичный пересчёт состава водного раствора и состава породы, расчеты комплексообразования, степени равновесия раствора с минералами породы, моделирование растворения-осаждения, смешения и испарения
 - [Расчеты по газам](#) - пересчеты состава газа, моделирование водно-газовых равновесий и процессов растворения и выделения газа из раствора
 - [Плановый поток \(3D\)](#) - численный расчет 1, 2, 3D (одно-, двух- или трехмерной) модели геофильтрации и геомиграции водного раствора
-

При вводе ИД в основном применяются единицы измерения, наиболее часто используемые на практике, а при выводе результатов единицы СИ и допускаемые ГОСТ внесистемные единицы. Некоторые из величин могут быть приближенно оценены с помощью вспомогательных номограмм.

Настройка модели

Пункт меню: [Гидрогеохимия](#)->Настройка модели. Позволяет редактировать используемую в модели базу термодинамических данных (ТБД) и назначать списки участвующих в расчётах компонентов раствора и минералов породы ("настраивать систему гидрогеохимического моделирования").

Содержит вложенное меню, которое включает две опции:

- [База данных](#)
 - [Настройка](#)
-

Первая из них служит для стандартного управления ТБД. Кроме того, поле "Выбор базы" определяет способ "составления" расчетных частиц раствора и минералов породы из "простых"-базовых частиц, который может различаться в случае учета в расчетах окислительно-восстановительных процессов и без учета таких реакций. Выбранный способ описания определяет выбираемые из БД строки с различающимися значениями поля TypeRecord в двух первых таблицах.

Кроме того, задавая в этих таблицах значение поля Use, можно отмечать строки, которых будут присутствовать в списках выбора компонентов при определении системы моделирования (для использования в расчетах). Это позволяет пометить, какие строки нужно поместить в списки выбора, поскольку для одних и тех же частиц раствора и минералов в базе часто присутствуют одновременно данные, заимствованные из нескольких различных источников.

Вторая опция (настройки) используется для собственно определения системы моделирования - выбора компонентов раствора и минералов породы, которые будут участвовать во всех физико-химических расчетах. Фактически, грамотный выбор системы моделирования определяет размерность возможных для реализации моделей и, соответственно, расход памяти и быстродействие ПЭВМ, что для многих из гидрогеохимических задач может стать критическим обстоятельством реальной их реализуемости. Следует также иметь в виду, что любые изменения в ТБД будут учитываться в расчетах только после нового выбора (перевыбора) системы моделирования в рамках данной опции, поскольку выбранная система моделирования сохраняется во вспомогательных файлах, которые обновляются (пересоздаются) только при повторном применении данной опции.

База справочных термодинамических данных

Пункт меню: [Гидрогеохимия](#)->Настройка модели->База данных.

Открывает окно, предназначенное для просмотра/изменения базы термодинамических данных.

Окно содержит поле выбора используемой базы данных (обычная или с учетом Eh), поле фильтра и связанную с ним кнопку "Найти", и 6 страниц, отражающих содержимое таблиц используемой ПК НГ базы термодинамических данных (ТБД), а также панели их управления:

- Комп. р-ра** - термодинамические и справочные параметры компонентов раствора (таблица "1-3w" в ТБД).
- Минералы** - термодинамические и справочные параметры минералов породы (таблица "4m" в ТБД)
- К-А взаим.** - параметры Питцера, учитывающие парные взаимодействия типа катион-анион (таблица "5КА" в ТБД)
- К-К, А-А взаим.** - параметры Питцера, учитывающие парные взаимодействия типа катион-катион и анион-анион (таблица "6РІКК" в ТБД)

- **К-К-А, К-А-А взаим.** - параметры Питцера, учитывающие тройные взаимодействия (таблица "7PIKKA" в ТБД)
- **Плотн. конст.** - плотностные константы солей раствора (таблица "2PLOTN" в ТБД)

Просмотр/изменение базы термодинамических данных

Выбор базы: **обычная** Фильтр: Найти

Комп. р-ра: Минералы | К-А взаим. | К-К, А-А взаим. | К-К-А, К-А-А взаим. | **Плотн. конст.**

Термодинам. парам. компонентов раствора

AtomNum	Use	Base	DataSource	TypeF	IonName	im1	n1	im2	n2	im3	n3	im4	n4	im5	n5	im6	n6	MolWeight	Charge	G_298	S_2
13			Волков,Соломин,83,набс	0	(Al(SO3)2)+	Al3+	1	(SO3)2-	1	0	0	0	0	0	0	0	0		1	-1003657.92	
13			Волков,Соломин,83,набс	0	(Al(SO3)2)-	Al3+	1	(SO3)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	0		-1	-1520842.16	
13			Волков,Соломин,83,набс	0	(Al(HSO3)2)+	Al3+	1	(SO3)2-	2	H+	2	0	0	0	0	0	0		1	-1521762.64	
13			Волков,Соломин,83,набс	0	(AlHSO3)2+	Al3+	1	(SO3)2-	1	H+	1	0	0	0	0	0	0		2	-1002695.6	
13			Карпов И.К. и др.,88	2	(Al(SO4)2)-	Al3+	1	(SO4)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	219.109		-1	-2002179	
13	+		Amorsson et al.(1982), ур-е набор параметров, 6.1.9.	2	(AlSO4)+	Al3+	1	(SO4)2-	1	0	0	0	0	0	0	0	123.045		1	-1242058	
13			Карпов И.К. и др.,88	2	(AlSO4)+	Al3+	1	(SO4)2-	1	0	0	0	0	0	0	0	123.045		1	-1249474	
13	+		Волков,Соломин,83,набс набор параметров, 6.1.9.	2	Al2(SO4)3	Al3+	2	(SO4)2-	3	0	0	0	0	0	0	0	342.144		0	-3202642.8	
13			Волков,Соломин,83,набс набор параметров, 6.1.9.	2	(Al(SO4)2)-	Al3+	1	(SO4)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	219.102		-1	-2005730	
13	+		Amorsson et al.(1982), ур-е набор параметров, 6.1.9.	2	(Al(SO4)2)-	Al3+	1	(SO4)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	219.102		-1	-1996333	
13			Hammel W. et al.2002, NA	2	(Al(SO4)2)-	Al3+	1	(SO4)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	219.102		-1	-2009425	
13			Hammel W. et al.2002, NA	2	(AlSO4)+	Al3+	1	(SO4)2-	1	0	0	0	0	0	0	0	123.045		1	-1254005	
13	+		Линник, Набиванец,86,ф	2	(AlFK2)-	Al3+	1	(FK)2-	2	0	0	0	0	0	0	0	5000		-1	-520400.62	
13	+		Линник, Набиванец,86,ф	2	AlFK+	Al3+	1	(FK)2-	1	0	0	0	0	0	0	0	5000		1	-504418.36	
13			Волков,Соломин,83,набс	2	(Al(CH3COO)2)+	Al3+	1	CH3COO-	2	0	0	0	0	0	0	0	145.03		1	-1259886.08	
13	+		Волков,Соломин,83,набс	2	(AlCH3COO)2+	Al3+	1	CH3COO-	1	0	0	0	0	0	0	0	86.006		2	-874874.4	
13	+		сrpn92 ref:G4, 5 Apr 93	2	(Al(CH3COO)2)+	Al3+	1	CH3COO-	2	0	0	0	0	0	0	0	145.03		1	-1256204.16	
13	+		сrpn92	2	Al(CH3COO)3	Al3+	1	CH3COO-	3	0	0	0	0	0	0	0			0	-1636362.4	
13	+		Волков,Соломин,83,набс	2	(AlCl2)+	Al3+	1	Cl-	2	0	0	0	0	0	0	0	97.888		1	-750149.36	
13	+		Волков,Соломин,83,набс	2	(AlCl)2+	Al3+	1	Cl-	1	0	0	0	0	0	0	0	62.435		2	-623457.84	
13	+		набор параметров, 6.1.9.	2	AlCl3	Al3+	1	Cl-	3	0	0	0	0	0	0	0	133.341		0	-884180	
13			Волков,Соломин,83,набс	2	(AlF)2+	Al3+	1	F-	1	0	0	0	0	0	0	0	45.9804		2	-803328	
13			Карпов И.К. и др.,88	2	(AlF4)-	Al3+	1	F-	4	0	0	0	0	0	0	0	102.975		-1	-1705099	
13			Волков,Соломин,83,набс	2	(AlF2)+	Al3+	1	F-	2	0	0	0	0	0	0	0	64.9788		1	-1111354.08	
13	+		Булах А.Г., Булах К.Г., 78	2	(AlF5)2-	Al3+	1	F-	5	0	0	0	0	0	0	0			-2	-2006400	

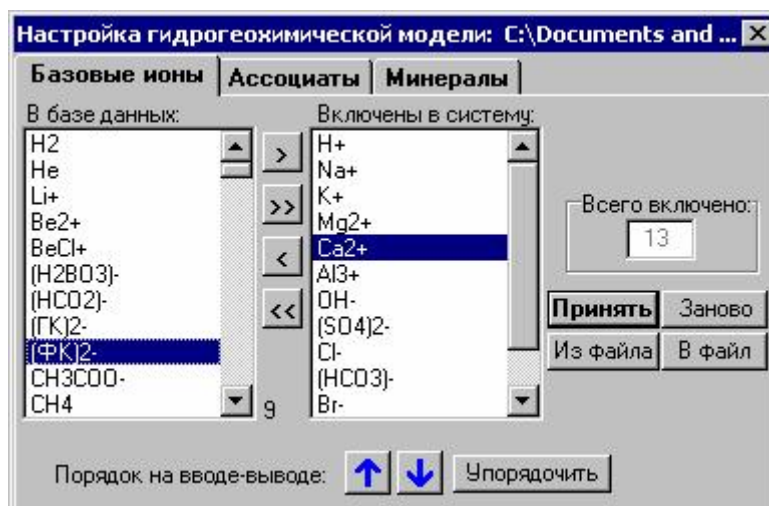
Пояснения по содержанию полей каждой из этих таблиц можно посмотреть, открыв структуру соответствующей таблицы в MS Access.

Важно. Любые сделанные в ТБД изменения будут применяться в последующих расчетах и моделировании только после того, как будет выполнена перенастройка системы моделирования

Настройка

Пункт меню: [Гидрогеохимия](#)->Настройка модели->Настройка.

С помощью данной опции осуществляется выбор компонентов раствора и минералов породы, включаемых в систему гидрогеохимического моделирования (настройка системы моделирования). Опция доступна только когда закрыты окна пересчета состава раствора и породы и моделирования геомиграции.



- Базовые ионы**
- Ассоциаты** - выбор производных от базовых частиц раствора, ионных ассоциатов и комплексных соединений,
- Минералы** - выбор минералов породы.

Перемещение между страницами только последовательное, причем выход из окна настройки становится возможным лишь по завершении выбора.

Принять", "Заново", "Из файла", "В файл" и "Порядок на вводе-выводе". Среди них кнопки загрузки-сохранения списков выбора позволяют сохранить их в файлах со стандартными расширениями ion, ass и min, для последующего повторного использования (в т.ч. путем редактирования).

Для выбора компонентов на каждой из страниц служат списки "В базе данных" и "Включены в систему", кнопки выбора и исключения частиц раствора и минералов из списка включаемых в систему и кнопки изменения их местоположения в списках (порядка при вводе-выводе). Левые списки заполняются автоматически из ТБД, причем в следующие за базовым списки включаются только те компоненты, для которых выбраны все составляющие их базовые частицы.

Например, если в числе базовых частиц раствора не выбран "Cl-", то в списках ассоциатов будут отсутствовать частицы в состав которых входит данный ион, а в списке минералов будут отсутствовать хлориды и другие минералы, в составе которых присутствует "Cl-".

Индивидуальными на каждой из страниц являются элементы управления:

- кнопка "Упорядочить"** при выборе базовых ионов, с помощью которой производится проверка сформированного пользователем правого списка на выполнение обязательных правил и при необходимости автоматически редактирует его,

- **кнопки установки** конца списка ввода и при выборе ассоциатов и
- **метка** вида параметров G и S, выбираемых для использования из ТБД.

Кроме обычного назначения, отметка кнопками конца "списка ввода" (можно ввести данные только по предшествующим компонентам раствора, включая отмеченный) и "списка вывода" (при стандартном выводе выводится для просмотра только этот список), последний список используется также для включения соответствующих компонентов в расчеты комплексообразования (и, соответственно, моделирование растворения-осаждения) в случае, когда для расчета коэффициентов активности выбран метод К.С.Питцера (в отличие от него, при использовании метода Девис, в расчетах всегда участвуют все компоненты раствора, как базовые, так и производные от них ионные ассоциаты и комплексы). Необходимость этого связана с изначальными особенностями реализации теории межчастичного взаимодействия и метода расчета коэффициентов активности Питцера, оперирующего валовыми концентрациями включаемых в расчет комплексообразования компонентов. Поэтому при выборе метода Питцера в список вывода должны быть включены все частицы для которых этот метод не может обеспечить полноценный учет общего солевого состава раствора, как, например, это происходит в случае ионов кремния и алюминия, для которых в список вывода в этой ситуации следует включить основные из содержащих их ассоциатов.

Важно:

1) Ввиду возможного наличия в ТБД недостаточно надежных значений, желательно проводить их проверку путем последовательного пошагового включения в модель необходимых компонентов и оценивая получаемые результаты (сравнением с экспериментальными и полевыми данными). Для оптимизации памяти ПЭВМ и быстродействия необходимо во всех случаях стремиться к максимально возможной минимизации числа включаемых в систему компонентов.

2) В ходе настройки осуществляется выбор из ТБД всех справочных параметров, необходимых для проведения расчетов и моделирования, и сохранение их в специальных служебных файлах, откуда они извлекаются в ходе работы ПК (без проведения настройки ПК не использует изменения, внесенные в ТБД).

Пересчеты состав раствора и породы

Выполняет первичные пересчёты состава водного раствора (с балансировкой ИД по принципу электронейтральности и учётом его Eh) и состава породы, а также служит для просмотра и вывода в протокол счета данных по исходным и полученным в результате пересчетов и моделирования взаимодействия составам раствора и породы.

Кроме того, если известно (или предполагается), что текущий раствор равновесен по отношению к каким либо из изучаемых минералов системы, в данном окне можно определить (методом подбора) значения свободной энергии Гиббса и величины энтропии, отвечающие состоянию равновесия, экспериментально (или иным образом) фиксируемому для таких минералов ("экспериментальных" стандартных значений $dI_t G$ и $dI_t S$ образования минералов; для подбора энтропии требуются данные о равновесных составах раствора не менее, чем при двух температурах).

Открывающееся окно содержит шесть страниц:

- [Валовый состав раствора](#) - служит для ввода, пересчетов и визуализации "валового" состава водного раствора (суммарных концентраций компонентов, определяемых по данным химического анализа), а также текущих значений активности и коэффициентов активности
- [Действительный состав раствора](#) - производит пересчеты и визуализацию "истинного" состава раствора, учитывающего результаты расчета комплексообразования, активности, коэффициентов активности и констант устойчивости ассоциатов
- [Состав породы](#) - используется для ввода, пересчета и визуализации состава пород и констант равновесия реакций осаждения минералов, включенных в систему
- [Смешение и/или испарение](#) - служит для моделирования смешения, испарения вод и приведения их в состояние насыщения с CO₂ равновесной газовой фазы
- [Сорбция катионов](#) - применяется для моделирования сорбции катионов и выполнения связанных с ней вспомогательных расчетов
- [Растворение-осаждение](#) - визуализирует текущий характер насыщения раствора с заданной породой и выполняет моделирование реакций

растворения-осаждения минералов породы при её взаимодействии с раствором (с учетом или без учета кинетики).

Валовый состав раствора

Страница окна пересчетов состава раствора и породы. Используется для ввода и пересчета данных о химическом составе водного раствора и визуализации результатов любых других, выполняемых в рамках ПК NG, расчетов состава вод (в т.ч. при моделировании).

Управление пересчетом анализа

Раствор: текущий исходный новый

Ед. изм.: мг/л

Восст. эл.-нейтр.: Na+

Метод расч. k act: Davies/Pitzer Davies Pitzer

Данные по составу соответствуют: Расчет pH

Исходные данные и результаты пересчета

Компонент	Содержание
H+	2,9071E-5
Na+	51,52
K+	4,73
Ca2+	80,1
Mg2+	18,6
Fe3+	1,21
Al3+	0,001
(UO2)2+	0
e-	0,0
OH-	0,327811
(HCO3)-	371,2
(SO4)2-	4,04
Cl-	55,51
H2O	999292
SiO2	27,66

Привязка (имя анализа): Усредненная вода палеогена

Формула солевого состава: Усредненная вода палеогена

(HCO3)- 78.34 Cl- 20.16 (SO4)2- 1.08 OH- 0.25 (CO3)2- 0.16

0.658 Ca2+ 50.25 Na+ 28.17 Mg2+ 19.24 K+ 1.52 Fe3+ 0.82

	Плотн.(кг/м3)	рН	Еh(мВ)	M(г/л)	Ионная сила(моль/л)	К-А(г-экв/л)
Исходные:	999,1	7,54	0,0	0,658	н/опр	н/опр
Расчетные:	999,1	7,54	0,0	0,658	0,011	н/опр

Точность в COMPL: Ньютон 0,01; Основная 1E-5; Сходимость "жестко"

газ текущий учет распада/деградации

Обнулить

При использовании страницы важно обращать внимание на , размещенных в её верхней части.

Ввод и вывод данных может быть представлен в различных единицах измерения концентрации: мг/л, г/л, мг/кг, г/кг, мг-экв/л, г-экв/л, мг-экв/кг, г-экв/кг, мг-моль/л, моль (г-моль)/л, мг-моль/кг, моль/кг, %-экв (экв-%), мольные доли. Кроме того в этом списке можно выбрать вывод активностей и текущих коэффициентов активности компонентов раствора. Соответствующие пересчеты выполняются "на лету", при каждом изменении данного поля.

Кроме прочего, это дает возможность вводить значения в разных единицах измерения, для чего вводятся данные в одних единицах, затем выполняется переход к другой единице измерения, вводятся данные в этой системе и т.д.

Первичные данные анализа вод обычно не отвечают условию электронейтральности. Поэтому важен выбор компонента раствора, содержание которого будет при расчете изменено с целью **восстановления баланса катионов и анионов** (поле "Восст. эл.-нейтр."). При первичном пересчете анализа, если имеется определение рН, опция "Расчет рН" всегда должна быть отключена, тогда как для анализа, уже прошедшего первичный пересчет, эту опцию следует включить. Кроме того, первичный пересчет необходимо осуществлять при РТ-условиях, при которых анализ выполнялся в лаборатории (изначально заданы 22 град. С и 0.1 МПа), поскольку любое отклонение от этого условия на данной стадии может резко исказить действительное кислотно-щелочное состояние раствора. Напротив, переход к расчетным РТ-условиям ("природным", "пластовым" и т.п.) и все другие последующие расчеты должны проводиться при включенном состоянии данной опции (при выполнении моделирования она включается автоматически).

Начальная концентрация компонента, выбранного для балансировки, должна быть задана не нулевой, иначе считается, что он в растворе отсутствует и, следовательно, проводить по нему балансировку нельзя.

Совет: если Na+K определялись расчетом (частая ситуация для старых данных), то для балансировки выбирается Na⁺, концентрация которого в этом случае рассчитывается; в противном случае лучше выбирать один из компонентов, содержащийся в наибольших количествах, поскольку точность их определения обычно ниже, либо компонент, по которому нет уверенности в достоверности лабораторного определения, и "исправление" которого (конечно при условии, что анализ всех других компонентов обладает достаточной полнотой) может оказаться целесообразным; кроме того из выпадающего списка может быть выбрано "нет" - тогда невязка анализа запоминается и во всех дальнейших расчетах сохраняется постоянной. Её начальная и текущая величины выводятся для контроля в полях "К-А, г-экв/л" (здесь К - сумма катионов, а А - анионов); еще один путь балансировки - включение опции "Расчет рН", тогда балансировка осуществляется подбором рН (имеет смысл только если начальные суммы катионов и анионов совпадают, а величина рН неизвестна).

Появление при пересчете анализа сообщения "Не выполняется условие электронейтральности" происходит в 2-х случаях: если балансировка требует понижения концентрации выбранного компонента, но снижение её до нуля недостаточно для сбалансирования анализа (нужно исправить неверно введенные начальные значения или изменить способ балансировки), либо при большом начальном дисбалансе (в этом случае пересчет нужно повторить несколько раз до достижения баланса).

При определении **метода расчета коэффициентов активности** ("Метод расч. k act") возможны три опции:

- Davies/Pitzer**
- Davies** - следует использовать для пресных и слабосоленых вод, в большинстве случаев ускоряет расчеты
- Pitzer** - установлен по умолчанию, применяется для высокоминерализованных вод и рассолов.

Переключение опций группы **раствор** обычно осуществляется автоматически. Выбор переключателя "исходный" позволяет в ряде случаев восстановить предшествующее состояние таблицы концентраций, а выбор "новый" может понадобиться, если нужно принудительно провести расчеты с текущим анализом, как с новым исходным раствором.

Необходимо следить, чтобы при выполнении первичного пересчета анализа все доступные поля в группе **Исходные данные и результаты пересчета** были изначально заполнены. Обычно не следует вводить отличные от нуля значения в поля таблицы H⁺, OH⁻ и H₂O, т.к. они всегда рассчитываются. Исключением является ситуация, когда в поле pH введено число 0. В последнем случае расчет pH будет выполнен по введенным значениям H⁺ и OH⁻. Выбор некоторых из единиц измерения может потребовать дополнительного ввода величины минерализации раствора (M, г/л). Поле ввода Eh активно, только если при определении настроек системы гидрогеохимических расчетов и моделирования выбрано использование базы термодинамических данных "С учетом Eh" (в противном случае Eh раствора в расчетах не учитывается).

Таблица состава может находиться в режиме ввода данных (когда в ней отображается список ввода, определенный при выборе системы) или визуализации результатов (отображается список вывода). В первый режим таблица переходит после выделения любого поля ввода данных, а во второй - после выполнении пересчета или моделирования. При правильной настройке этим можно пользоваться для просмотра "валового" состава раствора (суммарных концентраций компонентов, которые могут содержаться в растворе одновременно в нескольких формах, но вводятся в какой то одной из них).

Управляющие кнопки имеют то же назначение, что и во всех других случаях: вывод ИД в протокол счета, запись в файл и чтение из него данных, выполнение пересчета, обнуление полей таблицы и возврат в окно моделирования (появляется при моделировании геомиграции). Щелчек правой кнопкой мыши вызывает всплывающее меню.

Формула солевого состава является графическим компонентом и её всплывающее меню отличается составом доступных опций, позволяя сохранить изображение в файле или передать его через буфер в документ MS Word или какого либо другого редактора.

Действительный состав раствора

Страница окна пересчетов состава раствора и породы. Используется для "расчета комплексообразования" - пересчетов и визуализации "истинного" состава раствора (с учетом присутствующих в нем ионных ассоциатов и комплексных соединений), а также просмотра и вывода значений активности ионов и частиц раствора, коэффициентов активности и констант устойчивости ассоциатов.

Компонент	Содержание
OH-	100
(HCO3)-	98,9979
(SO4)2-	100
Cl-	100
SiO2	48,5005
(CO3)2-	0,224185
H2SiO3	2,33275
(HSiO3)-	0,477425
(H3SiO4)-	0,419617
H4SiO4	48,2696
Fe2+	98,8322
[Fe(OH)4]-	0,00511936
Fe(OH)3	0,0227194
[Fe(OH)2]+	0,0014602
FeOH+	1,13846
UO2CO3	0,00265857
(UO2(CO3)2)2-	0,870189
(UO2(CO3)3)4-	1,47536
(U(OH)5)-	97,6514
(UO2(OH)3)-	0,000152405
(H2UO4)-	0,000149275

Управление выводом
 Ед. изм. мольные % от суммы
 Отменить выделение
 Вывести в протокол

В таблице
 состав раствора
 коэф. активности
 активности
 In конст. уст. ассоциатов

Расчетный состав раствора Число приближений 14
 Усредненная вода палеогена

Формула солевого состава
 Усредненная вода палеогена
 (HCO3)- 80.55 Cl- 18.05 (SO4)2- 0.97 (CO3)2- 0.36
 0.699
 Ca2+ 46.08 Na+ 34.38 Mg2+ 17.64 K+ 1.39 Fe2+ 0.49

Переход к данной странице возможен только для раствора в состоянии "текущий" (прошедшего первичный пересчет состава).

пересчеты выполняются в момент перехода на страницу, а также при смене выбора в поле "Ед. изм." (единицы измерения), либо выбора вида визуализации в группе меток "В таблице".

Поле **единиц измерения** позволяет выбирать те же единицы измерения концентраций, что и на странице валового состава, и кроме того: "мольные % от

суммы 1-го" (первого вида ионов в ассоциате) и "мольные % от суммы 2-го" (второго вида ионов в ассоциате).

В зависимости от **состояния кнопки** "Выделить главные" или "Отменить выделение", в таблице выводится либо весь список частиц раствора, определяемый выбранной системой моделирования, либо список только преобладающих частиц (при выводе в таблице состава раствора).

Остальные элементы управления имеют то же назначение, что и в других случаях.

Расчетные давление и температура всегда отвечают введенным на стр. валового состава раствора.

Состав породы

Страница окна пересчетов состава раствора и породы. Используется для ввода, пересчета и визуализации состава пород и констант равновесия реакций осаждения минералов, включенных в систему.

Минерал	Формула	Содержание
уранинит	UO2 кр	0,01

Порода
Условная порода

Открытая пористость(%) 20,0

Управление вводом - выводом

Состав
 текущий
 исходный
 новый

Из файла В файл

Пересчет

В таблице
 состав породы
 In конст. осаждения

Ед. изм. %-объём

Вывести в протокол

Согласование G,S
 Подбор G (св. энерг. Гиббса) Подбор S (энтропии)

Сохранить систему

Обнулить

Назначение и использование **элементов управления** и визуализации (ввода-вывода), присутствующих на данной странице, не отличается от описанного для предыдущих страниц.

Возможными **единицами измерения** ("Ед. изм.") минерального состава породы являются: %-объема, %-массы, моль/м³ и кг/м³.

Важно:

В ходе пересчета выполняется проверка соответствия суммарного объема заданных минералов и пористости. Если **введенный состав является неполным или избыточным**, пользователю предлагается привести минеральное выполнение породы к 100%. Если такое приведение принимается, то введенные содержания пересчитываются с разбросом невязки на все минералы пропорционально их концентрации. В противном случае, для неполного состава породы, считается, что все введено верно, а при всех последующих пересчетах и изменениях состава породы принимается, что недо введенный объем породы представлен неизвестным минералом с условной плотностью 2500 кг/м³.

Исключением является случай, когда для всех минералов, которые могут составлять породу, вводятся нулевые содержания. В этом случае появляется запрос "Минералы в составе породы не заданы. Принять пористость равной 100%?" и при положительном ответе на него в качестве исходной породы принимается "**пустая порода**" с открытой пористостью 100%, т.е. система вода-порода рассматривается как раствор без твердой фазы (растворяться в такой системе нечему, но в случае пересыщения из раствора может выпасть соответствующий минерал).

Для **подбора значений стандартной свободной энергии Гиббса**, отвечающих состоянию равновесия текущих составов раствора и породы, нужно включить метку "Подбор G (св. энерг. Гиббса)". Тогда, после перехода на следующую страницу "[Растворение-осаждение Состав породы](#)", включить метку "Подбор S (энтропии)" и снова выполнить расчет на стр. "Растворение-осаждение".

Исправленные таким образом **значения G и S** будут действовать на продолжении текущего сеанса работы ПК НГ, но станут недействительными при следующем его запуске. Поэтому для использования их в дальнейшем, такие значения должны быть "вручную" занесены в ТБД, как "экспериментальные" (из ПК: [Гидрогеохимия](#)->Настройка модели->База данных, или с помощью Access), после чего следует вновь провести настройку системы моделирования, выбрав соответствующее значение вида параметров G и S минералов.

Сорбция катионов

Страница моделирования сорбции катионов и выполнения связанных с ней вспомогательных расчетов.

Ион	Кр, см3/г	Cs, мг-э/100г
H+	0,01	3,22E-8
Na+	0,23	0,06859
Ca2+	0,31	0,1239
Fe3+	0,40	0,0026
(UO2)2+	63,2	0

Управление

Добавить: (UO2)2+

Из файла

Ер, мг-экв/100г: 3,1

В файл

Принять

В протокол

Расчет

Равновесие с раствором

Кр - константа фазового распределения;
Cs - в поглощенном комплексе породы;
Ер - емкость поглощенного комплекса;
сохранение в файле и чтение из файла
вместе с составом породы

Содержит таблицу **"Сорбируемые частицы"**, куда заносятся значения констант фазового распределения сорбируемых катионов и где визуализируются их вычисленные концентрации в породе, а также **элементы управления**:

- поле **"Добавить"** - служит для выбора сорбируемых катионов, для которых выполняется расчет сорбции
- поле **ввода** величины ёмкости поглощенного комплекса
- инициализирует введенные исходные данные
- клавиша **"В протокол"** - выводит текущее содержание страницы в протокол счета
- клавиша **"Равновесие с раствором"** - рассчитывает начальный состав поглощенного комплекса породы, равновесный с текущим составом раствора (последний при этом не изменяется)
- , которые используются стандартным образом.

Важно:

Состав поглощенного комплекса и другие исходные данные по сорбции сохраняются вместе с составом породы. То есть, клавиши сохранения в файл и чтения из файла на страницах "Состав породы" и "Сорбция катионов" по своему действию полностью эквивалентны. В этой связи, в данных файлах всегда определен, кроме обычного состава породы, и состав поглощенного комплекса. Если же он на момент сохранения состава породы не определен, то при его чтении из файла он тоже окажется не определенным.

Смешение/испарение

Страница окна пересчетов состава раствора и породы. Используется для моделирования смешения или испарения вод (включая приведение их в равновесие с CO₂ свободной или растворенной в нефти газовой фазы, контактирующей с раствором).

Пересчёты состава раствора и породы: C:\Documents and Settings\Букаты МБ\Мои документы\Da...

Валов. раствор | Действ. раствор | Состав породы | Сорбция катион. | Смешен./Испар. | Раств.-осажден.

Вид расчета
 Смешение
 Испарение/эвазия-инвазия CO₂

Смешение
 Раствор "А": Усредненная вода палеогена
 Текущий № 2 [Новый]
 Раствор "В": не введен
 Текущий № 0 [Новый]
 Доля растворов "А" и "В" в смеси (в долях ед.):
 Раствор А 1 : Раствор В 0 [Смешать]
 [Завершить смешение]

p-р А является смесью АВ*

Испарение
 Удалить растворителя (в % от V p-ра) 0.0
 [Расчет]
 Раствор поглотил 0.0 г/л CO₂

Эвазия/инвазия CO₂
 CO₂ в газе, %-об. 0.033
 коэфф. насыщен. 1.0

CO₂ в газовой фазе
 Норм. для воздуха
 Задать

* Вводить в долях ед.: p-р А - доля А в текущей смеси АВ, p-р В - требуемая доля В в новой смеси (после смешения на выходе пропорция исходных растворов: А:В в получившейся смеси)

Приведение раствора в равновесие с CO₂ газовой смеси осуществляется в ходе моделирования испарения. Для восстановления равновесия раствора с газом в случае, когда не требуется испарение, нужно просто выполнить расчет без удаления растворителя (с удалением 0% растворителя от объема раствора).

Для моделирования смешения нужно:

- выбрать в качестве вида расчета "Смешение",

- определить составы смешивающихся вод (раствором "А" при первом входе становится текущий раствор),
- задать пропорцию смешения и
- выполнить расчет, нажав кнопку "Смешать".

После этого произойдет автоматический переход на страницу валового состава раствора, где текущим раствором станет состав смеси. С этой смесью могут быть выполнены любые доступные пересчеты, после чего, вернувшись на страницу смешения можно, не переопределяя исходные растворы, участвующие в смешении, повторить все расчеты со смесью в другой пропорции и т.д. до нажатия на этой странице кнопки "Завершить смешение".

При нажатом состоянии метки "Р-р А является смесью АВ", если вводить в виде доли раствора А его долю в текущей смеси АВ (т.е. до смешивания!), а в качестве доли раствора В требуемую долю В в новой смеси, то после смешения на выводе будет приводиться пропорция исходных растворов А:В в получившейся смеси (при «обычном» смешении доли растворов в смеси рассчитываются как $V=B/(B+A)$; $A=1-B$, где А – число, введенное в поле «Раствор А», В – число, введенное в поле «Раствор В», а при включенном «Р-р А является смесью АВ» сначала проводится изменение введенных долей $A=(1-B)/A$; $B=1-A$, и только затем считается $V=B/(B+A)$; $A=1-B$). Например, если нужно "закачать" раствор 1 в пласт, содержащий раствор 2, то каждая следующая закачанная порция раствора 1 на забое скважины будет смешиваться со смесью растворов 1 и 2, полученной на предыдущем шаге закачки. В этом случае, чтобы контролировать долю пластовой воды в образующихся смесях, можно принять раствор 2 за раствор В, а раствор 1 - за А и далее изменять на каждом шаге только долю раствора В. Такую модель можно представить как "доливание" раствора А в емкость, содержащую раствор В, следя за долей В в образовавшейся смеси. Если изменять долю пластовой воды в смеси с шагом 0.1, то на 1м шаге нужно ввести А:В как 1 и 0.1, затем изменять долю В на 0.2, 0.3 и т.д. (после расчета каждого шага смешения новая текущая доля раствора А в смеси передается в соответствующее поле редактирования автоматически).

Для имитации испарения или/и равновесия с CO₂

- выбирается вид расчета "Испарение/эвазия-инвазия CO₂",
- определяется количество удаляемого растворителя (если нужно моделировать испарение раствора или его разбавление дистиллятом),
- при необходимости включается метка "Эвазия/инвазия CO₂",
- выбирается "использовать нормальное для воздуха содержание CO₂" (в качестве количества CO₂ в газе будет автоматически задана его средняя концентрация в воздухе) или "задать" (в этом случае, содержание CO₂ в

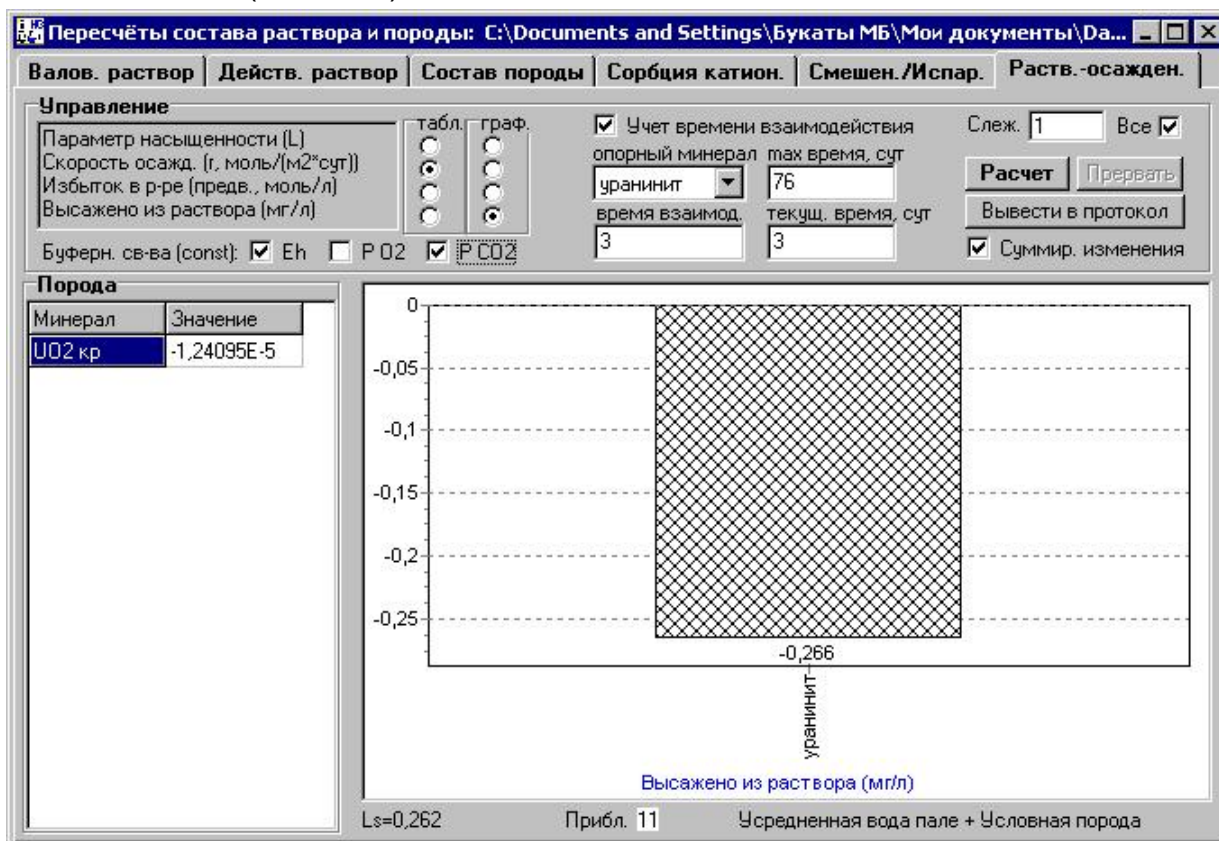
газе нужно ввести) и вводится величина коэффициента насыщения раствора газом ($K_g = P_g / P_{пл}$) и

- нажимается кнопка "Расчет".

Примечание: Расчетные давление и температура должны быть введены на странице валового состава раствора.

Растворение-осаждение

Страница окна пересчетов состава раствора и породы. Используется для визуализации текущего характера насыщения раствора с заданной породой и моделирования реакций растворения-осаждения минералов породы при её взаимодействии с раствором, с учетом или без учета заданного времени взаимодействия (кинетики).



Левая часть блока управления (в верхней части таблицы) позволяет выбрать вид параметра отображаемого в таблице и на графике. Здесь же определяются буферные свойства системы - назначаются параметры, которые при моделировании взаимодействия раствора с породой поддерживаются постоянными за счет предполагаемого привноса выноса.

В центральной части размещаются компоненты **настройки учета кинетики** (времени взаимодействия). Их применение более подробно описано в разделе справки, посвященном методике моделирования гидрогеохимических процессов и руководстве пользователя.

Справа размещаются **управляющие кнопки**. Здесь же можно изменить **шаг слежения** (в т.ч. во время протекания процесса моделирования) и в случае, если в текущей системе нужно рассмотреть несколько последовательных шагов взаимодействия, задать состава раствора и породы и включить/выключить кнопку "Все", изменяющую применяемый алгоритм моделирования растворения-осаждения - с метода "1 минерал за шаг" итерационного счета на метод "все реагирующие минералы на каждом шаге" счета и наоборот.

Слишком дробный шаг слежения может затруднить восприятие процесса взаимодействия из за "мелькания" таблицы и графика и заметно замедляет расчеты.

Метод "1 минерал за шаг" более устойчив в вычислительном отношении, тогда как метод "все минералы на каждом шаге" лучше отвечает реальному характеру взаимодействия раствора с породой и несколько ускоряет счет.

Основную часть данной страницы занимают компоненты, предназначенные **для визуализации** начального состояния системы, процесса моделирования и его результатов.

Примечания:

За изменением состава раствора и породы в ходе моделирования можно также следить, переходя в процессе расчета на страницы валового состава раствора и состава породы.

Расчетные давление и температура вводятся на стр. валового состава раствора.

Расчеты по газам

Окно включает две страницы:

- Исход. данные** - "исходные данные", предназначена для ввода исходных данных и управляющих параметров
- Результаты** - используется для визуализации результатов расчетов

Для **ввода и визуализации** данных служат: таблица исходного состава, а также поля выбора вида газа (водорастворенный или гипотетический равновесный с раствором при данных условиях свободный/попутный газ), температуры и давления (при которых выполняется расчет), привязки (условного

имени пересчитываемой пробы), газонасыщенности (обнуляется при выборе свободного/попутного газа) и температуры, при которой она измерена, данные по содержащему газ или контактирующему с ним раствору (плотность, минерализация и сумма катионов или анионов).

Расчеты по водорастворенным и свободным/попутным газам: C:\Documents and Setti...

Исход. данные Результаты

Исходный состав, %-об.

Компонент	Содержание
H2	0
CH4	64.1385
C2H6	7.88473
C3H8	1.88113
iC4H10	0.390234
nC4H10	0.730438
iC5H12	0
nC5H12	0
C6H14	0.580348
CO2	0
H2S	0
CO	0
He+i	0.55033
Ar+i	0
N2	23.8443
O2	0
C2H4	0
C3H6	0
C4H8	0
C5H10	0

Вид газа: Водорастворенный

t, град.С: 31 P, МПа: 31

В протокол Из файла

В файл

Привязка (имя анализа)
Собинская 34, 2702-2709, вн2

Газонасыщенность, л/л: 0.418

Измерена при t, град.С: 0.0

Исключение воздуха

Воздух захвачен
До замера газонасыщенности

Данные по раствору

Плотность, кг/м3: 1230

Минерализация, г/л: 340

Сумма Кат/Ан р-ра, г-экв/л: 6

Использовать текущий раствор

Обнулить

Расчеты по водорастворенным и свободным/попутным газам: C:\Documents and Setti...

Исход. данные Результаты

Свободный газ, %-об.

Компонент	Содержание
H2	0
CH4	32.3332
C2H6	15.5553
C3H8	15.1093
iC4H10	4.91821
nC4H10	12.1565
iC5H12	0
nC5H12	0
C6H14	1.92345
CO2	0
H2S	0
CO	0
He+i	0.14718
Ar+i	0
N2	17.8569
O2	0
C2H4	0
C3H6	0
C4H8	0
C5H10	0

В таблице: Свободный газ, %-об.

Привязка: Собинская

В протокол

Раствор

Привед. газонасыщ., л/л: 0.418

Давление насыщен., МПа: 23.723

Козф. насыщения: 0.765

Тип залежи по коэфф.

CH4/У	нефтяной
iC4H10/nC4H10	нефтяной
iC5H12/nC5H12	н/опр.

Свободная фаза

Плотность станд., кг/м3: 1.518

Плотность по возд., кг/м3: 1.174

Плотность пласт., кг/м3: 413.98

Псевдопривед. давление: 5.50

Псевдопривед. температ.: 1.24

Козф. сверхсжимаем.: 0.756

Тепл. сгор. (низш.), кДж/м3: 1.5985

Тепл. сгор. (высш.), кДж/м3: 1.7469

Возраст по He/Ar, млн. лет: 0.0

К конденс. (стаб.), см3/м3: 377.3

В протокол

Изменение T,P

Число приближений: 1

Если перед этим проводился пересчет состава раствора, то данные по раствору могут быть заимствованы из данных расчета, выполненного последним (в соответствующие поля будут перенесены данные по "текущему" раствору), для чего нужно активизировать расположенную ниже метку.

Управление данными и расчетом выполняют кнопки "В протокол", "Из файла", "В файл", имеющие обычное назначение, и метки "Исключение воздуха" (в этом случае, в поле ниже метки нужно выбрать случай, когда он мог попасть в пробу) и "Использовать текущий раствор" (позволяет заимствовать данные по "текущему" раствору, если они имеются).

Расчет

Последняя служит для **визуализации результатов** расчета равновесия вода-газ и содержит четыре управляющих элемента:

- поле выбора вида газа**
- , в верхнем правом углу - выводит в протокол данные таблицы,
- , в области визуализации дополнительных расчетных характеристик - выводит в протокол эти характеристики и
- кнопка "Изменение Т,Р"**, осуществляет возврат на первую страницу, для изменения расчетных ТР-условий.

эвазии газа из раствора.

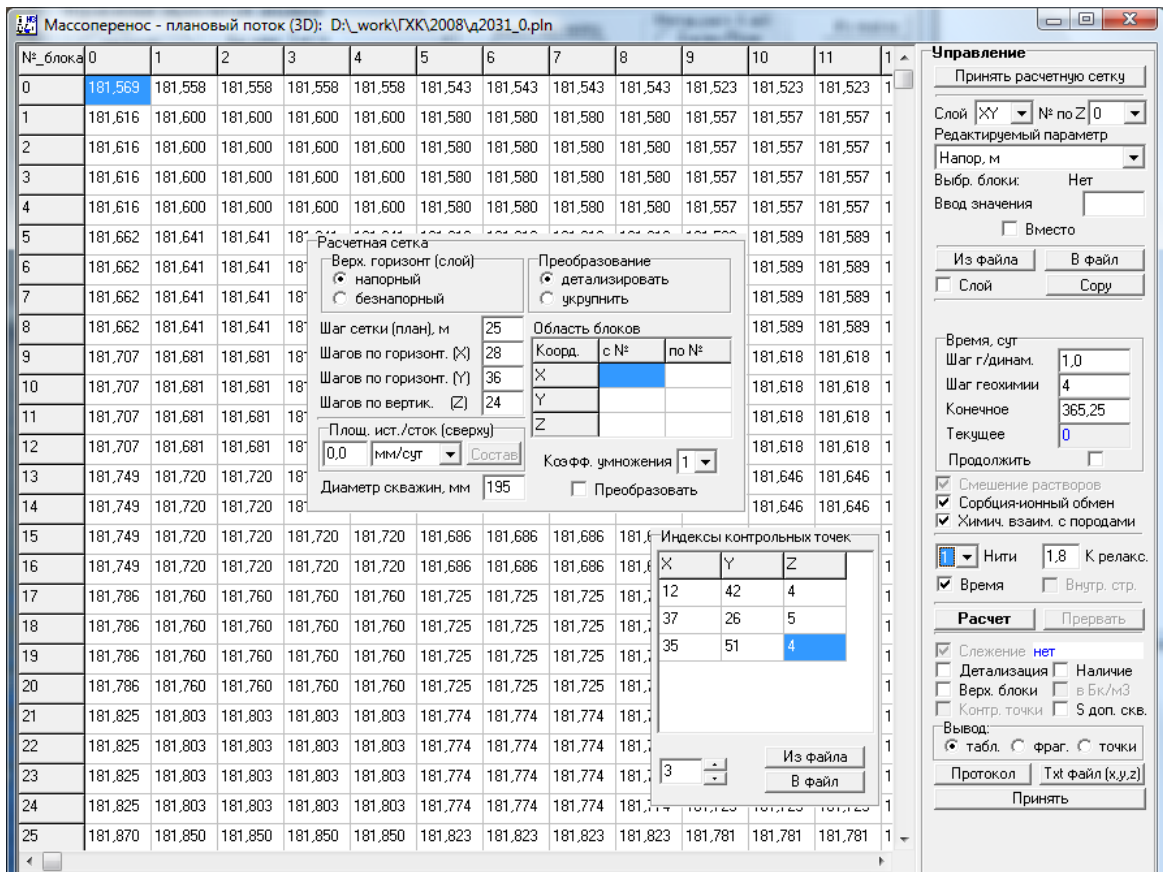
Для моделирования растворения газа (его инвазии) должен быть определен состав свободной газовой фазы и условия взаимодействия, после чего при переходе на страницу результатов будет рассчитан состав и количество, находящегося в равновесии с ним растворенного газа.

Подробнее о методике расчетов можно посмотреть в разделе справки "Применяемые методы и алгоритмы", руководстве пользователя, и в публикациях, перечисленных в разделе "Основные публикации по методике и применению программного комплекса".

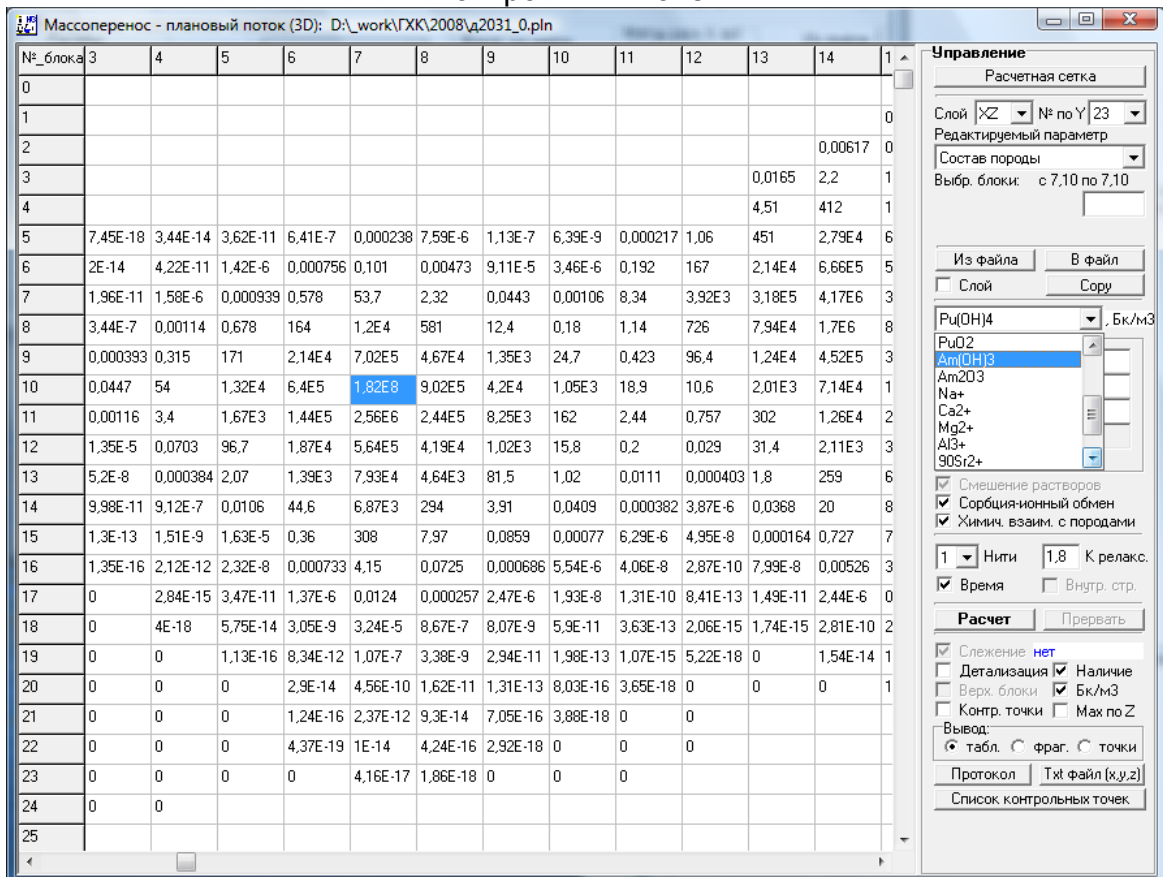
Плановый поток (3D)

Опция подменю [главного меню](#) "[Гидрогеохимия](#)->Плановый поток (3D)". Предназначена для численного расчета 1, 2, 3D (одно-, двух- или трехмерных) сеточных моделей геофильтрации и геомиграции водных растворов.

Создает и открывает окно:



Вид окна в состоянии переопределения расчетной сетки и задания контрольных точек



Вид окна в состоянии перевыбора редактируемого/просматриваемого параметра

Основными компонентами рабочего окна являются **таблица** для послойного ввода и визуализации данных и **панель управления** расчетами и моделированием.

На панели управления находятся:

- Кнопка "Расчетная сетка"** - активизирует "всплывающую" панель для определения или преобразования ранее определенной расчетной сетки и назначения условий работы модели

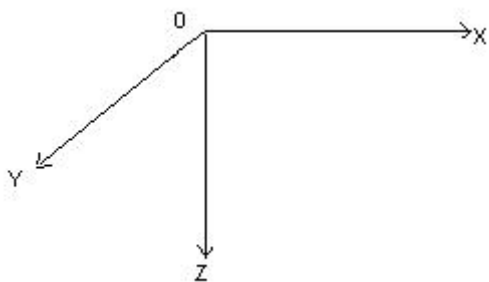
После включения меняет наименование кнопки на "Принять расчетную сетку". Определение расчетной сетки осуществляется в левой части панели. Она содержит метку для выбора характера фильтрации в верхнем расчетном слое (напорный или безнапорный), поля определения расчетной сетки (в настоящей версии расчетные блоки имеют квадратную форму в плане, при определении числа шагов сетки по горизонтали и вертикали нужно иметь в виду, что по каждой из сторон модели будут дополнительно заданы слои фиктивных блоков, служащие для определения в них внешних граничных условий). Кроме того, здесь находятся поле выбора, поле ввода и кнопка, с помощью которых выбираются единицы измерения и задаются интенсивность действия и состав (нужен только для источника) площадного источника/стока (например, инфильтрации или испарения, задаваемого отрицательным числом). Кроме того, здесь задается диаметр закачных (источники) и/или откачных (стоки) скважин.

Левая часть панели служит для автоматического преобразования расчетной сетки. Здесь выбирается тип преобразования ("детализировать" - для вырезания заданной области расчетной сетки и/или разбиения ранее имевшихся расчетных блоков на части, либо "укрупнить" - для объединения блоков выбранной области, в соответствии с заданным коэффициентом умножения), вводятся номера блоков изменяемой области (от - до, по каждой из осей координат), задается коэффициент умножения и метка необходимости выполнения заданного преобразования.

- Поле выбора "Слой"** - назначает проекцию (XY, XZ или YZ) слоя отображаемого в таблице

Принятое направления осей: X - вправо, Y - "вниз" (см. направления роста номеров блоков в таблице) в горизонтальной плоскости, Z - высотное положение (сверху-вниз).

- Поле выбора "№ по (X,Y,Z)"** - определяет номер слоя, отображаемого в таблице
- Поле выбора "Редактируемый параметр"** - выбирает параметр модели, отображаемый в таблице для просмотра или редактирования



В списке перечисляются параметры, предназначенные как для просмотра, так и для ввода: напор, мощность (толщина), коэффициент фильтрации, коэффициент пьезопроводности (не может быть выбран для безнапорной модели, в которой емкость определяется пористостью), открытая пористость, доля проточной пористости, дебит источника/стока (для стока вводятся отрицательные значения и не нужен ввод состава воды), состав раствора, состав раствора источников, состав породы, метки включения-отключения расчета гидрогеохимии в блоке (автоматически включаются, если блок непроницаем - имеет нулевой коэффициент фильтрации, "отсутствует" - его мощность равна нулю или не обладает ёмкостью - с нулевой открытой пористостью) и параметры, предназначенные только для просмотра: $Q(x)$ блока, $Q(y)$ блока и $Q(z)$ блока (расходы **вытекания** из блока в направлении соответствующей оси; просмотр межблочных расходов возможен только непосредственно после выполнения хотя бы одного шага расчета гидродинамического поля).

Граничные условия задают: нулевым коэффициентом фильтрации для внутренних и внешних непроницаемых границ и значением открытой пористости более 100% (например, 101%, что служит меткой задания в таких блоках "бесконечной" ёмкости) для внутренних границ постоянного напора. Во внешних граничных блоках напоры не пересчитываются и они автоматически являются границами $H = \text{const}$.

При безнапорном режиме фильтрации мощности (толщины) блоков, расположенных выше поверхности земли, условно "пустых", задаются, как имеющие мощность, равную нулю, что служит их условной меткой. В этом случае "втекать" в такие блоки вода может (разгрузка), а "вытекать" (питание) - нет. Зона аэрации изначально не задается, а формируется за счет стекания воды в смежные и нижележащие блоки, для чего на начальном этапе моделирования нужно просчитать гидродинамическую систему до состояния, близкого к стационарному. После этого можно задать возмущающие источники-стоки и рассматривать вопросы гидродинамического и геохимического изменения системы при заданных воздействиях. Инфильтрация, определенная во "всплывающей" панели, в этом случае рассматривается как поступление воды непосредственно на уровень грунтовых вод от площадного источника с заданным расходом и составом. Напоры и мощности, в случае безнапорного режима,

должны задаваться согласованно: начальная величина напора должна отсчитываться от подошвы модели и быть равной сумме мощностей в столбе блоков выше подошвы модели в этом месте (в этом "столбике" блоков).

состава раствора и породы приводит к выводу в полях таблицы, где они должны быть введены, знаков "+" (введен) или "-" (не введен) и делает видимым поле выбора компонента или параметра состава для визуализации его значения (см. ниже).

- **Поле "Выбраны блоки"** - служащее для отображения номеров выбранных блоков активного слоя

Выбор блока осуществляется нажатием левой клавиши мыши. Для выбора группы смежных блоков указатель мыши, не отпуская клавишу, нужно переместить над выбираемыми блоками.

- **Поле "Ввод значения"** - служит для ввода, отображения и редактирования значения параметра в выделенном (выбранном) блоке или группе блоков

Становится видимым при наличии выделения поля или группы полей таблицы. При выборе нескольких блоков, в поле отображается значение блока, имеющего старший индекс среди выбранных. Передача значения поля ввода в выделенные блоки (поля таблицы) происходит **при нажатии клавиши ввода или изменении выбора** в таблице. Это позволяет, после ввода нужного значения в поле ввода, передать его в несколько других полей или групп смежных полей таблицы путем их последовательного переВыбора мышью.

Данное поле использовать **для ввода или изменения составов раствора и породы**. Для их ввода или редактирования нужно выполнить двойной щелчок левой кнопкой мыши (DubleClick) в выбранном блоке, после чего автоматически откроется нужная страница окна "Пересчеты состава раствора и породы", куда передается текущая информация о текущем составе раствора или породы в блоке.

Здесь должны быть выполнены **ввод и первичный пересчет** или **редактирование** и пересчет состава, а также **переопределение некоторых из параметров моделирования** (например, метода расчета коэффициентов активности, включение учета деградаци, способа учета кинетики, параметров эвазии-инвазии CO₂, если это требуется; следует учитывать, что такое переопределение действует только в рамках текущего сеанса работы и только пока открыто окно планового потока - если его закрыть, то все изменения настроек сбрасываются к заданным по умолчанию!), после чего, нажав клавишу "Возврат к модели", можно вернуться в исходное окно моделирования. Если ввод и пересчет состава выполняется для блока с индексом (номером X,Y,Z) "0,0,n", то будет

предложено передать текущий состав раствора одновременно во все расчетные блоки активного слоя модели.

- **Метка "вместо" и связанное с ней поле ввода** - служат для одновременной замены заданного значения в нескольких полях новым значением

Метка видима при наличии выделения. После её активации становится видимым и отвечающее ей поле ввода. Для выполнения контекстной замены нужно выделить группу полей, где должна быть проведена замена, ввести значение, которое нужно ввести, и значение, которое должно быть заменено, и нажать клавишу ввода (или осуществить выделение новой группы блоков).

- **Клавиша "Copy/Paste"** - служит для копирования всего содержимого из одной активной таблицы в другую

Обозначение клавиши изменяется в соответствии с состоянием операции копирования. Для копирования нажать "Copy", изменить номер слоя, и нажать "Paste".

- **Клавиши "Из файла" и "В файл"** - имеют обычное назначение и служат для сохранения модели в файле и чтения её из файла

Сохранение и последующее чтение (загрузка) модели происходят "как есть", вне зависимости от того, все ли данные в нее внесены (что сохранено, то и будет потом загружено). Сохраняется текущее состояние модели, со всеми изменениями параметров в ходе моделирования. Структура и размеры файла определяются заданными размерностями модели и выбранной при настройке системой гидрогеохимического моделирования. При несоответствии текущей системы той, которая использовалась при создании модели, файл, возможно, не сможет быть прочитан. Кроме клавиши "В файл", при завершении расчетов по истечении заданного времени моделирования происходит автосохранение модели в перезаписываемом файле "kill.pln", что облегчает проведение расчетов в отсутствие пользователя.

При включенной **метке "слой"** при нажатии клавиш "Из файла" и "В файл" читаются/сохраняются только данные по текущему слою (обычный формат txt с символом табуляции-#9 в качестве разделителя значений в строке и символом перевода строки-#13 в конце строк, но с расширением sln; значения выводятся в файл в том же порядке, в котором вы видите их в текущей таблице визуализации параметров; данные размерности матрицы значений и принадлежности слоя в файле отсутствуют).

- **Поле выбора компонента или параметра состава** раствора или породы - отображает в таблице распределение в активном слое значений выбранного параметра

Становится видимым при выборе в качестве редактируемого параметра составов раствора или породы. Обновление вида отображения с признаков наличия данных на цифровое представление происходит после принудительного выбор значения из выпадающего списка.

- Группа "Время"** - объединяет поля и метку, служащие для управления временными параметрами модели

Шаг г/динам." - шаг гидродинамики назначает временной шаг для расчета изменения поля напоров/давлений; **"Шаг геохимии"** - определяет периодичность включения процедур расчета геохимических процессов в системе вода-порода; **"Конечное"** - задает конечное время моделирования; **"ТекущееПродолжить"** обеспечивает возможность продолжения расчетов, не сбрасывая счетчик текущего времени. Желательно, чтобы значения первых трех полей были кратными друг-другу. При их изменении (в т.ч. во время расчета) предусмотрена автокорректировка значений, проводимая с целью выполнения ограничений, используемых для обеспечения сходимости итерационного счета.

- Метка "Смешение растворов"** - включает моделирование массопереноса без взаимодействия раствора с породой

Если она не включена, осуществляется только расчет гидродинамики.

- Метка "Сорбция-ионный обмен"** - включает расчет сорбции и ионного обмена (если они предусмотрены при вводе и пересчете состава породы расчетного блока в окне "Пересчеты состава раствора и породы").
- Метка "Взаим. с пород."** - взаимодействия с породой, дополнительно включает моделирование физико-химического взаимодействия раствора с породой

Следует иметь в виду, что моделирование физико-химических взаимодействий резко увеличивает время счета. Поэтому прежде, чем приступить к подобному моделированию, следует по возможности более четко сформулировать требования к решаемой задаче на предмет их возможной минимизации: снижение числа компонентов, включаемых в состав раствора и породы, снижение размерности расчетной сетки модели, метод расчета коэффициентов активности и т.п. Для подбора приемлемых ограничений и оценки влияния каждого из них на суммарное время счета рекомендуется проведение пробных расчетов до начала моделирования.

- Поле выбора "Нити"** - обеспечивает возможность "распараллеливания" расчета взаимодействия раствора с породой на два или четыре потока (отображение изменено по сравнению с показанным в видах окна)

Его изменение имеет смысл при выполнении расчетов на ЭВМ с процессором, поддерживающим НТ (HyperThreding) технологию, или при

использовании многопроцессорных (либо многоядерных) систем. В этих случаях она может обеспечить существенное повышение скорости счета химических взаимодействий в системе вода-порода. Переключать в момент расчета гидрогеохимических процессов и выбирать значения превышающие число реально используемых вычислительной системой процессоров/ядер нежелательно.

- Метка "Время"** - обеспечивает учет кинетики при моделировании взаимодействия растворов с породами (иначе на каждом временном шаге расчет идет до состояния равновесия)
- Метка "Внутренняя структура"** - задает приоритет внутренней структуры фильтрационного потока при моделировании фильтрации для безнапорной модели

При её включении в каждом цикле во внешние граничные блоки модели передаются значения, полученные путем экстраполяции данных по смежным внутренним блокам модели.

- Поле "К релакс."** - позволяет изменить значение коэффициента релаксации, используемое при расчете поля напоров/давлений (отображение изменено по сравнению с показанным в видах окна)

По умолчанию используется рекомендуемое значение, которое при решении каких либо специфических задач может быть изменено.

- Клавиша "Расчет"**
- Клавиша "Прервать"** - прерывает выполнение расчетов

После прерывания расчет может быть продолжен. При этом, чтобы не начинать отсчет времени снова, следует включить метку "Продолжить" в группе полей управления временем перед продолжением моделирования. Это справедливо и для предыдущих состояний модели, ранее сохраненных в файле. В этом случае нужно заново определить текущее время, достигнутое к моменту прекращения предыдущего расчета.

- Метка "Слежение"** - позволяет включать/отключать динамическое обновление информации, отображаемой во время моделирования

Обновление данных в процессе выполнения расчетов может заметно снижать скорость счета. С другой стороны, слежение за изменениями, происходящими в модели в процессе выполнения расчетов, может оказаться как полезным, так и интересным, особенно учитывая, что при этом можно наблюдать за практически любыми параметрами модели, поскольку все элементы управления, остающиеся доступными во время моделирования, могут изменяться пользователем практически без ограничений. Важно лишь, чтобы они были осмысленными. Рядом с меткой слежения находится поле, в котором отражается

характер производимых во время моделирования расчетов (обозначения: "Дин" - расчет поля напоров, "Тем" - поля температур, "Прт" - межблочных перетоков, "СРС" - расчет смешения-распада-сорбции, "АХ" - химических взаимодействий, где А - число потоков; за меткой типа расчета следуют счетчики циклов/ход схождения по точности).

- **Метка "Формат 1"** - задает обычную разрядность (точность) значений параметров, выводимых в таблицу
- **Метка "Формат 2"** - назначает вывод параметров модели в таблицу с увеличенной разрядностью
- **Метка "Наличие"** - задает режим визуализации параметров в таблице только там, где они "существуют" (например, напор или состав воды имеют смысл только в тех блоках, где она в данный момент времени присутствует, а состав породы - там где блок существует и, соответственно, его мощность не равна нулю)
- **Метка "В Бк/м3"** - задает вывод содержания радиоактивных компонентов в единицах активности
- **Метка "S доп. скв."** - изменяет значения напоров в блоках, где заданы источники-стоки, добавляя к ним дополнительные понижения/повышения уровня, обусловленные фильтрационным сопротивлением скважин (вместо среднего напора в блоке выводится расчетный напор в стволе заданной в данном расчетном блоке "совершенной" скважины)
- **Метка "Мах по Z"** - дает возможность просмотра максимальных значений концентраций компонентов раствора или породы в разрезе (появляется только в проекции XY)
- **Метка "Вывод"** - позволяет назначить вывод данных либо всей активной таблицы, либо только фрагмента, выделенного в её пределах
- **Клавиша "Протокол"** - выводит данные активной таблицы или её фрагмента в протокол счета
- **Клавиша "Тхт файл (x,y,z)"** - выводит данные активного слоя (таблицы) или её фрагмента в текстовый файл

В этом случае в каждой строке выводятся плановые координаты центра блока, значение визуализируемого параметра и условное имя блока. Выводимый текстовый файл предназначен для построения карты изолиний с помощью Surfer или других подходящих для этого программных средств.

- **Клавиша "Список контрольных точек", всплывающая панель "Индексы контрольных точек" с её элементами управления, метка "Контр. точки" и "точки" (в группе "Вывод:")** - предназначены для определения контрольных точек (до 200) и наблюдения за текущими

значениями в них напора и состава раствора, либо их вывода в протокол или txt-файл (в последнем, в отличие от других случаев, в качестве координат выводятся индексы X, Y, Z).

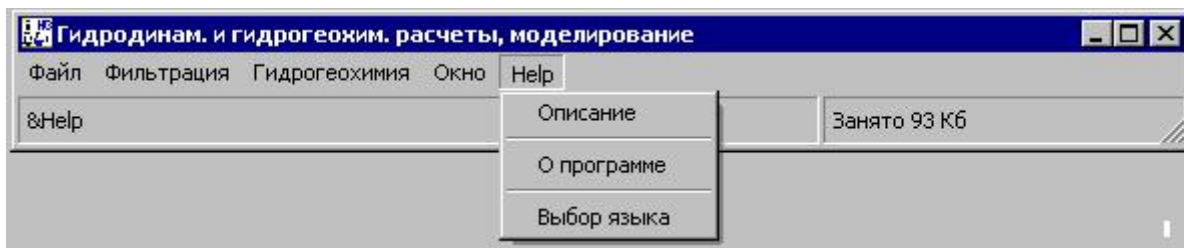
Важно: 1) Модель нормально рассчитывается только при полном и "осмысленном" задании исходных данных, которые должны быть взаимно согласованы. Например, если в блоке задан ненулевой коэффициент фильтрации, то в нём не может быть задано нулевое значение проточной пористости и т.п. 2) Следует иметь в виду, что в случае учета в сеточной модели геохимического взаимодействия раствора с породой, кроме задаваемых в данном окне, действуют параметры и условия, определенные в параллельно открываемом окне "Пересчеты состава раствора и породы". В частности, на его странице "Валовый состав" выбирается способ расчета коэффициентов активности. Здесь также может быть выполнена корректировка параметров, определяющих точность, с которой проводится расчет комплексообразования. На странице "Сорбция катионов" задаются сорбируемые компоненты и параметры сорбции (формально они входят в состав породы и всегда задаются и сохраняются в файлах вместе с ним; если они не заданы, то по умолчанию сорбируемые компоненты отсутствуют). На странице "Растворение-осаждение" задается способ учета времени (кинетики) взаимодействий, метод моделирования (по одному минералу за шаг приближения к равновесию, либо "Все" вместе) и "буферные" компоненты, причем, когда задано $CO_2=const$, на странице "Смешение-испарение" может быть дополнительно определена необходимость и параметры расчета его выделения-поглощения раствором (эвазии-инвазии), которое затем выполняется на каждом шаге моделирования. Все эти условия должны быть определены до запуска расчета сеточной модели, иначе при проведении расчетов действуют условия, заданные по умолчанию.

2.6.4. Окно

Пункт . Содержит динамически формируемый список открытых окон ПК, позволяющий выполнять взаимопереходы между ними.

2.6.5. Помощь

Пункт главного меню



Включает опции:

- Описание - вызывает систему помощи ПК (Help)
- О программе - активизирует информационное окно ПК
- Выбор языка - позволяет выбрать русский или английский язык интерфейса ПК (реализация перевода в настоящее время не завершена)

2.7. Главное окно

Включает (кроме невизуальных компонентов):

- главное меню,
- информационную панель и
- обычные элементы окон Windows

2.8. Окно протокола

В главном меню предусмотрен выбор вывода данных и результатов счета:

- в автономное окно протокола счета (встроенный текстовый редактор),
- в создаваемый автоматически документ MS Word

2.9. Всплывающее меню

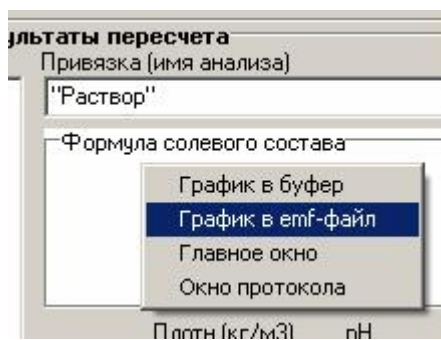
Вызываются в основных рабочих окнах нажатием правой кнопки мыши и для обычных объектов включают опции навигации:

- Главное окно - переход к главному окну и его компонентам
- Окно протокола - переход к окну автономного протокола счета

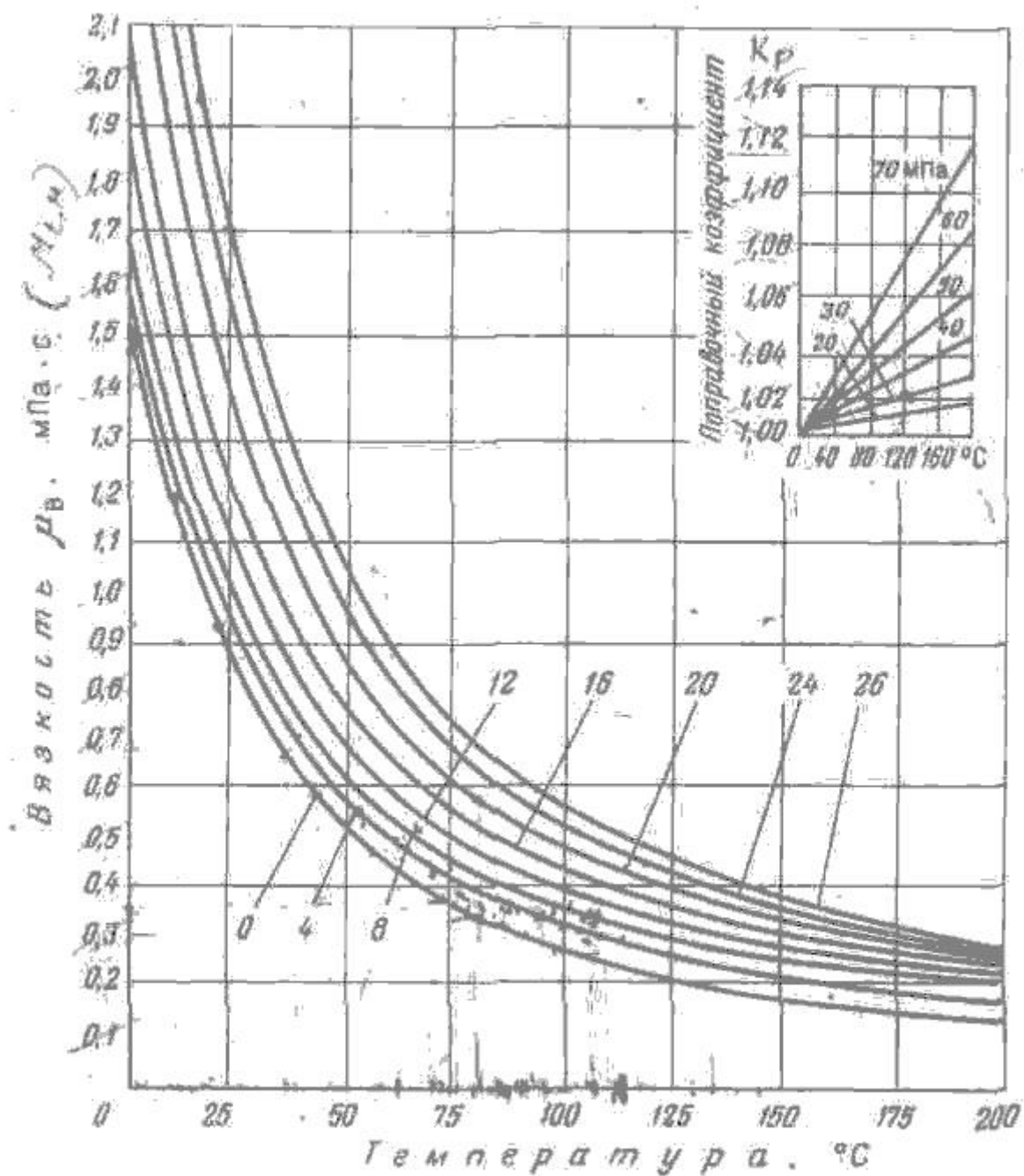
Для графических объектов к ним, кроме того, добавляются опции сохранения изображения:

- График в буфер - сохранение изображения в буфере Windows для последующей вставки в Word или другой документ-приемник отчетной информации
- График в emf-файл - сохранение графика в виде emf, иногда bmp-файла

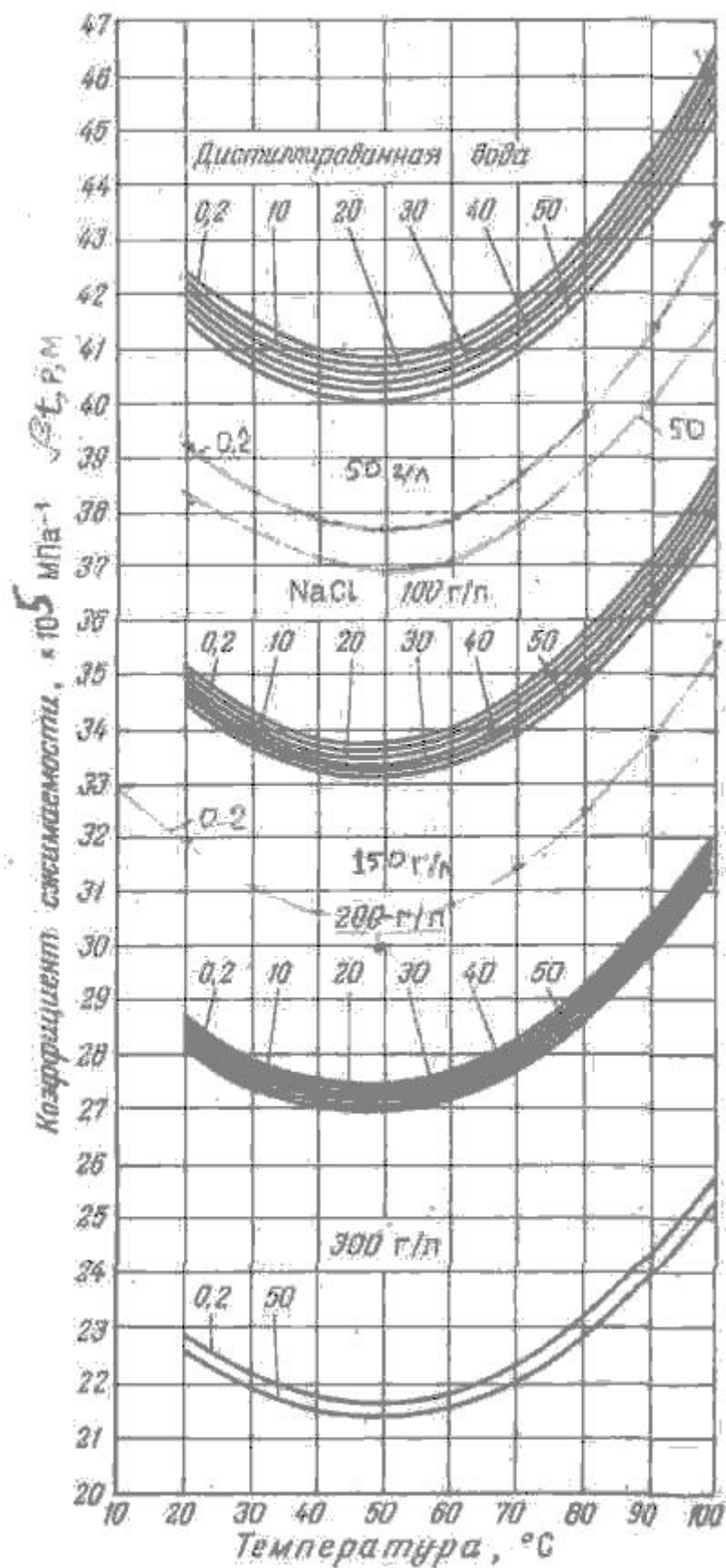
Фрагмент рабочего окна (формы) с всплывающим меню:



3. Номограммы

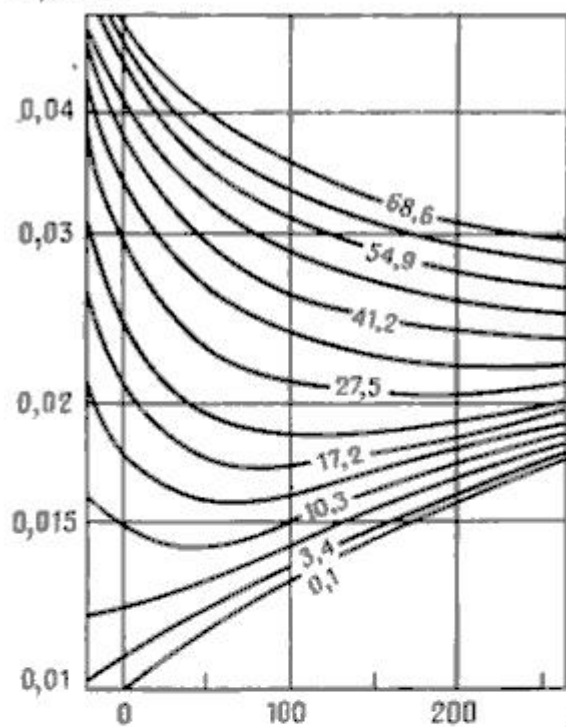


Зависимость вязкости воды η_n от температуры при различных концентрациях NaCl. Шифр кривых — концентрация NaCl в г/100 г

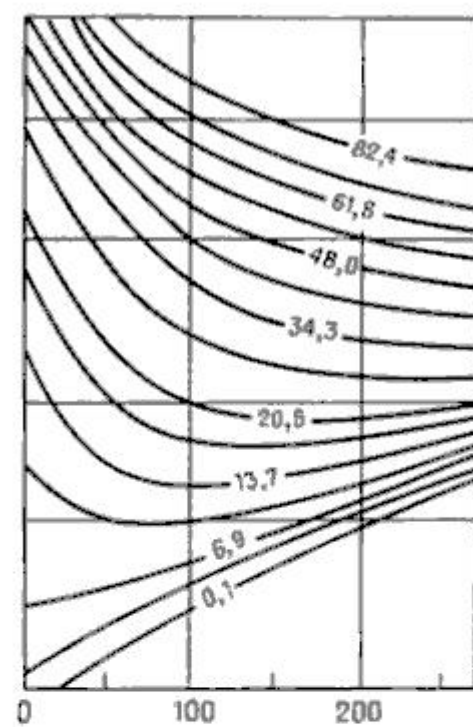


Зависимость коэффициента сжимаемости воды от давления и температуры при различных концентрациях NaCl (по Д. Лонгу и Д. Кьеричи). Шифр кривых — давление в МПа

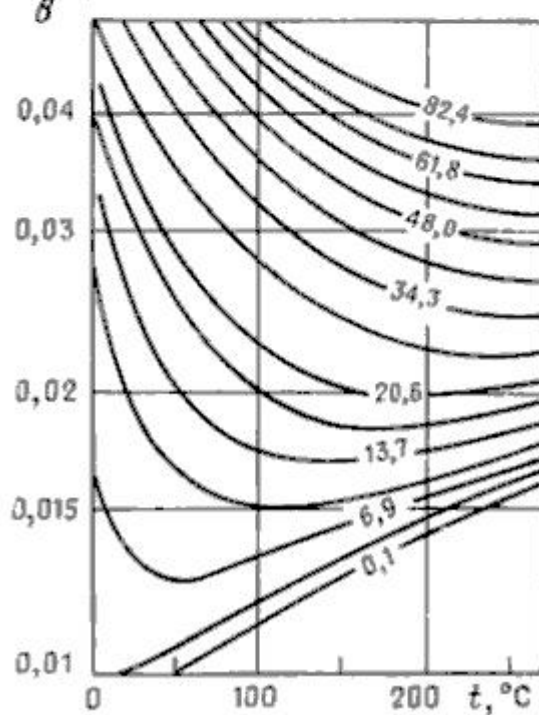
α
 $\mu, \text{МПа}\cdot\text{с}$



δ



ϵ



Зависимость
вязкости природных га-
зов μ от температуры t
и давления p при отно-
сительной плотности 0,6
(α), 0,8 (δ), 1,0 (ϵ).
Шифр кривых — p , МПа
(по Д. Л. Катцу, Д.
Корнеллу, Р. Кобаяши-
ну)

4. Основные единицы измерения

При вводе ИД в основном применяются единицы измерения, наиболее часто используемые на практике, а при выводе результатов единицы СИ и допускаемые ГОСТ внесистемные единицы.

Связь основных единиц измерения и константы перевода

Время (τ)

1 мин = 60 с; 1 час = 3600 с; 1 сут = 86400 с; 1 год = 3.1514·10⁷ с

Расстояние (l)

1 А (ангстрем) = 1e-10 м; 1' (дюйм) = 2.54 см = 25.4 мм

Ускорение свободного падения (g)

$g = 9.80665 \text{ м}^2/\text{с}$

Плотность (ρ)

1 г/см³ = 1000 кг/м³

Температура (t, T)

$t \text{ [K]} = t \text{ [град.С]} + 273.15 \text{ [K]}$

Давление (P)

абсолютное = избыточное + 0.1 МПа

1 кгс/см² = 1 ат/ата (тех) = 98066.5 Па; 1 МПа = 1e6 Па; 1 бар = 0.1 МПа

1 атм (физ) = 101325 Па; 1 мм рт. ст. = 133.322 Па

1 Па = 1 Н/м² = 9.676e-7 Дж

Вязкость

Динамическая (η): 1 сПз = 0.001 Па*с = 1 мПа*с

Кинематическая (μ): 1 Ст = 1e-4 м²/с

Коэффициент продуктивности (q)

$q \text{ [м}^3\text{/сут]}/\square P_{\text{депр}} \text{ [МПа]}; 1 \text{ м}^3\text{/сут} = 1/86400 \text{ м}^3$

Коэффициент фильтрации ($K_{\text{ф}}$)

1 м/сут = 1/86400 м/с

$K_{\text{ф}} \text{ [м/с]} = (K_{\text{п}} \text{ [м}^2\text{]}/\eta \text{ [Па*с]}) * \rho \text{ [кг/м}^3\text{]} * g \text{ [м/с}^2\text{]}$

(конст. логарифм. припл. ур-я Тейса: $c = 2.24584$;

переход к безнапорным усл.: $2Sm \rightarrow S(2H-S)$ и $a \rightarrow a_y$)

Коэффициент проницаемости ($K_{\text{п}}$)

1 Д = $(10/9,80665) * 1e-12 \text{ м}^2 = 1,0197e-12 \text{ м}^2$

1 мкм² = 1e-12 м²; 1 Д = 1000 мД; 1 Фм² = 1e-15 м²

Пьезопроводность (a)

1 м²/сут = 1/86400 м²/с = 1.1574e-5 м²/с

Теплота (G)

1 кал (термохим.) = 4.184 Дж; 1 кал (межд.) = 4.1868 Дж

Универсальная газовая постоянная (R)

$R = 8.3147 \text{ Дж}/(\text{моль} \cdot \text{К})$

Радиоактивность (количество радиоактивного вещества)

1 Ки (Кюри) = 3.7×10^{10} Бк (Бк = с^{-1})

$A [\text{Бк}] = m [\text{моль/л}] \cdot 6.02214 \times 10^{23} \cdot (\ln 2) / (T_{1/2} [\text{с}])$

Рекомендуемая литература

Основная

1. Методы геохимического моделирования и прогнозирования в гидрогеологии. / Под ред. С.Р. Крайнова – М.: Недра, 1988. – 254 с.
2. Геологическая эволюция и самоорганизация системы вода-порода. Т.1 Система вода-порода в земной коре: взаимодействие, кинетика, равновесие, моделирование. // Под ред. С.Л. Шварцева. - Новосибирск: Изд. СО РАН, 2005. - 244 с.
3. Букаты М.Б. Геоинформационные системы и математическое моделирование. Учеб. пособие. – Томск: изд. ТПУ, 2002. – 75 с.
4. Гидрогеодинамические расчеты на ЭВМ. Учебное пособие. / Под ред. Р.С. Штенгелова – М.: Изд-во МГУ, 1994. – 335 с.
5. Керн Р., Вайсброт А. Основы термодинамики для минералогов, петрографов и геологов. – М.: Мир, 1966. – 278 с.

Дополнительная

1. Гаррелс Р.М., Крайст Ч.Л. Растворы, минералы, равновесия. – М.: Мир, 1968. – 368 с.
2. Крайнов С.Р., Рыженко Б.Н., Швец В.М. Геохимия подземных вод. Теоретические, прикладные и экологические аспекты. - М.: Наука, 2004. - 677 с.
3. Термодинамическое моделирование в геологии: минералы, флюиды и расплавы. / Р.К. Ньютон, А. Навротски, Б.Дж. Вуд и др. - М.: Мир, 1992. - 534 с.
4. Langmuir D. Aqueous Environmental Geochemistry. – London: Prentice-Hall International, 1997. – 601 pp.
5. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Проблемы гидрогеоэкологии. Т.1 Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. – М.: Изд-во МГУ, 1998. – 611 с.

6. Геотехнология урана на месторождениях Казахстана. / В.Г. Язиков, В.Л. Забазнов, Н.Н. Петров, Е.И. Рогов, А.Е. Рогов. – Алматы, 2001. - 444 с.
7. <http://www.scisoftware.com>
8. <http://water.usgs.gov/software>
9. <http://www.geolink-ltd.com>
10. <http://www.softwareperfect.com>

Перечень используемых информационных продуктов

Дисциплина обеспечена электронными презентациями по изучаемым темам, раздаточным и контролирующим материалом, вычислительной техникой на базе класса ПЭВМ, пакетами программ HydroGeo, GMS (Groundwater Modeling System), Access, Excel, Surfer и ArcGIS, демонстрационными версиями программных продуктов Freeqc, GeoLink (включает MODFLOW), ECLIPSE, Селектор-С, SOXXXX, BALANCE, SOL.

Численные методы моделирования геомиграции радионуклидов

Методические указания к выполнению лабораторных работ для студентов
направления магистерской подготовки
«Урановая геология»

Составитель Михаил Болеславович Букаты

Подписано к печати

Формат 60×84/16. Бумага писчая № 2.

Плоская печать. Усл.печ.л. . Уч.-изд.л.

Тираж экз. Заказ . Цена свободная.

ИПФ ТПУ. Лицензия ЛТ № 1 от 18.07.94.

Ротапринт ТПУ. 634034, Томск, пр. Ленина, 30.