Гидрогеологическое моделирование в задачах обоснования безопасности захоронений радиоактивных отходов с помощью расчетного кода GeRa*

И.В. Капырин[1,2], И.Н. Коньшин[1,2], Г.В. Копытов[1], К.Д. Никитин[1,2], Ю.В. Василевский[2]

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН[1], Институт вычислительной математики РАН[2]

Рассматриваются аспекты гидрогеологического моделирования и разработки соответствующих расчетных кодов для обоснования безопасности захоронения радиоактивных отходов (РАО). Анализ текущих разработок позволяет выделить три основных тенденции: возрастание сложности моделей; коды «рожденные параллельными»; переход на неструктурированные сетки и соответствующие им методы дискретизации. Эти концепции демонстрируются на примере расчетного кода GeRa (Геомиграция Радионуклидов) с использованием ряда сложных моделей: переноса с геохимическими взаимодействиями, насыщенно-ненасыщенной фильтрации, плотностной конвекции.

1. Введение

Численное моделирование геомиграции радионуклидов в настоящее время является основным инструментом при оценке долговременной безопасности захоронений РАО. Большие временные и пространственные масштабы задач, сложность инженерных и природных барьеров безопасности, многообразие существенных физических и химических процессов обуславливают высокие требования к расчетным кодам в части возможностей моделирования, точности и скорости расчетов. При этом отечественные расчетные коды для гидрогеологического моделирования в этой области практически не представлены, и специалистами на практике используются зарекомендовавшие себя зарубежные программные коды: MODFLOW, MT3DMS, FEFLOW, TOUGH2 и др.

В рамках подпроекта «Коды нового поколения» проекта «Прорыв» ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН, совместно с рядом других организаций, разрабатывается расчетный код (РК) GeRa [1]. Основным назначением GeRa является решение комплекса задач, связанных с захоронением РАО, образующихся в рамках замкнутого ядерно-топливного цикла: выбор мест подземной изоляции РАО; оценка безопасности захоронения в части геомиграции радионуклидов; обоснование принципа радиационно-миграционной эквивалентности [2]. GeRa является интегральным кодом, то есть, позволяет проводить полный цикл работ, начиная от создания геологической модели на основе данных полевых и лабораторных исследований и заканчивая расчетом доз для населения по всем основным путям развития. Учитывая широту функционала кода, он может быть использован и для решения задач оценки безопасности объектов ядерного наследия, в том числе, полигонов захоронения жидких РАО. В перспективе возможно применение кода в задачах оценки воздействия химических загрязнений на состояние подземных вод.

Следует отметить, что разработка перечисленных выше зарубежных программных средств была начата в 70-е и 80-е годы XX века. Хотя к настоящему времени столь продолжительное время разработки позволило внедрить в них широкий спектр моделей, ограничивающим фактором для большинства из них является то, что изначально заложенные численные методы были ориентированы на имевшиеся в те годы небольшие вычислительные мощности, и адаптация их к современным высокопроизводительным параллельным ЭВМ весьма затруднительна. Это стало причиной начала работ по новым проектам, отличительными чертами которых являются переход на трехмерные неструктурированные сетки [3-5] и массивная параллельность, изначально заложенная в разработку [4,5].

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта «Прорыв» ГК Росатом и гранта РФФИ 15-35-20991мол_а_вед.

Разработка кода GeRa также ориентирована на использование адаптивных многогранных неструктурированных сеток, параллельность, что обеспечивается разработкой кода на программной платформе MSPP (близка к платформе INMOST [6], которая является ее следующим поколением). Платформа MSPP обеспечивает параллельное хранение и синхронизацию сеточных данных, сборку линейных систем и их решение, при этом от разработчиков дискретизации требуется только вызов команды синхронизации данных на требуемых этапах расчета.

2. Возможности моделирования в коде GeRa

К настоящему времени в коде GeRa реализованы возможности геологического моделирования, численного моделирования процессов фильтрации и переноса, оценки и визуализации результатов. В совокупности с дополнительным модулем расчета дозовых нагрузок реализован расчет доз для населения, получаемых при различных сценариях водопользования. Код снабжен графическим интерфейсом, обеспечивающим препроцессинг (задание геометрии расчетной области, начальных и граничных условий, параметров моделей, скважин, поверхностных водоемов и т.д.), запуск расчетов, а также двумерную и трехмерную визуализацию полученных результатов. На рисунке **1** показан интерфейс программы с двумерным (слева) и трехмерным (справа) окнами редактирования и визуализации.

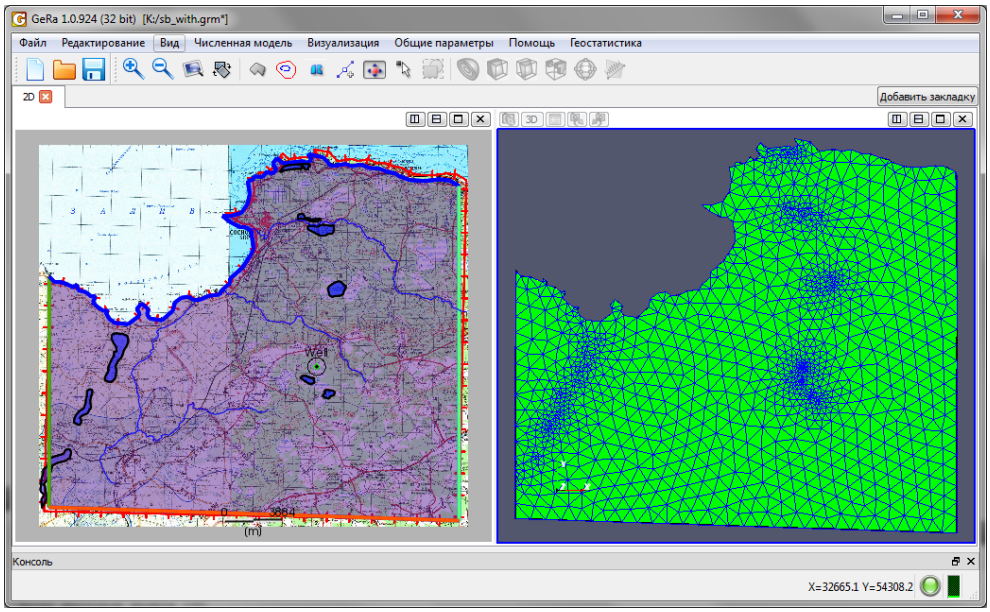


Рис. 1. Интерфейс расчетного кода GeRa

Геологическое моделирование включает построение структурной модели объекта и полей фильтрационных и миграционных параметров геологических сред. Для построения поверхностей кровель и подошв слоев, либо полей параметров могут быть использованы методы интерполяции (триангуляция, обратные расстояния) и геостатистики (кригинг, дополненный вариограммным анализом).

Для моделирования геофильтрационных и геомиграционных процессов в настоящее время реализованы следующие модели:

- фильтрация в напорной, напорно-безнапорной и насыщенно-ненасыщенной постановке.
- адвективно-диффузионно-дисперсионный массоперенос.
- радиоактивный распад.
- сорбция по линейной изотерме с постоянным коэффициентом распределения K_d, либо с переменным K_d, который зависит от концентрации одной из переносимых компонент. В последнем случае K_dзадается таблицей значений.
- плотностная конвекция.

– перенос с полным расчетом химических взаимодействий. Непосредственно расчет химических реакций выполняется с помощью свободно распространяемого кода PHREEQC [7], встроенного в GeRa.

При моделировании учитываются различные гидрогеологические объекты: поверхностные водоемы, скважины, дренажные системы.

3. Особенности дискретизации задач

Методы дискретизации задач ориентированы на использование произвольных конформных (в обобщенном смысле) многогранных трехмерных сеток. В коде GeRa реализовано два сеточных генератора:

– генератор треугольно-призматических сеток с исключением вырожденных ячеек и возможностью образования тетраэдральных и пирамидальных ячеек при вырождении одной или двух образующих призм;
– генератор гексаэдральных сеток на основе восьмидеревьев с методикой «скалывания» ячеек [8].

Оба генератора позволяют аппроксимировать плановые границы расчетной области и поверхности кровель и подошв слоев со вторым порядком точности. Треугольно-призматический генератор обеспечивает двумерную плановую адаптацию сетки, в то время как гексаэдральный – трехмерную адаптацию сетки к особенностям задач.

Для дискретизации оператора диффузии по времени может быть использован один из двух линейных методов конечных объемов (МКО): традиционная двухточечная схема аппроксимации потоков и более точная, но вычислительно трудоемкая, многоточечная O-схема аппроксимации потоков [10]. Для дискретизации задач диффузионного типа также реализована новая нелинейная монотонная схема конечных объемов с двухточечной аппроксимацией потоков, гарантирующая неотрицательность получаемых решений диффузионных задач [11].

Для моделирования конвективно-диффузионного переноса могут быть использованы следующие численные схемы: явно-неявная схема расщепления по физическим процессам (явная конвекция, неявная диффузия), для адвекции в ней может быть использована низкодиссипативная схема высокого разрешения (MUSCL-типа) с кусочно-линейным восстановлением концентрации на ячейках сетки, либо стандартная схема МКО с кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации; полностью неявная схема нелинейного монотонного МКО (с MUSCL-схемой для конвективного члена); полностью неявная схема с кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации, использующая один из линейных МКО для дискретизации диффузионного члена.

При моделировании нелинейных задач, в частности, процессов безнапорной и насыщенно-ненасыщенной фильтрации, используется метод простой итерации. Для дискретизации по времени задач плотностной конвекции, которые неразделимы на подзадачи фильтрации и переноса, используется итерационное сопряжение моделей этих процессов, при котором на каждом шаге по времени цикл расчета отдельных подшагов выполняется до достижения заданного критерия сходимости. В силу высокой вычислительной сложности решения задач переноса с химическими взаимодействиями, в них выполняется безытерационное сопряжение, при котором реакционный и миграционный подшаги делаются лишь один раз на каждом шаге по времени.

4. Примеры применения кода

В настоящем разделе приводится ряд примеров использования кода GeRa для выполнения расчетов в рамках достаточно сложных моделей: плотностной конвекции, безнапорной и насыщенно-ненасыщенной фильтрации, переноса с химическими взаимодействиями.

4.1 Моделирование напорно-безнапорной и ненасыщенной фильтрации, переноса в зоне аэрации

Данная задача используется в качестве обучаеющей к расчетному коду VS2DT[11], ее постановка и численное решение можно найти в работе [12]. Расчетный разрез тестовой задачи и дискретизация модели, реализованной в VS2DT, показаны на рисунке **2** , на котором отражена расчетная область, имеющая размеры 6,47 × 4,06 м. Зона аэрации сложена неоднородными породами: голубым цветом показаны хорошо проницаемые пески, а розовым - менее проницаемые пылеватые грунты. Необходимые параметры гидрофизических моделей пород приведены в таблице **1** (используется модель Ван Генухтена-Муалема [13]). В левом и правом нижних углах задано граничное условие первого рода со значением напора H=-4,5 м. Отметка -4,5 м соответствует нулевому давлению, и выше этой отметки начальные давления заданы гидростатическими. На верхней границе задано инфильтрационное питание 0,01 м/сут. В углублении, которое можно интерпретировать как хранилище отходов, концентрация инфильтрата 1000 мг/л, в остальной области на верхней границе она равна нулю. Расчетное время составляет 110 суток.

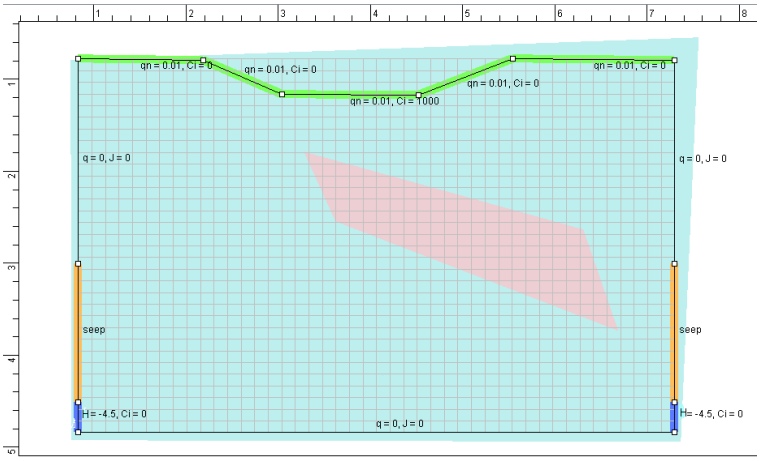


Рис. 2. Геометрия расчетной области и граничные условия

Таблица 1. Параметры к двумерной задаче фильтрации и массопереноса

Параметр	Песок	Пылеватый грунт
Коэффициент фильтрации при полном насыщении (м/сут)	12,4	0,7
Влагосодержание при полном насыщении θ_s	0,39	0,4
Остаточное влагосодержание θ_r	0,06	0,14
Параметр уравнения состояния n	5,8	7,0
Параметр уравнения состояния α ($м^{-1}$)	2,3	0,25
Продольная дисперсивность, α_L (м)	0,1	0,1
Поперченная дисперсивность, α_T (м)	0,01	0,01
константа распада, λ ($сут^{-1}$)	0,03	0,03

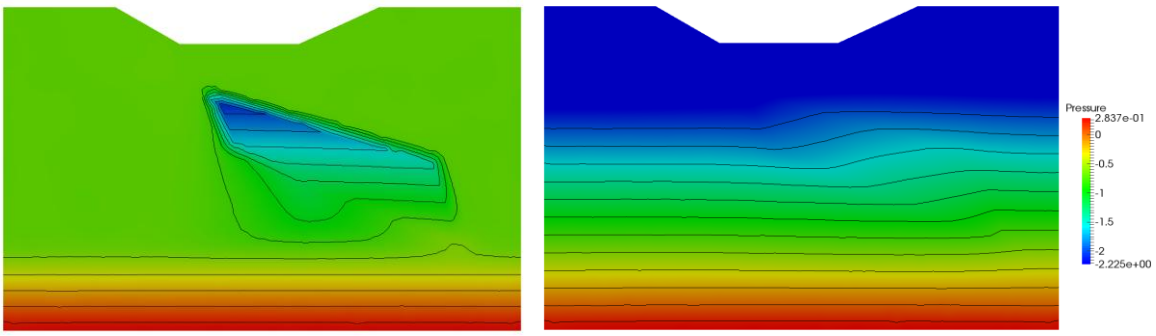


Рис. 3. Распределение давления в расчетной области при T=110 суток, посчитанное моделью насыщенно-ненасыщенной фильтрации (слева) и напорно-безнапорной фильтрации (справа)

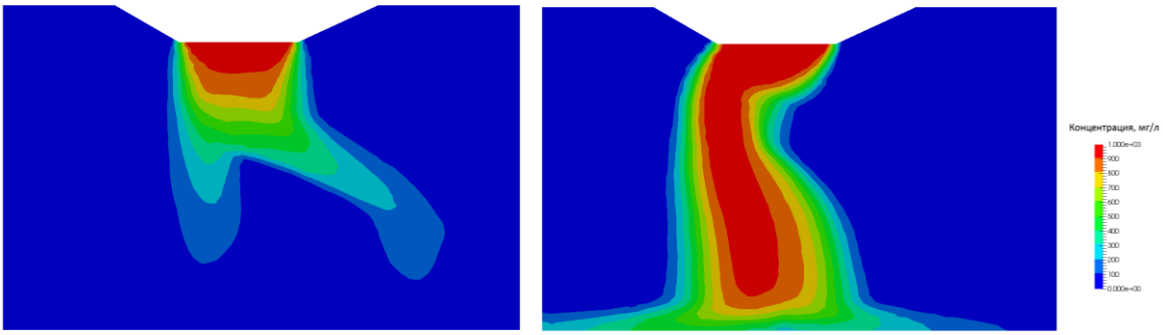


Рис. 4. Концентрация загрязнения в расчетной области при T=110 суток, посчитанная при моделировании фильтрации насыщенно-ненасыщенной моделью (слева) и напорно-безнапорной моделью (справа)

Моделирование проводится с помощью двух моделей: напорно-безнапорной и насыщенно-ненасыщенной фильтрации, для демонстрации различий между ними. Как видно из рисунка **3**, картина распределения давления в расчетной области кардинально отличается в этих двух моделях. Более простая модель напорно-безнапорной фильтрации не способна учесть сложного нелинейного поведения гидрофизических параметров породы, что ставит под сомнение ее использование при моделировании фильтрации и переноса в зоне аэрации, хотя такие модели являются компонентами расчетных кодов MODFLOW и FEFLOW.

При переносе загрязнения (см. рисунок **4**) модели также показывают принципиально разные результаты. Во-первых, в напорно-безнапорной постановке загрязнение распространяется значительно быстрее. Во-вторых, линза слабопроницаемых пылеватых грунтов выполняет различные роли. В модели напорно-безнапорной фильтрации она служит водоупором, и поток обтекает ее. В насыщенно-ненасыщенной постановке, напротив, она служит коллектором потока, а на ее нижней границе образуется капиллярный барьер, отводящий поток вправо, вдоль нижней границы линзы.

4.2 Моделирование плотностной конвекции

Одной из наиболее известных задач, используемых при верификации численных моделей плотностной конвекции, является задача Элдера, предложенная Элдером в [14] для моделирования тепловой конвекции и адаптированная к задачам плотностной конвекции в работе [15]. Полная постановка задачи представлена в [15]. Приведем здесь лишь результаты моделирования этой задачи на грубой сетке из 44×25 ячеек (см. рисунок 5) и на мелкой сетке 400×100 ячеек (см. рисунок 6). На рисунках 5 и 6 показаны изолинии обезразмеренной концентрации соли 0.2, 0.4, 0.6 и 0.8.

Наблюдаемые результаты близки к ранее полученным другими исследователями [16-18]: решение на грубой сетке кардинально отличается от решения на мелкой сетке. К концу моделирования (T=20 лет) наблюдаются две конвективные ячейки на грубой сетке с нисходящим потоком в центре, и четыре конвективных ячейки с восходящим потоком в центре – на мелкой сетке. Наблюдается хорошее соответствие с кодами SEAWAT [19] и SUTRA [15] на грубой сетке, с TVDV-2D [16] на мелкой сетке и на обеих сетках – с кодами ROCKFLOW и FEFLOW [17]. Доказано, что решение должно сходиться к показанному на рисунке 6, и разная структура решения на мелкой и грубой сетках является следствием близости параметров задачи к пограничным, разделяющим два варианта (с двумя и с четырьмя конвективными ячейками), малые возмущения приводят к различным решениям [20].

Стоит отметить, что в коде GeRa возможен адекватный учет чисто примесных источников (когда поступление в систему примеси не сопровождается поступлением жидкости), без которого расчет напоров и потоков в ряде задач (в частности, в задаче Элдера) неверен, как это показано в работе [21].

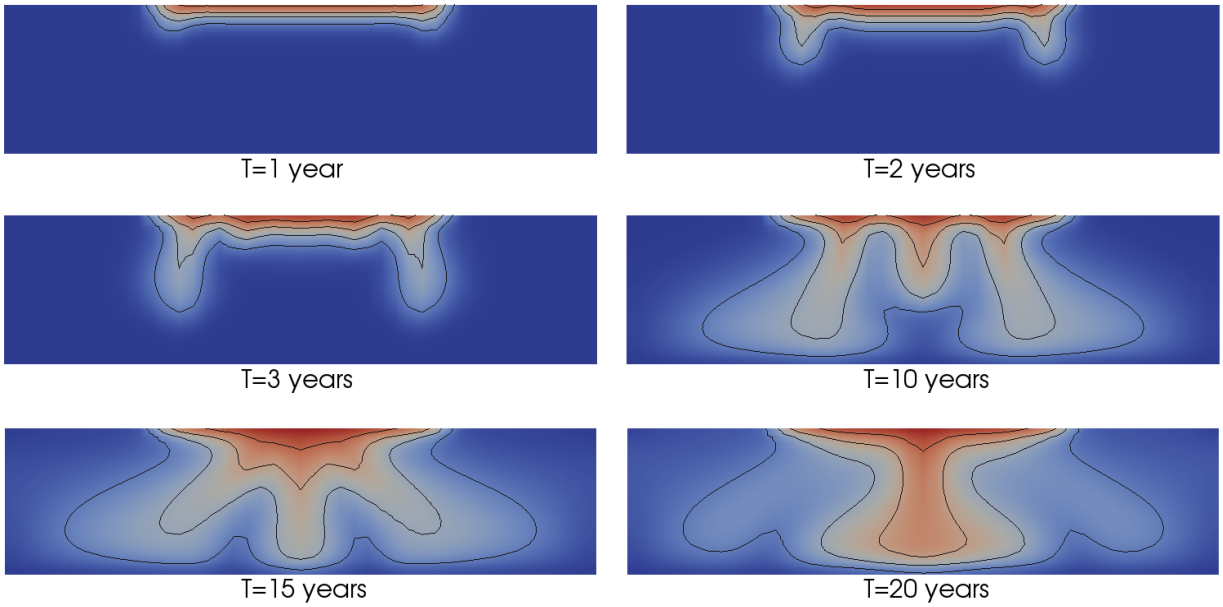


Рис. 5. Решение задачи Элдера на сетке из 44×25 ячеек

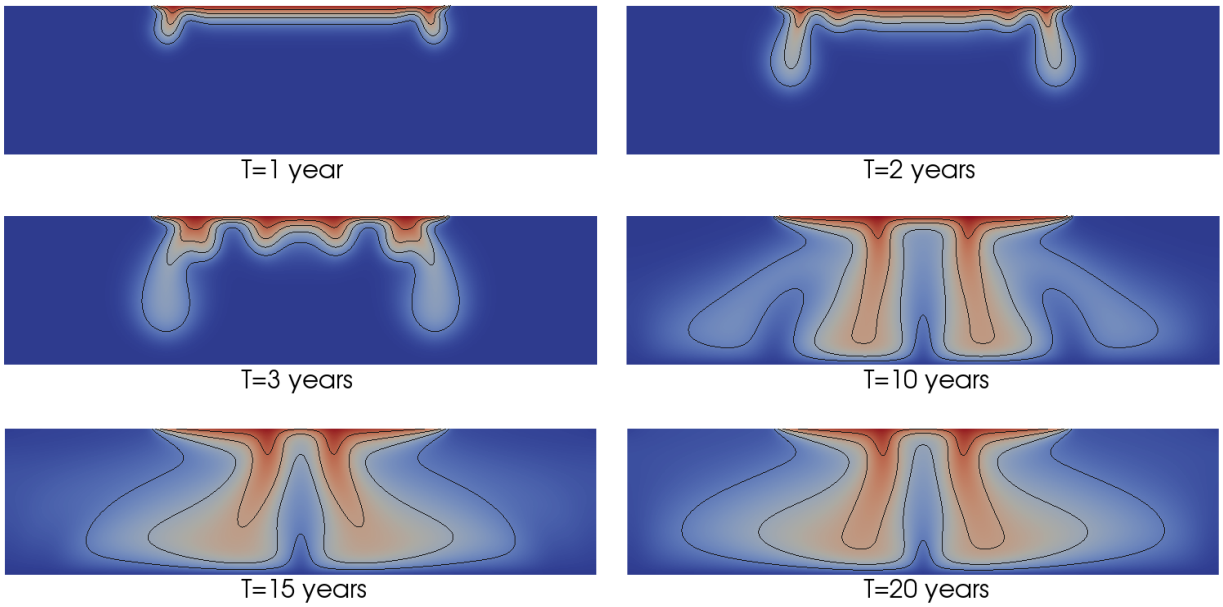


Рис. 6. Решение задачи Элдера на сетке из 400×100 ячеек

4.3 Моделирование переноса с химическими взаимодействиями

Химические взаимодействия играют, как правило, ключевую роль в динамике распространения радионуклидов и иных загрязнений в геологической среде. В наиболее простых моделях переноса, с учетом равновесной обратимой сорбции по изотерме Генри, характерное время миграции загрязнителя прямо пропорционально фактору задержки. Присутствующие в литературных источниках коэффициенты распределения, K_d, для одних и тех же радионуклидов и геологических пород могут отличаться на порядки [1]. Следовательно, во-первых, геомиграционные модели имеют высокую чувствительность к параметру K_d, и, во-вторых, учитывая большой разброс его значений в базах данных, использование табличных данных может быть оправдано только в консервативных моделях.

Для обоснования значений K_d требуется проведение сорбционных экспериментов с конкретными растворами и породами, характерными для данного объекта. В практике обоснования безопасности K_d обычно определяется с помощью стандартизованного эксперимента, и считается неизменным параметром породы на весь период моделирования [2, 3]. Однако такая методика либо вовсе не учитывает реальный состав растворов (в эксперименте используется дистиллированная вода), либо не позволяет учесть динамику изменения этого раствора в процессе взаимодействия с породами.

В коде GeRa предусмотрены два подхода, позволяющих с разной степенью точности учесть реальные составы раствора и вмещающей породы при переносе загрязнения. Первый подход заключается в моделировании сорбции по линейной изотерме, в которой коэффициент распределения K_d является переменным, зависящим от концентрации одной из переносимых компонент раствора. Второй – состоит в полном моделировании химических взаимодействий (в настоящее время – в равновесной постановке) с помощью кода PHREEQC [25]. Первый подход предполагается менее точным, но его достоинством является меньшее на несколько порядков время расчета, так как расчет химических реакций является вычислительно чрезвычайно затратным.

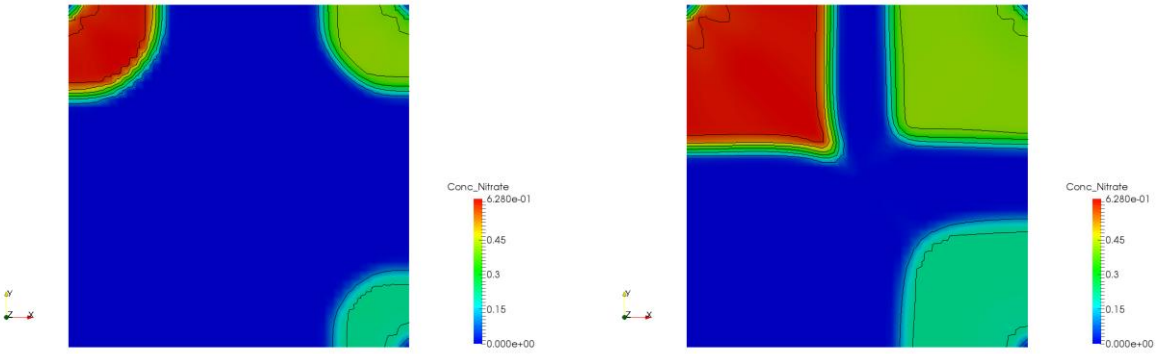
Для демонстрации возможностей кода GeRa по моделированию переноса с химическими взаимодействиями, приведем пример моделирования задачи о закачке растворов различного состава в однородный пласт. Моделируется сбалансированная по расходам одновременная работа пяти скважин, четырех нагнетательных и одной разгрузочной. Расчетная область является прямоугольным параллелепипедом [-100 м;100 м]×[-100 м;100 м]×[-5 м;5 м]. В точках P_1 = (-95 м; -95 м), P_2=(95 м; -95 м); P_3=(95 м; 95 м); P_4=(-95 м; 95 м) расположены нагнетательные сква-

жины, фильтры которых находятся на высоте от -2 м до 2 м. Расход каждой из этих скважин составляет 10 $м^3$/сутки. В центре расчетной области, точке (0;0) расположена разгрузочная скважина, фильтр которой также находится на высоте от -2 м до 2 м. Расход разгрузочной скважины компенсирует закачку и составляет 40 $м^3$/сутки. Порода пласта и раствор, заполняющий ее в начальный момент времени, находятся в химическом равновесии. На породе присутствуют две ионообменных фазы.

В нагнетательные скважины осуществляется закачка растворов, содержащих нитрат натрия и стронций. Концентрация стронция в закачиваемых растворах одинаковая и составляет $3{,}3 \times 10^{-9}$ моль/л. Концентрация нитрата натрия варьируется и составляет:

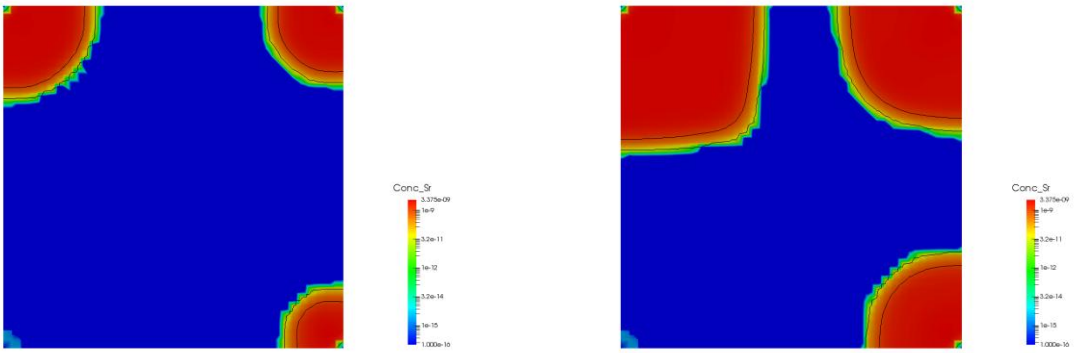
- 0 моль/л в скважине P_1;
- 0,2 моль/л в скважине P_2;
- 0,4 моль/л в скважине P_3;
- 0,6 моль/л в скважине P_4.

Моделирование проводится на период в 3000 дней. На рисунках **7** и **8** показаны концентрации нитрата натрия и стронция в сечении слоя плоскостью Z=0 м в моменты времени 1000 дней и 3000 дней. Отмечены изолинии концентрации стронция 10^{-10} моль/л и 10^{-9} моль/л, а также изолинии концентрации нитрата натрия от 0,1 до 0,6 моль/л с шагом 0,1 моль/л. Во-первых, данная модель позволяет учесть влияние различного содержания нитрата натрия на миграцию стронция: чем выше концентрация нитрата, тем меньше сорбируется стронций. Во-вторых, в отличие от других моделей, наблюдается замедление миграции самого нитрата, то есть, он уже не является нейтральным трассером, как традиционно принято считать.



а) T=1000 суток б) T=3000 суток

Рис. 7. Распределение нитрата натрия в расчетной области при учете химических взаимодействий



а) T=1000 суток б) T=3000 суток

Рис. 8. Распределение стронция в расчетной области при учете химических взаимодействий

5. Заключение

В работе кратко описаны основные возможности интегрального кода GeRa для гидрогеологического моделирования в задачах обоснования безопасности захоронений РАО. В соответствии с современными тенденциями разработки кодов подобной направленности, GeRa является кодом, «рожденным параллельным» благодаря использованию программной платформы MSPP, и работает на адаптивных трехмерных неструктурированных сетках.

В расчетном коде реализованы базовые и усложненные модели фильтрации и переноса, включая модели напорно-безнапорной фильтрации, насыщенно-ненасыщенной фильтрации, плотностной конвекции, переноса в зоне аэрации, переноса с химическими взаимодействиями. Код отличает наличие ряда уникальных моделей, не включенных в современные широко распространенные коды (семейство MODFLOW, FEFLOW и др.), в частности, модель плотностной конвекции позволяет адекватно учитывать чисто примесные источники, а при моделировании сорбции по изотерме возможен учет влияния концентрации одной из переносимых компонент на коэффициент распределения других веществ.

Расчетный код GeRa позволяет провести полный цикл моделирования при решении задачи оценки безопасности захоронения РАО: геологическое моделирование, геофильтрационное и геомиграционное моделирование, оценка и визуализация результатов. К настоящему времени первая версия кода прошла опытную эксплуатацию во ФГУП «Национальный оператор по обращению с радиоактивными отходами» и готовится к подаче на аттестацию в Ростехнадзор.

Литература

1. Капырин И.В., Уткин С.С., Василевский Ю.В. Концепция разработки и использования расчетного комплекса GeRa для обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактив-

ных отходов // Вестник атомной науки и техники, серия «Математическое моделирование физических процессов», – 2014 – №4 – С.44-54.

2. Лопаткин А.В., Величкин В.И., Никипелов Б.В., Полуэктов П.П. Радиационная эквивалентность и природоподобие при обращении с радиоактивными отходами // Атомная энергия, том 92, вып. 4, 2002. С. 308-317.
3. Panday S., Langevin C.D., Niswonger R.G., Ibaraki M., and Hughes J.D. MODFLOW-USG version 1: An unstructured grid version of MODFLOW for simulating groundwater flow and tightly coupled processes using a control volume finite-difference formulation. U.S. Geological Survey Techniques and Methods, 2013, book 6, chap. A45, 66 p.
4. Freedman V.L. et al. A high-performance workflow system for subsurface simulation // Environmental Modelling & Software – 2014 – Vol.55 – Pp.176-189.
5. Hammond G.E., Lichtner P.C., Mills R.T. Evaluating the performance of parallel subsurface simulators: An illustrative example with PFLOTRAN //Water resources research. – 2014. – Т. 50. – №. 1. – С. 208-228.
6. Василевский Ю.В., Коньшин И.Н., Копытов Г.В., Терехов К.М. INMOST - программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида. – М.: Издательство Московского университета, 2013, 144 стр.
7. Charlton S. R., Parkhurst D. L. (2011). Modules based on the geochemical model PHREEQC for use in scripting and programming languages. Computers & Geosciences, 37(10), 1653-1663.
8. Чернышенко А. Ю. Построение сеток типа восьмеричное дерево со сколотыми ячейками в неоднородных областях // Вычислительные методы и программирование. – 2013. – Т. 14. – С. 229-245.
9. Aavatsmark I. Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids // Computational Geosciences. 2007. Vol.11, Pp. 199-206.
10. Danilov A.,Vassilevski Yu. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes.// Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling. 2009 .Vol. 24, № 3. Pp. 207-227.
11. Официальная страница расчетного кода VS2D http://wwwbrr.cr.usgs.gov/projects/GW_Unsat/vs2di1.3/index.html .
12. Zheng C., Bennett G.D.. Applied Contaminant Transport Modeling , 2nd ed . Wiley and Sons, Inc.,– 2002 – 621 p.
13. van Genuchten, M. Th., A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils//Soil Sci. Soc. Am. J., 44, 892-898, 1980.
14. Elder J. W. Numerical experiments with free convection in a vertical slot //J. of Fluid Mechanics. – 1966. – Vol. 24. – No. 4. – Pp. 823-843.
15. Voss C. I., Souza W. R. Variable density flow and solute transport simulation of regional aquifers containing a narrow freshwater-saltwater transition zone //Water Resources Research. – 1987. – Vol. 23. –No. 10. – Pp. 1851-1866.
16. Ackerer P., Younes A., Mose R. Modeling variable density flow and solute transport in porous medium: 1. Numerical model and verification // Transport in Porous Media. – 1999. – Vol. 35. – No. 3. – Pp. 345-373.
17. Kolditz O., Ratke R., Diersch H. J. G., Zielke W. Coupled groundwater flow and transport: 1. Verification of variable density flow and transport models // Advances in Water Resources – 1998 – Vol.21 – No.1 – Pp. 27-46.
18. Oldenburg C. M., Pruess K. Dispersive transport dynamics in a strongly coupled groundwater-brine flow system //Water Resources Research. – 1995. – Vol. 31. – No. 2. – Pp. 289-302.

19. Guo W., Langevin C. D. User's guide to SEAWAT: A computer program for simulation of three-dimensional variable-density ground-water flow. US Department of the Interior, US Geological Survey – 2002 – 77 p.

20. Woods J. A., and G. F. CareyUpwelling and downwelling behavior in the Elder-Voss-Souza benchmark // Water Resour. Res. – 2007 –Vol. 43 – W12403, doi:10.1029/2006WR004918.

21. Hidalgo, J. J., J. Carrera, and A. Medina, Role of salt sources in density-dependent flow // Water Resour. Res. – 2009 – Vol. 45 –W05503, doi:10.1029/2008WR007679.

22. McKinley, I. G., Scholits, A.. A comparison of radionuclide sorption databases used in recent performance assessments. J. of Contaminant Hydrology (1993), 13(1), 347-363.

23. Материалы оценки воздействия на окружающую среду при размещении приповерхностного пункта захоронения радиоактивных отходов низкого и среднего уровней активности в районе Ленинградского отделения филиала «Северо-Западного территориального округа ФГУП «РосРАО». – М.: ФГУП «РосРАО» – 2012. – 266 с.

24. Bourgeat A., Kern M., Schumacher S., Talandier J. The COUPLEX test cases: Nuclear waste disposal simulation // Computat. Geosci. - 2004 - Vol. 8, No. 2. - Pp. 83–98.

25. Parkhurst D.L., Appelo C.A.J. User’s guide to PHREEQC (version 2) — a computer program for speciation, batch-reaction, one-dimensional transport, and inverse geochemical calculations, Denver, Colorado, USA, 1999.