

РАЗВИТИЕ ИНТЕГРАЛЬНОГО КОДА GERa ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ПУНКТОВ ЗАХОРОНЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

Григорьев Ф.В., Капырин И.В., Коньшин И.Н. (ИБРАЭ РАН, ИВМ РАН, Москва, Россия), Копытов Г.В., Сускин В.В. (ИБРАЭ РАН, Москва, Россия)

1. Введение

Сегодня главным методом подтверждения долговременной безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов является численное моделирование геомиграции радионуклидов. Программное средство, предназначенное для выполнения такого рода моделирования, должно удовлетворять высоким требованиям в части возможности учета множества физических и химических процессов, точности и скорости расчетов.

Интегральный код GeRa разрабатывается специалистами ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН. Он обеспечивает пользователя инструментами для проведения полного цикла работ по оценке безопасности, начиная от построения геологической модели и заканчивая расчетом доз для населения. Первая версия кода GeRa/V1 сейчас проходит завершающий этап аттестации.

В данной работе кратко описаны возможности GeRa/V1, а также разрабатываемый сейчас новый функционал, который войдет в GeRa/V2.

2. Первая версия расчетного кода GeRa: GeRa/V1

В первой версии кода GeRa/V1 были реализованы модели следующих процессов:

- Стационарная и нестационарная фильтрация в напорной и напорно-безнапорной постановках;
- Насыщенно-ненасыщенная фильтрация;
- Нестационарный адвективно-дисперсионно-диффузионный перенос с возможностью учета химических взаимодействий в системе вода-порода, радиоактивного распада переносимых нуклидов с учетом цепочек;
- Плотностная конвекция.

Численные модели были построены на основе метода конечных объемов (МКО) и приспособлены для дискретизации на трехмерных неструктурированных сетках. Для создания такого рода сеток в GeRa реализованы два сеточных генератора:

- генератор треугольно-призматических сеток;
- генератор гексаэдральных сеток на основе восьмидеревьев.

Хранение сеточных данных в GeRa/V1 осуществляется с помощью программной платформы MSPP[1]. Данная платформа позволяет проводить расчет в параллельном режиме, обеспечивая синхронизацию сеточных данных, сборку и решение линейных систем.

Для дискретизации оператора диффузии по пространству в GeRa/V1 можно использовать одну из трех схем МКО: классическую двухточечную схему, многоточечную O-схему [2], либо нелинейную монотонную схему конечных объемов с двухточечной аппроксимацией потоков [3]. Для решения задач переноса были реализованы следующие численные схемы:

- Явно-неявная (явная конвекция, неявная диффузия) схема расщепления по физическим процессам. При этом для решения адвективной подзадачи может быть использована высокоточная TVD-схема MUSCL типа с кусочно-линейным восстановлением концентрации на ячейках сетки, либо стандартная схема МКО с противопотоковой кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации.
- Полностью неявная схема нелинейного монотонного МКО.
- Полностью неявная схема с кусочно-постоянной аппроксимацией концентрации.

Средства геологического моделирования GeRa/V1 позволяют строить структурные модели объектов и окружающей геологической среды при помощи методов интерполяции (триангуляция, обратные расстояния) и геостатистики (кригинг).

Отметим, что при разработке GeRa максимально использовались существующие открытые библиотеки. Так, графический интерфейс построен на основе библиотеки Qt [4], средства визуализации – на основе библиотеки VTK [5], один из линейных решателей – PETSc [6].

Подробную информацию о GeRa/V1 можно найти в работах [7,8].

3. Развитие расчетного кода GeRa: GeRa/V2

Дальнейшее развитие кода GeRa происходит по нескольким направлениям. В первую очередь внедряется учет дополнительных физических и химических процессов в моделях. Среди таких процессов:

- фильтрация и перенос в средах с двойной пористостью;
- двухфазная (жидкость-газ) фильтрация в пористой среде с учетом фазовых переходов;
- течение растворов с переменной вязкостью;
- коллоидный перенос;
- учет течения поверхностных вод;
- модели течения и переноса в трещиноватых средах;
- тепловые процессы: тепловыделение при радиоактивном распаде, конвекция (пример совместного моделирования тепловой и солевой конвекции – смешанная задача Элдера – приведен на рисунке 1);
- эвапотранспирация.

Продолжается внедрение новых численных методов и улучшение старых. В частности, в GeRa/V2 будет доступен метод Ньютона для решения нелинейных задач безнапорной и ненасыщенной фильтрации, гораздо более быстрый по сравнению с методом простой итерации, реализованным в GeRa/V1. Значительные изменения претерпел гексаэдральный генератор. Проведены работы по повышению робастности высокоточной схемы для задачи переноса. Внедряются методы оценки неопределенностей на основе стохастического моделирования и методы автоматической калибрации моделей. Реализован функционал для построения больших детализированных моделей при помощи скриптовых команд (пример такой модели приведен на рисунке 2).

Еще одним путем совершенствования расчетного кода является обновление его программных компонентов. Так, в GeRa/V2 осуществлен переход с сеточной платформы MSPP на платформу INMOST [1,9], продемонстрировавшую лучшую эффективность обращения с используемыми сеточными данными [10]. Осуществляется интеграция кода GeRa с расчетными кодами, моделирующими источники загрязнения и поведение барьеров безопасности, а также с кодами для расчета дозовой нагрузки.

Большое внимание уделяется отчуждаемости кода. Проводятся консультации с пользователями-гидрогеологами, учитываются их замечания и пожелания. В 2017 году в рамках школы-семинара по Кодам нового поколения был проведен учебный курс по коду GeRa. К данному курсу была разработана учебная версия кода и пособие-самоучитель к ней.

4. Заключение

Код GeRa позволяет проводить полный цикл работ по оценке безопасности захоронений РАО и других источников загрязнения в геологических средах. К настоящему моменту разработана версия GeRa/V1, обладающая базовым функционалом для гидрогеологического моделирования. Она является полноценным программным продуктом с положительным опытом передачи в сторонние организации. При этом развитие кода продолжается путем добавления учета новых физико-химических процессов, реализации усовершенствованных численных методов, обновления компонентов программы. В

Список литературы

1. 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.
2. *Aavatsmark I.* Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids // Computational Geosciences. 2007. Vol.11, Pp. 199-206.
3. *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.
4. Официальная страница проекта Qt. URL: www.qt.io.
5. Официальная страница проекта VTK: www.vtk.org.
6. Официальная страница проекта PETSc: www.mcs.anl.gov/petsc/.
7. *Капырин И.В., Уткин С.С., Василевский Ю.В.* Концепция разработки и использования расчетного комплекса GeRa для обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов // Вестник атомной науки и техники, серия «Математическое моделирование физических процессов», – 2014 – №4 – С.44-54.
8. *Капырин И.В., Иванов В.А., Копытов Г.В., Уткин С.С.* Интегральный код GeRa для обоснования безопасности захоронения РАО // Горный журнал. – 2015. – №10. – С. 44—55.
9. Официальная страница программной платформы INMOST. URL: www.inmost.org.
10. *Капырин И.В., Коньшин И.Н., Григорьев Ф.В.* Применение программной платформы INMOST в расчетном коде GeRa для работы с распределенными сетками общего вида // Математика Црне Горе. – 2016. – XXXVI. – С. 27–44.