

УДК 519.688

КОНЦЕПЦИЯ РАЗРАБОТКИ И ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РАСЧЕТНОГО КОМПЛЕКСА GeRa ДЛЯ ОБОСНОВАНИЯ БЕЗОПАСНОСТИ ПУНКТОВ ЗАХОРОНЕНИЯ РАДИОАКТИВНЫХ ОТХОДОВ

И. В. Капырин, С. С. Уткин, Ю. В. Василевский
(ИБРАЭ РАН, ИВМ РАН, г. Москва)

Изложены принципы разработки расчетного комплекса GeRa, предназначенного для обоснования безопасности захоронений радиоактивных отходов и определения требований к отходам, подлежащим захоронению. Его функциональность должна позволить решать трехмерные задачи полного цикла геофильтрационного и геомиграционного моделирования, от создания геологической модели до анализа неопределенностей и оценки достоверности результатов. Комплекс ориентирован на использование трехмерных неструктурированных расчетных сеток и возможность решения задач в параллельном режиме на суперкомпьютерах. Подробно рассматриваются возможности каждого из его модулей, в том числе используемые модели физических и химических процессов, численные методы.

Ключевые слова: радиоактивные отходы, безопасность захоронения, трехмерное моделирование, фильтрация, перенос, геологическая среда, параллельность вычислений, суперкомпьютеры.

Введение

Современные подходы к созданию объектов использования атомной энергии предполагают рассмотрение их полного жизненного цикла уже на стадии проектирования. Для АЭС это означает, в частности, что заранее должны быть решены все вопросы, связанные с обращением с радиоактивными отходами (РАО), т. е. рассмотрены варианты их окончательной изоляции. Отечественная практика показала, что игнорирование детальной проработки вопросов перевода РАО в экологически безопасное состояние уже на этапах создания новых ядерных объектов и технологий приводит к необходимости вложения существенно больших интеллектуальных и финансовых средств в дальнейшем.

Принципиально важно, что при обосновании решений по отдельным технологиям внереакторной части замкнутого ядерного топливного цикла (ЗЯТЦ) в рамках системной инженерии взаимосвязь его элементов может реализовываться как стандартным образом (от образования РАО к их захоронению), так и в обратном порядке

(от вариантов безопасного захоронения к требованиям для технологий иммобилизации РАО и создания инженерных барьеров безопасности).

В *традиционной* задаче обоснования безопасности пункта захоронения РАО в качестве исходных данных используется набор параметров, которые целесообразно представить в виде двух групп.

К параметрам первой группы, явным образом зависящим от технологических решений при реализации ЗЯТЦ, относятся:

- радионуклидный и элементный состав облученного ядерного топлива в зависимости от типа реактора, глубины выгорания, исходного обогащения или исходной топливной композиции, времени выдержки;
- качественный и количественный состав РАО, формируемый в зависимости от выбранной технологии переработки облученного ядерного топлива;
- технологии иммобилизации РАО в матрицах, пригодных для дальнейшей изоляции РАО;

- технические характеристики контейнеров, упаковок, пеналов, в которых происходит размещение РАО для окончательной изоляции.

Вторая группа параметров содержит характеристики объекта окончательной изоляции РАО, определяемые свойствами вмещающей среды (коэффициенты фильтрации, сорбции; плотность и пористость формации и др.) и непосредственно конструкцией пункта захоронения.

Обратная задача, т. е. определение требований к характеристикам кондиционированных отходов исходя из условий захоронения РАО, пока носит более "академический", нежели прикладной характер, в силу имеющихся неопределенностей по вопросам окончательной изоляции и потенциально возможным вариантам ЗЯТЦ. Однако именно этот подход представляется наиболее логичным и экономически эффективным, поскольку дает возможность оптимизации процессов кондиционирования РАО и сооружения инженерных барьеров безопасности. Поэтому уже до появления практических результатов по объектам окончательной изоляции РАО (в частности подземной лаборатории в Нижнеканском гранитоидном массиве, пункту захоронения НАО и САО на Северо-Западе) необходимо приступить к разработке соответствующих методологии и расчетных инструментальных средств, с тем чтобы обосновать *обратные* требования. В этом случае результаты, получаемые на основе расчетов для обоснования безопасности захоронения РАО, могут служить исходными данными для технологов, занимающихся фракционированием и иммобилизацией РАО, логистикой иммобилизованных РАО.

В соответствии с планами по развитию крупномасштабной ядерной энергетики захоронение РАО должно осуществляться исходя из принципа радиационно-миграционной эквивалентности. Его суть — "возврат в землю количества радионуклидов, которое равно по опасному воздействию на человека количеству, извлеченному из земли с ураном" [1], при этом опасность учитывает различные миграционные свойства радионуклидов. Отметим, что методы количественной оценки радиационно-миграционной составляющей и потенциальной биологической опасности РАО [2] могут быть существенно модернизированы с учетом имеющихся расчетно-теоретических наработок в области решения радиоэкологических задач [3] и прогноза миграции радионуклидов в геосфере [4].

Развитие принципа радиационно-миграционной эквивалентности в методах геомиграционного моделирования, многовариантные расчеты с возможностью их оперативного проведения позволят сформулировать более четкие и оптимизированные технические требования к базовым технологиям.

В настоящее время в России нет готовых расчетных инструментальных средств, позволяющих решать полный комплекс задач обоснования безопасности захоронения РАО и определения требований к характеристикам завершающих стадий ЗЯТЦ, которые диктуются условиями захоронения РАО. Из существующих наиболее развитых отечественных программных средств выделяются две программы, позволяющие строить геомиграционные модели для обоснования безопасности: GEON [5] (в разных модификациях) и НИМФА [6]. Комплекс GEON был разработан в 1990-2000 гг. на предприятии "Гидроспецгеология" специально для решения задач геофильтрации и геомиграции на объектах Производственного объединения "Маяк" (в первую очередь на озере Карачай). Он аттестован и имеет достаточно широкие функциональные возможности; развитие уже не ведется. Пакет программ НИМФА создан в РФЯЦ-ВНИИЭФ, но информация о нем практически не представлена в открытой печати.

Для решения вышеперечисленных задач разрабатывается код GeRa, который должен эксплуатироваться в единой системе с уже существующими и планируемыми технологическими моделями радиохимических переделов ЗЯТЦ (в первую очередь обращение с РАО). В 2010-2011 гг. в ИБРАЭ РАН были сформулированы требования к этому расчетному комплексу, а в 2012 г. начата его практическая разработка.

Сфера применения и структура расчетного комплекса GeRa

В связи с тем, что при захоронении РАО перенос радионуклидов происходит, как правило, в водной фазе, основным назначением комплекса является расчет трехмерных задач геофильтрации и геомиграции примесей. Предполагается, что по сравнению с широко распространенными на сегодняшний день расчетными средствами (Tough2, MODFLOW, MT3DMS, FEFLOW) новый комплекс будет обладать следующими преимуществами:

- ориентация на задачи, стоящие перед российской атомной отраслью (в частности, учет специфики решений для ЗЯТЦ);
- широкий спектр моделируемых процессов: учет тепловой и плотностной конвекции, многофазная фильтрация, химические взаимодействия (в том числе неравновесные) в системе *вода—порода*;
- высокоточные и эффективные методы дискретизации (низкодиссипативные методы, схемы второго порядка точности, адаптивные многогранные расчетные сетки);
- развитые средства оценки неопределенностей и достоверности результатов прогнозного моделирования;
- изначальная ориентация реализации на массивную параллельность (для решения больших задач) и кроссплатформенность.

Анализ современного развития расчетных средств моделирования геофильтрации и геомиграции подтверждает соответствие создаваемого комплекса передовым мировым тенденциям. Характерными примерами близких по содержанию работ являются комплекс MODFLOW-USG [7], в создании которого участвуют геологическая служба США и компания Shlumberger, а также крупная междисциплинарная программа исследований ASCEM Министерства энергетики США [8].

Помимо задач, перечисленных выше, расчетный комплекс GeRa может быть использован при обоснованиях:

- простых и дешевых решений по захоронению очень низкоактивных РАО;
- безопасности действующих пунктов захоронения, включая полигоны закачки жидких РАО и пункты размещения особых РАО;
- безопасности первых пунктов захоронения низкоактивных и среднеактивных отходов с выработкой оптимальных решений по их сооружению;
- безопасности национального глубинного пункта захоронения высокоактивных отходов.

Исходя из планируемой сферы применения определен спектр физических и химических процессов, которые должны учитываться при моделировании. Базовый набор моделей описывает следующие процессы:

1. Фильтрация:
 - насыщенная;
 - напорно-безнапорная;
 - насыщенно-ненасыщенная (при моделировании возможно использование различных известных зависимостей влагосодержания и коэффициента влагопереноса от высоты всасывания: Ван Генухтена, Брукса—Кори и др.);
 - двухфазная фильтрация *вода—воздух*.
2. Адвективно-диффузионно-дисперсионный массоперенос:
 - в однородной пористой среде;
 - в среде с двойной пористостью.
3. Химические взаимодействия в системе *вода—порода*:
 - равновесная сорбция с использованием при моделировании изотермы Генри, Фрейндлиха или Ленгмюра;
 - равновесная сорбция с детальным расчетом химических взаимодействий в системе *вода—порода*;
 - геохимические взаимодействия, учитывающие кинетику химических реакций.
4. Радиоактивный распад с учетом цепочек превращений.
5. Плотностная конвекция.
6. Теплоперенос, тепловыделение при радиоактивном распаде.
7. Тепловая конвекция.
8. Изменение вязкости раствора в зависимости от температуры и концентрации примесей.

В процессе работы пользователем создается проект, состоящий из геологической модели и численных моделей в совокупности с их параметрами и результатами моделирования. В рамках одного проекта могут быть проведены расчеты с помощью нескольких численных моделей.

Широта и разноплановость функциональных возможностей комплекса обуславливают использование при его создании подхода, при котором соответствующими группами специалистов ведется разработка отдельных компонентов с согласованными входными и выходными данными. В дальнейшем эти компоненты объединяются на базе графического интерфейса. Модульная структура позволяет, с одной стороны, грамотно построить цикл создания кода и максимально использовать потенциал узкоспециализированных разработчиков (гидрогеологов, программистов, специалистов по численным методам и параллельным вычислениям). С другой стороны, в

дальнейшем модульность позволит легко дополнять расчетный комплекс новыми компонентами, а при необходимости совершенствования кода ограничиваться только изменением или заменой необходимых модулей.

При разработке модульной структуры расчетного комплекса GeRa за основу взята последовательность действий пользователя при создании и использовании моделей геофильтрации и геомиграции. Она должна быть следующей:

- создание геологической модели, задание исходных данных, граничных условий;
- построение расчетной сетки;
- выбор численной модели (фильтрация насыщенная/насыщенно-ненасыщенная, напорная и безнапорная, адвективно-диффузионно-дисперсионный перенос, радиоактивный распад, геохимия, плотностная и тепловая конвекция);
- выбор методов дискретизации и выполнение расчетов на последовательной или параллельной ЭВМ;
- анализ и визуализация результатов;
- калибровка параметров модели;
- оценка достоверности результатов.

Исходя из функциональности расчетного комплекса, выделим следующие модули, которые должны войти в GeRa:

- 1) модуль построения геологической модели на основе исходных данных;
- 2) модуль построения расчетных сеток;
- 3) модуль дискретизации математических моделей;
- 4) модуль расчета геохимических взаимодействий в системе *вода–порода*;
- 5) параллельная программная MPI-платформа для работы с сетками и данными на сетках;
- 6) модуль программных средств хранения и обработки (базы данных, базы знаний) исходных данных, данных мониторинга, результатов расчетов и постпроцессинга по моделям;
- 7) модуль решения больших систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ);
- 8) модуль калибровки моделей и оценки достоверности результатов;
- 9) графический интерфейс расчетного комплекса, интегрирующий все имеющиеся модули и обеспечивающий средства визуализации.

Назначение и функции каждого из этих модулей описаны ниже.

Функциональные возможности модулей расчетного комплекса

Построение геологической модели. Работа в комплексе GeRa начинается с создания геологической модели. Для этого определяются границы расчетной области и ее геологическая структура.

Плановые границы области могут быть созданы в сторонних геоинформационных системах (ГИС), например MAPINFO, и загружены из файлов. Также пользователь имеет возможности привязки карт и самостоятельного выделения граничных контуров.

Комплекс GeRa в настоящее время ориентирован на слоистую структуру расчетной области. Поверхности кровель и подошв могут быть построены на основе данных геологических исследований с помощью методов интерполяции и геостатистического моделирования с возможностями вариограммного анализа. Помимо этого, поверхности могут быть созданы с помощью внешних программных средств, например геостатистического пакета GSLIB. Для простейших случаев предусмотрена возможность задания поверхностей горизонтальными и наклонными плоскостями. При задании параметров слоев предполагается учет пространственной неоднородности; для этого в слоях могут быть выделены подобласти с определенными характеристиками. В перспективе поля параметров можно будет построить с помощью геостатистических методов.

Построение расчетных сеток. Все методы дискретизации базируются на использовании неструктурированных многогранных сеток. Это значит, что ячейками сетки могут быть произвольные многогранники, в сетке одновременно могут присутствовать разные типы ячеек. Безусловно, такой класс сеток включает все более простые и распространенные классы: прямоугольные, гексаэдральные, треугольно-призматические, тетраэдральные сетки. Применение произвольных многогранных сеток призвано обеспечить высокую точность аппроксимации границ расчетных областей. Благодаря адаптации сеток и в перспективе их динамическому локальному перестроению.

нию будет достигнута высокая точность и скорость решения.

Неотъемлемым требованием к генераторам сеток является возможность адаптации сеток, сгущения в областях со сложной структурой и границами, в окрестностях исследуемых объектов. Необходимо обеспечить максимально точное воспроизведение гранями сеточных ячеек различных поверхностей геологических особенностей (выклиниваний пластов, разломов) и инженерных сооружений. Поскольку построение сеток должно быть автоматизировано, выбор пал на треугольно-призматический сеточный генератор и генератор многогранных сеток (преимущественно гексаэдральных) на основе восьмидеревьев со склотыми ячейками. Этот выбор также обоснован тем, что для гидрогеологических задач характерна слоистая структура расчетной области. В этом случае использование, к примеру, тетраэдральных сеточных генераторов не представляется адекватным, так как генерируемые ими сетки плохо подходят для учета пространственной анизотропии и впоследствии их использование приводит к трудностям при дискретизации и решении СЛАУ.

Треугольно-призматические сетки (рис. 1) строятся в два этапа. На первом этапе создается двумерная неструктурированная треугольная сетка в проекции расчетной области на горизонтальную плоскость методом продвигаемого фронта [9] с помощью средств библиотеки

Ani2d [10]. Затем последовательно на основе двумерной сетки добавляются треугольные основания призм и вертикальные образующие, соединяющие их.

Отметим, что основания не обязаны быть параллельны друг другу, производится отслеживание негоризонтальных кровель и подошв геологических слоев. Более того, в областях вырождения слоев ячейки сетки также вырождаются, переходя в пирамиды (слияние одной пары вершин верхнего и нижнего оснований призмы) или тетраэдры (слияние двух пар вершин), либо полностью исключаются из сетки.

Пользователь может управлять сгущением сетки к границам и локальным объектам, геологическим разломам, а также ее разрежением при удалении от границ и областей сгущения. Также для каждого геологического слоя может быть задано количество покрывающих его сеточных слоев и выбран алгоритм управления высотой ячеек при построении сетки.

Сетки на основе восьмидеревьев (рис. 2) удобны тем, что в большей части расчетной области пользователь получает гексаэдры достаточно регулярной формы и минимизирует число ячеек, что положительно сказывается на эффективности решения задач. Вертикальные ребра этих гексаэдров направлены по оси Z , верхние и нижние грани определяются кровлями и подошвами геологических слоев. В то же время можно легко добиваться необходимого локального измельчения сетки, причем в трех измерениях.

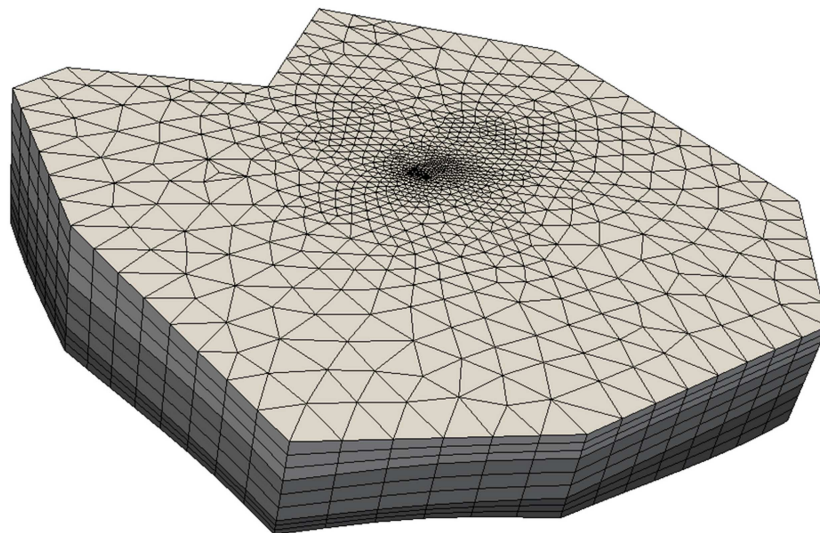


Рис. 1. Пример треугольно-призматической сетки с локальным сгущением к скважине для области с тремя геологическими слоями

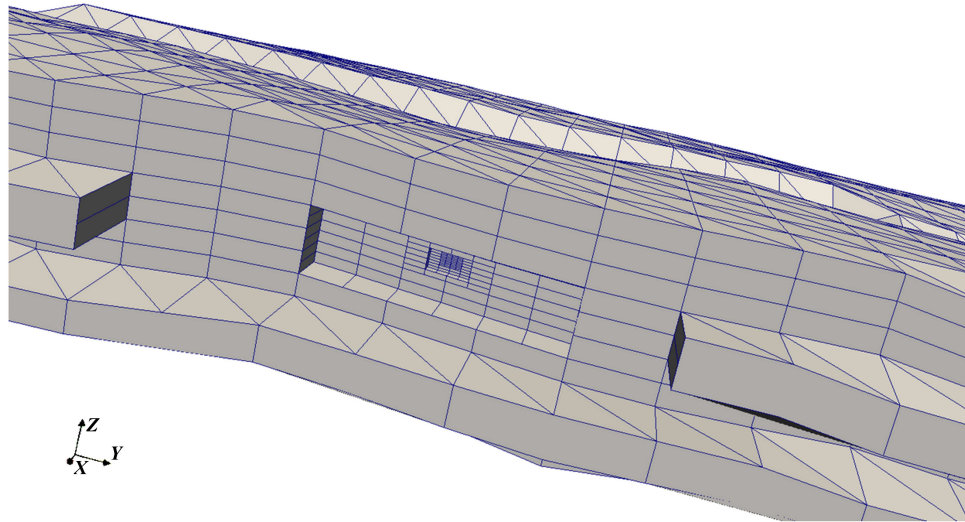


Рис. 2. Пример сетки на основе восьмидеревьев со сколотыми ячейками с локальным сгущением к скважине в слоистой области сложной структуры

На рис. 2 показано локальное сгущение сетки к фильтру скважины. В процессе измельчения нужная ячейка дробится на восемь гексаэдров. Соседние ячейки не могут отличаться более чем на один уровень разбиения. Технология *скалывания* ячеек позволяет адаптировать сетку к сложным границам области или поверхностям кровель и подошв геологических слоев. В результате в сетке присутствуют гексаэдры и многогранники. Многогранники образуются после скалывания гексаэдральных ячеек поверхностями. Кроме того, ячейки более низкого уровня измельчения (более крупные), граничащие с ячейками более высокого уровня (более мелкими), трактуются в коде как топологические многогранники, в которых некоторые плоские грани могут быть разбиты на четыре.

Дискретизация математических моделей. Вышеописанный класс сеток предъявляет существенные требования к методам дискретизации. Так, использование хорошо развитых традиционных методов конечных разностей и конечных элементов уже не представляется возможным либо затруднительно. В комплексе GeRa для дискретизации основных дифференциальных операторов применяются методы конечных объемов (МКО). Их достоинствами, помимо применимости на произвольных конформных сетках с произвольными исходными данными, являются простота вычисления потоков (жидкости или примеси) через грани ячеек сетки, локальная и глобальная консервативность.

Рассмотрим подробнее построение аппроксимаций операторов диффузии (они также используются в задаче фильтрации) и переноса, которые составляют основу дискретизации задач геофильтрации и геомиграции.

В комплексе GeRa для дискретизации оператора диффузии пользователю на выбор предлагается несколько методов.

Первый метод — это простейшая и широко распространенная двухточечная схема аппроксимации потоков (TPFA — Two-Point Flux Approximation) [11]. Главным достоинством традиционной двухточечной схемы является ее простота, вычислительная дешевизна и надежность: она всегда позволяет получить численное решение задачи. Однако она не обеспечивает аппроксимации на сетках, не обладающих свойством K -ортогональности [12], т. е. для таких сеток дает неснижаемую с измельчением пространственного шага ошибку, что сразу сужает ее область применимости. Включить эту схему в расчетный код следует по двум причинам: во-первых, она служит базовой схемой для сравнения; во-вторых, в ряде случаев возможность измельчения сетки отсутствует и ошибка в решении, полученном применением двухточечной схемы, хотя и является неснижаемой, но на заданной сетке может быть ниже, чем для некоторой другой схемы.

Второй метод — O -схема МКО с многоточечной аппроксимацией потока через грань (также кратко описана в работе [11]). На сегодняшний день этот метод является наиболее распростра-

ненным среди методов с многоточечной аппроксимацией потока. В некоторых работах доказана его сходимости для определенных классов сеток [13]. Метод имеет второй порядок точности по пространству, однако матрицы создаваемых СЛАУ обычно недостаточно разрежены в силу того, что шаблон аппроксимации оператора на ячейке включает все соседние ячейки, имеющие хотя бы одну общую вершину с данной. При этом матрицы плохо обусловлены — решение СЛАУ может представлять трудности.

Третий метод — новый нелинейный метод конечных объемов (НМКО) [14, 15]. Его отличительной особенностью является монотонность в смысле неотрицательности получаемых решений. Это свойство очень важно при расчете химических взаимодействий и радиоактивного распада: наличие отрицательных концентраций веществ, свойственное общепринятым методам, ведет к появлению нефизических источников и нарушению консервативности расчетов. При этом метод обладает минимальным шаблоном аппроксимации потока — двухточечным, а также вторым порядком точности по пространству. "Цена" достоинств схемы — зависимость коэффициентов в аппроксимации потока от значений искомой скалярной переменной (давления или концентрации) в соседних ячейках сетки. Это ведет к необходимости решения нелинейной задачи, которое осуществляется методом простой итерации (методом Пикара). Однако благодаря лучшим свойствам матриц (значительно меньшему числу ненулевых элементов, диагонально-преобладанию по столбцам, предположительно более низкому числу обусловленности), возникающих на каждой итерации решения СЛАУ, по скорости расчетов НМКО сравним с О-схемой МКО.

Для дискретизации оператора переноса предполагается использование схемы МКО с кусочно-линейным восстановлением решения на ячейках сетки [16], относящейся к классу TVD-схем (Total Variation Diminishing). Такие схемы позволяют получить второй порядок точности по пространству и высокое качество переноса фронтов концентрации загрязнителей, т. е. низкую численную диффузию. При необходимости быстрых расчетов можно будет воспользоваться дискретизацией оператора переноса на основе простейшего МКО с противопотоковой аппроксимацией (решение постоянно на ячейках сетки). Такой метод вносит высокую численную диффузию.

Для дискретизации по времени предполагается использовать либо неявные схемы, что позволит выбирать большие временные шаги, либо схемы расщепления по физическим процессам с явной аппроксимацией оператора адвекции и неявной аппроксимацией оператора диффузии [17, 18]. При явной аппроксимации адвекции возникает ограничение на шаг по времени, определяемое числом Куранта. Однако оно является естественным для задач, в которых требуется отслеживать фронт загрязнения. Схема расщепления позволяет для каждого из операторов использовать наиболее качественную аппроксимацию по выбору пользователя, а также разные шаги по времени для решения диффузионной и адвективной задач. Последнее важно в случае преобладающей адвекции: решение диффузионной задачи всегда вычислительно затратно, и имеет смысл выбирать как можно больший шаг.

Расчет геохимических взаимодействий.

Большой объем накопленных экспериментальных и теоретических исследований (см. [8, 19]) свидетельствует о существенной и в ряде случаев определяющей роли геохимических процессов в динамике распространения загрязнений. На сегодняшний день наблюдается тенденция к переходу от упрощенных K_d -моделей сорбции радионуклидов к моделям, позволяющим рассчитывать химические превращения в системе вода—порода. Такие модели могут применяться как для обоснования и вычисления коэффициента распределения K_d в моделях переноса с учетом сорбции на основе традиционных изотерм Генри, Ленгмюра и Френдлиха [19], так и непосредственно для расчетов химических превращений при моделировании (см., например, [20, 21]). В комплексе GeRa планируется использование как равновесных сорбционных моделей с классическими изотермами сорбции, так и моделей с реальным расчетом химических взаимодействий. В первом случае будут применяться подпрограммы разработки ИБРАЭ, во втором случае — сторонний пакет, с наибольшей вероятностью PHREEQC [22]. С помощью такой комбинации транспортного и химического кодов будут рассчитываться задачи с равновесными и, при необходимости, неравновесными геохимическими процессами.

Использование MPI-платформы. GeRa изначально проектируется как *параллельный*

расчетный комплекс, поэтому он должен базироваться на программной MPI-платформе для параллельного хранения, разбиения сеток и выполнения базовых операций с сетками и данными на них. В результате оценки возможностей эффективного использования существующих параллельных платформ (FMDB, MSTK, Salome, OpenFOAM) [23] были выявлены их существенные недостатки с точки зрения интеграции в GeRa: невозможность или чрезвычайная трудоемкость дополнения платформы собственными разработками (Salome, OpenFOAM), ошибки (MOAB) или недостаточная проработка параллельной реализации (MSTK). В связи с этим разработана собственная программная MPI-платформа [23], ориентированная на поддержку трехмерных сеток с произвольными многогранными ячейками.

Хранение и обработка данных. Для хранения геологической информации, данных мониторинга, граничных условий модели и др. все программные комплексы используют собственные базы данных, имеющие разные форматы. Информация в таких базах хранится в текстовом, бинарном, графическом и других видах. Хранимую информацию можно разделить на четыре блока:

- 1) неизменяемая во времени (геологические данные и пр.);
- 2) изменяемая со временем (данные мониторинга, граничные условия и пр.);
- 3) результаты расчетов;
- 4) параметрическая база знаний.

Первые три блока в комплексе GeRa будут "привязаны" к отдельным проектам, а четвертый блок будет общим для всех проектов и может использоваться самостоятельно. В соответствии с современными международными подходами параметрическая база знаний будет включать данные о свойствах геологической среды, общих характеристиках пунктов захоронения РАО, сценарные варианты расчета, результаты экспериментальных исследований и т. д.

Решение больших СЛАУ. Как уже упоминалось, моделирование крупномасштабных задач геофильтрации и геомиграции радионуклидов требует решения больших СЛАУ. Особенности геологических сред (геометрическая анизотропия слоев, неоднородность и анизотропия параметров) приводят к плохо обусловленным

матрицам линейных систем, получаемым в результате дискретизации дифференциальных задач. Для их решения наиболее эффективно использование итерационных методов на подпространствах Крылова (методы сопряженных градиентов, обобщенных минимальных невязок, бисопряженных градиентов) с переобуславливанием, допускающих эффективную параллелизацию. В комплекс GeRa интегрирован свободно распространяемый пакет параллельных решателей PETSc [24], в который уже включены необходимые итерационные методы решения СЛАУ, переобуславливатели на основе неполной факторизации ILU(k), прямые параллелизуемые методы и др.

При решении реальных задач эффективность переобуславливателей из PETSc не всегда достаточна для обеспечения сходимости итераций, поэтому в GeRa внедряется параллелизуемый переобуславливатель собственной разработки на основе метода BILU2 [25]. Он уже показал высокую эффективность, в частности, для матриц, полученных в результате дискретизации оператора диффузии с помощью O-схемы МКО. Этот переобуславливатель является комбинацией методов неполного обратного треугольного разложения (BILU) и приближенной треугольной факторизации второго порядка (ILU2). Первая часть используется для разбиения задачи на независимые вычислительные подзадачи при параллелизации, вторая — для решения этих подзадач локально на каждом процессоре.

Калибровка моделей. После получения результатов моделирования возникают вопросы соответствия модели объекту и достоверности сделанных прогнозов, а также уточнения параметров (калибрации), в измерениях которых присутствуют неопределенности. Под калибрацией модели понимается процедура выбора вектора параметров модели, который наилучшим образом удовлетворяет неким заданным критериям сходства модельных результатов и натуральных данных. Для калибровки и оценки чувствительности моделей представляется разумным использование имеющихся в открытом доступе программных средств, к примеру, программы PEST [26], которая на сегодняшний день является наиболее распространенной в гидрогеологическом моделировании.

Оценка достоверности прогнозов заключается в анализе неопределенностей результатов моделирования, полученных на ранее откалиброван-

ной модели. Эти неопределенности, в свою очередь, связаны с неопределенностями в параметрах модели.

Для выполнения прогнозов геомиграции радионуклидов при захоронении РАО в геологической среде оценка достоверности имеет кардинальное значение в связи с тем, что период наблюдений, по которому строится и калибруется модель, на порядки меньше требуемых прогнозных периодов. В связи с этим часть параметров не может быть откалибрована по данным наблюдений, а имеющаяся исходная информация о параметрах не позволяет задать их точно в каждой ячейке расчетной модели.

Для оценки достоверности в таких случаях будет использован стохастический подход. Он базируется на многократном геостатистическом моделировании полей входных параметров на основе имеющейся исходной информации. Для каждого из полученных случайных полей проводится прогнозное моделирование с последующим статистическим анализом результатов. Таким образом, устанавливается связь вероятностных характеристик результата прогноза с неопределенностью поля исследуемого параметра.

Графический интерфейс. Основным отличием "промышленного" расчетного комплекса

от исследовательского расчетного кода является наличие пользовательского графического интерфейса. Как показывает опыт, множество кодов не стало рабочим инструментом гидрогеологов по причине его фактического отсутствия и организации ввода-вывода через файлы, что может быть оправданно только на стадии разработки кода.

При разработке GeRa принципиально большое внимание уделяется пользовательской оболочке. Интерфейс GeRa (рис. 3) интегрирует все расчетные и сервисные модули комплекса, предоставляет средства задания исходных данных, управления процессом моделирования и постобработки результатов расчетов [23]. В нем поддерживается работа с двумерными (левое графическое окно на рис. 3) и трехмерными (правое окно на рис. 3) объектами. Визуализация решения основана на использовании библиотеки VTK [27].

Заключение

Изложена концепция создания и использования современного расчетного комплекса GeRa для решения задач геофильтрации и геомиграции радионуклидов. Ключевые достоинства комплекса — широкий спектр моделируе-

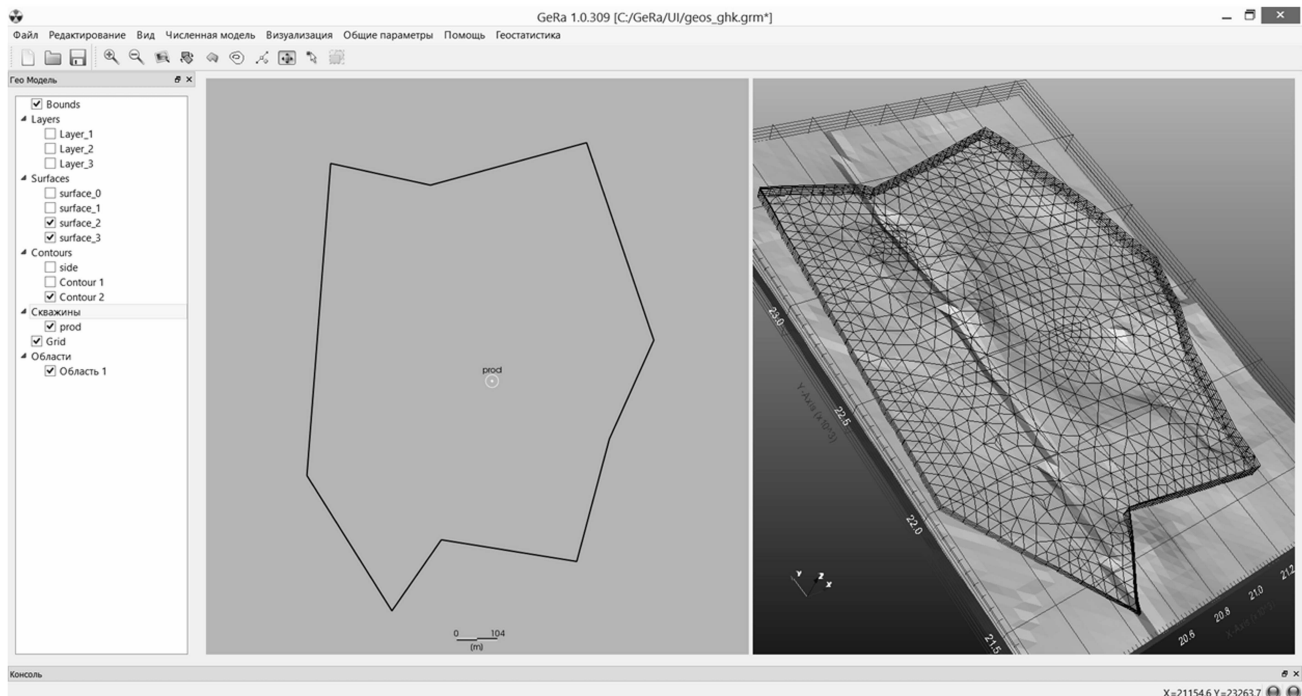


Рис. 3. Графический интерфейс расчетного комплекса GeRa (текущая версия)

мых процессов, использование современных вычислительных методов и ориентация на решение проблем завершающих стадий ЗЯТЦ, включая обоснование безопасности.

Комплекс GeRa направлен на обеспечение полной последовательности действий пользователя при создании и использовании моделей геофильтрации и геомиграции.

При создании GeRa применяется "экономный" подход. Он заключается в максимально возможном использовании имеющихся в открытом доступе протестированных программных средств: ParMetis [28] и Zoltan [29] — для разбиения сеток и распределения данных по процессорам; PETSc [24] — для параллельного решения больших СЛАУ (переобуславливание и итерационные методы); PEST [30] — для калибровки моделей и оценки чувствительности; PHREEQC [22] — для расчетов геохимических взаимодействий. При этом усилия разработчиков направляются на области, в которых возможно существенное улучшение результатов по сравнению с существующими программами: мультифизические модели, высокоточные численные методы, современный графический интерфейс, приложения для российских объектов.

В соответствии с графиком работ к середине 2014 г. планируется подготовка первой рабочей версии кода и ее передача в опытную эксплуатацию. В 2015 г. предполагается проведение верификации комплекса и подача документов на аттестацию первой версии GeRa.

Работа выполнена в рамках проекта "Коды нового поколения" проекта "ПРОРЫВ" ГК Росатом и частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований (№ 12-01-33084).

Список литературы

1. Лопаткин А. В., Величкин В. И., Никителов Б. В., Полуэктов П. П. Радиационная эквивалентность и природоподобие при обращении с радиоактивными отходами // Атомная энергия. 2002. Т. 92, № 4. С. 308—317.
2. Адамов Е. О., Ганев И. Х., Лопаткин А. В. и др. Трансмутационный топливный цикл в крупномасштабной ядерной энергетике России. М.: ГУП НИКИЭТ, 1999.
3. Спириин Е. В., Спиридонов С. И., Алексахин Р. М., Уткин С. С. Радиэкологическая оценка уранового месторождения для обоснования радиационно-миграционного баланса долгоживущих отходов // Атомная энергия. 2013. Т. 114, № 1. С. 34—39.
4. Уткин С. С., Капырин И. В. Некоторые принципиальные вопросы обоснования экологической безопасности захоронения радиоактивных отходов // XLI Радиэкологические чтения В. М. Ключковского. Обнинск, 4 декабря 2012 г. / Под ред. акад. Р. М. Алексахина. Обнинск: ГНУ ВНИИС-ХРАЭ, 2013. С. 11—36.
5. Алексахин А. И., Глаголев А. В., Дрожко Е. Г. Водоем-9 — хранилище жидких радиоактивных отходов и воздействие его на геологическую среду / Под ред. Е. Г. Дрожко, Б. Г. Самсонова. М.: Росатом, 2007.
6. Базин А. А., Бакулин В. Е., Горев В. В. и др. Пакет программ НИМФА: численное моделирование течений в пористых средах // Мат. всерос. конф. по математическому моделированию в гидрогеологии. г. Пахра Московской обл. 23—25 апреля 2008 г.
7. Panday S., Langevin C. D., Niswonger R. G. et al. 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. <http://pubs.usgs.gov/tm/06/a45/>.
8. ASCEM Phase I Demonstration. http://esd.lbl.gov/files/about/staff/susanhubbard/ASCEM_Phase_I_Demonstration_signed_1-11-11.pdf.
9. Danilov A. Unstructured tetrahedral mesh generation technology // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 2010. Т. 50, № 1. С. 146—163.
10. Ani2d. <http://sourceforge.net/projects/ani2d/>.
11. Aavatsmark I. Interpretation of a two-point flux stencil for skew parallelogram grids // Computational Geosciences. 2007. Vol. 11. P. 199—206.
12. Edwards M. G., Rogers C. F. Finite volume discretization with imposed flux continuity for the general tensor pressure equation // Ibid. 1998. Vol. 2, No 4. P. 259—290.
13. Agelas L., Masson R. Convergence of the finite volume MPFA O scheme for heterogeneous

- anisotropic diffusion problems on general meshes // *Comptes Rendus Mathematique*. 2008. Vol. 346, No 17–18. P. 1007–1012.
14. *Danilov A., Vassilevski Yu.* A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes // *Russ. J. Num. Anal. Math. Modelling*. 2009. Vol. 24, No 3. P. 207–227.
 15. *Danilov A., Vassilevski Yu.* Benchmark 3d: A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on polyhedral meshes // *Finite Volumes for Complex Applications VI: Problems & Perspectives*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. P. 993–1003.
 16. *Nikitin K., Vassilevski Yu.* A monotone nonlinear finite volume method for advection-diffusion equations on unstructured polyhedral meshes in 3D // *Russ. J. Num. Anal. and Math. Modeling*. 2010. Vol. 25, No 4. P. 335–358.
 17. *Василевский Ю. В., Капырин И. В.* Две схемы расщепления для нестационарной задачи конвекции-диффузии на тетраэдральных сетках // *Журнал вычисл. мат. и мат. физ.* 2008. Т. 48, № 8. С. 1–19.
 18. *Vassilevski Yu., Danilov A., Kapurin I., Nikitin K.* Application of nonlinear monotone finite volume schemes to advection-diffusion problems // *Finite Volumes for Complex Applications VI: Problems & Perspectives*. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2011. P. 761–769.
 19. Thermodynamic Sorption Modeling in Support of Radioactive Waste Disposal Safety Cases: NEA Sorption Project Phase III. Paris: OECD Publishing, 2012.
 20. *Montarnal Ph., Dimier A., Diville E. et al.* Coupling methodology within the software platform alliances // *Proc. of Int. Conf. on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*. <http://arxiv.org/ftp/cs/papers/0611/0611127.pdf>.
 21. *Šimůnek J., Jacques D., van Genuchten M., Mallants D.* Multicomponent geochemical transport modeling using HYDRUS-1D and HP1 // *J. American Water Resources Association*. 2006. Vol. 46, No 6. P. 1537–1547.
 22. *Parkhurst D. L., Appelo C. A. J.* Users' Guide to PHREEQ — a Computer Program for Speciation, Reaction-Path, 1D-transport and Inverse Geochemical Calculations. US Geological Survey Water Resources Investigations Report. 1999.
 23. *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.: Изд-во Московского университета, 2013.
 24. PETSc. <http://www.mcs.anl.gov/petsc/>.
 25. *Kaporin I. E., Konshin I. N.* A parallel block overlap preconditioning with inexact submatrix inversion for linear elasticity problems // *J. Numer. Lin. Alg. Appl.* 2002. Vol. 9, No 2. P. 141–162.
 26. *Doherty J., Hunt R.* Approaches to Highly Parameterized Inversion — A Guide to Using PEST for Groundwater-Model Calibration. US Geological Survey Scientific Investigations Report 2010-5169.
 27. *Schroeder W., Martin K., Avila L., Law C.* The Visualization Toolkit User's Guide. New York: Kitware Inc., 2001.
 28. ParMetis. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/parmetis/overview>.
 29. Zoltan. <http://www.cs.sandia.gov/zoltan/>.
 30. PEST. <http://www.pesthomepage.org/>.

Статья поступила в редакцию 17.01.14.