

## РАСЧЕТНЫЕ КОДЫ ДЛЯ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ В ЗАДАЧАХ ОЦЕНКИ БЕЗОПАСНОСТИ ОИАЭ

И. В. Капырин<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

<sup>2</sup>Институт вычислительной математики им. Г. И. Марчука РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 16 мая 2022 г.

*Статья посвящена анализу современных тенденций в разработке и использовании программных комплексов трехмерного гидрогеологического моделирования. Выполнен аналитический обзор наиболее современных и широко распространенных проектов, хода их развития, реализованных моделей и используемых численных методов. Определен круг характерных задач российской атомной отрасли, требующих создания численных геофильтрационных и геомиграционных моделей. Использование современных вычислительных технологий демонстрируется на примере расчетов модели полигона глубинного захоронения жидких радиоактивных отходов (ПГЗ ЖРО) в программном комплексе GeRa. Определены пути дальнейшего развития программных комплексов с учетом российских потребностей в создании пунктов приповерхностного захоронения радиоактивных отходов (ППЗРО) и пунктов глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО), выводе из эксплуатации, а также накопленного опыта эксплуатации пунктов хранения радиоактивных отходов (РАО) и мировых тенденций в разработке кодов.*

**Ключевые слова:** гидрогеологическое моделирование, геомиграция радионуклидов, комплексы программ, фильтрация, мультифизические модели, радиоактивные отходы.

### Введение

Гидрогеологическое моделирование является на сегодняшний день ключевым элементом оценки безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов (ПЗРО) и объектов ядерного наследия (ОЯН), поскольку возможный перенос радионуклидов в подземных водах рассматривается как основной путь их распространения в окружающей среде. Стандартом на сегодняшний день является создание гидрогеологических моделей в специализированных программах, обеспечивающих средства схематизации, численного решения соответствующих уравнений фильтрации, массо- и теплопереноса

и анализа результатов. Эти модели позволяют оценивать структуру фильтрационного потока и скорость переноса примесей в подземных водах, прогнозировать миграцию веществ и эффекты от технических решений (противофильтрационных и противомиграционных барьеров, покрывающих экранов, дренажей и др.).

Целью настоящей статьи является обзор современных тенденций в создании программ гидрогеологического моделирования на основе анализа ведущих мировых разработок и актуальных задач оценки безопасности ОИАЭ, стоящих перед российской атомной отраслью.

Заметим здесь, что помимо программ трехмерного моделирования при оценке безопасности объектов часто используются так называемые камерные модели, реализуемые в таких программах, как ECOLEGO (аттестованная программа), AMBER и GoldSim. Они весьма просты в освоении и позволяют легко выстраивать сложные цепочки переноса загрязнения от его источника вплоть до биосферы и человека с учетом переменных во времени параметров сред и объектов, а также быстро оценивать неопределенности. Однако следует четко понимать их ограничения: потоки, в которых происходит перенос загрязнения, должны быть рассчитаны с помощью внешних программных средств, а концентрация загрязнения усредняется в рамках каждой камеры, что способно привести к занижению расчетной концентрации в конечной точке на порядки.

В настоящей работе рассматриваются программы, предназначенные для трехмерного гидрогеологического моделирования. Статья построена следующим образом: в первом разделе дан обзор современных программ гидрогеологического моделирования, используемых при оценке безопасности объектов использования атомной энергии (ОИАЭ); во втором разделе рассмотрены актуальные задачи российской атомной отрасли, для решения которых требуется гидрогеологическое моделирование; на основе первых двух разделов в третьем разделе формулируются основные направления развития программ и приводятся некоторые характерные примеры их использования; в заключении делаются выводы о перспективах их развития.

### Программы трехмерного гидрогеологического моделирования

История существования таких программ насчитывает не менее 50 лет. Так, разработка наиболее распространенных в мире на сегодняшний день программ была начата в 70-х (FEFLOW[01]) и 80-х (семейство MODFLOW[2], TOUGH[3]) годах XX столетия.

Программа MODFLOW создана Геологической службой США (USGS). Работы над ней были начаты в 1981 году, а первый релиз вышел в 1984-м. На сегодняшний день именно эта программа используется наиболее часто при оценке запасов подземных вод, обосновании зон санитарной охраны водозаборов и при решении других задач, связанных с водопользованием. Столь высокая популярность объясняется несколькими факторами. Во-первых, программа построена по модульному принципу. В начале разработки

она состояла из модулей двух типов: «формулировок», в которых производилась дискретизация математических моделей, и «решателей», позволявших решать сформулированные в модулях первого типа линейные и нелинейные задачи. В дальнейшем, когда потребовалась интеграция расчета задач переноса и калибровки, модулями программы стали модели отдельных процессов. Такой подход с едиными правилами программирования модулей и понятными интерфейсами их взаимодействия обеспечил легкость при добавлении в нее новых возможностей с использованием отдельных модулей. Во-вторых, исходный код программы всегда был открытым, что позволяло множеству специалистов создавать свои специализированные модули, графические оболочки и программы, включавшие MODFLOW в качестве расчетного ядра. Среди них стоит отметить: MT3D — для расчета задач массопереноса, MODPATH — для построения траекторий частиц, SEAWAT — для расчета задач плотностной конвекции, графические интерфейсы Visual MODFLOW, Processing MODFLOW, Groundwater modeling system (GMS). Отметим, что, в отличие от самого расчетного ядра MODFLOW, современные графические интерфейсы являются коммерческими программами.

На сегодняшний день USGS поддерживает две центральных версии MODFLOW: MODFLOW-2005 и MODFLOW 6. Первая является основной «рабочей» программой и представляет собой классическую версию, основанную на дискретизации задач фильтрации и переноса методом конечных объемов/конечных разностей (control volume finite differences) на прямоугольных гексаэдральных сетках. Вторая находится в стадии активной разработки, в ней реализуются возможности расчета фильтрации и переноса на неструктурированных сетках, параллельных расчетов с использованием MPI, интегрируется модуль расчета течений растворов переменной плотности. MODFLOW 6 написана с чистого листа с использованием объектно-ориентированного подхода и позволяет сопрягать различные процессы как путем последовательного решения отдельных подзадач, так и объединения в общую систему уравнений. Помимо двух центральных версий, USGS поддерживает несколько продвинутых специализированных пакетов: MODFLOW-USG — для расчетов на неструктурированных сетках; MOFLOW-NWT — для расчетов задач фильтрации в безнапорных условиях с использованием метода Ньютона и сглаживания нелинейных зависимостей; GSFLOW — для совместного моделирования течения подземных и поверхностных вод; MT3D-USGS — для расчета

переноса примесей; SEAWAT — для расчета течений растворов переменной плотности и др. После отработки вычислительных технологий в таких пакетах они со временем входят в центральную версию.

Также широкое распространение среди гидрогеологов получила программа FEFLOW [1] — наиболее успешный коммерческий гидрогеологический код. Его разработка была начата в конце 1970-х годов. Дискретизации в FEFLOW основаны на использовании метода конечных элементов на слоистых призматических либо полностью неструктурированных тетраэдральных сетках. Программа снабжена удобным графическим интерфейсом, большим объемом учебной литературы и научных публикаций, а также качественных демонстрационных и учебных видеороликов в открытом доступе, что, наряду с широкими возможностями моделирования, определяет ее привлекательность для пользователей. FEFLOW ориентирована на применение персональных ЭВМ (систем с общей памятью) с возможным задействованием многоядерной архитектуры процессора. В ней реализован расчет фильтрации в режимах переменной насыщенности, тепло- и массопереноса, в том числе с учетом химических взаимодействий на основе сопряжения с PHREEQC [4]. Возможен совместный расчет динамики подземных и поверхностных вод при сопряжении программ FEFLOW и MIKE. Учет трещин и разломов реализован с помощью инструмента кондуитов (быстрых каналов).

В сфере задач оценки безопасности ОИАЭ большое распространение получила программа моделирования широкого профиля — COMSOL Multiphysics [5]. Ее преимуществами являются возможности построения широкого спектра мультифизических моделей (механика, гидродинамика, теплопередача и т. д.) и высокоуровневый графический интерфейс. В COMSOL использован метод конечных элементов, включая разрывный метод Галеркина (Discontinuous Galerkin) и неструктурированные сетки со смешанным типом ячеек (тетраэдры, гексаэдры, призмы, пирамиды), имеются интерфейсы для сопряжения с геохимическим модулем PHREEQC [6, 7].

Одной из наиболее продвинутых в части численных моделей программ является TOUGH [8], разрабатываемая с начала 1980-х годов Лабораторией Беркли, США, и в которой реализовано моделирование многофазных многокомпонентных течений. Применение для решения нелинейных задач метода Ньютона с приближенным численным расчетом якобиана позволило внедрить в TOUGH множество сложных моделей.

Базовые возможности TOUGH позволяют использовать либо декартовы (прямоугольные) сетки, либо радиально-симметричные, однако имеются также внешние генераторы сеток, позволяющие строить неструктурированные сетки для расчетов в этой программе. Дискретизация основана на интегральном методе конечных разностей (integral finite difference). Использование неявной схемы Эйлера и простейшей противопотоковой аппроксимации конвективных членов, обеспечивая безусловную устойчивость, приводит к высокой численной дисперсии расчетных схем. В последней версии программы, TOUGH3 [9], упор сделан на вычислительную эффективность: массивно-параллельные расчеты и эффективные линейные решатели. Сама по себе эта программа весьма сложна в освоении, ввод-вывод осуществляется с помощью файлов. Графический интерфейс не входит в базовую поставку TOUGH, есть некоторые коммерческие версии графического интерфейса, предлагаемые сторонними компаниями.

При моделировании процессов фильтрации и переноса в насыщенно-ненасыщенных условиях может быть использована программа HYDRUS [10]. Ее основным предназначением является моделирование течения, массо- и теплопереноса в зоне аэрации (преимущественно для задач сельского хозяйства). Основной упор сделан на возможности учета гидрофизических свойств пород, особенностях поглощения влаги растениями из почвы. Программа ориентирована на персональные ЭВМ, использует метод конечных элементов на сетках со смешанным типом ячеек. В HYDRUS учет трещиноватости среды возможен с помощью моделей двойной пористости и двойной проницаемости. Поскольку данная программа предназначена преимущественно для решения задач фильтрации и переноса в почвенном слое, построение в ней трехмерных геологических моделей сложных пластовых комплексов затруднительно.

Наряду с вышеперечисленными разработками, история которых насчитывает 30 и более лет, отметим и некоторые более новые программы, которые еще не успели приобрести такой популярности, но используют наиболее современные подходы в программировании и использовании ЭВМ.

Так, в США развивается программный комплекс Amanzi (<https://amanzi.github.io>). Его разработка была начата в 2010 году в рамках проекта Департамента энергетики США (US DOE) ASCEM, нацеленного на решение задач по захоронению РАО и реабилитации территорий, относящихся к DOE. Она ведется рядом национальных

лабораторий США (LANL, LBNL, ORNL, PNNL), на ранней стадии в проекте ASCEM также участвовал ИБРАЭ РАН. Amanzi предназначен для моделирования неизотермических процессов фильтрации и переноса в условиях переменной насыщенности с использованием персональных и массивно-параллельных ЭВМ [11]. Комплекс предусматривает гибкие средства мультифизического моделирования, к примеру, возможно подключение внешних модулей геохимических расчетов PFLOTRAN и CrunchFlow. Дискретизация выполняется на сетках с многогранными ячейками различными способами: линейным и нелинейным методами конечных объемов, методом опорных операторов (mimetic finite difference). Упор в разработке сделан на использовании наиболее современных пакетов для массивно-параллельного решения задач: платформы MSTK для сеток и данных на них; пакетов эффективных линейных решателей Trilinos, PETSc (<https://petsc.org>) и HYPRE. Исходный код Amanzi является открытым. Впоследствии он был сопряжен с программой ATS для совместного моделирования динамики подземных и поверхностных вод [12], включая процессы замораживания и оттаивания [13]. Среди самых последних нововведений Amanzi — возможность расчета течения и переноса в трещиновато-пористой среде на основе DFM-подхода (Discrete Fracture and Matrix) [14]. С помощью Amanzi выполнены расчеты для ряда ядерно и радиационно опасных объектов (ЯРОО) в США (в штате Невада, в Саванна Ривер).

Программа PFLOTRAN [15] является еще одной передовой разработкой с открытым исходным кодом, поддерживаемой группой национальных лабораторий США (Лос-Аламосская, Окриджская, Тихоокеанская северо-западная, Сандиа) и рядом других организаций. Она ориентирована в первую очередь, на массивно-параллельные ЭВМ. К настоящему моменту она тестировалась при расчетах на сотнях тысяч ( $2^{18}$ ) узлов для задач на сетках, содержащих до 2 миллиардов ячеек. PFLOTRAN предназначена для моделирования многофазных многокомпонентных потоков с химическими взаимодействиями в пористой среде и в дискретной системе трещин (DFN). Для расчета переноса с химическими взаимодействиями может быть использована как полностью неявная схема с методом Ньютона, так и схема расщепления. В настоящее время ведется разработка сопряжения подземных и поверхностных вод, моделей геомеханики и мультисконтинуальных. Насколько известно автору, PFLOTRAN не имеет собственного графического интерфейса. Дискретизации осуществляются

методом конечных объемов с использованием двухточечной схемы аппроксимации потока на структурированных и неструктурированных сетках.

Программа OpenGeoSys разрабатывается международным сообществом, большинство членов которого работает в Германии. Создание последней версии этой программы было начато в 2011 году, когда обнаружилось трудности в дальнейшем развитии предшествующей версии, вызванные сложностью в доработках программы для пользователей многократным дублированием кода [16]. Программа предназначена для моделирования тепло-гидро-механико-химических процессов (ТНМС) в поровых и трещиноватых средах. Она многократно использовалась для задач, связанных с безопасностью пунктов захоронения РАО (например, в проектах MoMaS, DECOVALEX, SEALEX, Mont Terri, см. [17] и другие книги этой серии). Для дискретизации используется метод конечных элементов и неструктурированные сетки [18]. OpenGeoSys представляет собой вычислительное ядро, запускаемое из командной строки. Для удобства решения практических задач предлагается использовать отдельные препроцессоры — сторонние пакеты для создания расчетных сеток GMSH ([www.gmsh.info](http://www.gmsh.info)) и TetGen ([www.berlios.de/software/tetgen/](http://www.berlios.de/software/tetgen/)), PETSc — для эффективного решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), постпроцессор ParaView ([www.paraview.org](http://www.paraview.org)) — для визуализации результатов. OpenGeoSys распространяется по BSD-лицензии, позволяющей свободно использовать ее исходный код при создании коммерческих приложений.

В научных публикациях (к примеру, [19, 20]) также часто встречается программа ParFlow (<https://parflow.org>). Ее основное предназначение — моделирование водного баланса больших территорий, включая течение подземных и поверхностных вод, осадки, эвапотранспирацию. На сегодняшний день расчеты в ней выполняются на ортогональных структурированных сетках, основной упор сделан на массивно-параллельные расчеты. Продемонстрирована параллельная эффективность при работе более чем на 100 тысячах вычислительных ядер. С помощью ParFlow были построены континентальные гидрологические модели для США и Западной Европы, модели крупных водосборных площадей. В ней совместно симулируются течение в поровой среде с переменной насыщенностью на основе уравнения Ричардса и поверхностный сток на основе уравнений мелкой воды. Программа разрабатывается более 20 лет в рамках крупной международной кооперации, в которой

участвуют 10 научных и образовательных организаций из Европы и США, исходный код является открытым. Схематизация задач для ParFlow выполняется с помощью текстовых файлов-скриптов, визуализация результатов осуществляется во внешней программе VisIt (<https://visit-dav.github.io>). В настоящее время в ParFlow ведутся разработки технологий построения адаптивных сеток, расчета траекторий частиц Лагранжевым методом и модели переноса с химическими взаимодействиями на основе схем высокого порядка для адвекции и геохимического модуля CRUNCH.

Последние три программы, PFLOTTRAN, OpenGeoSys и ParFlow, хотя и являются очень мощными расчетными инструментами, на сегодняшний день представляются в большей степени исследовательскими кодами, используемыми в основном учеными для отработки вычислительных технологий либо решения достаточно уникальных частных задач, а не рабочими инструментами гидрогеологов.

Среди российских программ гидрогеологического моделирования можно отметить две, активно развиваемые в настоящее время и используемые на практике: GeRa (<http://gera.ibrae.ac.ru>, разработка ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН с 2012 года) и НИМФА (<http://nimfa.vniief.ru>, разработка ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ» и ФГБУ «Гидроспецгеология» с 1998 года). Они имеют версии, аттестованные Ростехнадзором для использования при обосновании безопасности ОИАЭ, ориентированы на применение неструктурированных расчетных сеток, методов конечных объемов для пространственной дискретизации и расчетов как на персональных, так и на параллельных ЭВМ. В настоящее время эти программы позволяют моделировать процессы фильтрации, массо- и теплопереноса в поровых средах. Для пространственной дискретизации задач в НИМФА используются трехмерные неструктурированные сетки и метод конечных объемов [21]. К ее аттестованным возможностям относятся модели фильтрации в напорно-безнапорных и ненасыщенных условиях, конвективно-диффузионно-дисперсионного переноса с учетом равновесной сорбции по изотермам и радиоактивного распада. Также НИМФА имеет гидрологический модуль, позволяющий рассчитывать поверхностный сток и течение в открытых каналах прямоугольной формы, но без связи последних с подземными водами.

Отличительными особенностями GeRa, лидером разработки которой является автор, стали аттестованные функциональные возможности расчета переноса с химическими реакциями

(для этого использован современный геохимический модуль PHREEQCRM [4]), сопряженная модель подземного и поверхностного стока [22], модель двухфазной фильтрации вода—газ. Реализованы возможности учета достаточно специфических эффектов: зависимости коэффициента распределения примесей от концентрации одного из компонентов (например, нитрата), радиоактивного распада по цепочкам, радиогенного тепловыделения, переменных во времени параметров сред (последнее важно при моделировании ближней зоны ОИАЭ). GeRa снабжена пользовательским графическим интерфейсом, позволяющим полностью решить задачу оценки безопасности ОИАЭ в части потенциального загрязнения подземных вод: от построения геологической модели вплоть до расчета дозовых нагрузок для населения. Схематизация гидрогеологических условий выполняется независимо от сетки, что позволяет легко ее изменять при необходимости. Параллелизация реализована с помощью библиотеки MPI [23]. Для эффективной одновременной работы с сетками и данными на них, сборки и решения СЛАУ используется свободно распространяемая программная платформа INMOST ([www.inmost.org](http://www.inmost.org), [24, 25]), разрабатываемая ИВМ РАН. Первая версия GeRa была аттестована в 2018 году и включала базовые возможности моделирования процессов фильтрации и переноса в поровых средах с переменной насыщенностью, допускала учет плотностной конвекции и химических взаимодействий в системе вода—порода (как по изотерме, так и с расчетом химических реакций). Во второй версии, аттестованной в 2021 году, добавились возможности моделирования сред с двойной пористостью, тепловых процессов, двухфазной фильтрации и поверхностного стока. С помощью этих программ были успешно реализованы модели для ряда объектов на площадках ФГУП «ПО «Маяк», ФГУП «ГХК», АО «СХК» и многих других (примеры применения — [26, 27]). В настоящее время идет разработка GeRa/V3, в которой создаются модели фильтрации и переноса в трещиноватых средах [28], ориентированные на оценку безопасности проектируемого ПГЗРО на участке «Енисейский», а также более продвинутые химические и гидрологические модели, удобные пользовательские инструменты для решения прикладных задач.

Сравнивая отечественные и зарубежные коды, можно констатировать, что в целом российские программы развиваются в соответствии с общемировыми тенденциями. Однако в российской практике совершенно не получила

распространения разработка программ с открытым кодом, хотя в США и Европе уже осознаны ее существенные плюсы: многократная всесторонняя проверка кода и документации, повышающая доверие к результатам; возможность привлечения сторонних специалистов к разработке, тестированию и решению сложных задач с помощью этих программ, написанию публикаций; использование продвинутых готовых пакетов с открытым кодом, распространяемых по copyleft-лицензиям.

### Актуальные задачи атомной отрасли

Основными сферами применения программ гидрогеологического моделирования в атомной отрасли являются задачи оценки безопасности пунктов захоронения и хранения РАО, а также выводимых из эксплуатации ЯРОО и реабилитации загрязненных территорий [29]. С точки зрения потребностей в моделировании можно выделить четыре категории объектов.

К первой категории относятся пункты хранения и пункты приповерхностного захоронения РАО. Они обычно характеризуются сравнительно небольшим (сотни лет) периодом оценки, связанным либо с коротким периодом потенциальной опасности, либо со сроком функционирования объекта. Для них характерно наличие системы инженерных барьеров безопасности (ИББ), требующей создания отдельной модели ближней зоны, что обычно требует учета процессов в зоне аэрации.

Второй категорией являются объекты, выводимые из эксплуатации по варианту консервации либо захоронения на месте: промышленные уран-графитовые реакторы (ПУГР) [30, 31]; промышленные водоемы-хранилища ЖРО [32, 33]; здания, загрязненные в ходе предшествующей деятельности. Поскольку все они находятся в приповерхностной зоне, геологическая среда обычно не может рассматриваться как надежный барьер безопасности. В то же время они могут характеризоваться большим периодом потенциальной опасности, поскольку содержат долгоживущие радионуклиды. Для их иммобилизации должны быть созданы ИББ, ограничивающие фильтрацию и миграцию радионуклидов [34]. При моделировании здесь должны рассматриваться значительно большие временные периоды, чем для первой категории, учитываться эволюция ИББ и протекающие в длительный период химические процессы.

К третьей категории относятся ПГЗ ЖРО: «Железногорский», «Северский», «Димитровградский» [35, 36]. Они характеризуются большим

объемом закачанных за годы эксплуатации отходов (миллионы, десятки миллионов кубометров), сложными химическими и биологическими процессами, протекающими в пластах-коллекторах, плотностной и тепловой конвекцией, требующими оценки и учета в моделях. Модели данных уникальных объектов, хотя и разрабатываются уже много десятилетий, требуют дальнейшего развития, так как на сегодня их долговременная безопасность обоснована полноценно только для сравнительно короткоживущих радионуклидов [35].

Четвертой категорией объектов является проектируемый ПГЗРО на участке «Енисейский» (Красноярский край) [37]. Здесь наиболее существенными вызовами являются трещиноватая структура массива гнейсов, наличие разрывных нарушений, скудность имеющихся исходных данных как о граничных условиях, так и о свойствах геологических пород. Фильтрационный поток в массиве приурочен к трещинам и разрывным нарушениям, что требует создания соответствующих численных моделей с использованием подходов DFN, DFM, EPM и SCM.

### Тенденции развития программ гидрогеологического моделирования

Подводя итоги выполненного выше анализа актуальных программ и задач гидрогеологического моделирования, можно выделить представленные ниже современные направления развития в этой области. Практически все программы ориентированы на использование неструктурированных расчетных сеток (рис. 1). Это позволяет гибко изменять их шаг по пространству, измельчая сетку в тех подобластях, где требуется высокая точность решения (например, в областях предполагаемого нахождения ореола загрязнения) или учет геометрически сложных объектов. В то же время в других зонах сетка остается достаточно грубой, с тем чтобы расчеты не были слишком долгими.

Еще одним направлением развития является выполнение расчетов на массивно-параллельных ЭВМ, что позволяет реализовывать задачи на более мелких сетках (как по пространству, так и по времени), на порядки ускорять расчеты, проводить решение обратных задач и оценку неопределенностей моделей, что требует их многократного запуска на счет. Параллелизация позволяет эффективно задействовать возможности современных многоядерных процессоров персональных ЭВМ, а также проводить расчеты «больших» задач на удаленных кластерах.

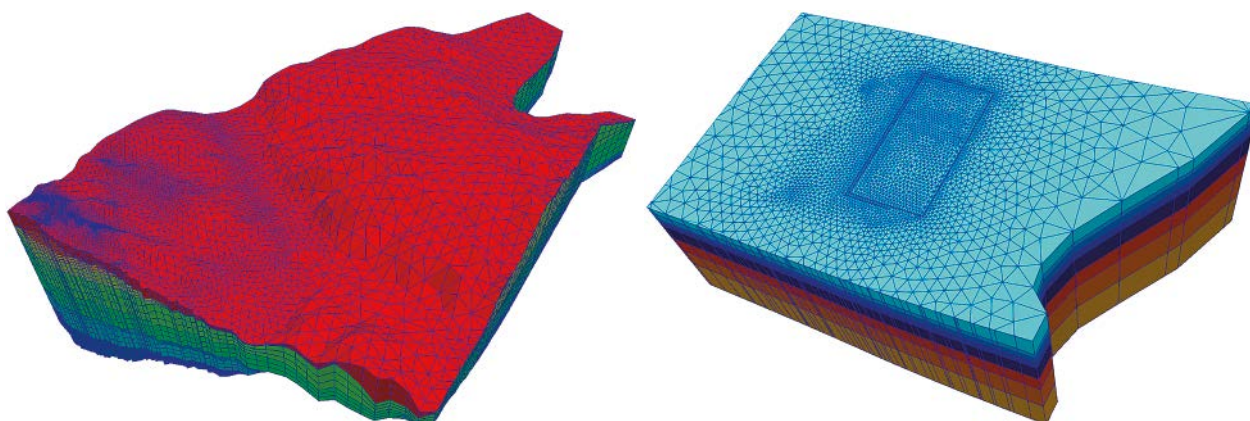


Рис. 1. Адаптивные неструктурированные сетки: слева – срез сетки модели ПГЗ ЖРО со сгущением к нагнетательным скважинам; справа – фрагмент сетки региональной модели, учитывающей двойную стену в грунте, окружающую промплоды

Активно развиваются мультифизические модели, позволяющие учесть процессы, ранее не включавшиеся в рассмотрение. Так, при моделировании ближней зоны ПЗРО необходимы ТНМС-модели [38]. В ряде случаев использование традиционных моделей сорбции примесей по изотермам недостаточно вследствие существенно меняющихся во времени химических условий и взаимовлияния отдельных веществ. Разрабатываются модели переноса с химическими, а также биологическими взаимодействиями, создание и использование которых возможно только в процессе междисциплинарных работ, при участии специалистов по гидрогеологии, численным методам и геохимии [39]. Такие модели особенно актуальны для ПГЗРО и ПГЗ ЖРО. Последние, к примеру, характеризуются высоким содержанием солей в закачиваемых растворах, что приводит к снижению сорбционной способности породы. В то же время биологические процессы, такие как нитратредукция, приводят к очищению подземных вод от нитрат-иона в долгосрочной перспективе. Данные процессы в будущем должны быть учтены в моделях для оценки безопасности ПГЗ ЖРО. В процессах замораживания и оттаивания это позволит решать гидрогеологические проблемы в Арктической зоне.

В качестве примера параллельных расчетов на адаптивных сетках для сложной модели, охватывающей большое количество сопряженных процессов, приведем расчет на GeRa задачи миграции высокоплотных ЖРО на полигоне «Железногорский», приведенной в работе [40]. В модели учитывается плотностная конвекция, двойная пористость среды, безнапорный режим фильтрации. Расчетная сетка содержит около 2,2 млн ячеек. С целью повышения точности при учете плотностной конвекции сетка

измельчена по вертикали в 9-м модельном слое (I эксплуатационном горизонте) и по горизонтали — в окрестности нагнетательных скважин. Задача имеет достаточно высокую сложность: моделирование на период в 44 года занимает сутки при параллельном расчете на 80 ядрах. Для этого использован кластер ИВМ РАН с вычислительными узлами Arbyte Alkazar R2Q50 G5, каждый из которых состоит из двух 20-ядерных процессоров Intel Xeon Gold 6230@2.10ГГц. Высокая сложность задачи связана с сильной неоднородностью параметров (коэффициент фильтрации изменяется на 6 порядков) и необходимостью итерационного решения вложенных нелинейных задач (плотностной конвекции и фильтрации в безнапорном режиме) методом простой итерации. Основное время расчета затрачивается на решение СЛАУ, необходимое на каждой итерации нелинейного решателя задачи фильтрации. Это связано, во-первых, с необходимостью использования очень «тяжелого» предобуславливателя для обеспечения сходимости процесса и, во-вторых, с медленной его сходимостью (для этого требуется от десятков до нескольких сотен итераций линейного решателя). Для решения СЛАУ использовался рестартированный итерационный метод GMRES(30) с распараллеливанием по аддитивному методу Шварца ASM(3) с тремя слоями перекрытия подобластей. Внутри каждой из них применялось неполное треугольное разложение ILU(8). Для анализа эффективности параллелизации выполнены расчеты на временной период в 5 лет на 10, 20, 40 и 80 вычислительных узлах.

На рис. 2 показано ускорение, получаемое при увеличении числа используемых вычислительных узлов, линейная зависимость приведена для сравнения как идеальный вариант. Данная задача достаточно эффективно распараллеливается,

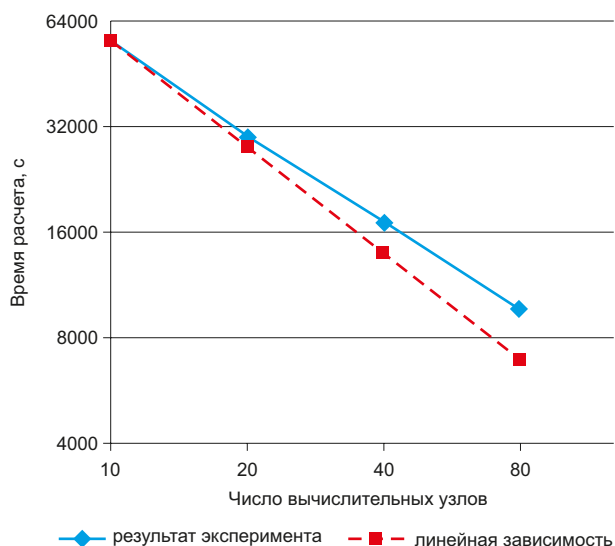


Рис. 2. Ускорение расчетов модели плотностной конвекции в ПГЗ ЖРО «Железногорский» на многопроцессорной ЭВМ

увеличение в 8 раз числа ядер дало ускорение в 5,76 раза. Отметим здесь, что расчет на 160 узлах с выбранными параметрами линейного решателя провести не удалось, поскольку качество предобуславливания оказалось недостаточным для обеспечения сходимости. Результаты расчета продемонстрированы на рис. 3.

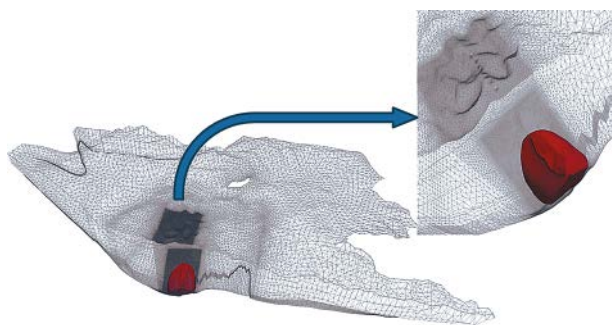


Рис. 3. Расчетный ореол распространения высокоплотного раствора нитрат-иона в эксплуатационном горизонте (увеличено в 10 раз по вертикали)

Данный пример наглядно демонстрирует еще одну тенденцию: поиск эффективных робастных решателей линейных и нелинейных задач. Использование неструктурированных сеток, анизотропия и неоднородность фильтрационных параметров, вертикально-горизонтальная анизотропия ячеек сетки и изменение относительной проницаемости среды вследствие переменной насыщенности приводят к чрезвычайно плохо обусловленным матрицам СЛАУ. Для их решения необходимы качественные параллелизуемые предобуславливатели. Решение

нелинейных задач при моделировании фильтрации в режимах переменной насыщенности (уравнение Ричардса или уравнения двухфазной фильтрации) представляет значительные трудности. Так, в обзорной статье [41] говорится, что на сегодняшний день не существует универсального робастного метода, гарантирующего решение и достаточную точность для всего спектра параметров сред, начальных и граничных условий, встречаемых на практике. Неоднородность параметров сред и разрывы производных в определяющих соотношениях приводят к необходимости выбора недопустимо малых шагов по времени либо вовсе к невозможности решить нелинейные задачи методами Ньютона или простой итерации. Для улучшения сходимости нелинейных решателей, к примеру, в MODFLOW-NWT реализовано сглаживание кусочно-линейных функциональных зависимостей [42], а разработчиками FEFLOW предложен метод замены главных переменных [1]. В GeRa выполнен ряд операций для решения подобных задач с помощью метода продолжения [43], однако поиск робастных и эффективных нелинейных решателей остается актуальной задачей.

Перспективы расположения ПГЗРО в кристаллических формациях требуют создания специализированных моделей, адекватно описывающих процессы фильтрации—переноса в трещиновато-пористых средах. Поскольку представление такой среды эквивалентной пористой не всегда возможно (это зависит от существования репрезентативного элементарного объема необходимого масштаба), развиваются модели DFN (Discrete fracture network) и DFM (Discrete fracture and matrix). Они позволяют в явном виде учитывать разрывные нарушения, а также на основе моделирования трещиноватой среды на малом масштабе рассчитывать ее характеристики на размере элементарного объема. Модели DFN предполагают течение растворов и перенос только по системе трещин (разрывных нарушений), в то время как в DFM также учитывается течение и перенос в матрице породы, влаго- и массообмен между трещинами и матрицей. Трещины представляются в этих моделях двумерными поверхностями.

Отдельно стоит обратить внимание на разработку моделей, необходимых в первую очередь для моделирования процессов переноса в системе ИББ. Среди них — модели коллоидного переноса [44] для учета возможной миграции радионуклидов на взвешенных частицах глиняного ИББ, модели необратимой сорбции и модели с изменяющимися во времени параметрами сред. Хотя на ряде объектов отмечена существенная



роль коллоидного переноса (пример — ПГЗ ЖРО «Северский», см. [44]), применение таких численных моделей на сегодня ограничено одномерными моделями и академическими исследованиями, но отсутствует в практике оценки безопасности ОИАЭ. Модели с переменными параметрами сред уже находят применение при описании ближней зоны в GeRa, в частности возможен учет меняющихся во времени коэффициентов фильтрации и распределения вследствие, к примеру, химической деградации бетонного ИББ. Значительно большую сложность представляют модели, которые позволят учесть изменение во времени фильтрационно-емкостных свойств пород. Отметим, что простота учета вариации пористости материала во времени при использовании камерных моделей таит в себе опасность нарушения закона сохранения массы либо нефизичных скачков концентрации в камерах и требует детального анализа.

При оценке безопасности ОИАЭ ключевым результатом обычно является пиковое значение удельной активности радионуклидов в точке предполагаемого водопользования. Эффект численной диффузии, присущий обыкновенно схемам дискретизации задач переноса, приводит к занижению расчетного предельного значения относительно реального. Так, ИБРАЭ РАН совместно с СПбО ИГЭ РАН было проведено сравнение решений кодом GeRa задачи конвективного переноса радионуклидов с аналитическим решением, полученным сотрудниками СПбО ИГЭ РАН [45]. Расчеты выполнялись на период времени в 2,7 млн лет в профильной постановке на достаточно мелкой сетке (размер ячеек 5 × 5 м) неявной схемой с шагом в 27 лет (всего 100 000 шагов). Как выяснилось, даже при выбранной подробной дискретизации задачи (и весьма продолжительном времени ее решения) расчетные пиковые значения удельной активности радионуклидов в воде на выходе из расчетной области оказались приблизительно в два раза ниже аналитических.

Борьба с эффектом численной диффузии заключается в измельчении сетки по пространству, уменьшении шага по времени и использовании схем дискретизации конвекции высокого порядка. Последние, однако, обычно являются явными и для устойчивости требуют использования достаточно малого временного шага, определяемого сеточным числом Куранта. С учетом необходимости расчетов на очень большие временные периоды, использование явных схем становится непозволительно затратным по времени. Соответственно, вопрос

разработки вычислительно эффективных методов дискретизации с низкой численной диффузией остается открытым.

## Заключение

Проведенный анализ зарубежных и российских программ гидрогеологического моделирования (как уже общепризнанных, так и наиболее новых разработок) позволил выделить основные тенденции развития данного направления. В части численных методов — это повышение эффективности и точности расчетов путем использования неструктурированных сеток, массивно-параллельных вычислений и новых решателей нелинейных и линейных систем алгебраических уравнений, разработки низкодиссипативных устойчивых расчетных схем. Касательно исследуемых процессов развитие связано с мультифизическим моделированием, объединением множества сопряженных процессов: гидрогеологических, гидрологических, тепловых, механических, химических и биологических (совместные модели подземного и поверхностного стока, ТНМС-модели и др.). Еще одним ключевым направлением эволюции программ является создание и верификация моделей фильтрации и переноса в трещиноватых средах, что особенно актуально для проекта ПГЗРО в кристаллическом массиве.

Создание отечественной программы GeRa ориентируется именно на вышеперечисленные мировые тенденции. Исключением является, пожалуй, отказ от открытия исходного кода, которое, по опыту зарубежных коллег, дает ощутимые преимущества в качестве и скорости разработки. В то же время существенным плюсом для разработки отечественных программ представляется большой накопленный атомной отраслью опыт создания, эксплуатации и мониторинга хранилищ РАО, ПГЗ ЖРО, барьеров безопасности.

## Литература

1. *Diersch H. J. G.* FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media. — Springer Science & Business Media, 2013.
2. *McDonald M. G., Harbaugh A. W.* The history of MODFLOW // Groundwater. 2003. Vol. 41. No. 2. Pp. 280—283.
3. *Pruess K., Oldenburg C. M., Moridis G. J.* TOUGH2 user's guide version 2. — Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), 1999. — No. LBNL—43134.

4. Parkhurst D. L., Wissmeier L. PhreeqcRM: A reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC // *Advances in Water Resources*. 2015. Vol. 83. Pp. 176–189. DOI: 10.1016/j.advwatres.2015.06.001.
5. Li Q. et al. COMSOL Multiphysics: A novel approach to ground water modeling // *Groundwater*. 2009. Vol. 47. No. 4. Pp. 480–487. DOI: 10.1111/j.1745-6584.2009.00584.x.
6. Nardi A. et al. Interface COMSOL-PHREEQC (iCP), an efficient numerical framework for the solution of coupled multiphysics and geochemistry // *Computers & Geosciences*. 2014. Vol. 69. Pp. 10–21.
7. Wissmeier L., Barry D. A. Simulation tool for variably saturated flow with comprehensive geochemical reactions in two- and three-dimensional domains // *Environmental Modelling & Software*. 2011. Vol. 26. No. 2. Pp. 210–218.
8. Pruess K. TOUGH2-A general-purpose numerical simulator for multiphase fluid and heat flow. 1991. 102 p.
9. Jung Y. et al. TOUGH3: A new efficient version of the TOUGH suite of multiphase flow and transport simulators // *Computers & Geosciences*. 2017. Vol. 108. Pp. 2–7.
10. Šimůnek J., Van Genuchten M. T., Šejna M. Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages // *Vadose Zone Journal*. 2016. Vol. 15. No. 7. P. vjz2016. 04.0033.
11. Freedman V. L. et al. A high-performance workflow system for subsurface simulation // *Environmental Modelling & Software*. 2014. Vol. 55. Pp. 176–189.
12. Coon E. T. et al. Coupling surface flow and subsurface flow in complex soil structures using mimetic finite differences // *Advances in Water Resources*. 2020. Vol. 144. P. 103701.
13. Jan A. et al. An intermediate-scale model for thermal hydrology in low-relief permafrost-affected landscapes // *Computational Geosciences*. 2018. Vol. 22. No. 1. Pp. 163–177.
14. Human J. D. et al. Flow and Transport in Three-Dimensional Discrete Fracture Matrix Models using Mimetic Finite Difference on a Conforming Multi-Dimensional Mesh // *arXiv preprint arXiv:2112.12592*. 2021.
15. 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. Vol. 50. No. 1. Pp. 208–228.
16. Bilke L. et al. Development of open-source porous media simulators: principles and experiences // *Transport in porous media*. 2019. Vol. 130. No. 1. Pp. 337–361.
17. Kolditz O. et al. Thermo-Hydro-Mechanical Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking. Vol. 25. — Berlin : Springer, 2016.
18. Wang W. et al. A parallel finite element method for two-phase flow processes in porous media: OpenGeoSys with PETSc // *Environmental Earth Sciences*. 2015. Vol. 73. No. 5. Pp. 2269–2285.
19. Jones J. E., Woodward C. S. Newton–Krylov-multigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems // *Advances in Water Resources*. 2001. Vol. 24. No. 7. Pp. 763–774.
20. Maxwell R. M. A terrain-following grid transform and preconditioner for parallel, large-scale, integrated hydrologic modeling // *Advances in Water Resources*. 2013. Vol. 53. Pp. 109–117.
21. Бутнев О. И. и др. Комплекс программ «НИМФА» для решения задач нелинейной однофазной фильтрации жидкости и теплопереноса в пористых средах // *Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов*. — 2018. — № 2. — С. 3.
22. Novikov K., Kapyrin I. Coupled Surface–Subsurface Flow Modelling Using the GeRa Software // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2020. Vol. 41. No. 4. Pp. 538–551.
23. Bagaev D. et al. Improving parallel efficiency of a complex hydrogeological problem simulation in GeRa // *Russian Supercomputing Days*. Springer, Cham, 2019. Pp. 265–277.
24. Terekhov K., Vassilevski Y. INMOST parallel platform for mathematical modeling and applications // *Russian Supercomputing Days*. Springer, Cham, 2018. Pp. 230–241.
25. Konshin I., Kapyrin I. Scalable computations of GeRa code on the base of software platform INMOST // *International Conference on Parallel Computing Technologies*. Springer, Cham, 2017. Pp. 433–445.
26. Сускин В. В., Капырин И. В., Расторгуев А. В. Программное средство «ГЕОПОЛИС»: геофильтрационное моделирование пункта глубинного захоронения жидких радиоактивных отходов полигона «Северный» // *Горный журнал*. 2021. № 5. С. 91–97. DOI: 10.17580/gzh.2021.05.12.
27. Сускин В. В., Капырин И. В., Григорьев Ф. В. Оценка эффективности барьера «стена в грунте» при создании приповерхностных пунктов консервации и захоронения РАО // *Радиоактивные отходы*. 2021. № 1 (14). С. 96–105. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-1-96-105.
28. Grigorev F. V., Kapyrin I. V., Plenkin A. V. Discrete Fracture Matrix Model Applied to the Computation of Water Flow Through the Underground Facility // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2020. Vol. 41. No. 4. Pp. 526–532.
29. Проблемы ядерного наследия и пути их решения. / Под общ. ред. А. М. Агапова, Л. А. Большова,

- Е. В. Евстратова, Н. П. Лаверова, И. И. Линге. Т. 1. — М. : ОАО «Энергопроманистика», 2012. 356 с.
30. Белкин Д. Ю., Иванов И. А., Тананаев И. Г. Концепция по выводу из эксплуатации промышленных уран-графитовых реакторов (ПО «Маяк», Челябинская область) // Вестник Дальневосточного отделения Российской академии наук. 2016. № 3(187). С. 58—65.
31. Талицкая А. В., Захарова Е. В., Андриященко Н. Д., Бочкарев В. В. Оценка долговременной безопасности объекта окончательной изоляции радиоактивных отходов, создаваемого при выводе из эксплуатации промышленного уран-графитового реактора // Ядерная и радиационная безопасность. 2017. № 2. С. 54—60.
32. Водоём-9 — хранилище жидких радиоактивных отходов и воздействие его на геологическую среду. Под ред. Дрожко Е. Г., Самсонова Б. Г. — М., 2007. 250 с.
33. Захарова Е. В., Андриященко Н. Д. и др. Инженерные барьеры безопасности при выводе из эксплуатации объектов ядерного топливного цикла / ARGILLASTUDIUM-2017. Материалы Пятой Российской Школы по глинистым минералам. 2017. С. 50—54.
34. Линге И. И., Иванов А. Ю., Казаков К. С. О системных мерах по расширению применения глиняных материалов на объектах атомной отрасли // Радиоактивные отходы. 2018. № 4 (5). С. 33—41.
35. Лаверов Н. П., Величкин В. И. и др. Изменение окружающей среды и климата: природные и связанные с ними техногенные катастрофы. Т. 5: Изоляция отработавших ядерных материалов: геолого-геохимические основы. — М.: ИГЕМ РАН; ИФЗ РАН, 2008. 280 с.
36. Рыбальченко А. И., Пименов М. К., Костин П. П. и др. Глубинное захоронение жидких радиоактивных отходов. Т. 256. — М. : ИздАТ, 1994.
37. Дорофеев А. Н., Большов Л. А., Линге И. И., Уткин С. С., Савельева Е. А. Стратегический мастер-план исследований в обоснование безопасности сооружения, эксплуатации и закрытия пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов // Радиоактивные отходы. 2017. № 1 (1). С. 33—42.
38. Birkholzer J. T., Bond A. E., Hudson J. A. et al. DECOVALEX-2015: an international collaboration for advancing the understanding and modeling of coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) processes in geological systems // Environ Earth Sci. 2018. Vol. 77. P. 539.
39. Carrera J., Saaltink M. W., Soler-Sagarra J., Wang J., Valhondo C. Reactive transport: a review of basic concepts with emphasis on biochemical processes // Energies. 2022. Vol. 15. No. 3. P. 925.
40. Капырин И. В. Assessment of density driven convection effect on the dynamics of contaminant propagation on a deep well radioactive waste injection disposal site // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2021. Vol. 392. Pp. 113425.
41. Farthing M. W., Ogden F. L. Numerical solution of Richards' equation: A review of advances and challenges // Soil Science Society of America Journal. 2017. Vol. 81. No. 6. P. 1257—1269.
42. Niswonger R. G., Panday S., Ibaraki M. MODFLOW-NWT, a Newton formulation for MODFLOW-2005 // US Geological Survey Techniques and Methods. 2011. Vol. 6. No. A37. Pp. 44.
43. Anuprienko D. Comparison of nonlinear solvers within continuation method for steady-state variably saturated groundwater flow modelling // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. 2021. Vol. 36. No. 4. P. 183—195.
44. Румынин В. Г. Геомиграционные модели в гидрогеологии. — СПб : Наука, 2011. 1158 с.
45. Rumynin V. G., Sindalovskiy L. N., Nikulenkov A. M., Leskova P. G. Effect of anisotropy and depth-dependent hydraulic conductivity on concentration curve response to nonpoint-source pollution // Journal of Hydrology. 2020. Vol. 591. P. 125319.

## Информация об авторе

Капырин Иван Викторович, кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52); старший научный сотрудник, Институт вычислительной математики им. Г. И. Марчука РАН (119333, Россия, Москва, ул. Губкина, д. 8), e-mail: kapyrin@ibrae.ac.ru.

## Библиографическое описание статьи

Капырин И. В. Расчетные коды для гидрогеологического моделирования в задачах оценки безопасности ОИАЭ // Радиоактивные отходы. 2022. № 2 (19). С. 105—118. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-2-105-118.

## COMPUTATIONAL CODES FOR THE HYDRO GEOLOGICAL MODELING IN THE SAFETY ASSESSMENT OF NUCLEAR FACILITIES

Капырин И. В.<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

<sup>2</sup>Marchuk Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Article received on May 16, 2022

The paper analyzes modern trends in the development and use of software systems for three-dimensional hydrogeological modeling. It provides an analytical overview of most recent and widely used software products, their development process, the implemented models and the numerical methods applied. The study specifies a range of typical tasks addressed by Russian nuclear industry requiring the development of numerical geofiltration and geomigration models. To demonstrate the use of modern computational technologies, studied was the case involving calculations in the GeRa software package performed for LRW DDF. The paper identifies the trends for further software evolution taking into account the Russian needs in the development of near-surface and deep RW disposal facilities, decommissioning, as well as the accumulated experience in the operation of RW storage facilities and global trends in the code development.

**Keywords:** hydrogeological modeling, geomigration of radionuclides, software packages, filtration, multiphysics models, radioactive waste.

### References

1. Diersch H. J. G. FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media. — Springer Science & Business Media, 2013.
2. McDonald M. G., Harbaugh A. W. The history of MODFLOW. *Groundwater*, 2003, vol. 41, no. 2, pp. 280—283.
3. Pruess K., Oldenburg C. M., Moridis G. J. TOUGH2 user's guide version 2. — Lawrence Berkeley National Lab. (LBNL), Berkeley, CA (United States), 1999. — No. LBNL—43134.
4. Parkhurst D. L., Wissmeier L. PhreeqcRM: A reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC. *Advances in Water Resources*, 2015, vol. 83, pp. 176—189. DOI: 10.1016/j.advwatres.2015.06.001.
5. Li Q. et al. COMSOL Multiphysics: A novel approach to ground water modeling. *Groundwater*, 2009, vol. 47, no. 4, pp. 480—487.
6. Nardi A. et al. Interface COMSOL-PHREEQC (iCP), an efficient numerical framework for the solution of coupled multiphysics and geochemistry. *Computers & Geosciences*, 2014, vol. 69, pp. 10—21.
7. Wissmeier L., Barry D. A. Simulation tool for variably saturated flow with comprehensive geochemical reactions in two- and three-dimensional domains. *Environmental Modelling & Software*, 2011, vol. 26, no. 2, pp. 210—218.
8. Pruess K. TOUGH2-A general-purpose numerical simulator for multiphase fluid and heat flow. 1991. 102 p.
9. Jung Y. et al. TOUGH3: A new efficient version of the TOUGH suite of multiphase flow and transport simulators. *Computers & Geosciences*, 2017, vol. 108, pp. 2—7.
10. Šimůnek J., Van Genuchten M. T., Šejna M. Recent developments and applications of the HYDRUS computer software packages. *Vadose Zone Journal*, 2016, vol. 15, no. 7, p. vj2016. 04.0033.
11. Freedman V. L. et al. A high-performance workflow system for subsurface simulation. *Environmental Modelling & Software*, 2014, vol. 55, pp. 176—189.
12. Coon E. T. et al. Coupling surface flow and subsurface flow in complex soil structures using mimetic finite differences. *Advances in Water Resources*, 2020, vol. 144, p. 103701.
13. Jan A. et al. An intermediate-scale model for thermal hydrology in low-relief permafrost-affected landscapes. *Computational Geosciences*, 2018, vol. 22, no. 1, pp. 163—177.
14. Hyman J. D. et al. Flow and Transport in Three-Dimensional Discrete Fracture Matrix Models using Mimetic Finite Difference on a Conforming Multi-Dimensional Mesh/ arXiv preprint arXiv:2112.12592. 2021.
15. 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, vol. 50, no. 1, pp. 208—228.
16. Bilke L. et al. Development of open-source porous media simulators: principles and experiences. *Transport in porous media*, 2019, vol. 130, no. 1, pp. 337—361.

17. Kolditz O. et al. Thermo-Hydro-Mechanical Chemical Processes in Fractured Porous Media: Modelling and Benchmarking. Vol. 25. — Berlin : Springer, 2016.
18. Wang W. et al. A parallel finite element method for two-phase flow processes in porous media: OpenGeoSys with PETSc. *Environmental Earth Sciences*, 2015, vol. 73, no. 5, pp. 2269–2285.
19. Jones J. E., Woodward C. S. Newton–Krylov-mul-tigrigrid solvers for large-scale, highly heterogeneous, variably saturated flow problems. *Advances in Water Resources*, 2001, vol. 24, no. 7, pp. 763–774.
20. Maxwell R. M. A terrain-following grid transform and preconditioner for parallel, large-scale, integrated hydrologic modeling. *Advances in Water Resources*, 2013, vol. 53, pp. 109–117.
21. Butnev O. I. et al. "NIMFA" software complex for solving problems of nonlinear single-phase fluid flows and heat-and-mass transport in porous media. *Voprosy Atomnoi Nauki i Tekhniki. Ser.: Math. Model. Phys. Process*, 2018, no. 2, pp. 3–13.
22. Novikov K., Kapyrin I. Coupled Surface–Sub-surface Flow Modelling Using the GeRa Software. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2020, vol. 41, no. 4, pp. 538–551.
23. Bagaev D. et al. Improving parallel efficiency of a complex hydrogeological problem simulation in GeRa. *Russian Supercomputing Days*. Springer, Cham, 2019. Pp. 265–277.
24. Terekhov K., Vassilevski Y. INMOST parallel platform for mathematical modeling and applications. *Russian Supercomputing Days*. Springer, Cham, 2018. Pp. 230–241.
25. Konshin I., Kapyrin I. Scalable computations of GeRa code on the base of software platform INMOST. *International Conference on Parallel Computing Technologies*. Springer, Cham, 2017. Pp. 433–445.
26. Suskin V. V., Kapyrin I. V., Rastorguyev A. V. Programmnoye sredstvo «GEOPOLIS»: geofil'tratsionnoye modelirovaniye punkta glubinnogo zakhoroneniya zhidkikh radioaktivnykh otkhodov poligona "Severnyy" [GEOPOLIS software tool: geofiltration modeling of a deep disposal facility for liquid radioactive waste at the Severnyy site]. *Gornyy zhurnal — Mining Journal*, 2021, no. 5, pp. 91–97. DOI: 10.17580/gzh.2021.05.12.
27. Suskin V. V., Kapyrin I. V., Grigorev F. V. Otsenka effektivnosti bar'yera «stena v grunte» pri sozdanii pri-poverkhnostnykh punktov konservatsii i zakhoroneniya RAO [Assessing the efficiency of a "buried wall" barrier in the establishment of near-surface long-term storage and disposal facilities for RW]. *Radioaktivnyye otkhody — Radioactive Waste*, 2021, no. 1 (14), pp. 96–105. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-1-96-105.
28. Grigorev F. V., Kapyrin I. V., Plenkin A. V. Discrete Fracture Matrix Model Applied to the Computation of Water Flow Through the Underground Facility. *Lobachevskii Journal of Mathematics*, 2020, vol. 41, no. 4, pp. 526–532.
29. *Problemy yadernogo naslediya i puti ikh resh-eniya* [Nuclear Legacy Challenges and Ways to Address Them]. / Under general ed. of A. M. Agapov, L. A. Bolshov, E. V. Evstratov, N. P. Laverov, I. I. Linge. Vol. 1. — Moscow, Energopromanalitika Publ., 2012. 356 p.
30. Belkin D. Yu., Ivanov I. A., Tananayev I. G. Kont-septsiya po vyvodu iz ekspluatatsii promyshlennykh uran-grafitovykh reaktorov (PO "Mayak", Chelyabinskaya oblast') [Decommissioning Concept for Production Uranium-graphite Reactors (PA Mayak, Chelyabinsk region)]. *Vestnik Dal'nevostochnogo ot-deleniya Rossiyskoy akademii nauk — Bulletin of the Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences*, 2016, no. 3 (187), pp. 58–65.
31. Talitskaya A. V., Zakharova Ye. V., Andryushchenko N. D., Bochkarev V. V. Otsenka dolgovremennoy bezopasnosti ob'yekta okonchatel'noy izolyatsii radioaktivnykh otkhodov, sozdavayemogo pri vyvode iz ekspluatatsii promyshlennogo uran-grafitovogo reaktora [Long-term safety assessment of the final radioactive waste disposal facility established during the decommissioning of a production uranium-graphite reactor]. *Yadernaya i radiatsionnaya bezopasnost' — Nuclear and Radiation Safety*, 2017, no. 2, pp. 54–60.
32. *Vodoyom-9 — khranilishche zhidkikh radioaktivnykh otkhodov i vozdeystviye yego na geologicheskuyu sredu* [Reservoir-9 - storage facility for liquid radioactive waste and its impact on the geological environment]. Edited by Drozhko E. G., Samsonov B. G. — Moscow, 2007. 250 p.
33. Zakharova Ye. V., Andryushchenko N. D. et al. In-zhenernyye bar'yery bezopasnosti pri vyvode iz ekspluatatsii ob'yektov yadernogo toplivnogo tsikla [Engineered safety barriers for the decommissioning of nuclear fuel cycle facilities]. *ARGILLASTUDIUM-2017. Materialy Pyatoy Rossiyskoy Shkoly po glinistym mineralam* [Proceedings of the Fifth Russian School on Clay Minerals], 2017, Pp. 50–54.
34. Linge I. I., Ivanov A. Yu., Kazakov K. S. O sistemnykh merakh po rasshireniyu primeneniya glinyanykh materialov na ob'yektakh atomnoy otrasli [On comprehensive approach to use clay materials as nuclear facilities safety barriers]. *Radioaktivnyye otkhody — Radioactive Waste*, 2018, no. 4 (5), pp. 33–41.
35. Laverov N. P., Velichkin V. I. et al. *Izmeneniye ok-ruzhayushchey sredy i klimata: prirodnyye i svyazannyye s nimi tekhnogennyye katastrofy. T. 5: Izolyatsiya otrabotavshikh yadernykh materialov: geologo-geokhimicheskiye osnovy* [Environmental and Climatic Changes: natural and man-induced disasters. Vol. 5: Final disposal of spent nuclear materials: geological

and geochemical fundamentals]. — Moscow, IGEM RAN, IPE RAS Publ., 2008. 280 p.

36. Rybal'chenko A. I., Pimenov M. K., Kostin P. P. et al. *Glubinnoye zakhoroneniye zhidkikh radioaktivnykh otkhodov* [Deep Disposal of Liquid Radioactive Waste]. — Moscow, Izdat Publ., 1994. Vol. 256.

37. Dorofeev A. N., Bolshov L. A., Linge I. I., Utkin S. S., Saveleva E. A. Strategicheskiy master-plan issledovaniy v obosnovaniye bezopasnosti sooruzheniya, ekspluatatsii i zakrytiya punkta glubinnogo zakhoroneniya radioaktivnykh otkhodov [Strategic Master Plan for R&D Demonstrating the Safety of Construction, Operation and Closure of a Deep Geological Disposal Facility for Radioactive Waste]. *Radioaktivnyye otkhody — Radioactive Waste*, 2017, no. 1, pp. 32–41.

38. Birkholzer J. T., Bond A. E., Hudson J. A. et al. DECOVALEX-2015: an international collaboration for advancing the understanding and modeling of coupled thermo-hydro-mechanical-chemical (THMC) processes in geological systems. *Environ Earth Sci*, 2018, vol. 77, p. 539.

39. Carrera J., Saaltink M. W., Soler-Sagarra J., Wang J., Valhondo C. Reactive transport: a review of basic concepts with emphasis on biochemical processes. *Energies*, 2022, vol. 15, no. 3, p. 925.

40. Kapyrin I. V. Assessment of density driven convection effect on the dynamics of contaminant propagation on a deep well radioactive waste injection disposal site. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2021, vol. 392, p. 113425.

41. Farthing M. W., Ogden F. L. Numerical solution of Richards' equation: A review of advances and challenges. *Soil Science Society of America Journal*, 2017, vol. 81, no. 6, pp. 1257–1269.

42. Niswonger R. G., Panday S., Ibaraki M. MODFLOW-NWT, a Newton formulation for MODFLOW-2005. *US Geological Survey Techniques and Methods*, 2011, vol. 6, no. A37, p. 44.

43. Anuprienko D. Comparison of nonlinear solvers within continuation method for steady-state variably saturated groundwater flow modelling. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 2021, vol. 36, no. 4, pp. 183–195.

44. Rumynin V. G. *Geomigratsionnyye modeli v gidrogeologii* [Geomigration models in hydrogeology]. Saint-Petersburg, Nauka Publ., 2011. 1158 p.

45. Rumynin V. G., Sindalovskiy L. N., Nikulenkova A. M., Leskova P. G. Effect of anisotropy and depth-dependent hydraulic conductivity on concentration curve response to nonpoint-source pollution. *Journal of Hydrology*, 2020, vol. 591, p. 125319.

---

### Information about the author

Kapyrin Ivan Viktorovich, Ph.D., Head of Laboratory, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), Senior Researcher, Marchuk Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences (8, Gubkina st., Moscow, 119333, Russia), e-mail: kapyrin@ibrae.ac.ru.

### Bibliographic description

Kapyrin I. V. Computational Codes for the Hydrogeological Modeling in the Safety Assessment of Nuclear Facilities. *Radioactive Waste*, 2022, no. 2 (19), pp. 105–118. DOI: 10.25283/2587-9707-2022-2-105-118. (In Russian).