СОЗДАНИЕ РАСЧЕТНЫХ СЕТОК ДЛЯ ЗАДАЧ ОБРАЩЕНИЯ С РАО

Р. А. Бутов, Н. И. Дробышевский, Е. В. Моисеенко, Ю. Н. Токарев

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, Москва

Статья поступила в редакцию 07 февраля 2021 г.

В статье приводится описание подхода к генерации расчетных сеток для решения задач при оценке безопасности обращения с РАО. Он основан на представлении объекта как набора простых геометрических форм (примитивов). Характеристики расчетной сетки (тип, размер, количество элементов) контролируются на уровне примитивов. Программа позволяет комбинировать их с помощью булевых операций для описания сложных объектов (например, интрузии в горной породе и их пересечение с горными выработками). Для описания вложенных друг в друга объектов (например, контейнер в скважине или скважин в горном массиве) в программе реализована возможность создания иерархии примитивов. Данный подход может использоваться для генерации сеток объектов с регулярной геометрией и/или многослойной структурой. Программа написана на языке Python. Создание расчетной сетки осуществляется с помощью редактирования входных файлов в формате JSON.

Ключевые слова: радиоактивные отходы, численное моделирование, генерация расчетных сеток, глубинное захоронение, вмещающие горные породы.

Введение

Обращение с радиоактивными отходами предполагает их размещение для целей хранения в специализированных емкостях практически на всех этапах процесса: начиная от сбора и заканчивая их удалением из биосферы. Форма емкостей, несмотря на свое многообразие, по сути, достаточно универсальна и представляет собой осесимметричную цилиндрическую или прямоугольную форму, а также их комбинации (рис. 1).

Это относится как к форме самих емкостей, так и форме хранилищ для них (рис. 2), за исключением некоторых случаев, таких, например, как закачки ЖРО в геологические формации.

Такая универсальность форм привела, в свою очередь, к формированию такого же универсального подхода к созданию расчетных сеток, который рассматривается в данной статье.

Основная концепция

Расчетная сетка создается из набора простых элементов — примитивов (Primitive). Каждый примитив представляет собой шестигранник с гранями различной формы (рис. 3). Комбинируя примитивы и изменяя форму их граней, можно создавать различные объекты от простых (куб, цилиндр, шар) до сложных многослойных

Рис. 1. Формы емкостей для РАО: а) цилиндрическая, б) прямоугольная, в) смешанная

Рис. 2. Хранилища РАО: а) бассейн выдержки, б) приповерхностное хранилище, в) глубинное хранилище

Рис. 3. Прimitives: а) куб, б) цилиндр, в) сложная форма

инженерных конструкций (контейнеры, скважины, туннели).

Конечно, такой подход не позволяет точно передать форму реального объекта со всеми мелкими деталями и неоднородностями, однако, как правило, для проведения расчетов все объекты приводятся к относительно простым элементам, которые, в свою очередь, могут быть воссозданы с помощью данного метода. Важным преимуществом сеток, состоящих из примитивов, является возможность простого и надежного контроля их качества — тонкой настройки. Каждый примитив, несмотря на свободную форму граней, топологически является шестигранником, что позволяет контролировать качество сетки по трем направлениям: длина, ширина и высота.

В случае же использования объемов произвольных форм контроль размера осуществляется сразу по всем направлениям, что не очень удобно, к примеру: моделирование тонких цилиндрических форм, когда нужно улучшить качество сетки в стенке в радиальном направлении, происходит уменьшение размера ячейки еще и в вертикальном направлении, что увеличивает количество элементов сетки, а следовательно, время расчета и необходимые вычислительные ресурсы.

Примитивы формируются в комплексы (Complex), как правило, отображающие какой-либо физический объект или форму (рис. 4). Комплексы нужны, во-первых, для удобства работы с сеткой, так как они позволяют описывать

Рис. 4. Комплексы: а) цилиндр из 5 примитивов, б) шар из 7 примитивов, в) сложная форма в разрезе (27 примитивов)

ее как композицию отдельных крупных блоков. Например, в случае задач с хранилищами РАО, когда вся сетка состоит, по сути, из множества копий одного объекта (например, контейнера РАО), достаточно создать один контейнер в виде комплекса, а затем распространить его на все хранилище. Во-вторых, такой подход позволяет использовать однажды созданные комплексы в других задачах, например, использовать уже созданные контейнеры при рассмотрении новой компоновки хранилища или, наоборот — использовать старую компоновку, но с новым типом контейнеров. Если провести аналогию расчетной сетки с городом, то комплексы — это дома, а примитивы — строительные блоки, кирпичи.

Иерархия комплексов показана на рис. 5. Отметим еще раз, что все примитивы являются элементами комплексов, это для наглядности показано на схеме красным прямоугольником.

Рис. 5. Иерархия комплексов

Одним из базовых является комплекс «Матрица» (Matrix). Он используется для создания расчетных сеток объектов с регулярной структурой и представляет собой трехмерную сетку, в ячейках которой можно задавать различные материалы и граничные условия, деформации, примитивы, а также другие комплексы. Возможность

размещения в ячейках других комплексов позволяет формировать сложные вложенные рекурсивные расчетные сетки, например, в каждой ячейке «Матрицы» могут размещаться другие «Матрицы» и т. д.

Комплекс «Полигон» (Polygon) служит для формирования сеток из набора полигонов и используется при импорте геометрии из других программ.

Комплекс «КомплексПримитив» (ComplexPrimitive) часто бывает необходим для формирования комплекса, состоящего из одного примитива.

«Регулярные Матрицы» (RegularMatrix и RegularBoundMatrix) используются при создании симметричных повторяющихся геометрий, например хранилища или пучков труб.

«Цилиндр» (Cylinder) используется при построении многослойных цилиндрических геометрий (контейнеры, бочки и т. п.), также он позволяет чередовать цилиндрическую геометрию с прямоугольной, например для размещения контейнера в кубическом блоке (как на рис. 1 в).

Все сетки создаются с помощью «класса-фабрики» (ComplexFactory), что позволяет унифицировать процесс генерации сетки независимо от того, из каких комплексов и примитивов она создана. На вход «фабрики» подается входной файл в формате json. На выходе «фабрика» создает файл расчетной сетки. Так как входные файлы могут содержать зависимости от других входных файлов, то процесс создания будет иметь вид, показанный на рис. 6. На вход исполняемого скрипта «фабрики» complex_factory.py подается главный входной файл 6.json с возможными зависимостями от других входных файлов 1–5.json на выходе, далее фабрикой генерируется сетка mesh.msh.

Для генерации расчетной сетки используется пакет gmsh [1]. Однако данный подход хоть и создан на базе функционала пакета, но, вообще говоря, может быть перенесен на другой

Рис. 6. Процесс генерации сетки

генератор при наличии в нем функционала, аналогичного gmsh. На данный момент gmsh является де-юре самым распространенным (цитируемым) пакетом для создания сеток в академической среде (4906 цитирований на январь 2021 года, в среднем — 500 цитирований в год), имеет широкий функционал, интеграцию с CAD системой OpenCASCADE [2] и API на распространенных на сегодняшний день языках (C, C++, Python и Julia), а также динамично развивается. Сам код использует библиотеки для работы с сетками: Netgen [2] и Mmg3d [3].

В gmsh доступно два расчетных ядра для построения сеток: гео и осс. Ядро гео является стандартным ядром программы и имеет все функции для построения сеток. Ядро осс является расширением ядра с добавлением возможностей пакета CAD OpenCascade [4]. Главным преимуществом этого является возможность использования булевых операций с объемами (Constructive solid geometry, CSG), что позволяет создавать сложные формы из комбинации простых за счет применения к ним логических операций.

На рис.7 показано формирование сложной формы из куба, шара и цилиндров за счет

Рис. 7. Булевы операции с объемами

булевых операций пересечения, объединения и вычитания. Подобным образом при формировании сеток создаются, например, пересечения скважин для размещения упаковок РАО с неоднородностями в горной породе (интрузии, зоны дробления и т. п.) при моделировании хранилища РАО в геологических формациях.

Однако этот алгоритм имеет свои недостатки. За счет большого количества объемов внутри скважины (контейнеры, инженерные барьеры безопасности (ИББ)) скорость работы алгоритма резко снижается, так как необходимо провести операцию пересечения с каждым объемом. После совершения этой операции для одной скважины количество объемов увеличивается, что замедляет операцию пересечения со следующей скважиной и т. д. Второй проблемой метода является шанс образования малых объемов, что ведет к сгущению расчетной сетки в них и, соответственно, резкому увеличению ее размера. На практике алгоритм работает либо для ограниченного количества скважин (1—4), либо для скважин без внутренней структуры, т. е. состоящих из однородного материала. Однако его универсальность (возможность производить пересечения любых объемов) делает его полезным, например, для создания пересечений с объемами, построенными в сторонних программах, без дополнительной их предобработки и анализа.

Моделирование ПГЗРО

Рассмотрим процесс формирования сетки пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов (ПГЗРО) [5], который состоит из набора скважин с локализованными в них РАО и ИББ. Скважины размещаются в горной породе упорядоченно в двух зонах по степени активности располагаемых в них РАО.

Для формирования расчетной сетки используются три комплекса: Cylinder, Matrix и RegularMatrix. Cylinder используется для моделирования скважин с их осесимметричной формой, RegularMatrix — для формирования двух зон с упорядоченно размещенными скважинами (Cylinder), Matrix служит для размещения двух зон со скважинами (RegularBoundMatrix) в горной породе.

Структура входных файлов для построения комплексов показана на рис. 8. Файлы **nkm_hlw_core.json** и **nkm_ilw_core.json** собираются из трех видов входных файлов, отражающих основание скважины (**nkm_xiyjz0.json**), верх (**nkm_xiyjz1.json**) и промежуточную часть с контейнерами РАО (**nkm_xiyjzk.json**), количество которых можно варьировать, т. е. задавать

Рис. 8. Структура входных файлов ПГЗРО: красный — комплекс Matrix, зеленый — RegularBoundMatrix, синий — Cylinder, серый — конфигурационный файл

их произвольное количество. Во входном файле **nkm_hlw_ilw_core.json** зоны со скважинами ориентируются относительно друг друга. В файле **nkm_hlw_ilw.json** зоны размещаются в горной породе. Дополнительно верхним входным файлом иерархии **nkm_hlw_ilw_conf.json** может задаваться конфигурационный файл с настройкой «фабрики» комплексов.

Получена расчетная сетка, структурированная из тетраэдральных элементов (рис. 9). Для создания гексаэдральной и/или неструктурированной сетки необходимо внести изменения в корневой конфигурационный файл **nkm_hlw_ilw_conf.json**. В случае изменения компоновки хранилища вносятся изменения в файлы зон: **nkm_hlw_core.json** и **nkm_ilw_core.json**, при изменении скважин и/или контейнеров РАО — в файлы: **nkm_xiyjz0.json**, **nkm_xiyjz1.json** и **nkm_xiyjzk.json**.

Рис. 9. Пример построенной сетки в разрезе

Такой подход позволяет менять параметры расчетной сетки через входной файл в автоматическом режиме, например, для многовариантного расчета объекта при поиске оптимальной компоновки. Также он позволяет перенести часть расчетной сетки, например одну зону, в другой проект копированием входного файла зоны и входных файлов скважин. Это позволяет эффективно использовать прошлые решения в

новых проектах. Конечно, будут возникать некоторые трудности при согласовании параметров старой и новой моделей, но внутренние параметры, отражающие геометрию каждой из зон, останутся прежними.

Примеры

Далее приведены примеры сеток, созданных для расчетов задач обращения с РАО с помощью приведенного в статье подхода.

На рис. 10 показано ПГЗРО с горными выработками, при этом скважины выполнены в виде структурированной сетки, а выработки и вмещающая горная порода (на рисунке не показана, заполняет все окружающее объект пространство) — неструктурированной.

Рис. 10. Один из вариантов компоновки подземной части ПГЗРО

Необходимость создания неструктурированных областей с плохо контролируемым качеством сетки возникает из-за невозможности объединения нескольких структурированных геометрий или больших затрат на такое соединение. Например, тоннели представляют собой осесимметричную или прямоугольную в сечении форму, которая может создаваться структурированной. Такую же форму имеют и вертикальные скважины, но соединение этих объектов уже не представляет собой упорядоченную форму и требует использования неструктурированной вставки, что усложняет построение сетки, делая алгоритм менее надежным и менее контролируемым со стороны пользователя.

В случае наличия криволинейной геометрии, например интрузии в горном массиве (рис. 11), соединение объектов становится еще более трудным. Пересечение скважины и интрузии образует криволинейную поверхность, которую практически невозможно задать вручную, а если и возможно, то она будет иметь очень ограниченный набор параметров для ее контроля.

В таком случае используется ядро OpenCASCADE с булевыми операциями над объемами. Каждый объем, по сути — примитив, в расчетной сетке пересекается с каждым другим, образуя новые, как правило, криволинейные поверхности в местах пересечений. После этого

Рис. 11. Пример использования булевых операций: пересечение интрузии (желтый) в горной породе (серый) со скважиной с ИББ (красный, зеленый)

Рис. 12. Пример многослойной криволинейной геометрии на базе комплекса Матрица (Matrix)

в них создается неупорядоченная расчетная сетка, размер которой контролируется косвенно, например, по самой короткой грани в объеме. Это сильно усложняет контроль за созданием расчетной сетки ввиду возможного возникновения очень маленьких объемов с небольшой длиной грани и, соответственно, сильным сгущением расчетной сетки в области пересечения, что отчетливо видно на рисунке. С увеличением количества интрузий и/или скважин вероятность возникновения таких объемов возрастает, что ведет либо к невозможности создать адекватную по размеру расчетную сетку, либо превышению доступной оперативной памяти компьютера. Также увеличение количества объектов ведет к значительному увеличению вычислительной сложности задачи, которое достаточно трудно оценить, потому что после каждой булевой операции количество объектов для новых операций возрастает.

Как показала практика, такой подход позволяет генерировать расчетную сетку для ограниченного числа скважин и интрузий (до 10) либо нескольких интрузий и сотен скважин, но с примитивной однородной средой внутри.

На рис. 12 показана возможность создания неосеимметричных сечений для моделирования, например, несовершенности форм контейнеров или скважин, при этом расчетная сетка остается структурированной, что повышает надежность и контроль ее качества.

На рис. 13 показан пример одной из компоновок ПГЗРО. Скважины имеют структурированную расчетную сетку, а горная порода — неструктурированную, что приводит к практически неконтролируемому сгущению сетки в области между скважинами, однако позволяет размещать скважины с различными типами контейнеров.

Рис. 13. Скважины ПГЗРО (часть)

На рис. 14 показан пример ячейки с контейнерами с РАО в наземном хранилище под принудительным воздушным охлаждением. Сечение ячейки содержит как окружающие, так и прямоугольные сечения, расчетная сетка при этом сохраняет структурированный вид. Возможность копирования уже созданных геометрий позволяет создавать блоки ячеек в произвольной компоновке.

На рис. 15 показаны скважины в траншейной компоновке, расчетная сетка внутри траншей — структурированная.

На рис. 16 показан пример импорта геометрии из геологического пакета Micromine [6]. Импортированная геометрия (оранжевый) представляет собой интрузии в горной породе, которые пересекают планируемые скважины (бирюзовый).

Рис. 14. Контейнеры РАО, размещенные в хранилище под принудительным охлаждением

Рис. 15. ПГЗРО (траншейная концепция, часть)

Рис. 16. Пример использования булевых операций между скважинами (бирюзовый) и интрузиями в горной породе (оранжевый). Интрузии импортированы из реальных геологических данных программы Micromine посредством комплекса Полигон (Polygon)

Рис. 17. Расчетная сетка для моделирования эксперимента в ПИЛ: серый – горная порода, желтый – стенки тоннеля, зеленый – пол тоннеля, синий – потолок тоннеля, красный – скважины с имитатором РАО. Для построения использовались булевы операции

Для обработки пересечений использовалось ядро OpenCASCADE с булевыми операциями пересечения.

Ядро OpenCASCADE использовалось и при построении модели для тепломеханического эксперимента в ПИЛ (рис. 17) [7]. Из объема горной породы (серый) вычитались объемы тоннеля и скважин. Создание данной расчетной сетки возможно и напрямую, явным заданием всех объемов и поверхностей, в том числе пересечений, но на практике это потребует гораздо больших трудозатрат, чем автоматический расчет с помощью булевых операций на элементарных для задания формах.

Важно, что система булевых операций встроена в общую концепцию подхода и для ее включения требуется изменение только одного параметра в верхнем конфигурационном файле. Например, если мы хотим добавить в уже созданную без булевых операций расчетную сетку пересечение с другой, нам не нужно изменять их входные файлы, все пересечения будут рассчитаны автоматически.

Заключение

Описанный подход позволяет создавать расчетные сетки для задач моделирования при обращении с РАО. Создание сетки осуществляется с помощью редактирования входных файлов.

Данный подход дал возможность провести трехмерный расчет теплового режима ПГЗРО с различной степенью детализации: для большинства скважин выбиралась упрощенная модель, а для нескольких — подробная, что позволило в одном расчете совместить оценку как широкомасштабных процессов — нагрева окружающей горной породы, так и мелкомасштабных — нагрева стенок контейнера.

На данный момент основными направлениями развития являются:

- 1) накопление базы данных входных файлов для новых задач;
 - 2) работа с задачами, требующими булевых операций с объемами (например, пересечение интрузий в породе и скважин выработок);
 - 3) импорт геометрий из сторонних программ (например, импорт реальных форм вмещающих массивов из специализированных пакетов);
 - 4) оптимизация и поддержка расчетного кода, а также добавление нового функционала.
- Несмотря на то, что программа создавалась и развивалась в области задач обращения с РАО, возможно применение данного подхода в задачах с похожими геометриями, например, таких как:
- 1) провода, короба, трубопроводы различной конфигурации;
 - 2) объекты с повторяющейся структурой: фундаменты, резервуары, склады, многоэтажные жилые дома, суперкомпьютеры;
 - 3) многослойные, композитные материалы.

Литература

1. Christophe G., Remacle J. F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities // International journal for numerical methods in engineering. 2009. Vol. 79. № 11. Pp. 1309—1331. DOI: 10.1002/nme.2579.
2. Программа Netgen. [Электронный ресурс]. — URL: <https://ngsolve.org/> (дата обращения 14.01.2021).
3. Программа mmg3d. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.mmgtools.org/> (дата обращения 14.01.2021).
4. Программа OpenCASCADE. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.opencascade.com/> (дата обращения 14.01.2021).
5. Дробышевский Н. И., Моисеенко Е. В., Бутов Р. А., Токарев Ю. Н. Трехмерное численное моделирование теплового состояния пункта глубинного захоронения радиоактивных отходов в Нижнеканском массиве горных пород // Радиоактивные отходы. 2017. № 1 (1). С. 66—75.
6. Программа Micromine. [Электронный ресурс]. — URL: <https://www.micromine.com/> (дата обращения 14.01.2021).
7. Моисеенко Е. В., Дробышевский Н. И., Бутов Р. А., Токарев Ю. Н. Концепция проведения крупномасштабных термомеханических экспериментов в ПИЛ в Нижнеканском массиве горных пород // Радиоактивные отходы. 2020. № 3 (12). С. 101—111.

Информация об авторах

Бутов Роман Александрович, инженер, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: bra@ibrae.ac.ru.

Дробышевский Николай Иванович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: drobyshevsky@inbox.ru.

Моисеенко Евгений Викторович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: moi@ibrae.ac.ru.

Токарев Юрий Николаевич, кандидат технических наук, старший научный сотрудник, Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (115191, Москва, Большая Тульская ул., д. 52), e-mail: ytokarev@ya.ru.

Библиографическое описание статьи

Бутов Р. А., Дробышевский Н. И., Моисеенко Е. В., Токарев Ю. Н. Создание расчетных сеток для задач обращения с РАО // Радиоактивные отходы. 2021. № 1 (14). С. 87—95. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-1-87-95.

MESH GENERATION FOR RADIOACTIVE WASTE MANAGEMENT TASKS

Butov R. A., Drobyishevsky N. I., Moiseenko E. V., Tokarev Yu. N.

Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Article received on February 07, 2021

The article describes an approach to mesh generation allowing to address radioactive waste management tasks. The approach is based on representing an object as a set of simple geometric shapes (primitives). The characteristics of the mesh (type, size, number of elements) are controlled at a primitive level. The program allows to combine primitives using boolean operations to describe complex objects (for example, intrusions in host rock and their intersections with excavations). To describe nested objects (for example, a radioactive waste container in a borehole or a borehole in a host rock), the program implements a hierarchy of primitives. This approach can be used to generate meshes of objects with regular geometry and/or layered structures. The program is written in Python language. The mesh is created by editing the input files in JSON format.

Keywords: radioactive waste, computer simulation, mesh generation, deep geological repository, host rock.

References

1. Christophe G., Remacle J. F. Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre- and post-processing facilities. *International journal for numerical methods in engineering*, 2009, vol. 79, no. 11, pp. 1309–1331. DOI: 10.1002/nme.2579.
2. Netgen Software [Electronic source]. — URL: <https://ngsolve.org/> (accessed on 14.01.2021).
3. mmg3d Software [Electronic source]. — URL: <https://www.mmgtools.org/> (accessed on 14.01.2021).
4. OpenCASCADE Software [Electronic source]. — URL: <https://www.opencascade.com/> (accessed on 14.01.2021).
5. Drobyishevskiy N. I., Moiseenko E. V., Butov R. A., Tokarev Yu. N. Trekhmernoe chislennoe modelirovanie teplovogo sostoyaniya punkta glubinnogo zahoroneniya radioaktivnykh othodov v Nizhnekanskom massive gornyyh porod [Three-dimensional numerical modelling of the thermal state of the deep radioactive waste disposal facility in the Nizhnekansk granitoid massif]. *Radioaktivnye otkhody — Radioactive Waste*, 2017, no. 1, pp. 66–75.
6. Micromine Software [Electronic source]. — URL: <https://www.micromine.com/> (accessed on 14.01.2021).
7. Moiseenko E. V., Drobyishevskiy N. I., Butov R. A., Tokarev Yu. N. Kontseptsiya provedeniya krupnomasshtabnykh termomekhanicheskikh ehksperimentov v PIL v Nizhnekanskom massive gornyyh porod [Concept of Large-Scale Thermomechanical Url Experiments in the Nizhnekanskiy Rock Massif]. *Radioaktivnye otkhody — Radioactive Waste*, 2020, no. 3, pp. 101–111.

Information about the authors

Butov Roman Aleksandrovich, Engineer, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: bra@ibrae.ac.ru.

Drobyishevsky Nikolay Ivanovich, PhD, Senior Researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: dni@ibrae.ac.ru.

Moiseenko Evgeny Viktorovich, PhD, Senior Researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: moi@ibrae.ac.ru.

Tokarev Yuriy Nikolaevich, PhD, Senior Researcher, Nuclear Safety Institute of the Russian Academy of Sciences (52, Bolshaya Tulsкая st., Moscow, 115191, Russia), e-mail: ytokarev@ya.ru.

Bibliographic description

Butov R. A., Drobyishevsky N. I., Moiseenko E. V., Tokarev Yu. N. Mesh generation for radioactive waste management tasks. *Radioactive Waste*, 2021, no. 1 (14), pp. 87–95. DOI: 10.25283/2587-9707-2021-1-87-95. (In Russian).