

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ МЕТОДИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ПРИМЕНЕНИЯ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА AMBER 4.4 ДЛЯ ОЦЕНКИ БЕЗОПАСНОСТИ ПРИПОВЕРХНОСТНЫХ ХРАНИЛИЩ РАО

Ушанова О.Н., Корж В.И., Кузнецов Л.А., Мишагина А.С. (НТЦ ЯРБ)

Программный комплекс Amber, основывающийся на методе камерного моделирования, нашел широкое применение для оценки безопасности хранилищ радиоактивных отходов (РАО) [1]. Его применение удобно тем, что позволяет рассчитать поглощенную человеком дозу от воздействия системы хранения/захоронения РАО. Одна из составляющих расчета — определение концентрации радионуклидов в водоносном горизонте (ВГ).

Несмотря на то, что круг пользователей метода камерного моделирования постоянно расширяется, а рынок программных средств постоянно пополняется совершенствующимися продуктами, до сих пор ряд вопросов, касающихся области применения метода камерного моделирования для решения задач распространения загрязнителей в ВГ, недостаточно освещен. Аттестация программных средств, используемых для оценки безопасности хранилищ РАО, первым этапом которой является их верификация, крайне актуальна, так как отечественные федеральные нормы и правила по безопасности в области использования атомной энергии (НП-016-05, НП-055-04, НП-069-06 и др.) при обосновании безопасности объектов использования атомной энергии (ОИАЭ) устанавливают необходимость применения аттестованных программных средств.

Цель настоящей работы — исследование некоторых методических особенностей применения программного комплекса Amber для оценки безопасности приповерхностного хранилища РАО. Для этого разработана и решена аналитически тестовая задача миграции радионуклидов с очень большим периодом полураспада ($10^5 - 10^6$ лет) в ВГ. Предполагалось, что скорость потока постоянна и поперечный перенос вещества между линиями тока отсутствует.

Вертикальный разрез хранилища РАО с находящимся под ним ВГ представлен на рис.1.

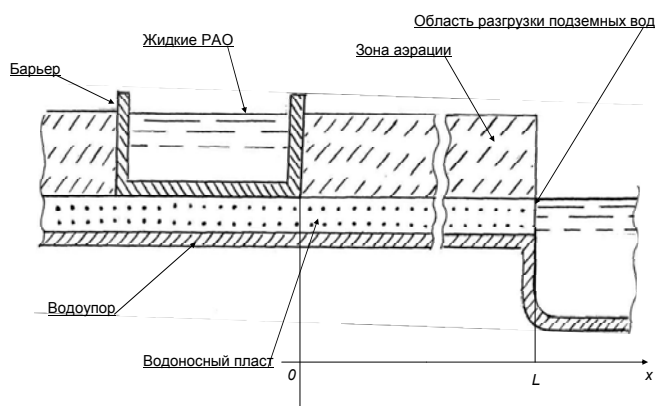


Рис. 1. Вертикальный разрез хранилища РАО с расположенным под ним ВГ: x — координата точки ВГ, отсчитываемая по течению подземных вод от хранилища РАО в сторону области разгрузки подземных вод; L — длина ВГ

Проведено сравнение результатов, полученных моделированием на Amber, с результатами аналитического решения дифференциального уравнения конвективной диффузии, или уравнения конвективно-дисперсионного массопереноса [1, 2, 3]:

$$(n_0 + K_d \rho) \frac{\partial}{\partial t} C(t, x) + V \frac{\partial}{\partial x} C(t, x) = D \frac{\partial^2}{\partial x^2} C(t, x) \quad (1)$$

с начальным условием:

$$C(0, x) = 0 \quad \text{при } x > 0; \quad (2)$$

с граничными условиями при $x = 0$ двух видов:

$$C(t, 0) = C_a H(t), \quad (3a)$$

$$C(t, 0) = C_a [H(t) - H(t - T_a)]; \quad (3b)$$

и граничным условием при $x = L$:

$$C(t, x) = 0. \quad (4)$$

В уравнении (1) и граничных условиях (2), (3a) и (3b) использовались следующие обозначения:

$C(t, x)$ – концентрация радионуклида в воде ВГ;

C_a – концентрация радионуклида в воде на входе в ВГ (при $x = 0$);

t – время (год);

x – координата точки ВГ, отсчитываемая от выхода из хранилища (м);

n_0 – активная пористость;

V – скорость фильтрации (м/год);

D – водный коэффициент молекулярной диффузии (чистый коэффициент диффузии или фильтрационный коэффициент диффузии) в отсутствие дисперсии скорости или коэффициент продольной гидродисперсии при наличии дисперсии скорости, м²/год, [2];

K_d – коэффициент распределения радионуклида между твердой и жидкой фазами среды (коэффициент межфазного распределения) (м³/кг);

ρ – объемная плотность пористой среды (масса сухого образца, деленная на объем образца), кг/м³;

L – длина ВГ (расстояние от области источника до области разгрузки подземных вод), м;

$H(t)$ – функция Хэвисайда;

T_a – длительность времени выхода активности из хранилища в водоносный горизонт, год;

N – количество камер, применяемых для моделирования в Amber.

В качестве исходных приняты следующие значения параметров ВГ:

$n_0 = 0,3$;

$V = 0,04; 0,4; 10; 100$ м/год (четыре значения);

$K_d = 0$;

$\rho = 1500$ кг/м³;

$D = 0,1; 1$ м²/год (два значения).

Рассматривалась миграция радионуклида в ВГ для двух граничных условий на входе в него:

- граничное условие «Ступенька концентрации» (3a). Принималось, что в начальный момент времени ($t = 0$) на вход в ВГ подается ступенька концентрации амплитудой C_a , то есть импульс концентрации бесконечно большой длительности (рис.2, кривая 1);
- граничное условие «Импульс концентрации» (3б). Принималось, что в начальный момент времени ($t = 0$) на вход в ВГ подается импульс

концентрации амплитудой C_a конечной длительности T_a (рис. 2, кривая 2).

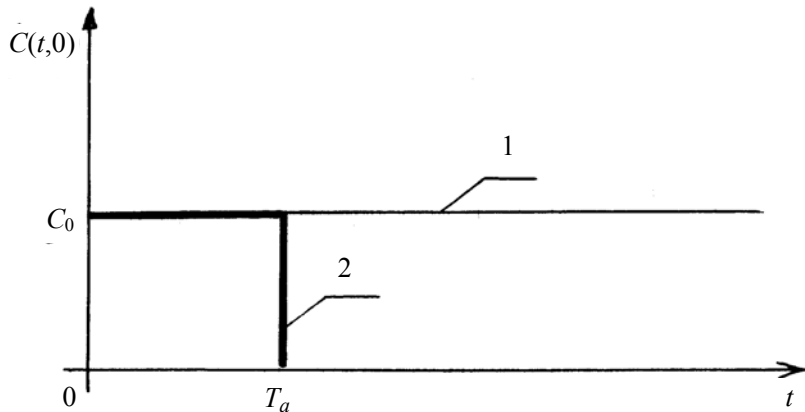


Рис.2. Граничные условия $C(t,0)$ на входе в водоносный горизонт:
1 – граничное условие «Ступенька концентрации» (3а);
2 – граничное условие «Импульс концентрации» (3б)

Рассмотрим теперь наиболее важные характеристики миграции радионуклида.

На рис. 3 показаны распределения радионуклида в ВГ в моменты времени 2, 5, 10, 14, 20, 50, 100 и 200 лет. Зависимости концентрации от координаты приведены в единицах $C/C_a = W$.

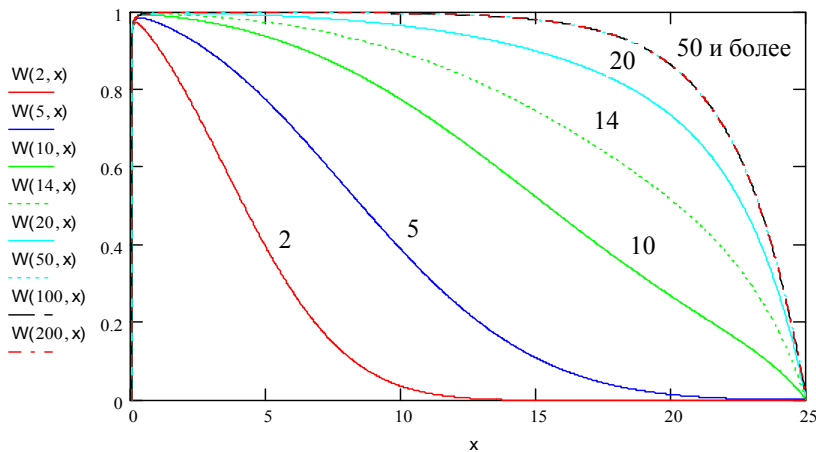


Рис.3. Распределение радионуклида в водоносном горизонте в моменты времени 2, 5, 10, 14, 20, 50, 100 и 200 лет:
параметры ВГ: $L = 25$ м, $V = 0,4$ м/год, $D = 1$ м²/год, $Pe = 10$;
граничное условие – «Ступенька концентрации»

Кривые для моментов времени 50, 100 и 200 лет совпадают. Процесс устанавливается на 50-м году, после чего идет перенос радионуклидов в область разгрузки подземных вод без изменения концентрации в ВГ. В большей части ВГ устанавливается значение концентрации, равное концентрации радионуклида в воде на входе в ВГ.

$Pe = LV/D$ – число Пекле (характеризует меру отношения конвективного переноса к диффузионному переносу [1,3]);

Зависимость концентрации от времени в точке $x = 10$ м в единицах $C/C_a = W$ приведена на рис. 4.

На рис. 4 показано, что уровень 0,1 от установившегося значения достигается через 2,5 года, уровень 0,9 от установившегося значения достигается через 14,5 лет. Длительность фронта нарастания концентрации радионуклида в данной точке ВГ, равная разности этих значений времени, $T_f = 12$ лет.

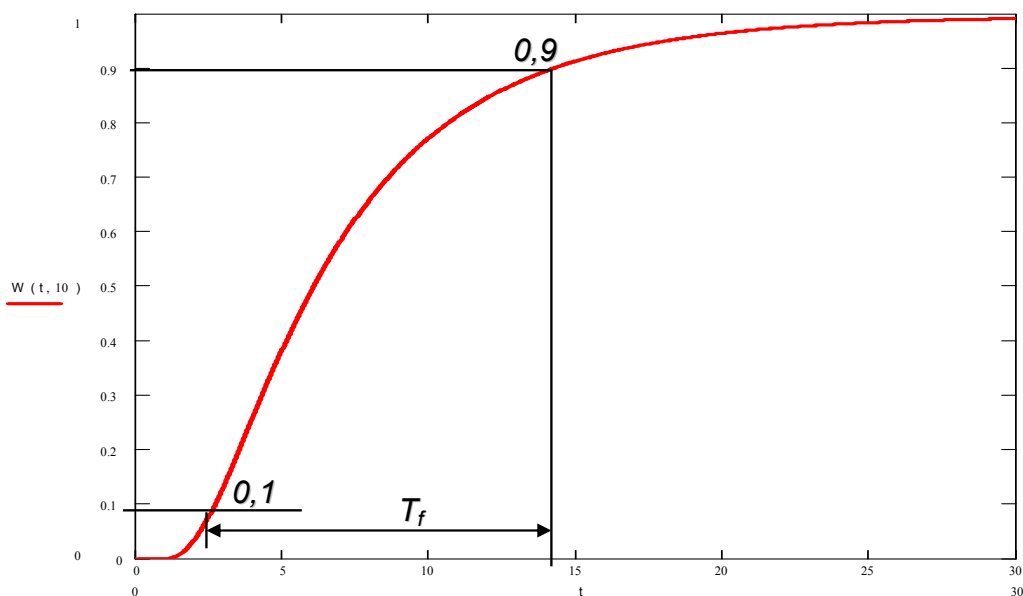


Рис. 4. Зависимость концентрации от времени в точке $x = 10$ м: параметры ВГ: $L = 25$ м, $V = 0,4$ м/год, $D = 1$ м²/год, $Pe = 10$; граничное условие – «Ступенька концентрации»

Камерное моделирование проводилось с помощью десяти, двадцати пяти и пятидесяти камер. Реализация большого количества камер затруднена из-за большой трудоемкости моделирования.

Обозначения величин, расчетные значения которых получены с помощью Amber, содержат верхний (надстрочный) индекс «А».

Сравнивались численные значения следующих характеристик процесса миграции радионуклидов в данной точке ВГ:

- концентрации радионуклидов (C и C^A соответственно);
- длительности времени достижения половинной концентрации от установившегося значения ($T_{0,5}$ и $T_{0,5}^A$ соответственно);
- длительности фронта нарастания концентрации радионуклида в данной точке ВГ (T_f и T_f^A соответственно).

Миграция радионуклида при граничном условии «Ступенька концентрации»

Граничное условие «Ступенька концентрации» применимо в практике моделирования миграции радионуклидов в тех случаях, когда время выхода накопленной активности из хранилищ РАО в ВГ очень большое, настолько что можно считать активность, вышедшую к текущему моменту времени t из хранилища, меньшей первоначальной.

Расчетное исследование выполнено для следующих соотношений между количеством камер и числом Pe :

- а) число камер N много больше числа Pe ($N \gg Pe$);
- б) число камер N сравнимо с числом Pe ($N \sim Pe$);
- в) число камер N меньше числа Pe ($N < Pe$);
- г) число камер намного меньше числа ($N \ll Pe$).

Результаты исследований приведены ниже в таблице 1. Обозначения величин, расчетные значения которых получены с помощью Amber, содержат верхний (надстрочный) индекс «А».

Из таблицы 1 видно, что отклонение значений характеристик миграции, полученных с помощью Amber, от значений, полученных путем непосредственного решения уравнения (1), могут быть довольно значительными. Эти отклонения являются погрешностью камерного моделирования.

Наибольшее отклонение результатов камерного моделирования от аналитических решений проявляется при определении длительности фронта нарастания концентрации радионуклида в данной точке ВГ. При выполнении условия $N \ll Pe$ рассчитанная при помощи Amber T_f^A , оказывается больше полученной аналитически T_f в 13 – 356 раз, то есть более, чем на 1 – 2,5 порядка. Поясним это на примере.

На рис. 5 показана зависимость концентрации от времени в точке $x = 200$ м одного и того же ВГ, полученная в результате аналитического решения (верхняя часть рисунка) и моделированием на Amber (нижняя часть рисунка). T_f и T_f^A соответственно 0,005 года и 1,0 год.

T_f^A , рассчитанная с использованием Amber в 200 раз больше.

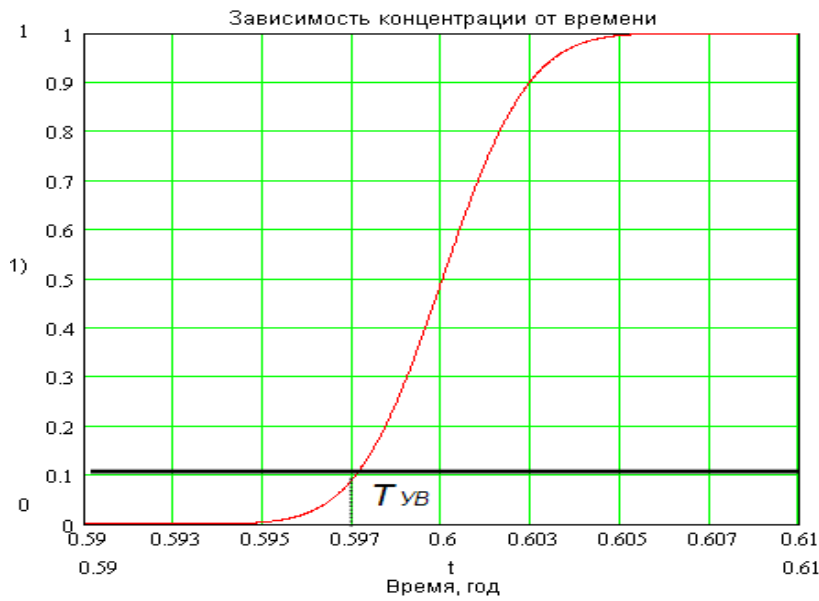
При этом, если контрольный уровень равен 0,1 от установившегося значения (в качестве контрольных уровней концентрации радионуклидов в ВГ могут быть использованы значения уровней вмешательства по воде УВ, приведенные в НРБ-99, приложение 2), то время достижения этого уровня:

- при моделировании на Amber $T_{ky}^A = 0,15$ года;
- при аналитическом решении $T_{ky} = 0,6$ года.

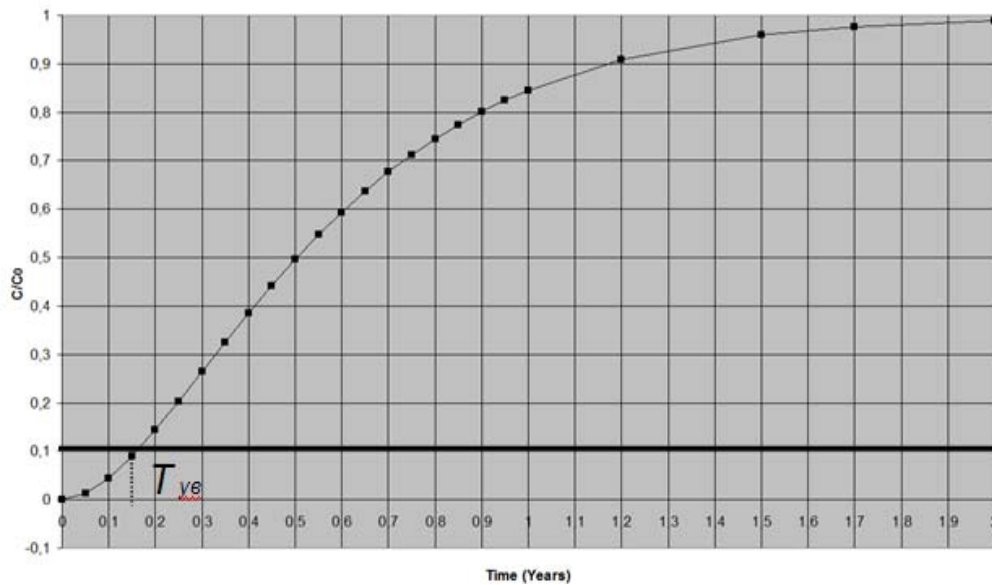
То есть Amber дает значение T_{ky}^A , в 4 раза меньшее по сравнению с T_{ky} , полученном аналитически.

Следует отметить, что значения 0,15 и 0,6 года получены в отсутствии сорбции. С учетом сорбции эти времена будут естественно больше, в частности, могут быть соответственно 30 и 120 лет (то есть один или четыре периода полураспада стронция или цезия), но их отношение остается 4:1.

Но если значение контрольного уровня равно 0,01 и меньше, то отношение указанных времен будет гораздо больше и составит $10^2 - 10^5$.



Результат аналитического решения



Результат моделирования на Amber'e при $N=25$

Рис. 5. Зависимость концентрации от времени в точке $x = 200$ м:
 параметры водоносного горизонта: $L = 2500$ м, $V = 100$ м/год,
 $D = 0,1$ м²/год, $Pe = 2500000$;
 граничное условие – «Ступенька концентрации»;
 контрольный уровень равен 0,1 от установившегося значения

Примечание [к1]: На рис. 5
 вверху заменить $T_{ув}$ на $T_{кy}$, а
 внизу – на $T_{кy}^A$!!!

Таблица 1

Характеристики миграции

Условие	Параметры	Характеристика	Обозначение	N = 10		N = 25		N = 50	
				Значение характеристики в точке x					
				x = 5 м	x = 22,5 м	x = 5 м	x = 22 м	x = 5 м	x = 22 м
N >> Pe	L = 25 м, V=0,04 м/год, D = 1 м ² /год, Pe = 1	Достигаемый уровень концентрации	C/C_0	0,87	0,15	0,87	0,18	0,87	0,18
			C^A/C_0	0,97	0,41	0,97	0,41	0,96	0,40
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	37,5	169	37,5	165	37,5	165
			$T_{0,5}^A$	8,6	66	14	75	16,2	78
		Длительность фронта (год)	T_f	27,6	43,6	27,6	43,6	27,6	43,6
			T_f^A	50,9	113,6	69,2	122,4	75,0	125,9
N ≥ Pe	L = 25 м, V=0,4 м/год, D = 1 м ² /год, Pe = 10	Достигаемый уровень концентрации	C/C_0	1	0,63	1	0,7	1	0,7
			C^A/C_0	1	0,93	1	0,97	1	0,98
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	0,95	15,3	0,69	15,0	0,69	15,0
			$T_{0,5}^A$	0,8	15,4	0,97	15,6	1,2	15,8
		Длительность фронта (год)	T_f	4,2	15,7	3,5	15,7	3,5	15,7
			T_f^A	3,2	16,2	3,1	13,8	3,2	12,8

Условие	Параметры	Характеристика	Обозначение	N = 10		N = 25		N = 50	
				Значение характеристики в точке x					
				x = 25 м	x = 225 м	x = 20 м	x = 220 м	x = 20 м	x = 220 м
	$L = 250$ м, $V=0,04$ м/год, $D = 1$ м ² /год, $Pe = 10$	Достижимый уровень концентрации	C/C_0	1	0,63	1	0,7	1	0,7
			C^A/C_0	1	0,92	1	0,96	1	0,97
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	97,3	1349	69,7	1335	69,7	1335
			$T_{0,5}^A$	15,5	1500	49	1517	80	1560
		Длительность фронта (год)	T_f	424,5	1569	351,8	1568	351,8	1568
			T_f^A	54,1	1733	203,0	1534	250,0	1460
$N < Pe$	$L = 250$ м, $V=0,4$ м/год, $D = 1$ м ² /год, $Pe = 100$	Достижимый уровень концентрации		x = 25 м	x = 225 м	x = 30 м	x = 220 м	x = 30 м	x = 220 м
			C/C_0	1	1	1	1	1	1
		Время достижения уровня 0,5 (год)	C^A/C_0	1	1	1	1	1	1
			$T_{0,5}$	15	-	18,8	-	18,8	-
		Длительность фронта (год)	$T_{0,5}^A$	7,5	155	18,3	159	19,5	159
			T_f	21,5	-	19,3	-	19,3	-
	T_f^A	24,3	144,7	21,5	102,9	19,0	71,9		

Условие	Параметры	Характеристика	Обозначение	N = 10		N = 25		N = 50	
				Значение характеристики в точке x					
				x = 25 м	x = 225 м	x = 20 м	x = 220 м	x = 20 м	x = 220 м
N << Pe	L = 250 м, V=10 м/год, D = 0,1 м ² /год, Pe = 25000	Достижимый уровень концентрации	C/C_0	1	1	1	1	1	1
			C^A/C_0	1	1	1	1	1	1
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	0,8	6,8	0,6	6,6	0,6	6,6
			$T_{0,5}^A$	0,5	6,5	0,5	6,5	0,55	6,4
		Длительность фронта (год)	T_f	0,05	0,2	0,05	0,2	0,05	0,2
			T_f^A	1,7	5,7	1,0	3,6	0,7	2,6
N << Pe	L = 2500 м, V=10 м/год, D = 0,1 м ² /год, Pe = 250000	Достижимый уровень концентрации	C/C_0	1	1	1	1	1	1
			C^A/C_0	1	1	1	1	1	1
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	7,5	66,5	6	66	6	66
			$T_{0,5}^A$	5,3	72	5,0	65	5,5	67
		Длительность фронта (год)	T_f	0,17	0,52	0,15	0,51	0,15	0,51
			T_f^A	16,4	57,3	10,1	37,6	7,4	27,1

Условие	Параметры	Характеристика	Обозначение	N = 10		N = 25		N = 50	
				Значение характеристики в точке x					
				x = 25 м	x = 225 м	x = 20 м	x = 220 м	x = 20 м	x = 220 м
$N \ll Pe$	$L = 250$ м, $V = 100$ м/год, $D = 0,1$ м ² /год, $Pe = 250000$	Достижимый уровень концентрации	C/C_0	1	1	1	1	1	1
			C^A/C_0	1	1	1	1	1	1
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	0,08	0,68	0,06	0,66	0,06	0,66
			$T_{0,5}^A$	0,05	0,65	0,05	0,65	0,06	0,65
		Длительность фронта (год)	T_f	$1,7 \cdot 10^{-3}$	$5,17 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$5,11 \cdot 10^{-3}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$	$5,11 \cdot 10^{-3}$
			T_f^A	0,17	0,57	0,11	0,36	0,09	0,26
$N \ll Pe$	$L = 2500$ м, $V = 100$ м/год, $D = 0,1$ м ² /год, $Pe = 2500000$	Достижимый уровень концентрации	C/C_0	1	1	1	1	1	1
			C^A/C_0	1	1	1	1	1	1
		Время достижения уровня 0,5 (год)	$T_{0,5}$	0,75	6,75	0,6	6,6	0,6	6,6
			$T_{0,5}^A$	0,52	6,5	0,5	6,5	0,55	6,5
		Длительность фронта (год)	T_f	$5,44 \cdot 10^{-3}$	$1,6 \cdot 10^{-2}$	$4,87 \cdot 10^{-3}$	$1,6 \cdot 10^{-2}$	$4,87 \cdot 10^{-3}$	$1,6 \cdot 10^{-2}$
			T_f^A	1,65	5,70	1,01	3,62	0,74	2,62

Представленные в табл. 1 значения характеристик миграции радионуклида при граничном условии «Ступенька концентрации» обобщены и приведены в табл. 2.

Таблица 2

Оценка особенностей применения программного комплекса Amber

Число камер	Возможность получения заведомо заниженного значения времени достижения контрольного уровня	Погрешность длительности фронта относительная $(T_f^A - T_f) / T_f$, %	Примечание
$N \gg Pe$	Обеспечивается	100 – 200 ($T_f^A > T_f$)	
$N \sim Pe$	Практически обеспечивается	-30 ($T_f^A < T_f$)	Модуль погрешности длительности фронта не превышает 30 % во всем ВГ за исключением ближней зоны
$N < Pe$	Обеспечивается	10 – 120 ($T_f^A > T_f$)	
$N \ll Pe$	Обеспечивается	$1,2 \cdot 10^3 - 3,5 \cdot 10^4$ ($T_f^A \gg T_f$)	Значительное занижение времени достижения контрольного уровня

Миграция радионуклида при граничном условии «Импульс концентрации»

Граничное условие «Импульс концентрации» применимо для моделирования миграции радионуклидов, когда вся накопленная в хранилище активность выходит в ВГ за ограниченное время.

Выше была рассмотрена такая важная характеристика водоносного горизонта при миграции радионуклидов, как длительность фронта нарастания концентрации. Показано, что при моделировании протяженных ВГ, то есть при условии $N \ll Pe$, Amber дает значение T_f^A , на три с половиной порядка превышающее значение T_f , полученное аналитически.

Именно для этого случая представляется наиболее актуальным рассмотреть прохождение через ВГ импульсов концентрации длительностью T_a порядка $T_f \ll T_f^A$.

Рассмотрим, как повлияет условие $N \ll Pe$, при граничном условии «Ступенька концентрации», на прохождение импульсов конечной длительности. Отклонение T_f^A от T_f , как показано выше для этого случая, составляет 50 – 3000 раз ($L = 2500$ м).

ВГ длиной 2500 м моделировался десятью камерами ($N = 10$) при следующих параметрах:

$V = 10$ м/год;
 $D = 0,1$ м²/год,
 Для указанных значений V , D и L $Pe = 250000$.
 $T_a = 1, 3, 10, 30, 100, 200$ и 300 лет.

График зависимости концентрации от времени, полученный на Amber для точки ВГ на расстоянии $x = 2250$ м от области источника, приведен на рис. 6. При тех же самых параметрах ВГ результаты аналитического решения показаны на рис. 7. Из рис. 6 и 7 видно, что при таком нарушении условия $N \sim Pe$ оценка безопасности хранилищ на основе результатов применения Amber приводит к занижению значения амплитуды импульса концентрации, масштаб которого будет тем больше, чем больше отношение T_f / T_a для рассматриваемой точки ВГ. При $T_a = 1$ год Amber дает в 100 раз меньшее значение амплитуды импульса концентрации. Максимальное значение концентрации в этом случае достигается на 67 году.

Аналогичные результаты получены и для ВГ длиной 2500 м со скоростью фильтрации 100 м/год. При $T_a = 0,1$ год Amber дает в 100 раз меньшее значение амплитуды импульса концентрации, но максимальное значение концентрации в этом случае достигается за время 6,7 года.

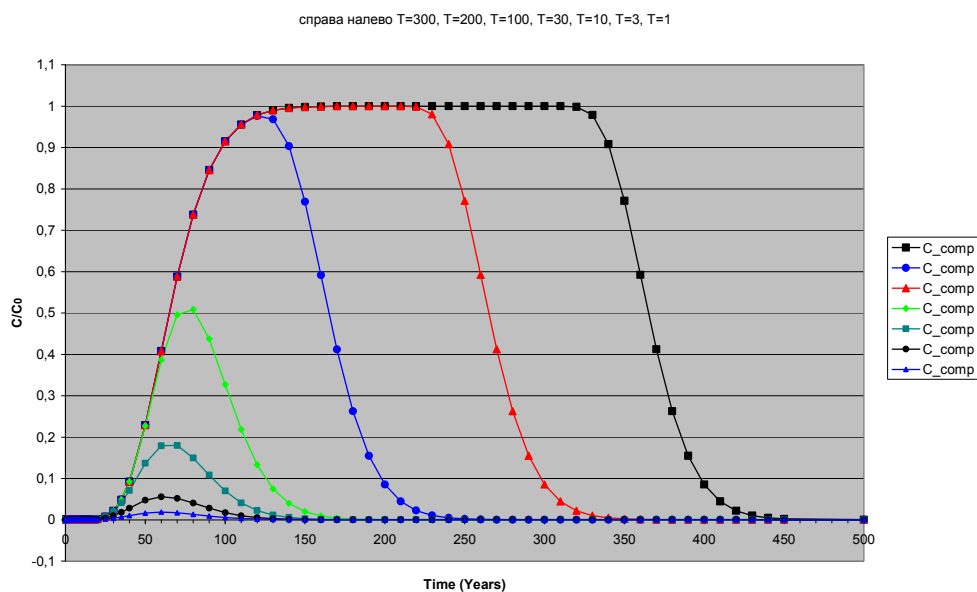


Рис. 6. Зависимость концентрации от времени в точке $x = 2250$ м для значений длительности выхода активности из хранилища в ВГ $T_a = 1, 3, 10, 30, 100, 200$ и 300 лет (расчет проведен с помощью Amber)

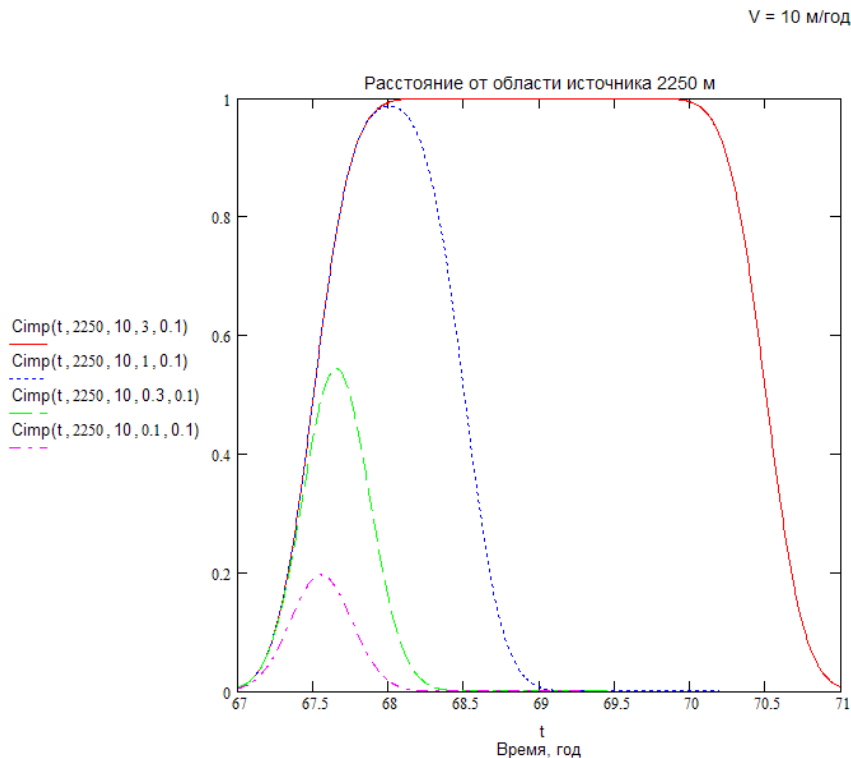


Рис. 7. Зависимость концентрации от времени в точке $x = 2250$ м для значений длительности выхода активности из хранилища в ВГ $T_a = 0,1; 0,3; 1,0$ и $3,0$ года (расчет проведен аналитически)

Выводы

Проведено сравнение значений характеристик миграции радионуклида в ВГ, полученных моделированием с помощью программного комплекса Amber 4.4, с результатами аналитического решения дифференциального уравнения конвективной диффузии, или уравнения конвективно-дисперсионного массопереноса. Моделирование проводилось для десяти, двадцати пяти и пятидесяти камер.

Рассмотрена миграция нуклида в ВГ для двух граничных условий на выходе из хранилища в ВГ: «Ступенька концентрации» (соответствует бесконечной длительности времени выхода активности в ВГ) и «Импульс концентрации» (соответствует ограниченной длительности времени выхода активности в ВГ).

Исследование выполнено для различных соотношений между количеством камер N и числом Пекле Pe .

Выявлены ограничения на использование программного комплекса Amber:

- показано, что Amber может применяться для моделирования миграции радионуклидов в ВГ небольшой длины, когда удается реализовать условие $N \sim Pe$, рекомендуемое разработчиком программного комплекса. Погрешность моделирования не превышает 50%;
- показано, что погрешность моделирования при выполнении условия $N \gg Pe$ ($Pe \sim 1$) не уменьшается с увеличением количества камер.

При этом:

- а) погрешность определения установившегося значения концентрации радионуклидов составляет 10 % в ближней зоне и 120 % – в дальней зоне;
- б) погрешность определения T_f составляет 50 – 75 % в ближней зоне и 120 % – в дальней зоне;
- показано, что если Amber применять для моделирования миграции радионуклидов в ВГ большой длины, не выполняя при этом условие $N \sim Pe$, то в этом случае оценка безопасности хранилищ на основе результатов применения Amber'a приводит:
 - а) при граничном условии «Ступенька концентрации» – к значительному занижению времени достижения контрольного уровня. T_f^A , рассчитанная при помощи Amber, оказывается значительно больше (в десятки – сотни раз), чем T_f , полученная аналитически и, соответственно, время достижения концентрации контрольного уровня оказывается значительно меньшим;
 - б) при граничном условии «Импульс концентрации» – к занижению амплитуды импульса концентрации, масштаб которого будет тем больше, чем больше отношение T_f^A / T_a для рассматриваемой точки ВГ. В моделируемом ВГ при $T_a = 1$ год Amber дает в 100 раз меньшее значение амплитуды импульса концентрации.

Использованная литература

1. Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities. Results of a co-ordinated research project. Volume II: Test cases. International Atomic Energy Agency, Vienna 2004.
2. Шестаков В.М. Гидрогеодинамика. М.: МГУ, 1995.
3. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Проблемы гидрогеологии. Т.1 Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. -М.: 1998.