

Parallel efficiency analysis of reactive transport simulations using the GeRa software

Анализ параллельной эффективности модели переноса с учетом химических взаимодействий в программном комплексе GeRa

И.В.Капырин, [И.Н.Коньшин](#)

ИБРАЭ РАН, ИВМ РАН; ФИЦ ИУ РАН, СУ

Igor.konshin@gmail.com

Кратко о GeRa

Программный комплекс GeRa



GeRa – разработка ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН по заказу ГК «Росатом» для эффективного решения задач геофильтрации и геомиграции загрязнений в поровых и трещиноватых средах

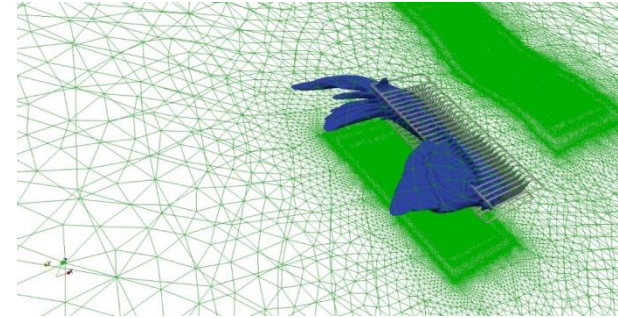
Сферы применения

- Оценка долговременной безопасности пунктов захоронения РАО и других объектов атомной отрасли
- Задачи защиты подземных вод от загрязнений различной природы
- Оценка запасов подземных вод
- Обоснование и сопровождение систем мониторинга и реабилитации
- Прогнозы подтопления и расчет дренажей

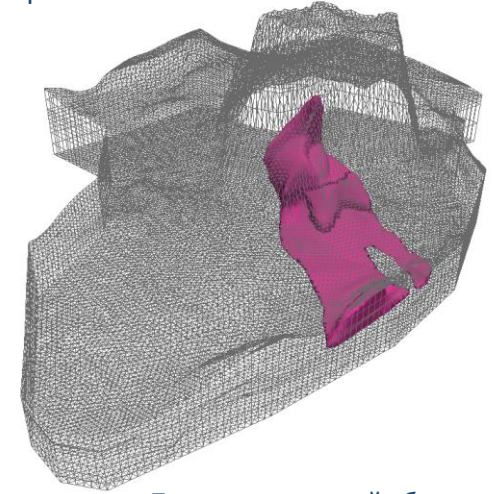
Объекты использования:

- площадки АО «СХК», ФГУП «ГХК», ФГУП «ПО «Маяк», Белоярской АЭС, ФГУП «Радон», АО «Радиовый институт» и др.
- ПГЗ ЖРО «Железногорский» и «Димитровградский»
- проект ПГЗРО на участке Енисейский

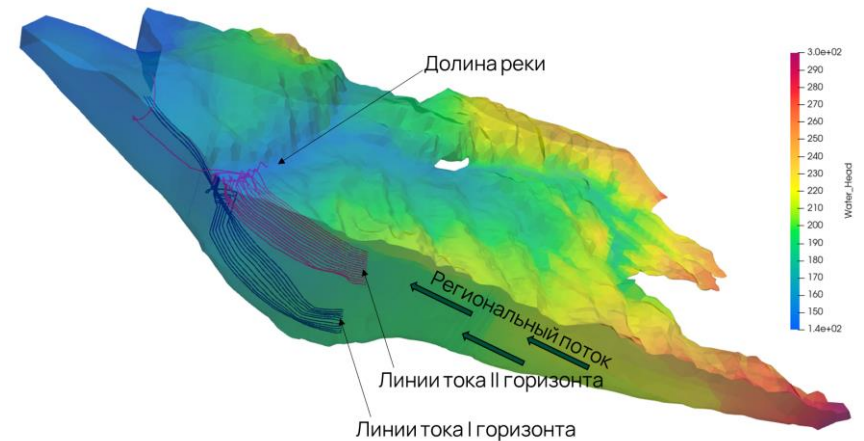
Расчетные ореолы загрязнения



Одна из концепций ПГЗРО



Приповерхностный объект



Траектории миграции ЖРО

GeRa /V1

аттестована
в 2018 году

- фильтрация в режимах различного насыщения
- адвективно-дисперсионно-диффузионный перенос, сорбция
- некоторые химические взаимодействия в системе вода-порода
- радиоактивный распад с учетом цепочек
- плотностная конвекция

GeRa /V2

аттестована
в 2021 г.

- двойная пористость
- тепловые процессы (тепловыделение, конвекция)
- двухфазная фильтрация вода-воздух
- совместное моделирование подземных и поверхностных вод
- переменные параметры сред
- расширенный спектр моделируемых химических процессов

GeRa /V3

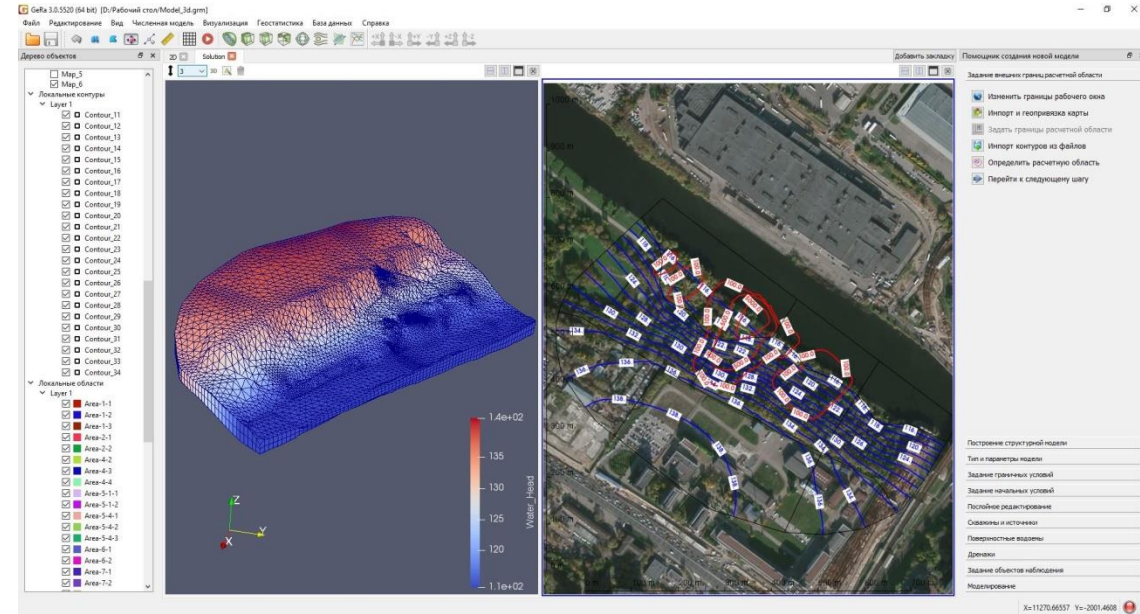
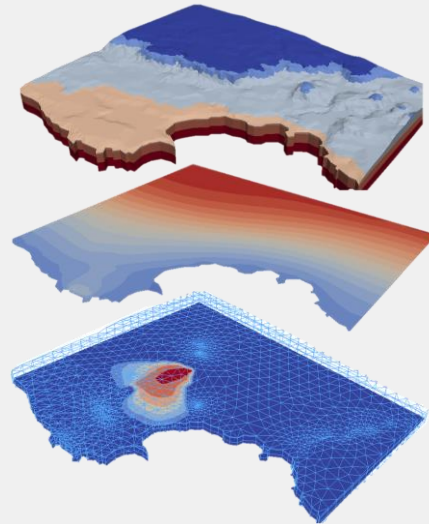
2020-н.в.

- фильтрация и перенос в трещиноватых средах
- прикладные инструменты для решения гидрогеологических задач, не связанных с миграцией радионуклидов
- растворение и осаждение матрицы породы
- гидрология
- перенос в двухфазном потоке

Возможности GeRa на сегодняшний день

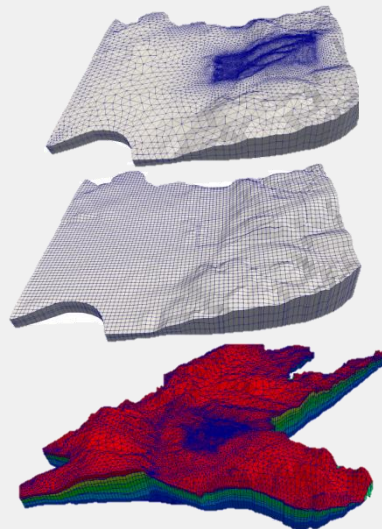
Моделирование:

- геологическое
- геофильтрационное
- геомиграционное
- + оценка неопределенностей (с MOUSE)
- + расчет дозовых нагрузок
- + расчеты на СуперЭВМ



Сеточные генераторы:

- Сетки учитывают геологическую структуру, в т.ч., выклинивания
- Высокая точность благодаря адаптации сеток к локальным особенностям
- Повышение скорости расчетов благодаря меньшему числу ячеек



Платформа – INMOST (www.inmost.org)

[Капырин И.В. Состояние и перспективы развития методов геомиграционного моделирования для анализа вопросов долгосрочного обеспечения радиационной безопасности. // Вопросы радиационной безопасности, 2022, №4 (108), с. 3-16.]

[Капырин И.В. Расчетные коды для гидрогеологического моделирования в задачах оценки безопасности ОИАЭ. // Радиоактивные отходы, 2022, №2 (19), с.105-115.]

[Parallel finite volume computation on general meshes. Vassilevski, Y., Terekhov, K., Nikitin, K., Kapryin, I. Springer Nature, 2020, 186 p.]

Модели переноса с химическими взаимодействиями

Подходы в GeRa: перенос с химическими взаимодействиями



Постоянный K_d (изотермы Генри, Ленгмюра, Фрейндлиха)



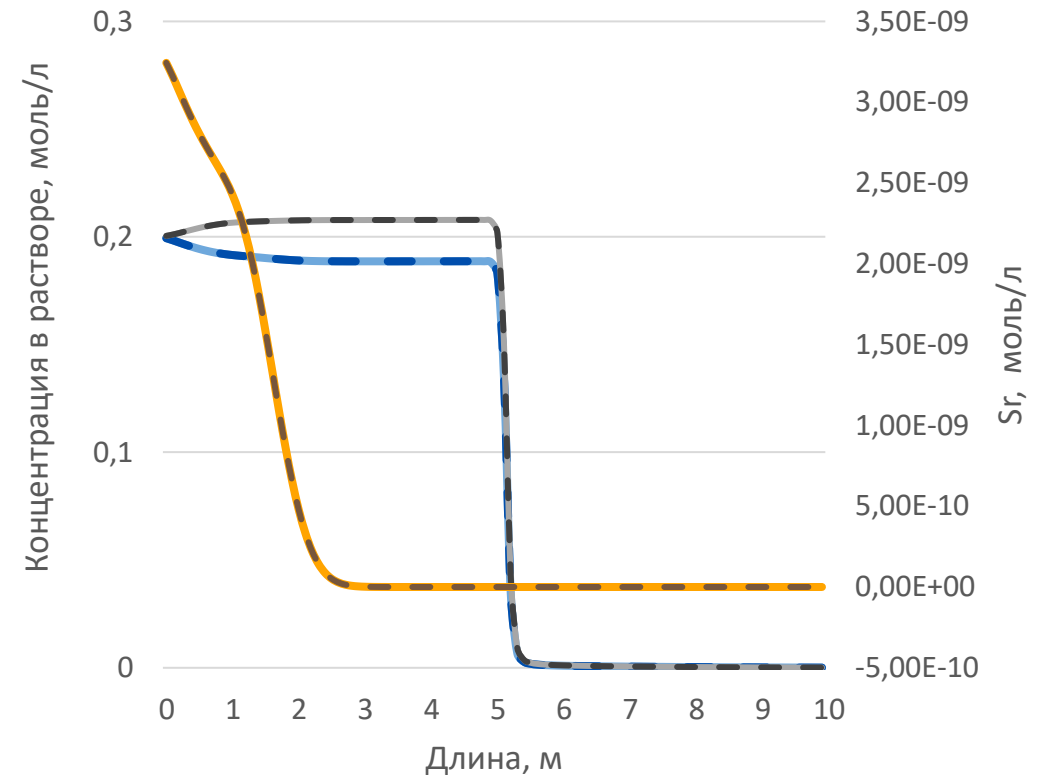
K_d зависит от концентрации основной компоненты



Расчет химического равновесия в каждой ячейке на каждом шаге по времени: сопряжение с PHREEQC (схема расщепления либо итерационное сопряжение переноса и химии)

Сравнение GeRa и PHREEQC

Закачка раствора нитрата (0,2 моль/л) со стронцием ($3,3 \cdot 10^{-9}$ моль/л)



— Na, GeRa
— Nitrate, GeRa2
— Sr, GeRa (ось справа)
— Na, PhreeqC 3.6
— Nitrate, PhreeqC 3.6
— Sr, PhreeqC 3.6 (ось справа)

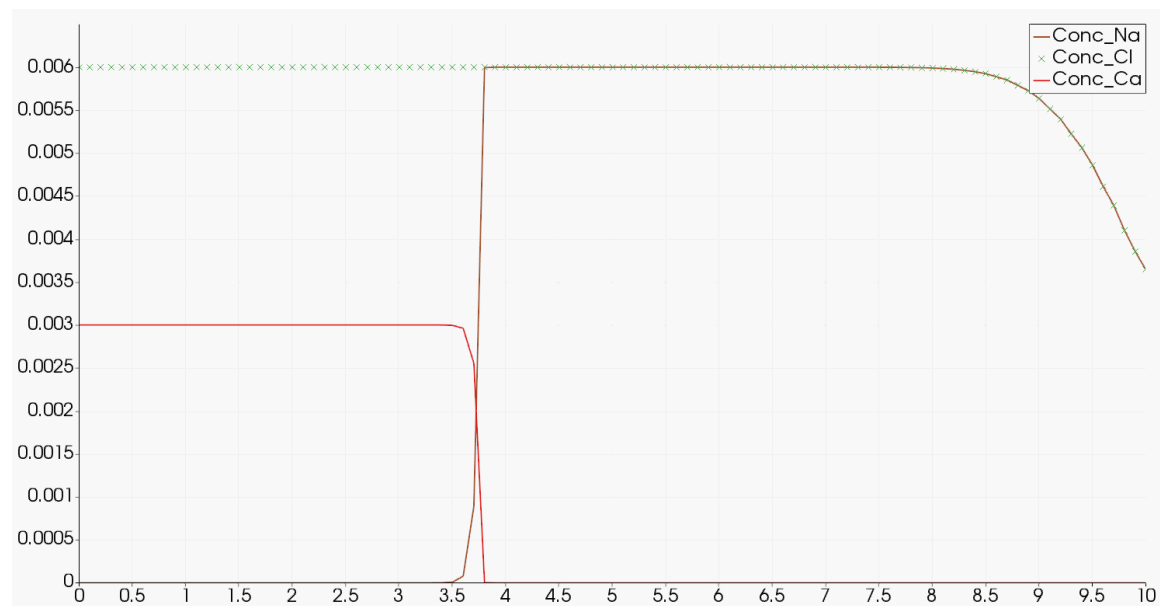
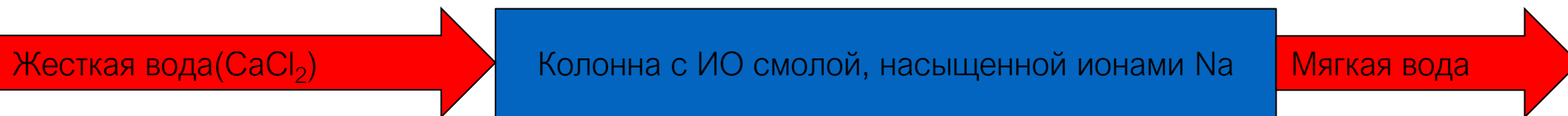
[Капырин И.В., Болдырев К.А. Моделирование процессов переноса с учетом химических взаимодействий в программном комплексе GeRa. // Радиоактивные отходы. 2024. № 1 (26). С. 84—92.]

[K.A. Boldyrev et. al, Strontium transport modeling in high-concentrated nitrate solution in deep liquid radioactive waste repository, Journal of Contaminant Hydrology, Volume 256, 2023, 104172]

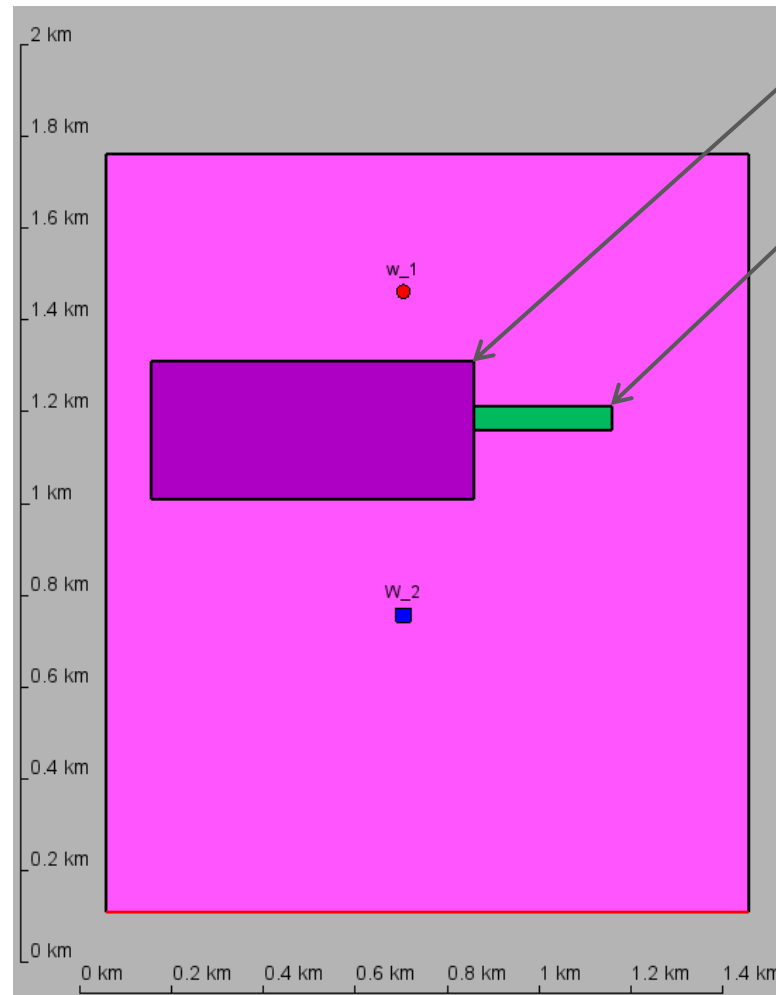
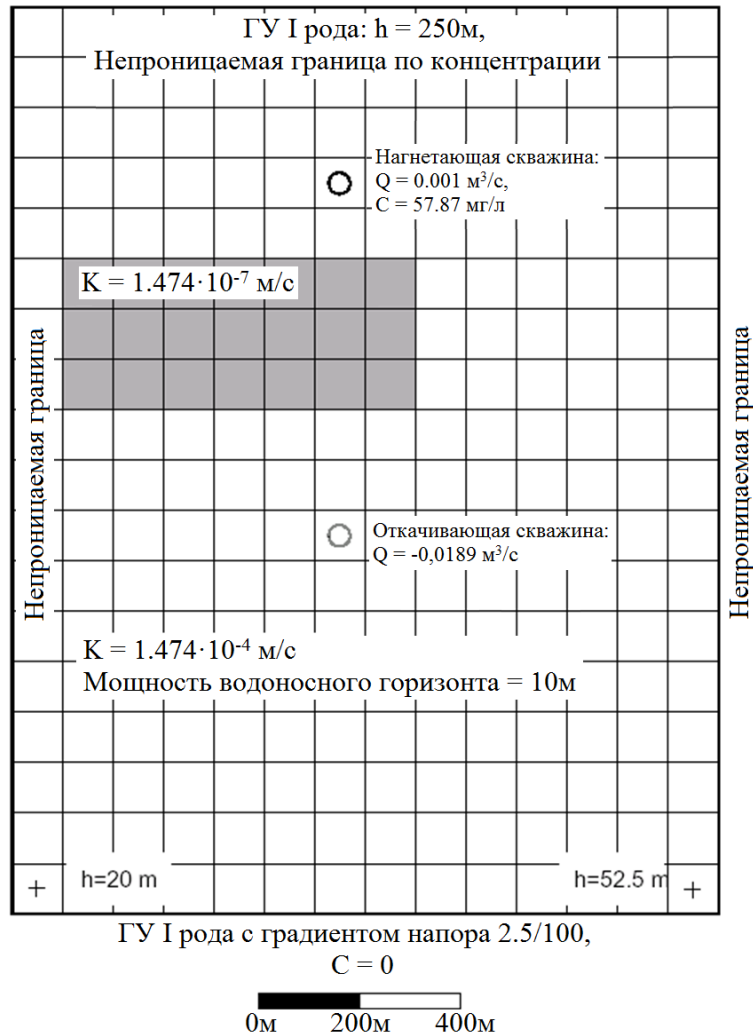
пример: ионный обмен

Фильтрация солей жесткости

- Жесткая вода содержит соли Ca и Mg.
- Частое решение: колонны с ионообменной смолой.
- Замещение Ca и Mg на Na.

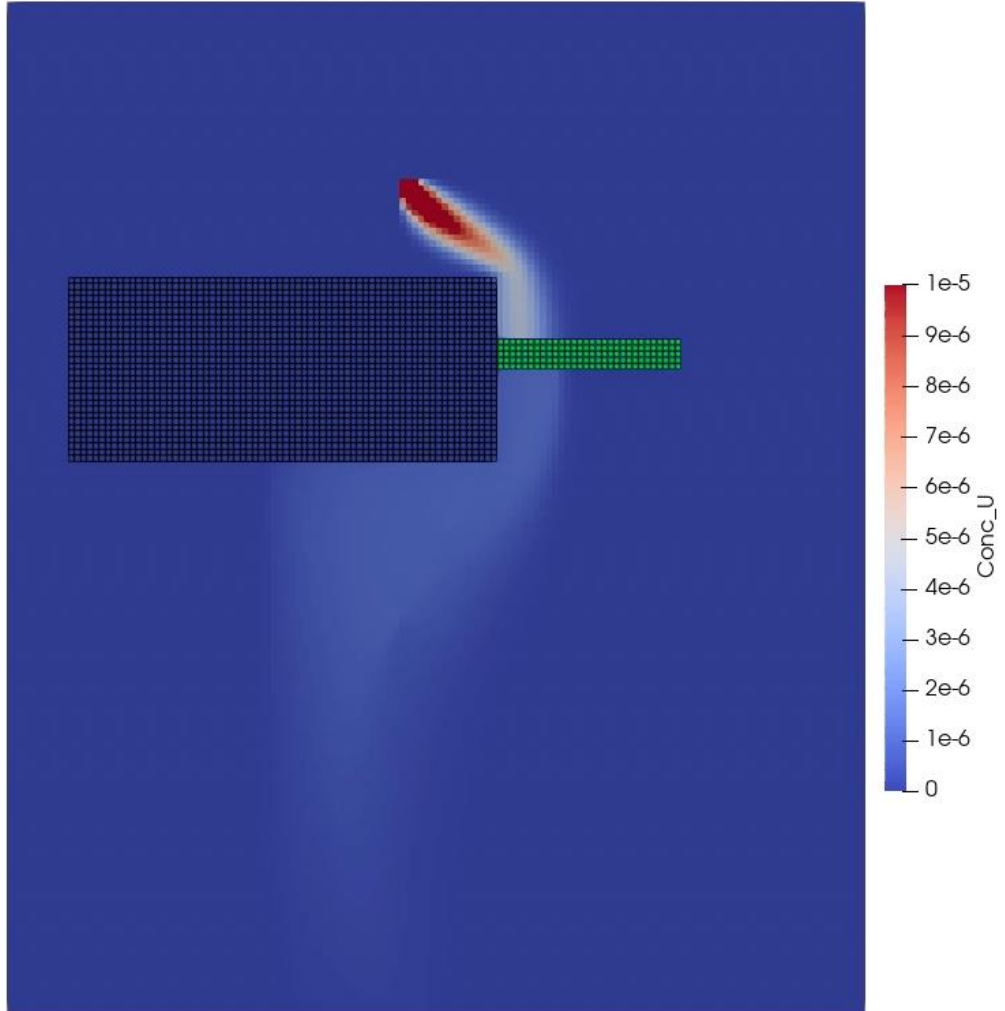


пример: поверхностное комплексообразование Проницаемый реакционный барьер

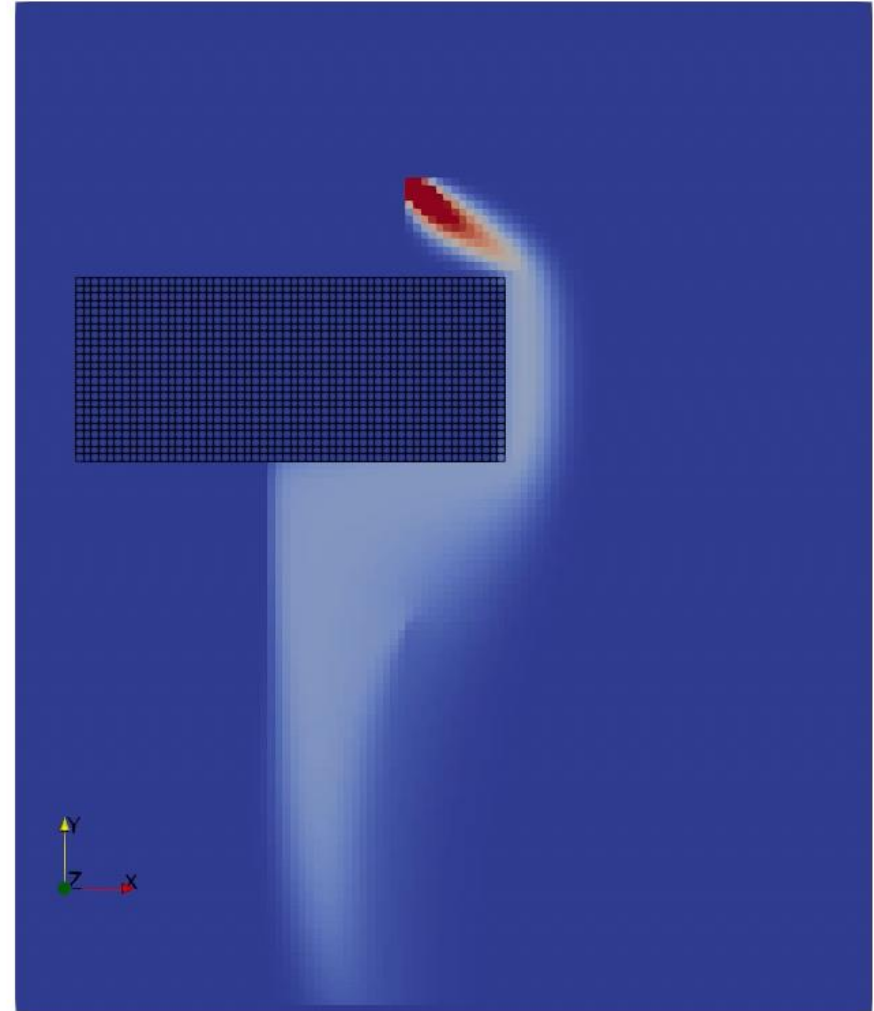


- В нагнетательную скважину закачивается урансодержащий раствор
- В качестве ПРБ может быть использовано металлическое железо

Проницаемый реакционный барьер



С ПРБ



Без ПРБ

Математическая модель переноса с растворением и осаждением



$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{u} = R(C, C_s), \quad \text{– закон сохранения массы раствора.} \quad \vec{u} = -K \nabla h \quad \text{– закон Дарси.}$$

$$\frac{\partial(\varphi C + C_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u} C) - \nabla \cdot D \nabla C = 0, \quad \text{– перенос суммарных концентраций компонентов.}$$

$$\varphi = \varphi_0 - \frac{C_s}{\rho_s} + s_{stor} (h - h_0) \quad \text{– зависимость пористости от концентрации твердых фаз и напора.}$$

$$K = K_0 \frac{\varphi^3}{(1 - \varphi)^2} \frac{(1 - \varphi_0)^2}{\varphi_0^3} \quad \text{– зависимость Козени-Кармана.}$$

$$d_m = \left(\frac{\varphi}{\varphi_0} \right)^3 d_{m0} \quad \text{– закон Арчи.}$$

+ химическое равновесие.

Схема дискретизации по времени



1. Решение задачи фильтрации:
$$S_{stor} \frac{h^{n+1} - h^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \vec{u}^{n+1};$$
2. Решение задачи переноса:
$$\tilde{\varphi}^n \frac{C^{n+1,1} - C^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\vec{u}^{n+1} C^n) + \nabla \cdot D^n \nabla C^{n+1};$$
3. Расчет химического равновесия (PHREEQC):
$$(C^{n+1,2}, C_s^{n+1,2}) = C(C^{n+1,1}, C_s^n).$$
4. Пересчет пористости:
$$\tilde{\varphi}^{n+1} = \varphi_0 - \frac{C_s^{n+1,2}}{\rho_s}.$$
5. Корректировка концентрации растворенных веществ в соответствии с ЗСМ:
$$\tilde{\varphi}^{n+1} C^{n+1} = \tilde{\varphi}^n C^{n+1,2}.$$

Анализ параллельной эффективности для MPI и OpenMP реализаций

PhreeqcRM: MPI vs. OpenMP



```
PhreeqcRM ( int nxyz, int thread_count_or_communicator,  
            PHRQ_io * io = NULL );
```

```
int nxyz = 40;
```

```
#ifdef USE_MPI
```

```
    PhreeqcRM phreeqc_rm(nxyz, MPI_COMM_WORLD);
```

```
    int mpi_myself;
```

```
    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &mpi_myself);
```

```
    if (mpi_myself > 0)
```

```
        phreeqc_rm.MpiWorker();
```

```
#else
```

```
    int nthreads = 3;
```

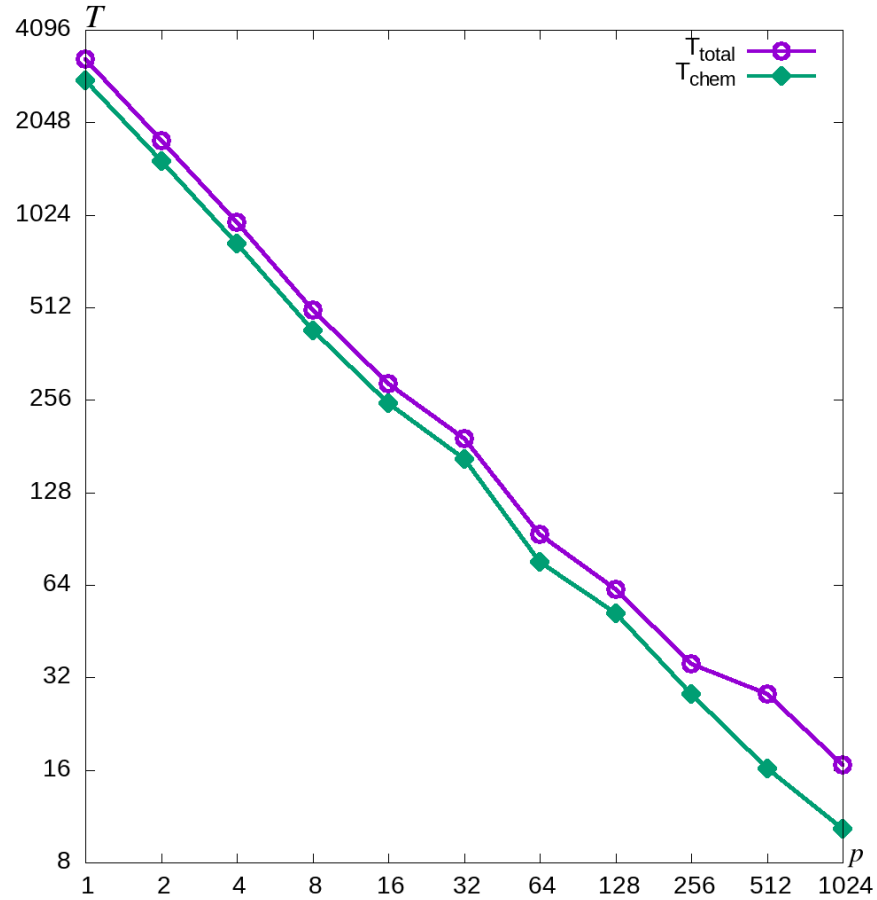
```
    PhreeqcRM phreeqc_rm(nxyz, nthreads);
```

```
#endif
```

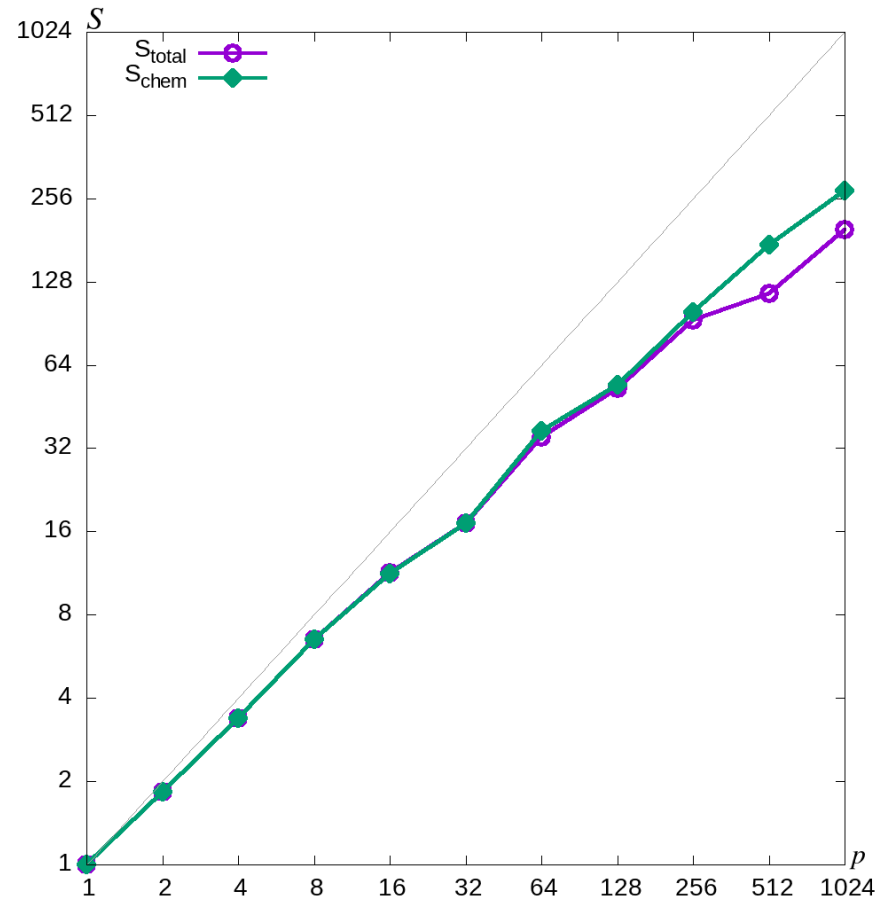
Ускорение на основе MPI

Кластер ИВМ РАН: узлы Arbyte Alkazar R2Q50 G5, в каждом 2x20 Intel Xeon Gold 6230@2.10 GHz

Расчет задачи о проницаемом реакционном барьере



Время счета – число ядер



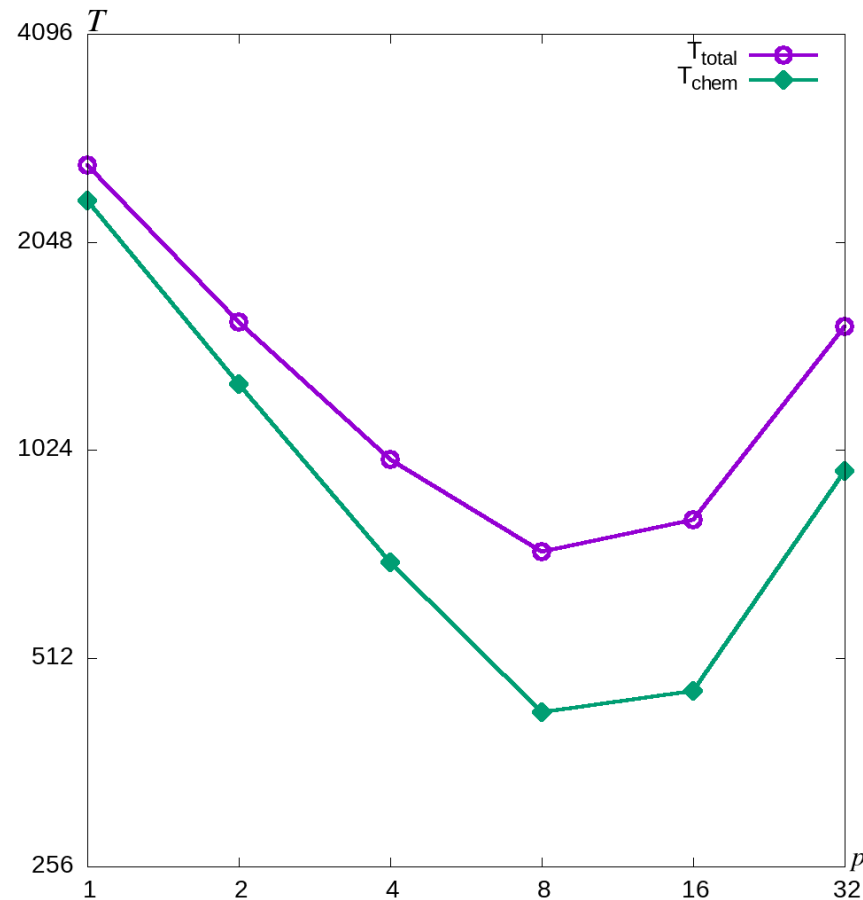
Ускорение – число ядер

Ускорение на основе OpenMP

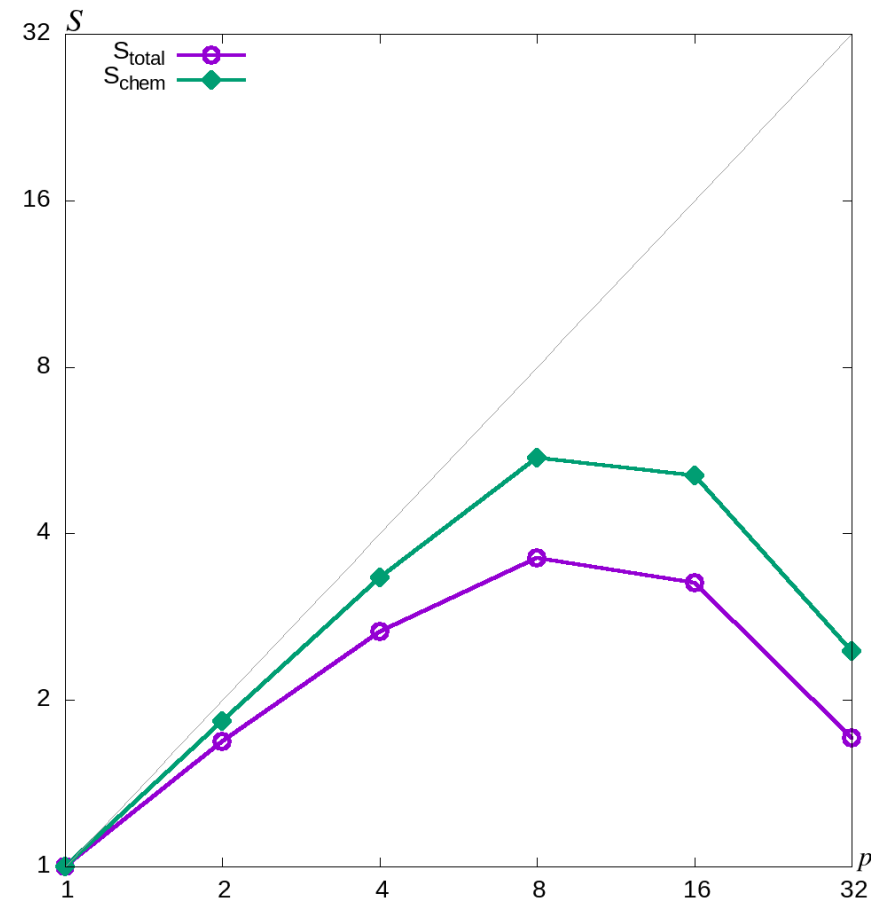


ПК: 16-ядерный процессор AMD Ryzen 9 5950X, 3.40 GHz

Расчет задачи о проницаемом реакционном барьере



Время счета – число нитей

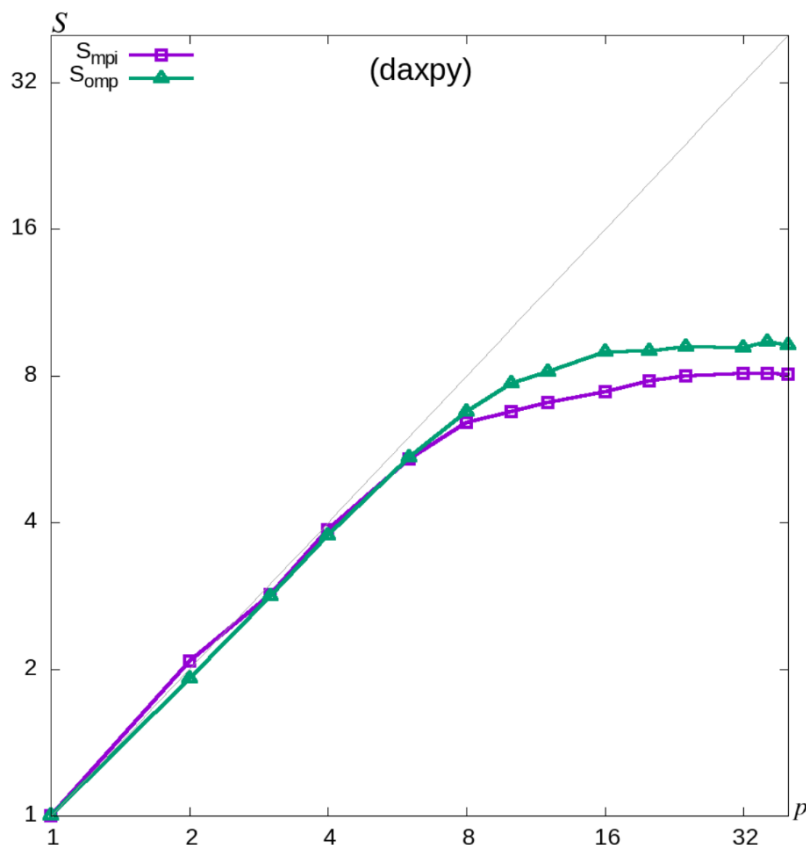


Ускорение – число нитей

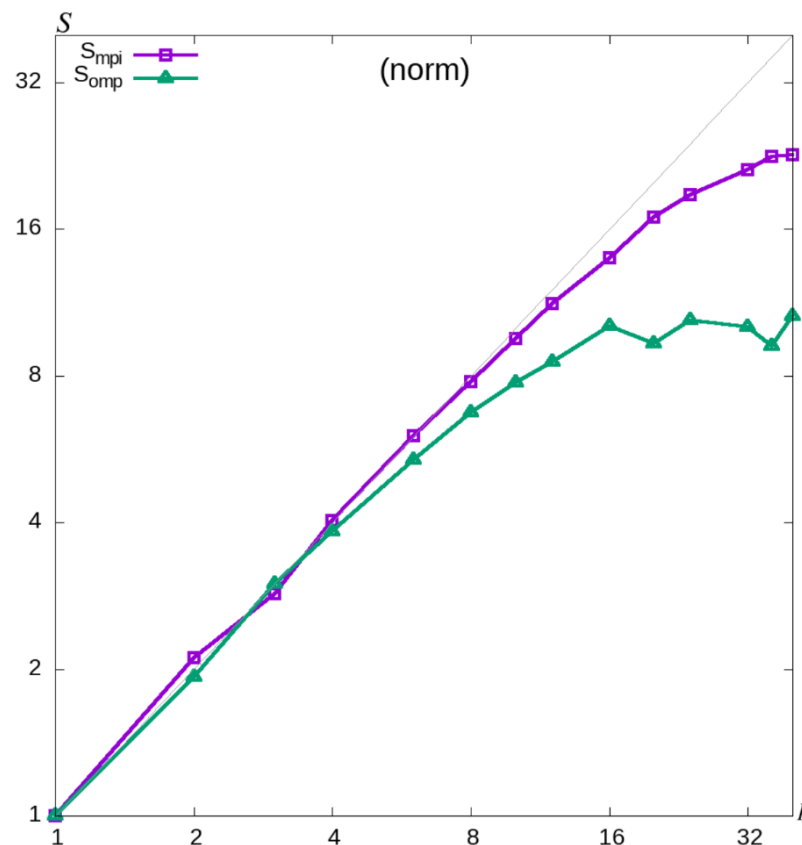
Ускорение MPI vs. OpenMP для обычных daxpy и norm



Кластер ИВМ РАН: 1 узел Arbyte Alkazar R2Q50 G5, 2x20 Intel Xeon Gold 6230@2.10 GHz



```
#pragma omp parallel for  
for (i=0; i<n; i++)  
    y[i] += a * x[i];
```



```
double sum = 0.0, summ;  
#pragma omp parallel for reduction (+:sum)  
for (i=0; i<n; i++)  
    sum += x[i] * x[i];  
MPI_Allreduce(&tmp, &summ, 1, MPI_DOUBLE, MPI_SUM, MPI_COMM_WORLD);  
sum = sqrt(summ);
```

Итоги

- Разработана модель, позволяющая учитывать влияние процессов растворения-осаждения на фильтрационные и миграционные свойства пород.
- Реализован широкий спектр моделей равновесных химических процессов, необходимых для анализа ближней и дальней зон объектов.
- Эффективное распараллеливание: MPI на кластерах; OpenMP на персональных ЭВМ.



gera.ibrae.ac.ru