

# Код GeRa: гидрогеологическое моделирование в задачах радиационной и химической безопасности

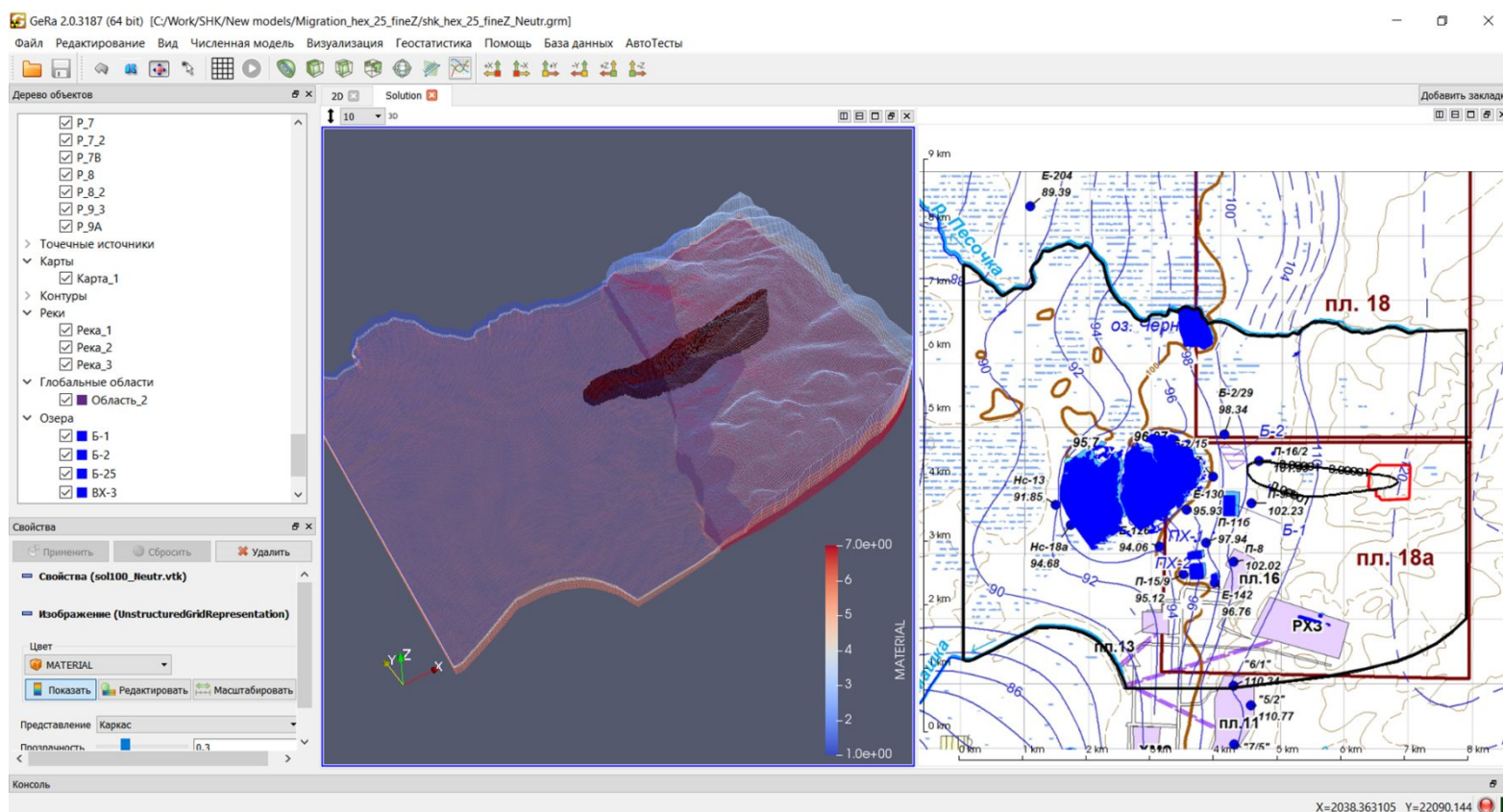
Капырин И.В.<sup>1,2</sup>, Крамаренко В.К.<sup>1,2</sup>, Коньшин И.Н.<sup>1,2</sup>

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

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

# Что такое расчетный код GeRa?

GeRa – программный комплекс трехмерного гидрогеологического моделирования, разработанный ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН для эффективного решения задач геофильтрации и геомиграции загрязнений в подземных водах



Разработка – с середины 2012 года.  
Разработчики: ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН

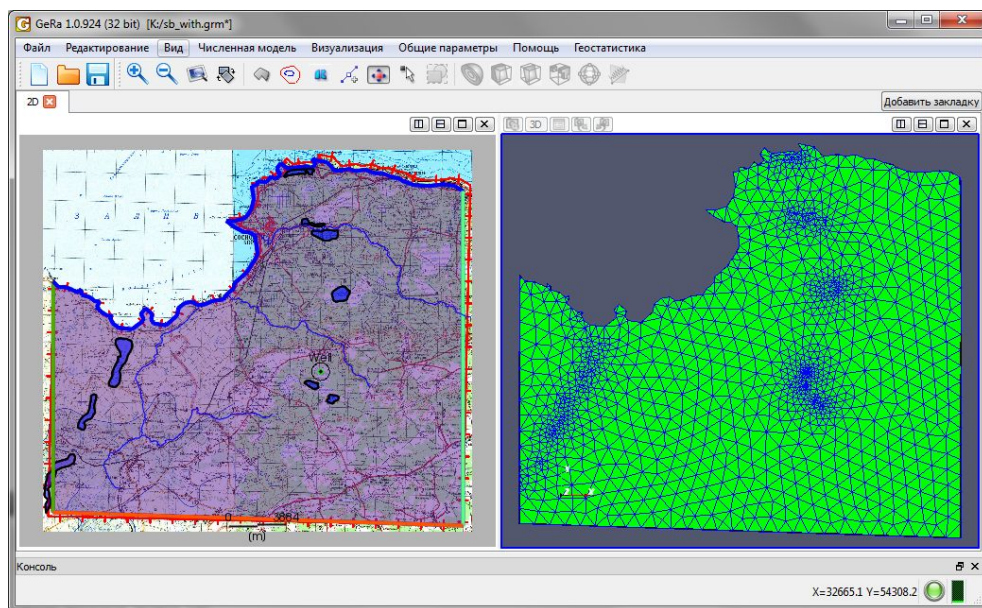
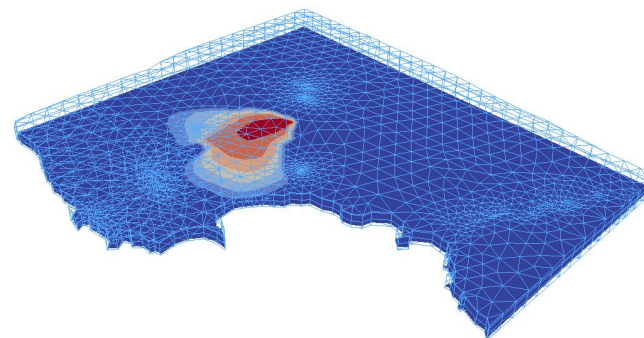
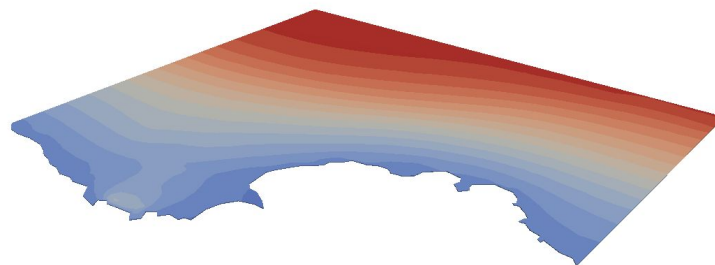
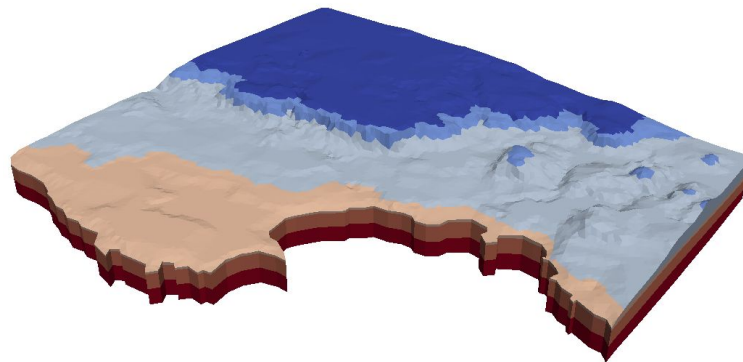
# Сферы возможного применения

1. Оценка безопасности пунктов захоронения РАО и других объектов атомной отрасли.
2. Задачи защиты подземных вод от загрязнений различной природы.
3. Оценка запасов подземных вод.
4. Обоснование и сопровождение систем мониторинга и реабилитации.
5. Прогнозы подтопления и расчет дренажей.

# Возможности кода GeRa сегодня

Моделирование:

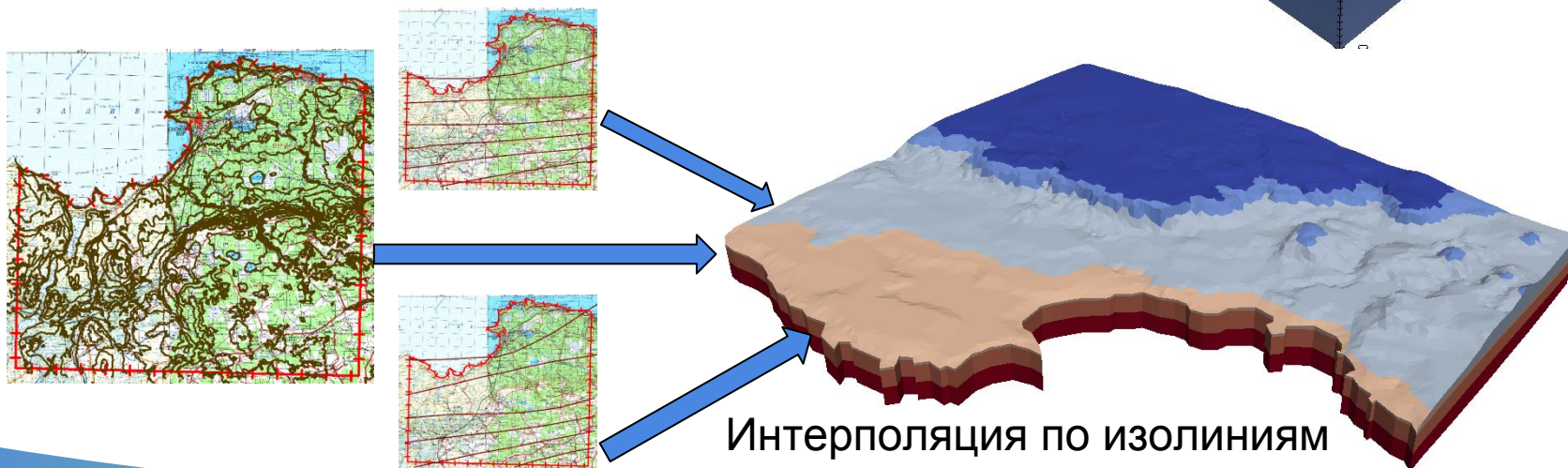
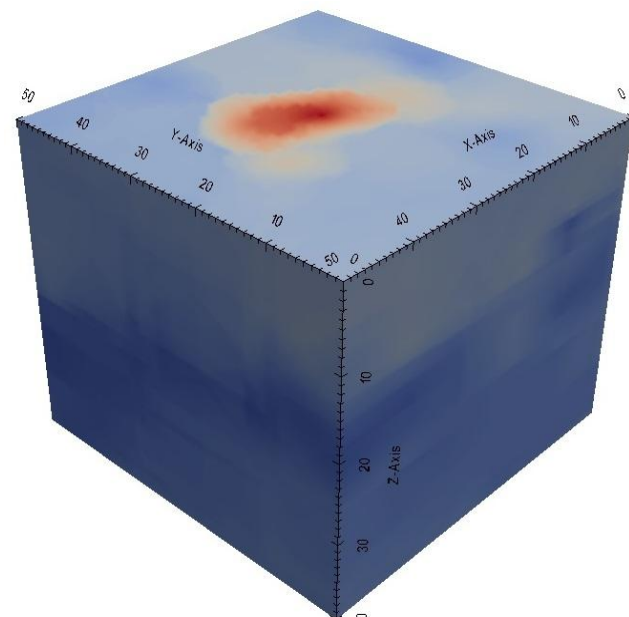
- геологическое
  - геофильтрационное
  - геомиграционное
- + оценка достоверности  
+ расчет дозовых нагрузок



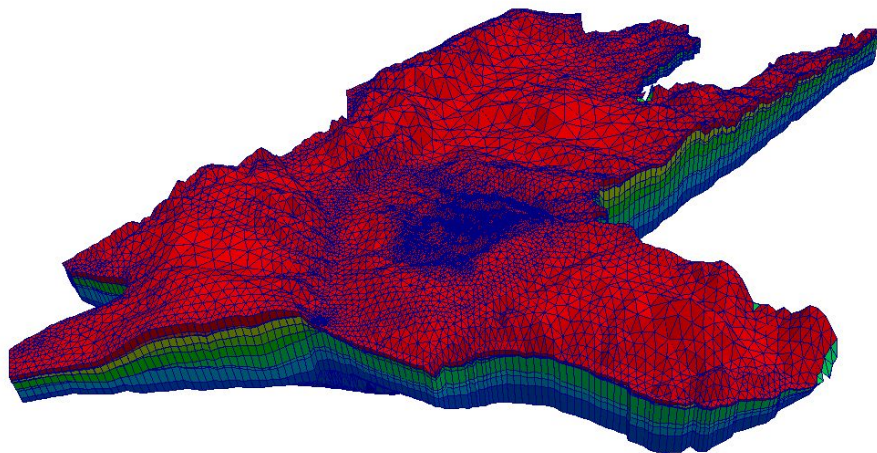
# Геологическое моделирование

- Геостатистические методы.
- Методы интерполяции данных.
- Интерполяция по изолиниям и их импорт.
- Двумерный и трехмерный вариограммный анализ данных.
- Импорт готовых 2D и 3D полей параметров.

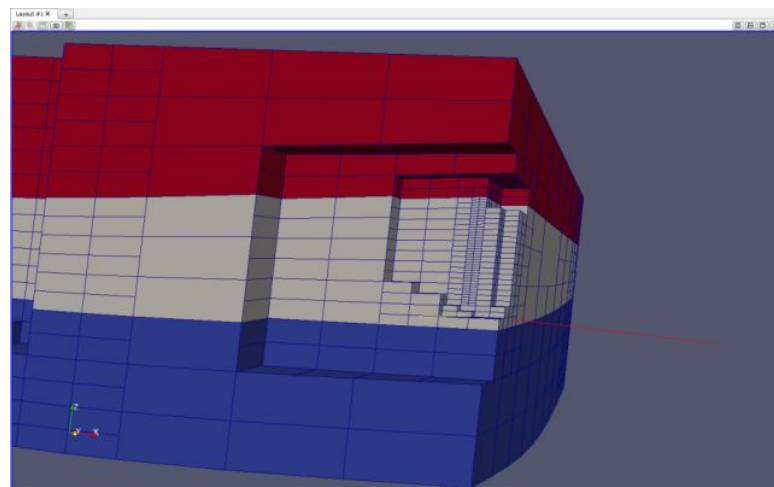
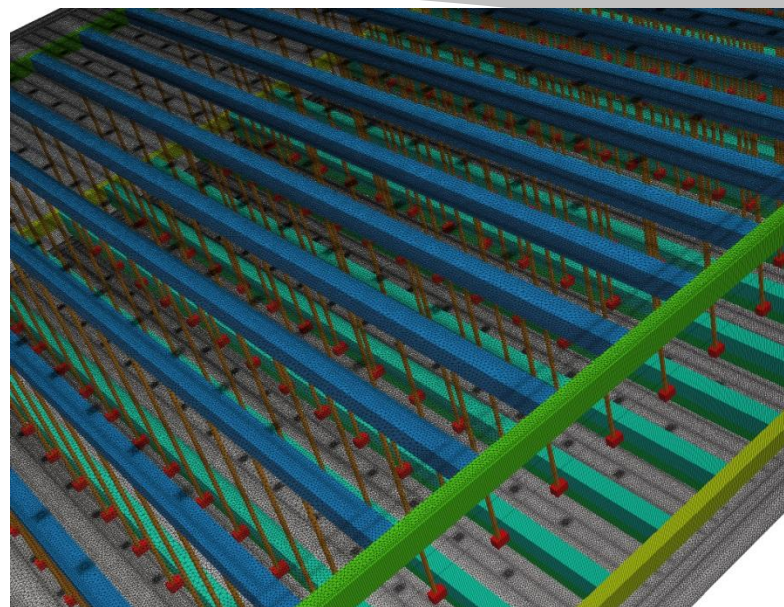
3D неоднородность



# Генераторы расчетных сеток



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



# Методы дискретизации

Метод конечных объемов (МКО) на сетках общего вида

- Задача фильтрации:
  - Линейная двухточечная схема.
  - Многоточечная O-схема.
  - Нелинейный монотонный МКО.
- Задача переноса:
  - Явная адвекция (TVD) – неявная диффузия (МКО).
  - Полностью неявный линейный МКО 1-го порядка.
  - Нелинейный монотонный МКО.

# Специальный модуль расчета дозовых нагрузок

GeRa-Aqua

Люди (водопользование) Травянистые растения Крупнорогатый скот

Нуклиды: Sr-90; Cs-137; Загрузка файла: Загрузить файл Разделитель: ;

Удельная активность нуклидов

Нуклид	Пресная вода (Бк/кг)	Морская вода (Бк/кг)	Воздух (Бк/м <sup>3</sup> )
Sr-90	1	0.4	10
Cs-137	2	0.5	15

Внешнее облучение

Пресная вода (время пребывания, сутки)

В воде (купание): 2

На плавсредствах: 2

Рыболовство: 3

На пляже: 4

Заливные земли: 10

Орошаемые земли: 20 V (м3): 10 S (м2): 100

Суммарное время пребывания: 41

Доза (мкЗв/год): 5.48E+003

Морская вода (время пребывания, сутки)

В воде (купание): 3

На плавсредствах: 0

Рыболовство: 3

На пляже: 6

В зоне прилива-отлива: 2

Суммарное время пребывания: 14

Доза (мкЗв/год): 1.59E+000

Ингаляция

Количество воздуха за один вдох, м3: 0.0009

Скорость дыхания, вдохов/сек: 0.35

Доза (мкЗв/год): 6.42E-004

Потребление продуктов питания (кг/год)

Продукт	0-1г	1-2г	2-7лет	7-12лет	12-17лет	>17лет (взр)
Вода питьевая	195	329	462	645	754	730
Мясо	17	29	41	57	67	65
Молоко и молочные г	63	106	149	208	243	235
Рыба морская	2	3	4	6	7	7
Рыба речная	2	5	5	7	8	8
Картофель	32	54	76	106	124	120
Овощи и бахчевые	25	43	60	84	98	95
Мука, крупы, бобовые	27	45	63	88	103	100
Яйца	4	7	10	13	16	15

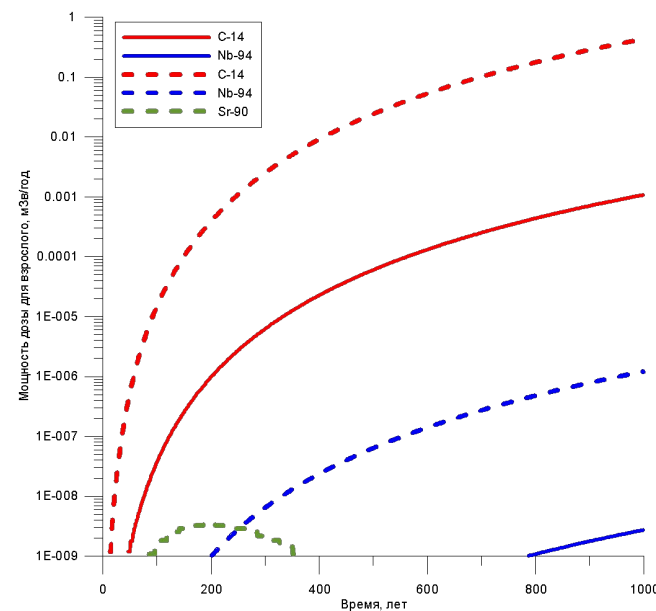
Время выпаса коров на заливных лугах, в долях года: 0.1

Время выпаса коров на орошаемых угодьях, в долях года: 0.45

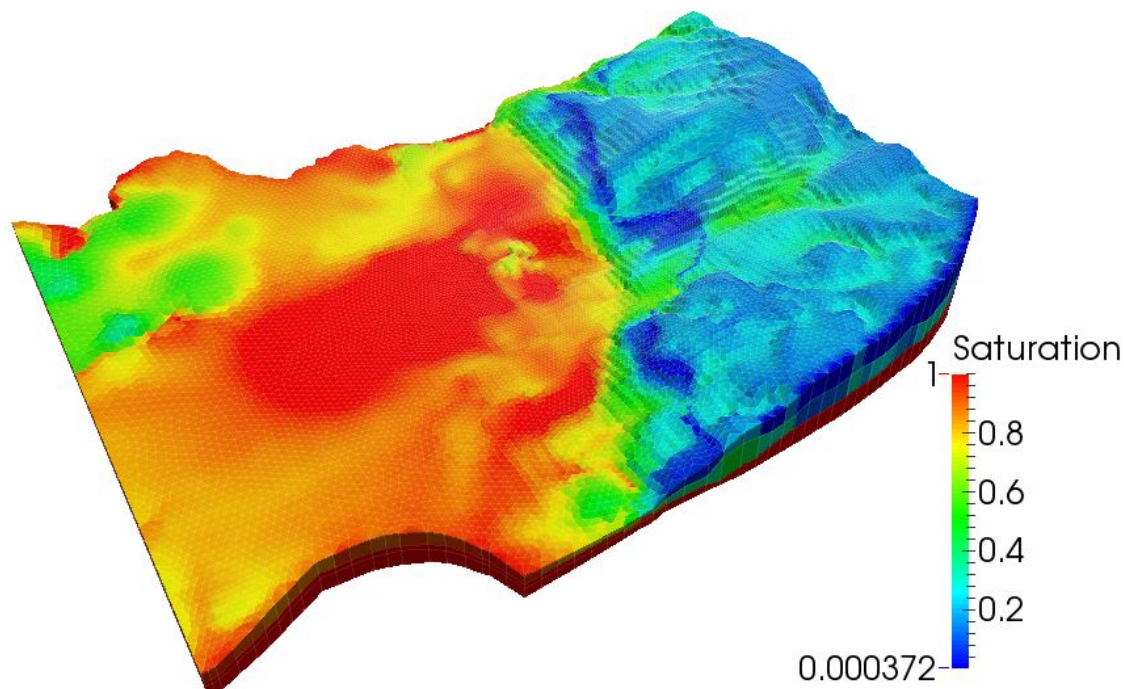
Доза (мкЗв/год): 4.74E+001

Посчитать дозу

Суммарная доза (мкЗв/год): 5.53E+003



# Внедрение метода Ньютона для задач напорно-безнапорной и ненасыщенной фильтрации



Распределение насыщенности на треугольно-призматической сетке из 25000 ячеек

Метод	Время счета, часы	# шагов
Пикара	16	29980
Ньютона	0.1	26

(\*) Denis Anuprienko, Ivan Kapyrin Modeling Groundwater Flow in Unconfined Conditions: Numerical Model and Solvers' Efficiency // Lobachevskii Journal of Mathematics. – 2018. – №39(7). – P. 867-873.

# Основные моделируемые процессы

1

- **Фильтрация** (напорная, безнапорная, ненасыщенная, двухфазная);

2

- **Адвективно-диффузионно-дисперсионный массоперенос** (в гомогенной и двухпористой средах);

3

- **Геохимия** (равновесная и неравновесная, по изотермам и с расчетом реакций);

4

- **Цепочки радиоактивного распада;**

5

- **Плотностная конвекция;**

6

- **Теплоперенос, тепловыделение** при радиоактивном распаде;

7

- **Тепловая конвекция** с переменной вязкостью растворов;

8

- **Коллоидный перенос веществ;**

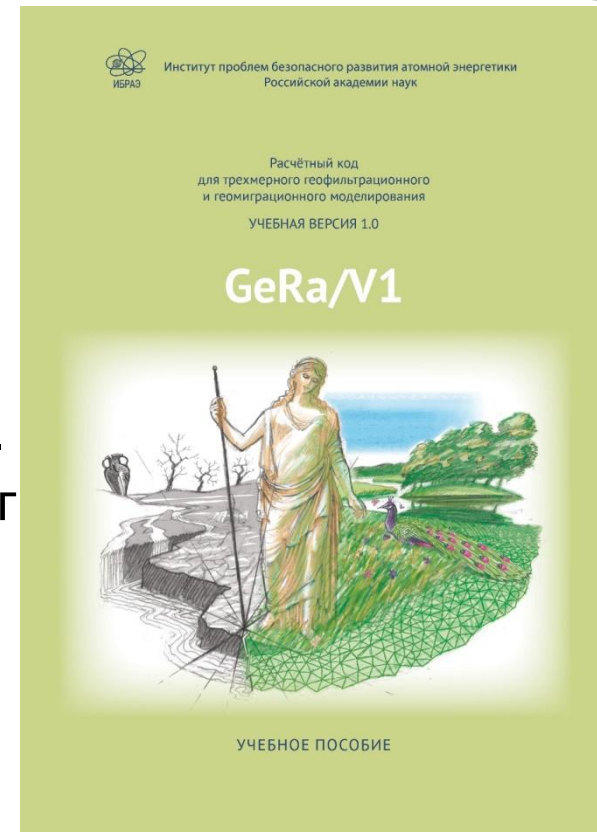
9

- **Геомеханические процессы**

10

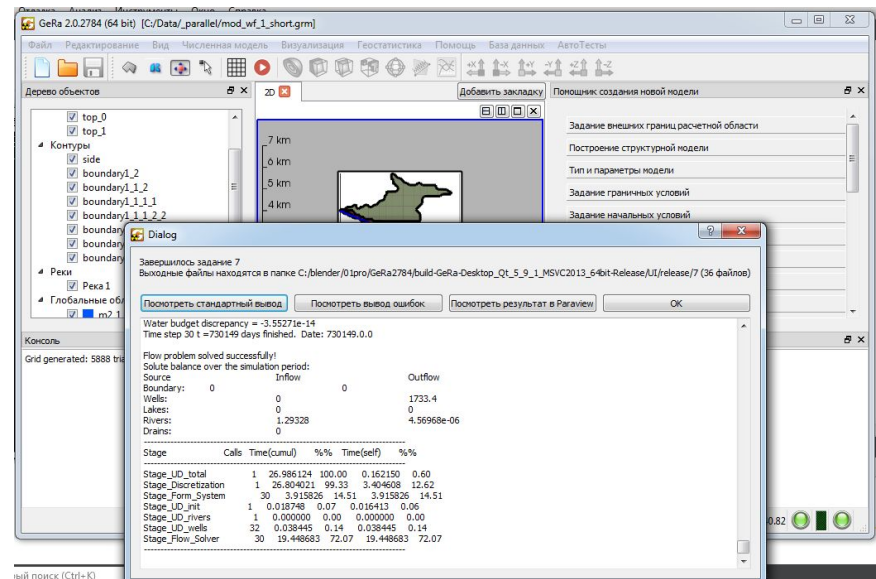
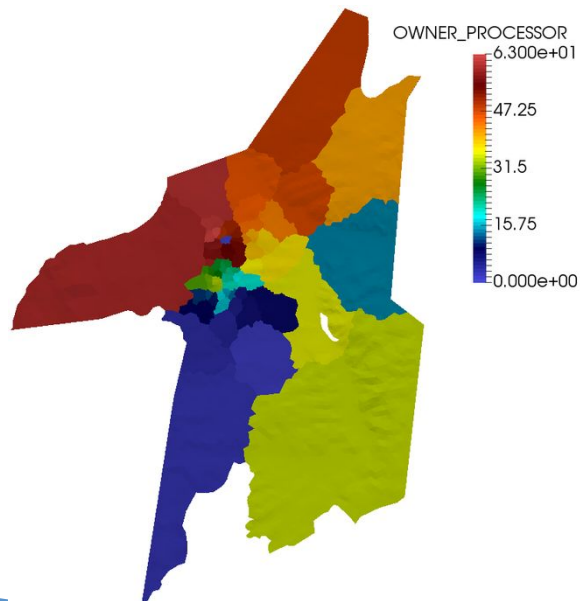
# Использование кода

- Аттестация для использования при обосновании безопасности ОИАЭ.
- Кросс-верификация по отношению к кодам MODFLOW-MT3DMS, FEFLOW, VS2DT, Traces.
- Совместный бенчмаркинг с IRSN (Франция, код Melodie).
- Передача в сторонние организации.
- Учебный курс.
- Моделирование реальных объектов.

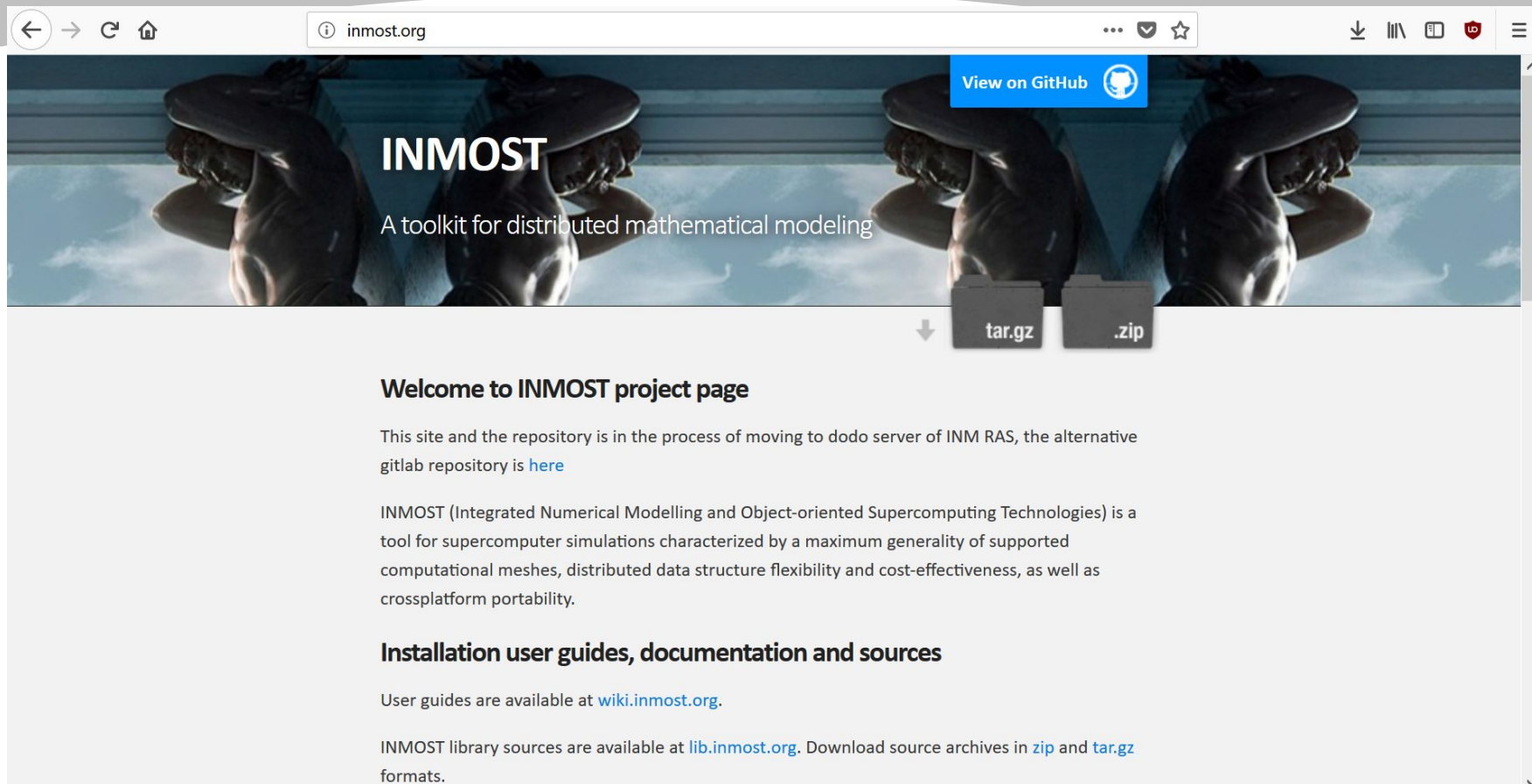


# Принципы параллелизации

- Ориентация на CPU, традиционное C++ программирование.
- Использование MPI.
- Возможность удаленного запуска на кластере непосредственно из интерфейса GeRa.
- Программная платформа INMOST.



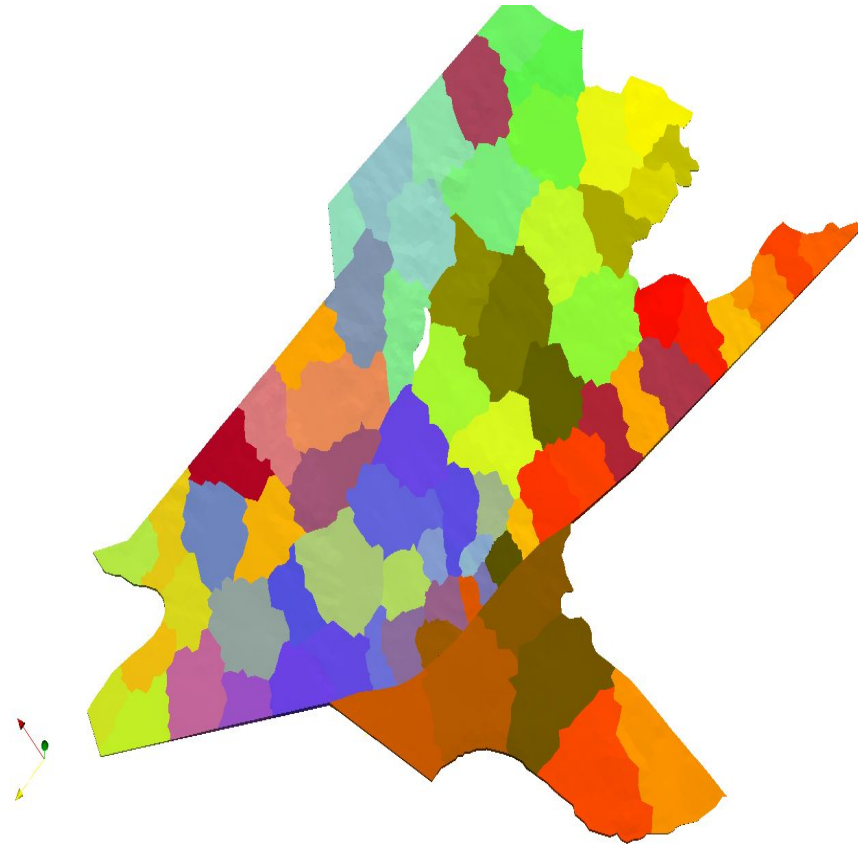
# Программная платформа INMOST (ИВМ РАН)



- Работа с распределенными сетками и данными на них
- Сборка и решение СЛАУ.
- Автодифференцирование, адаптация сеток и многое другое.

# Программная платформа INMOST в комплексе GeRa

- Работа с распределенными сетками и данными на них
- Декомпозиция сетки
- Сборка и решение СЛАУ
- Автодифференцирование



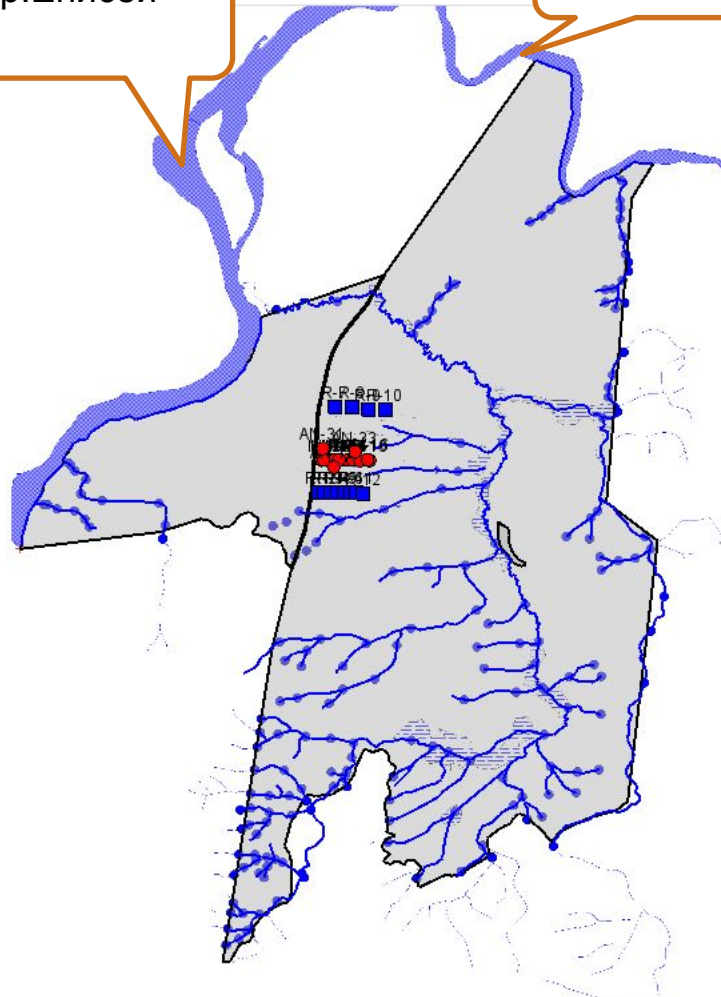
# Применение на реальных объектах

- Полигон закачки ЖРО «Северный»;
- Площадка ФГУП ПО «Маяк»;
- Проектируемый ПЗРО в г. Сосновый бор;
- Полигон закачки ЖРО на СХК;
- Приповерхностный ПЗРО в Новоуральске;
- Площадка проектируемого ПГЗРО в Нижнеканском массиве.

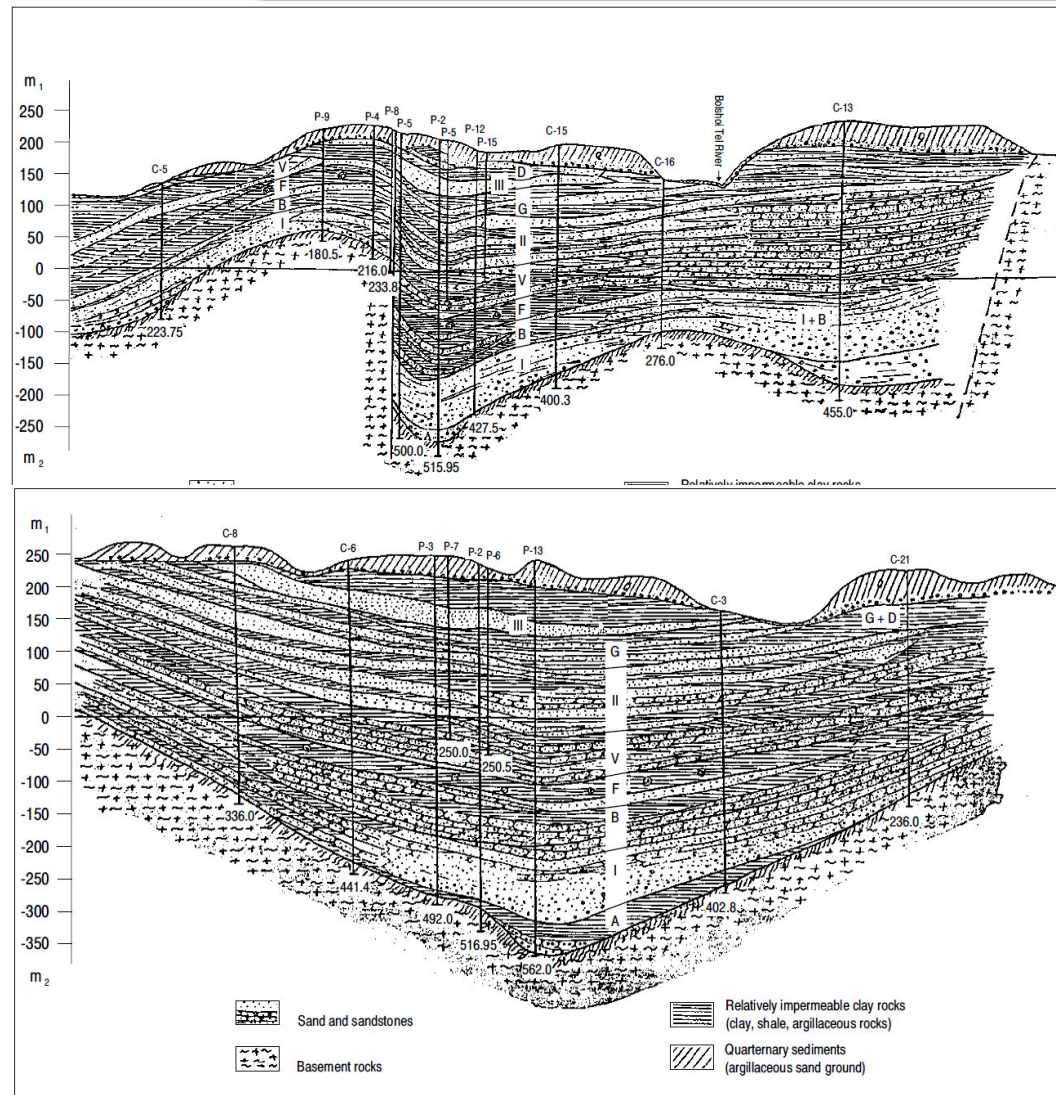
# Моделирование полигона «Северный»

р.Енисей

р.Кан

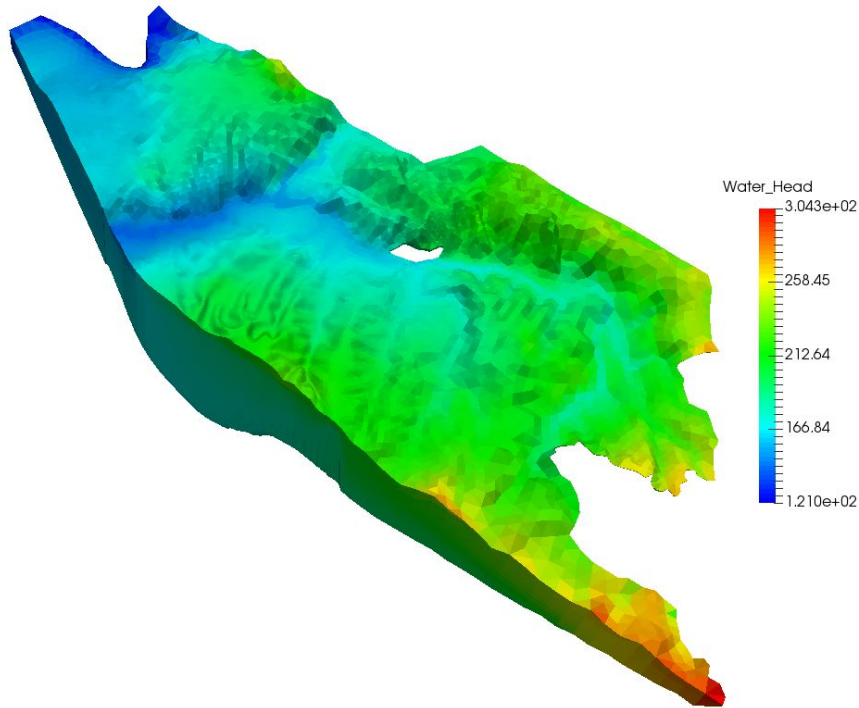


Расчетная область

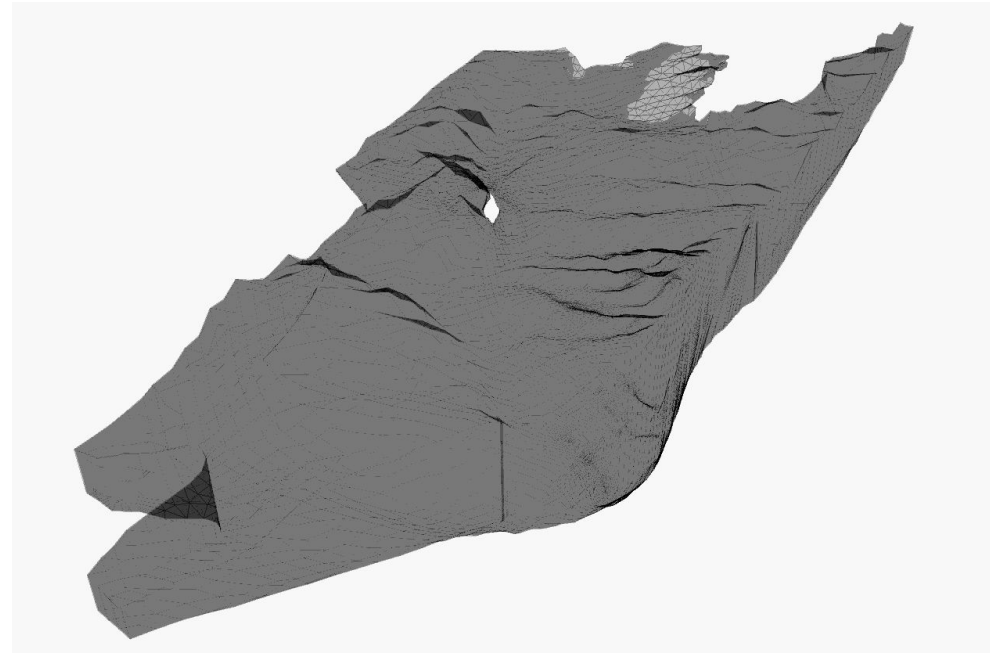


[K.Compton, V.Novikov, F.Parker, 2000]

# Моделирование полигона «Северный»: результаты (задача 1)



Установившееся решение фильтрационной задачи (поле напоров) в 1 горизонте



Закачка плотных растворов в I горизонт

# Параметры параллельных расчетов

Модель полигона – 480350 ячеек:

- Стационарная задача фильтрации
- Нестационарная задача фильтрации-переноса

Параметры очередей кластера:

- x6core: 12 вычислительных узлов Asus RS704D-E6 (два 6-ядерных процессора Intel Xeon X5650@2.67 GHz), 24GB RAM;
- x12core: 4 вычислительных узла Arbyte Alkazar+ R2Q50 (два 12-ядерных процессора Intel Xeon E5-2670v3@2.30 GHz), 64 GB RAM.

# Описание численного эксперимента

- Для разбиения сетки по процессорам использован пакет ParMETIS (via INMOST)
- Для решения линейных систем использовался пакет PETSc (via INMOST)
  - BiCGStab
  - Аддитивный метод Шварца  $AS(q)$  с параметром перекрытия  $q = 3$
  - Предобуславливатель в подобластях  $ILU(k)$ ,  $k = 3$
  - Критерий остановки: падение невязки в  $10^9$  раз

# Анализ параллельной эффективности (стационарная задача фильтрации)

x6core

#проц	Время счета, с	Ускорени е	Эффекти вность
1	2686.60	1.00	—
2	1541.19	1.74	1.74
4	784.49	3.42	1.96
8	529.28	5.07	1.48
16	484.56	5.54	1.09
32	178.52	15.04	2.71
64	80.46	33.39	2.21
128	43.78	61.36	1.83

x12core

#проц	Время счета, с	Ускорени е	Эффекти вность
1	2044.97	1.00	—
2	1086.56	1.88	1.88
4	571.91	3.57	1.89
8	324.19	6.30	1.76
16	205.35	9.95	1.57
32	140.97	14.50	1.45
64	105.25	19.42	1.33
128	46.49	43.98	2.26
192	32.16	63.58	1.44

# Анализ параллельной эффективности (нестационарная фильтрация+перенос)

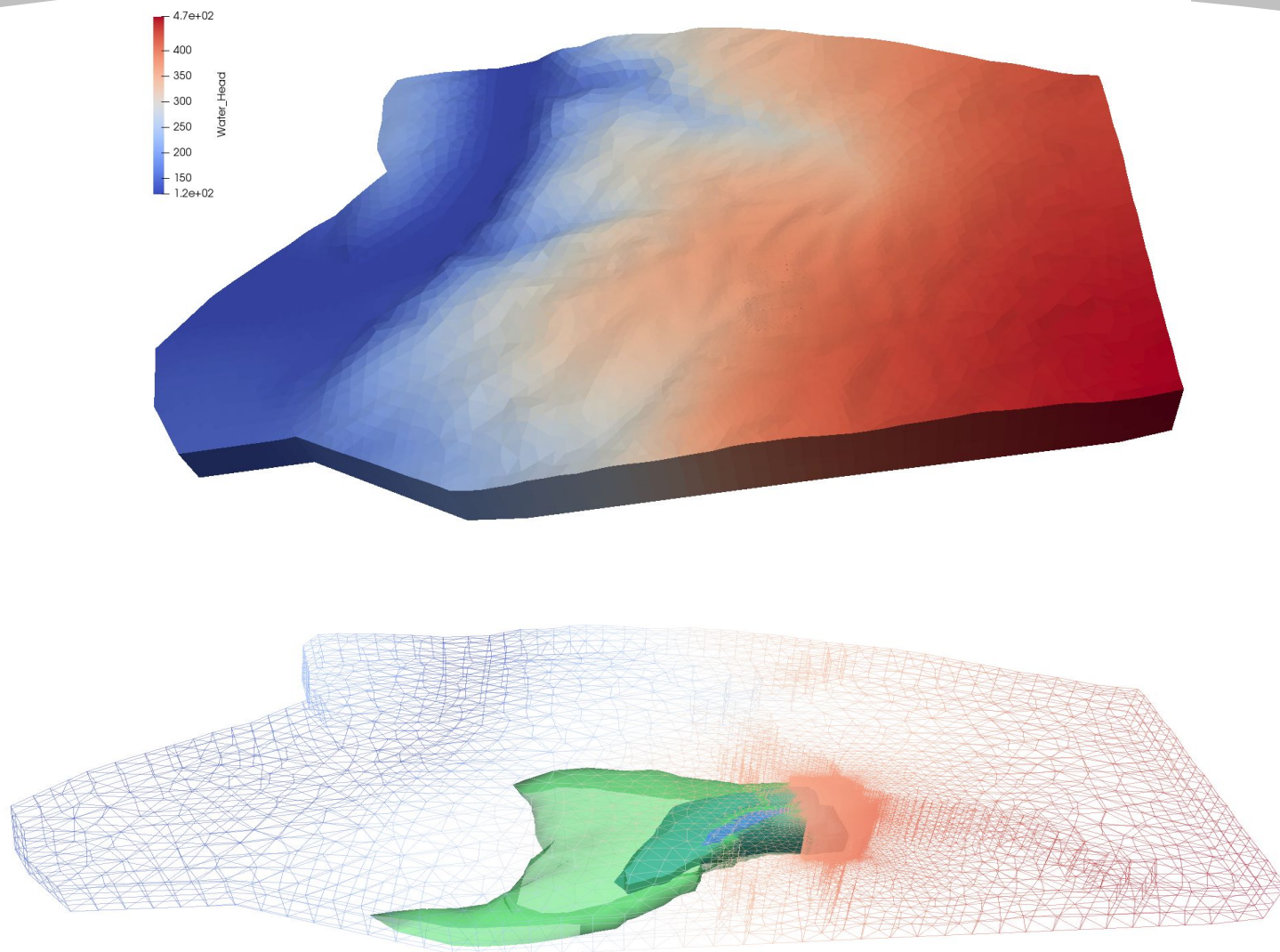
x6core

#проц	Время счета, с	Ускорени е	Эффекти вность
2	72267	1.00	—
4	37872	1.90	1.90
8	23490	3.07	1.61
16	14593	4.95	1.60
32	8639	8.36	1.68
64	4377	16.50	1.97
128	2470	29.25	1.77

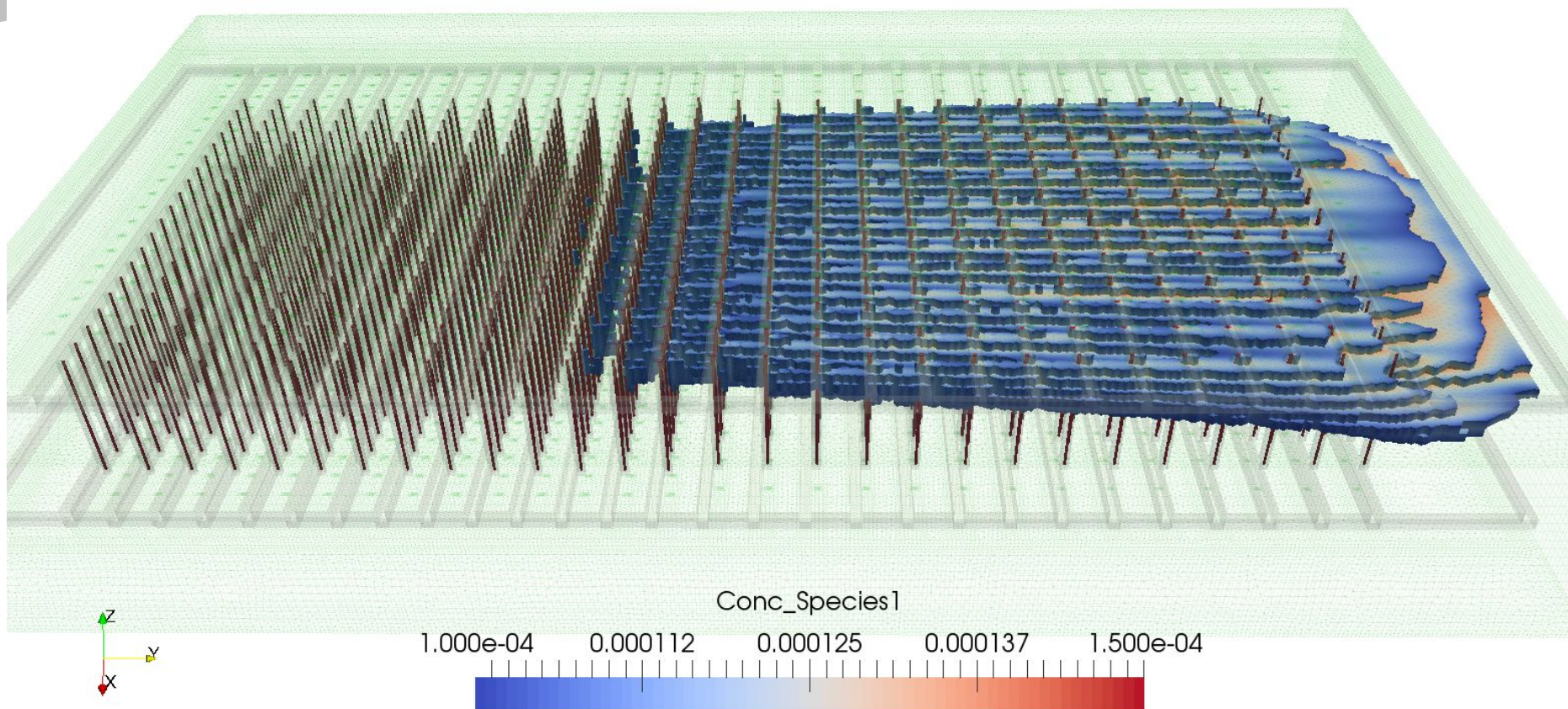
x12core

#проц	Время счета, с	Ускорени е	Эффекти вность
2	57027	1.00	—
4	30899	1.84	1.84
8	17928	3.18	1.72
16	10795	5.28	1.66
32	7692	7.41	1.40
64	4111	13.86	1.87
128	2065	27.60	1.99
192	1542	36.96	1.33

## Задача 2: ПГЗРО в Нижнеканском массиве

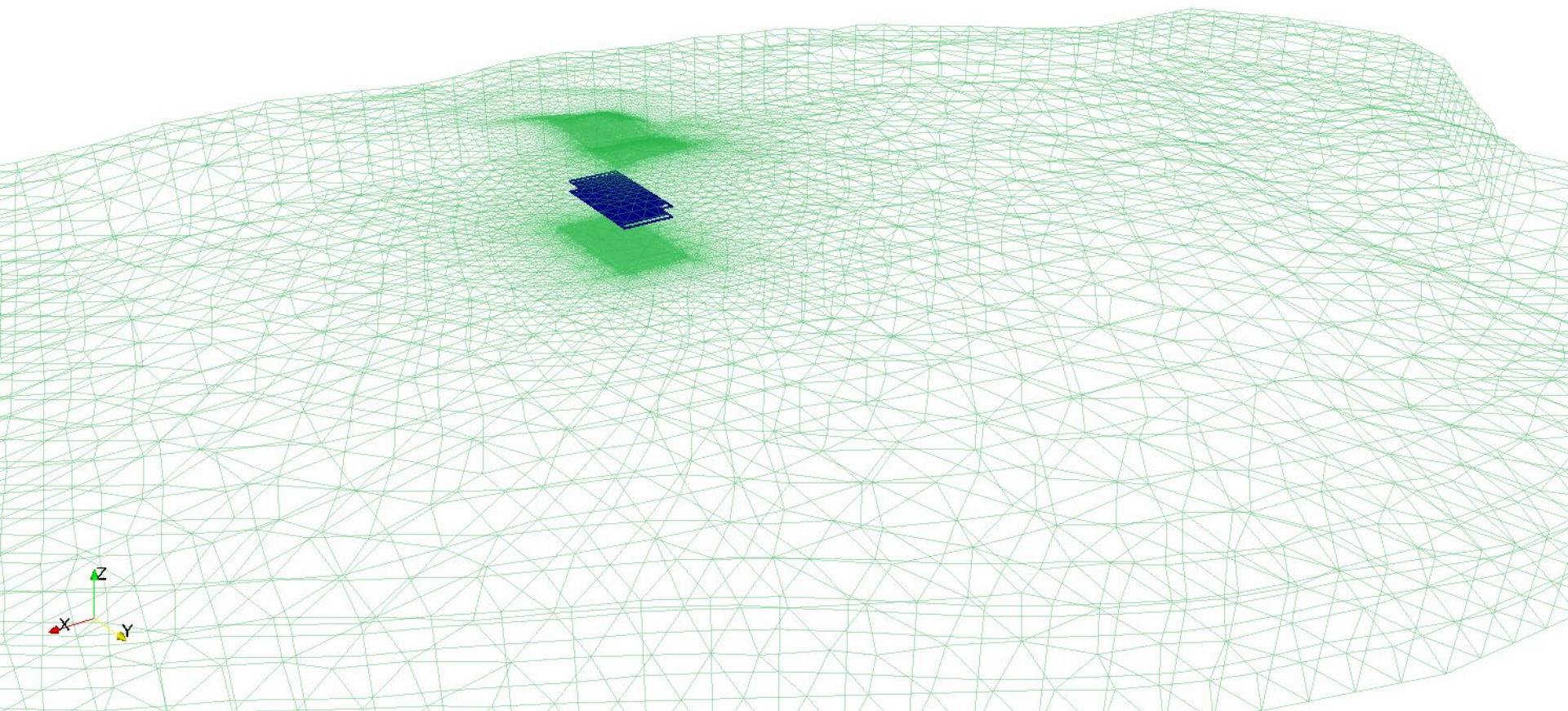


# Модель пункта захоронения



Пример детальной (несколько сотен элементов) сеточной модели объекта: сетка и результат расчета задачи переноса

# Расчетная сетка со сгущением к пункту захоронения



Расчетная сетка для комплексной модели проектируемого пункта захоронения в Нижнеканском массиве

# Анализ масштабируемости (1.6 млн ячеек)

$p$	Flow	Transport	Total	$S(1)$	$S(p/2)$
1	6632	53338	60021	1.0	-
2	3517	27686	31231	1.92	1.92
4	1868	15772	17656	3.39	1.76
8	1151	8701	9861	6.08	1.79
16	686	5064	5755	10.42	1.71
32	443	3288	3734	16.07	1.54
64	324	1818	2144	27.99	1.74
128	150	999	1151	52.14	1.86
192	85	736	823	72.92	1.39

# Анализ масштабируемости (4,3 млн ячеек)

$p$	Flow	Transport	Total	$S(2)$	$S(p/2)$
2	14013	93243	107346	1.0	-
4	8565	52596	61210	1.75	1.75
8	6022	28697	34748	3.08	1.76
16	4008	18397	22421	4.78	1.54
32	2054	11486	13552	7.92	1.65
64	1813	5484	7303	14.69	1.85
128	775	4385	4385	24.48	1.66
192	595	2890	3489	30.76	1.25

# Выводы

- GeRa позволяет эффективно распараллеливать решение гидрогеологических задач (протестировано с использованием до 1024 ядер).
- Ключевые преимущества GeRa:
  - Широкий спектр моделируемых процессов, в т.ч. мультифизика.
  - Интегральный подход: полная цепочка моделирования вплоть до расчета доз для населения.
  - Современные численные методы (сетки, дискретизации, параллельность).
  - Удобный графический интерфейс (с использованием Qt).
  - Визуализация результатов расчета (с использованием VTK).
  - Отчуждаемость (запросы АО «ВНИПИПромтехнологии», ФБУ «НТЦ ЯРБ», АО «ФЦНИВТ «СНПО «Элерон», ОАО «СХК», АО «Центральное ПГО», ООО «Тингидис», СколТех).
- Дальнейшие планы:
  - Совместное моделирование подземных и поверхностных вод.
  - Модели фильтрации-переноса в трещиноватых средах.
  - Повышение параллельной эффективности и масштабируемости.

# Трудности и проблемы

- организация одновременной работы большой группы разработчиков (max до 20 человек) (Была использована система контроля версий: SVN)
- для контроля за исправлением ошибок была использована система: Bug Tracking
- в команде разработчиков есть специальный человек, занимающийся только тестированием кода
- написание обширной документации по коду GeRa
- организация специальных курсов по обучению использования кода GeRa
- прохождение процесса аттестации кода
- бюрократические трудности согласования на передачу кода