

Геомиграционное и геофильтрационное моделирование в расчетном коде GeRa *

И.В. Капырин^{1,2}, И.Н. Коньшин^{1,2}, Ф.В. Григорьев^{1,3}

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН¹,
Институт вычислительной математики РАН²,
Московский физико-технический институт³

В работе изложены аспекты разработки расчетных кодов для гидрогеологического моделирования в задачах обоснования безопасности захоронения радиоактивных отходов (РАО). Рассматривается концепция развития второй версии расчетного кода GeRa (Геомиграция Радионуклидов). Анализируются современные тенденции в разработке кодов и запросы пользователей-гидрогеологов: повышение эффективности расчетов, внедрение новых моделей физических и химических процессов, совершенствование методов дискретизации задач. Демонстрируется новый функционал кода: моделирование тепловой конвекции и фильтрации растворов с переменной вязкостью.

1. Введение

Численное моделирование геомиграции радионуклидов в настоящее время является основным инструментом при оценке долговременной безопасности захоронений РАО. Большие временные и пространственные масштабы задач, сложность инженерных и природных барьеров безопасности, многообразие существенных физических и химических процессов обуславливают высокие требования к расчетным кодам в части возможностей моделирования, точности и скорости расчетов. При этом отечественные расчетные коды для гидрогеологического моделирования в этой области практически не представлены, и специалистами на практике используются зарекомендовавшие себя зарубежные программные коды: MODFLOW, MT3DMS, FEFLOW, TOUGH2 и др.

Расчетный код (РК) GeRa [1] разрабатывается ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН в рамках подпроекта «Коды нового поколения» проекта «Прорыв» для решения задач, связанных с безопасным захоронением РАО, образующихся в рамках замкнутого ядерно-топливного цикла. Помимо этого GeRa может быть использована для решения задач оценки безопасности объектов ядерного наследия и защиты подземных вод от химического загрязнения. К настоящему моменту разработана первая версия кода, которая проходит процедуру экспертизы в рамках государственной аттестации программного средства в Ростехнадзоре. Основные возможности первой версии кода были продемонстрированы на предыдущей конференции RuSCDays-2015 [2]. Отметим, что GeRa является интегральным кодом, то есть, позволяет проводить полный цикл работ, начиная от создания геологической модели на основе данных полевых и лабораторных исследований и заканчивая расчетом доз для населения по всем основным путям облучения. РК GeRa ориентирован на использование неструктурированных многогранных расчетных сеток [3].

Целью настоящей работы является определение концепции второй версии РК GeRa и демонстрация продвижений в разработке новой версии кода. Для этого анализируются современные тенденции развития гидрогеологических кодов и запросы конечных пользователей кода.

2. Перспективы развития РК GeRa

Для определения современных тенденций в развитии гидрогеологических расчетных кодов были рассмотрены следующие проекты:

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке проекта «Прорыв» ГК Росатом и гранта РФФИ 15-35-20991мол_а_вед.

– **MODFLOW-USG** [4] – версия MODFLOW для работы на неструктурированных сетках. К настоящему времени реализован только расчет фильтрационных задач, возможно построение траекторий частиц на сетках со структурой восьмидерева [5], реализован учет зон повышенной проницаемости (кондуитов). Исходный код является открытым.

– **Amanzi** [6] – массивно-параллельный гидрогеологический код, разрабатываемый рядом Национальных лабораторий США (Лос-Аламосской, Ливерморской, Тихоокеанской) в рамках проекта ASCEM. Работы были начаты в 2010 году. К настоящему моменту в коде реализованы модели однофазной насыщенной и ненасыщенной фильтрации, адвективно-диффузионно-дисперсионного переноса с широкими возможностями по моделированию геохимических взаимодействий. Используются неструктурированные расчетные сетки. Продемонстрированы возможности кода по моделированию реальных объектов в тестовом режиме [6,11]. Код снабжен средствами анализа неопределенностей, показана эффективность этого анализа в параллельном многопроцессорном режиме. Исходный код является открытым.

– **PFLOTRAN** [7] – массивно параллельный гидрогеологический код для расчета задач многофазной фильтрации и переноса с геохимическими взаимодействиями, написанный на языке FORTRAN. Исходные тексты кода являются открытыми. В разработке PFLOTRAN участвуют пять Национальных лабораторий США. В настоящее время код обладает возможностями расчета задач ненасыщенной и многофазной фильтрации, переноса с химическими взаимодействиями, тепловых процессов, течения поверхностных вод, процессов в трещиноватых средах на базе дискретной системы трещин.

– **OpenGeoSys** [8] – исследовательский гидрогеологический код с открытым исходным текстом для моделирования термо-гидро-химических процессов в поровых и трещиноватых средах. Разрабатывается большим научным сообществом, ключевым из которых является Центр Гельмгольца по исследованию окружающей среды (Helmholtz centre for environmental research – UFZ), также задействован ряд университетов из разных стран, Геологическая служба США, Федеральный институт геологии и природных ресурсов Германии (BGR).

– **НИМФА** [9] – массивно параллельный код для моделирования процессов многофазной фильтрации и переноса, разрабатываемый РФЯЦ-ВНИИЭФ. Для расчетов используются неструктурированные расчетные сетки и суперЭВМ с распределенной памятью.

Подводя итоги анализа этих проектов, можно выделить основные направления, по которым идет на сегодняшний день развитие расчетных кодов гидрогеологического моделирования. Во-первых, это повышение точности и скорости вычислений за счет новых численных методов и параллелизации вычислений, использования адаптивных неструктурированных сеток. Во-вторых, это усложнение моделей (продвинутое геохимические расчеты, многофазность и многокомпонентность, множество взаимосвязанных процессов).

Параллелизация в коде GeRa основана на MPI и ориентирована на системы с распределенной памятью. Для повышения эффективности вычислений в последовательном и параллельном режимах в настоящее время производится перенос кода GeRa на открытую программную платформу INMOST [12,13]. В результате сравнительного тестирования показана ее значительно (в разы) более высокая эффективность обращения с сеточными данными по отношению к используемой ранее в GeRa платформой MSPP. В части повышения эффективности, робастности расчетных схем во второй версии GeRa выделены следующие направления развития:

- Параллелизация всех реализованных в коде численных моделей на основе MPI (до настоящего времени параллельные расчеты выполнялись только для простейших моделей напорной фильтрации и переноса).
- Адаптация к многоядерным процессорам на основе openMP.
- Повышение робастности схем дискретизации задач диффузионного типа (в том числе задач фильтрации): адаптация ранее реализованной линейной многоточечной схемы [14] для работы на гексаэдральных сетках, в основе которых лежит восьмидерево [15]; внедрение нелинейных методов конечных объемов, удовлетворяющих не только условию неотрицательности решений [16,17], но и гарантирующих выполнение принципа максимума [18].
- Снижение численной диффузии в схемах переноса для неструктурированных сеток.
- Повышение эффективности линейных решателей.

- Разработка эффективных методов решения нелинейных задач в моделях безнапорной, ненасыщенной и двухфазной фильтрации.
- Возможности построения сеток на основе САПР-моделей объектов.

Вопрос использования графических плат является открытым, поскольку программирование под них сопряжено с рядом сложностей, в первую очередь связанных с эффективностью обращения к памяти.

Касательно внедрения новых численных моделей предполагаются следующие направления разработки:

- Модель двойной пористости и более сложные модели, описывающие перенос в трещиноватых средах.
- Тепловыделение при радиоактивном распаде, теплоперенос, тепловая конвекция с учетом зависимости вязкости от температуры и концентрации примесей в растворе.
- Коллоидный перенос.
- Модель двухфазной фильтрации-переноса с учетом фазовых переходов.
- Расширение спектра моделируемых химических процессов.
- Поверхностный сток.
- Сопряженные гидрогеологические и гидромеханические процессы.
- Биологические процессы.

Для удобства конечных пользователей и обеспечения интегрального подхода к моделированию (код позволяет полностью решить поставленную задачу) необходима связка GeRa с кодом расчета дозовых нагрузок, внедрение методов оценки неопределенностей на основе стохастического моделирования, обеспечение возможностей автоматизированной калибрации моделей. Также предполагается интеграция кода с отдельными РК моделирования источника загрязнения и барьеров безопасности.

3. Новые возможности моделирования в коде GeRa

К числу новых возможностей GeRa, не вошедших в первую версию кода [2], относятся модели двойной пористости, теплопереноса и тепловой конвекции, фильтрации растворов переменной вязкости. Продемонстрируем здесь некоторые результаты верификации и тестирования этих моделей.

3.1. Моделирование тепловой конвекции

Рассматривается задача Horton-Rogers-Lapwood (HRL, [19]). Изучается поведение жидкости в пористой среде между двумя различно нагретыми длинными ($L \gg H$) пластинами. Схематическое изображение области моделирования представлено на рисунке 1.

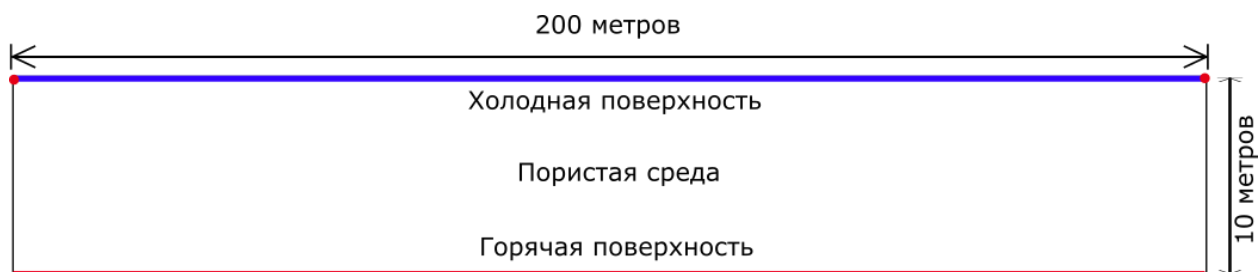


Рис. 1. Схема к постановке задачи HRL

Режимы конвективного течения в пористых средах характеризуются числом Рэлея:

$$Ra = \frac{\beta \Delta T K H c^f \rho}{\lambda} \quad (1)$$

Здесь β - коэффициент температурного расширения, ρ - плотность жидкости, c^f - удельная теплоемкость жидкости, K - коэффициент фильтрации, λ - средневзвешенная теплопроводность жидкости и породы.

Поток тепла через плоскость характеризуется числом Нуссельта:

$$Nu = \frac{Q}{\lambda \frac{\Delta T}{H} LW} \quad (2)$$

Здесь Q - тепловой поток через твердую границу, L, W, H - геометрические размеры области.

Аналитически показано [20], что при $Ra < Ra_c = 4\pi^2$ конвекция не происходит. Тепло передается посредством теплопроводности и $Nu = 1$ (см. рис. 3А). При $Ra > Ra_c$ происходит конвекция (см. рис. 3Б) и число Нуссельта становится больше единицы. Сверяя критическое число Рэлея, полученное в численном расчете (см. рис. 2), с теоретическим, можно сделать выводы о правильности модели. С помощью GeRa посчитаны решения для различных чисел Рэлея (изменялся коэффициент фильтрации). Числовые параметры приведены в таблице 1.

Таблица 1. Числовые параметры для задачи HRL

Параметр	Значение	Система единиц
Размеры сетки	200 x 10 x 1	-
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	1, 1, 1	м
K	0.411 – 6.159	м/сут
φ	0.1	-
λ	129332.16	Дж/(м К сут)
ρ_0	1000	Кг/м3
T_0	0	°С

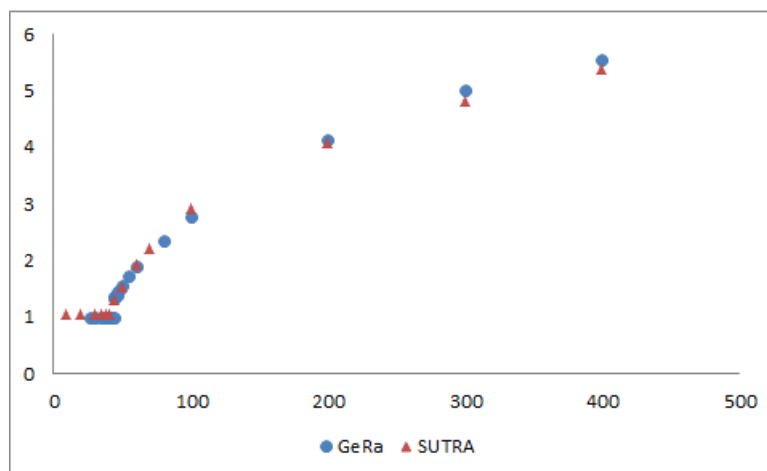


Рис. 2. Результаты численного решения задачи HRL с разными числами Рэлея (зависимость числа Нуссельта от числа Рэлея): сравнение GeRa и SUTRA [20]

А

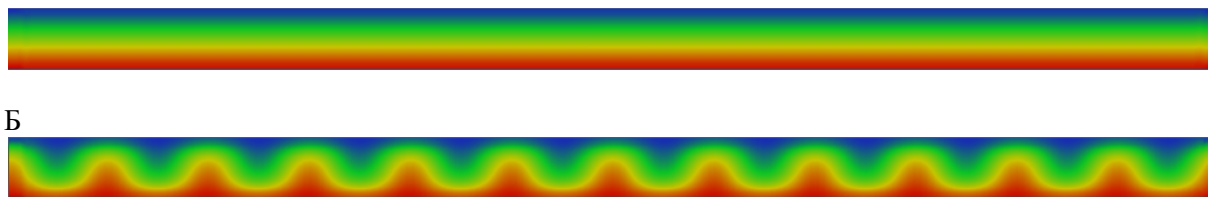


Рис. 3. Результат численного решения задачи HRL: поля температур для Ra=39 (А) и Ra=50 (Б)

3.2. Моделирование фильтрации с переменной вязкостью

Рассматривается конвекция жидкости с переменной вязкостью. Конвекция возникает за счет разницы температур вертикальных стенок (см. рис. 4).

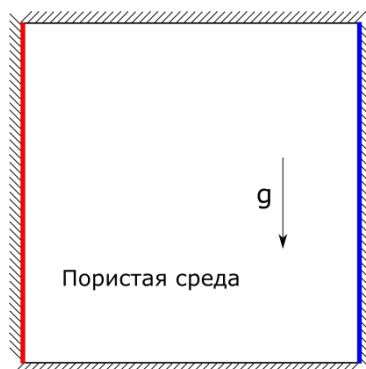


Рис. 4. Область моделирования в задаче о фильтрации с переменной вязкостью

В качестве жидкости выбрано полиальфаолефиновое масло. Это обусловлено резкой зависимостью ее вязкости от температуры (3) по сравнению, например, с водой [19].

$$\mu(T) = 0.168 \cdot T^{-1.0868}, \quad 5^{\circ}\text{C} < T < 170^{\circ}\text{C} \quad (3)$$

Впервые задача была рассмотрена в [21]. Данная модель была использована разработчиками кода Seawat для демонстрации возможности моделирования течений жидкостей с переменной вязкостью [19]. Были проведены расчеты для случаев с постоянной и с переменной вязкостью. Числовые параметры приведены в таблице 2.

Таблица 2. Числовые параметры для задачи о фильтрации с переменной вязкостью

Параметр	Значение	Единицы
Размеры сетки	130 x 130 x 1	-
$\Delta x, \Delta y, \Delta z$	0.0078125	м
K	127	м/с
φ	0.58	-
λ	71.48	Вт/(м К)
ρ_0	768.5	кг/м ³
T_0	21	°С
μ_0	0.00595	кг/(м с)
β	1.24e-5	1/К
Температура горячей стенки	36	°С

Температура холодной стенки	6	°C
-----------------------------	---	----

На рисунке 5 видно, что учет переменной вязкости приводит к сгущению линий тока из-за роста скорости у горячей стенки. Картина линий тока существенно меняется, становясь асимметричной.

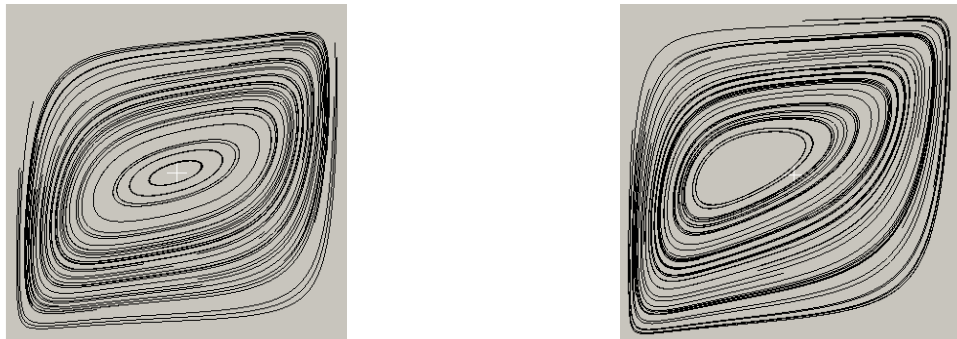


Рис. 5. Результаты численного решения: линии тока для случаев без учета переменной вязкости (слева) и с учетом переменной вязкости (справа)

5. Заключение

В работе кратко описаны основные направления разработки второй версии расчетного кода GeRa, основанные на анализе современных тенденций в развитии гидрогеологических кодов и запросах потенциальных пользователей кода – гидрогеологов. Это – повышение эффективности кода как в последовательном, так и в параллельном режиме, и расширение спектра моделируемых процессов. Базой развития второй версии кода станет программная платформа INMOST для параллельного хранения сеточных данных и решения систем линейных уравнений. Разработка второй версии кода должна идти параллельно с активным внедрением первой версии в производственный и образовательный процессы.

Литература

1. Капырин И.В., Уткин С.С., Василевский Ю.В. Концепция разработки и использования расчетного комплекса GeRa для обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов // Вестник атомной науки и техники, серия «Математическое моделирование физических процессов», – 2014 – №4 – С.44-54.
2. Капырин И.В., Коньшин И.Н., Копытов Г.В., Никитин К.Д., Василевский Ю.В.. Гидрогеологическое моделирование в задачах обоснования безопасности захоронений радиоактивных отходов с помощью расчетного кода GeRa. Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции (28-29 сентября 2015 г., г. Москва).– М.: Изд-во МГУ, 2015. – С. 122-132.
3. А.В.Пленкин, А.Ю.Чернышенко, В.Н.Чугунов, И.В.Капырин. Методы построения адаптивных неструктурированных сеток для решения гидрогеологических задач // Вычислительные методы и программирование – 2015 – Т.16 – С.518-533.
4. Panday S., Langevin, C.D., Niswonger, R.G., Ibaraki M., and Hughes, J.D. MODFLOW-USG version 1: An unstructured grid version of MODFLOW for simulating groundwater flow and tightly coupled processes using a control volume finite-difference formulation. U.S. Geological Survey Techniques and Methods, 2013, book 6, chap. A45, 66 p.
5. Pollock D. W. Extending the MODPATH Algorithm to Rectangular Unstructured Grids //Groundwater. – 2016. – Vol. 54. – №. 1. – Pp. 121-125.

6. Freedman V. L. et al. A high-performance workflow system for subsurface simulation // *Environmental Modelling & Software*. – 2014. – Vol. 55. – Pp. 176-189.
7. 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. – Т. 50. – №. 1. – С. 208-228.
8. Kolditz, O., Bauer, S., Bilke, L., Böttcher, N., Delfs, J.O., Fischer, T., Görke, U.J., Kalbacher, T., Kosakowski, G., McDermott, C.I., Park, C.H., Radu, F., Rink, K., Shao, H., Shao, H.B., Sun, F., Sun, Y.Y., Singh, A.K., Taron, J., Walther, M., Wang, W., Watanabe, N., Wu, Y., Xie, M., Xu, W., Zehner, B. (2012): OpenGeoSys: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media, *Environ. Earth Sci.* <http://dx.doi.org/10.1007/s12665-012-1546-x>.
9. Бутнев О.И., Горев И.В., Дерюгин Ю.Н. Программная платформа НИМФА на структуре данных ЛОГОС для моделирования многофазной фильтрации в геологических средах. Северный регион: наука, образование, культура. 2015. Т. 2. № 2 (32). С. 40-47.
10. Parkhurst D. L., Wissmeier L. PhreeqcRM: A reaction module for transport simulators based on the geochemical model PHREEQC // *Advances in Water Resources*. – 2015. – Т. 83. – С. 176-189.
11. Wainwright H. et al. Using ASCEM Modeling and Visualization to Inform Stakeholders of Contaminant Plume Evolution and Remediation Efficacy at F-Basin Savannah River. Proceedings of the WM2015 Conference, March 15 – 19, 2015, Phoenix, Arizona, USA.
12. Василевский Ю.В., Коньшин И.Н., Копытов Г.В., Терехов К.М. INMOST - программная платформа и графическая среда для разработки параллельных численных моделей на сетках общего вида. – М.: Издательство Московского университета, 2013, 144 стр.
13. Официальная страница программной платформы INMOST: www.inmost.org.
14. Aavatsmark I., Barkve T., Voe O., Mannseth T. Discretization on unstructured grids for inhomogeneous, anisotropic media. Part I: Derivation of the methods // *Siam. J. Sci. Comput.* – 1998. – Vol. 19 – No. 5. – Pp. 1700–1716.
15. Чернышенко А. Ю. Построение сеток типа восьмеричное дерево со скелетами ячейками в неоднородных областях // *Вычислительные методы и программирование*. – 2013. – Т. 14. – С. 229-245.
16. Капырин И.В. Семейство монотонных методов численного решения трехмерных задач диффузии на неструктурированных тетраэдральных сетках // *Доклады Академии Наук*, т.614, №5, 2007.
17. Danilov A., Vassilevski Yu. A monotone nonlinear finite volume method for diffusion equations on conformal polyhedral meshes. // *Russ. J. Numer. Anal. Math. Modelling*. 2009 .Vol. 24, № 3. Pp. 207-227.
18. Lipnikov K., Svyatskiy D., Vassilevski Yu. Minimal stencil finite volume scheme with the discrete maximum principle. *Russian J. Numer. Anal. Math. Modelling*, 2012; 27:369–385.
19. Dausman, A.M., Langevin, C.D., Thorne Jr., D.T., and Sukop, M.C., 2010, Application of SEAWAT to Select Variable-Density and Viscosity Problems: U.S. Geological Survey, Scientific Investigations Report 2009-5028, 31 p.
20. Weatherill, D., Simmons, C.T., Voss, C.I., Robinson, N.I., “Testing density-dependent groundwater models: Two-dimensional steady state unstable convection in infinite, finite and inclined porous layers” *Advances in Water resources* 27 (2004) 547-562.
21. Guo, Z.L. and Zhao, T.S. (2005) ‘Lattice Boltzmann simulation of natural convection with temperature-dependent viscosity in a porous cavity’, *Progress in Computational Fluid Dynamics*, Vol. 5, Nos. 1/2, pp.110–117.