

Ускорение с помощью OpenMP для DFM-модели фильтрации и переноса с учетом реакций растворения-осаждения

OpenMP parallel efficiency for DFM flow and transport model coupled with precipitation-dissolution reactions

Ф.В.Григорьев, И.В.Капырин, И.Н.Коньшин

Fedor Grigorev, Ivan Kapyrin, Igor Konshin

ИБРАЭ РАН, ИВМ РАН, ВЦ РАН

Nuclear Safety Institute RAS, INM RAS, CC RAS

grig-fedor@ibrae.ac.ru

Расчетный код GeRa и процессы в трещиновато-пористых средах

Программный комплекс GeRa

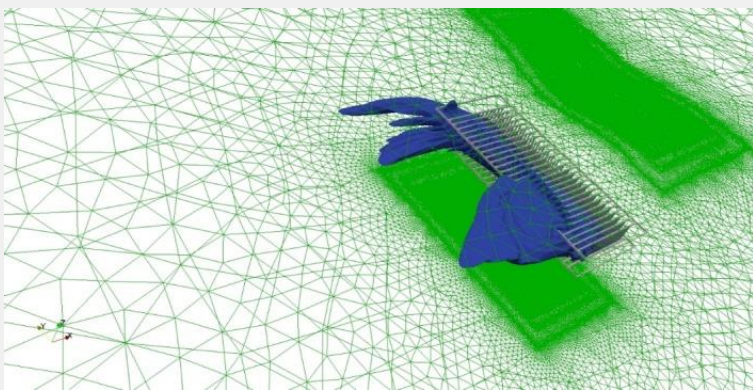


GeRa – разработка ИБРАЭ РАН и ИВМ РАН по заказу ГК «Росатом» для эффективного решения задач геофильтрации и геомиграции загрязнений в поровых и трещиноватых средах

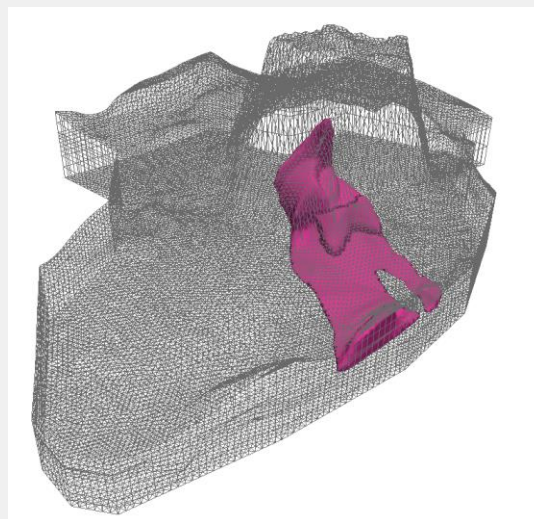
Сферы применения

- 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

Примеры объектов



Одна из концепций ПГЗРО



Приповерхностный объект

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., Kapyrin, I. Springer Nature, 2020, 186 p.]

Трещиновато-пористые среды



Модели растрескавшихся ИББ



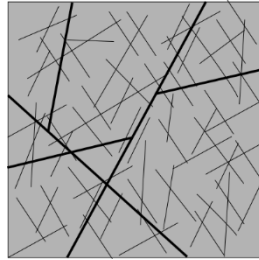
Трещины во вмещающей кристаллической породе

+

Крупные разрывные нарушения в дальней зоне захоронения

Подходы к моделированию трещиноватой среды

Идеальная детальная модель трещиновато-пористой среды



Модели с неявным представлением трещин

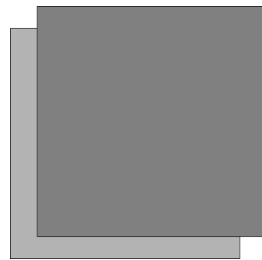
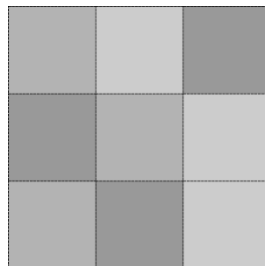
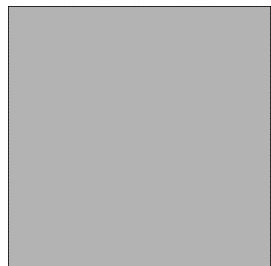
Модели с учетом геометрии трещин

Модели единого континуума

Модели множественного континуума

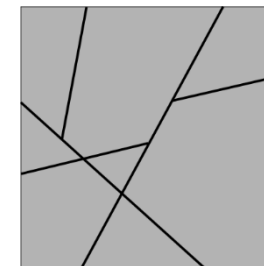
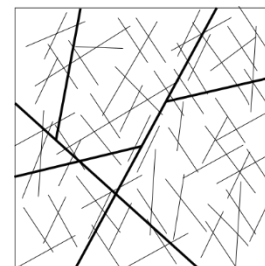
Модели однородной пористой среды (СРМ)

Модели неоднородной пористой среды (ЕСРМ)



Модели дискретных сетей трещин DFN

Модели дискретных сетей трещин и матрицы DFM



DFM-модель + химические взаимодействия

Модель DFM: учитываемые процессы и особенности модели

Обмен между трещиной и пористой матрицей:

- Вода
- Загрязнитель

В пористой матрице:

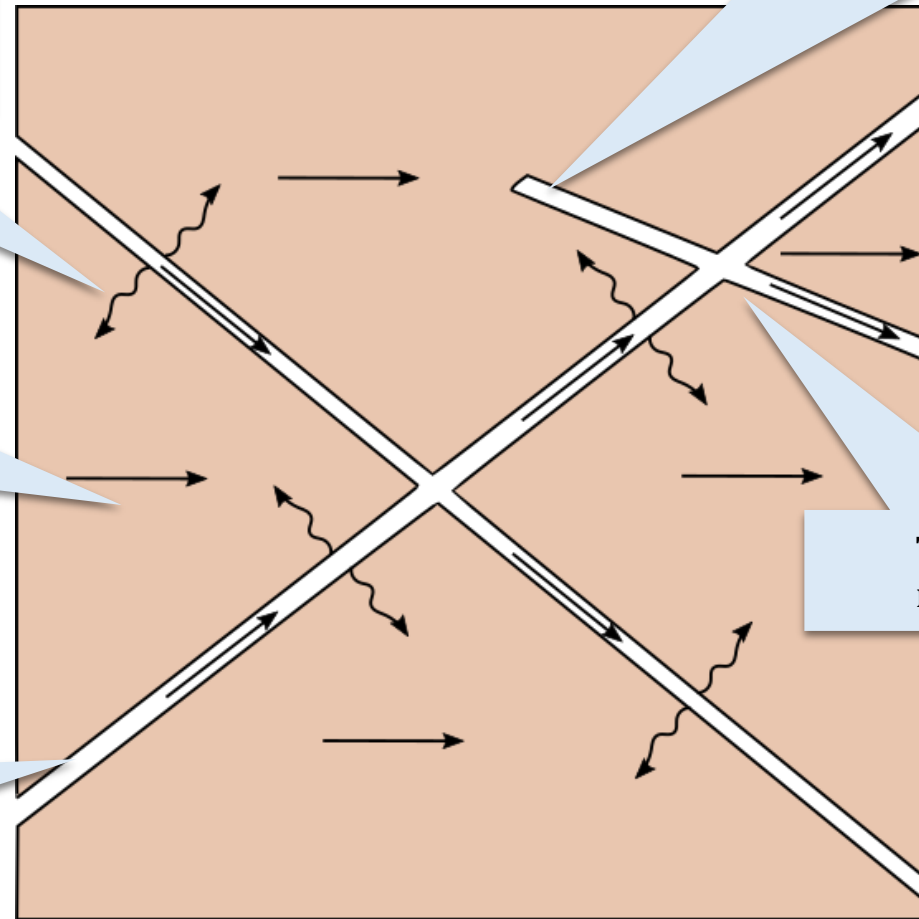
- Фильтрация
- Адвекция
- Диффузия-дисперсия
- Равновесная химия растворения-осаждения

В трещинах:

- Фильтрация
- Адвекция
- Дисперсия
- Равновесная химия растворения-осаждения

У трещин могут быть тупиковые концы

Трещины могут пересекаться



Математическая модель переноса с растворением и осаждением в трещиновато-пористой среде



Законы сохранения массы раствора

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{u} = R(C, C_s) \quad \text{– в пористой матрице}$$

$$\frac{\partial b}{\partial t} - \nabla' \cdot (b\vec{v}) = -Q_{V,fr} \quad \text{– в трещинах}$$

Перенос химических компонентов

$$\frac{\partial (\varphi C + C_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{u}C) - \nabla \cdot D\nabla C = 0 \quad \text{– в пористой матрице}$$

$$\frac{\partial (bC_{fr})}{\partial t} + \nabla' \cdot (b\vec{v}C_{fr}) - \nabla' \cdot (bD_{fr}\nabla C_{fr}) = -Q_{C,fr} \quad \text{– в трещинах}$$

Закон Дарси

$$\vec{u} = -K\nabla h \quad \text{– в пористой матрице}$$

$$\vec{v} = -K\nabla h_{fr} \quad \text{– в трещинах}$$

- + химическое равновесие
- + согласование между трещинами и пористой матрицей

Определяющие соотношения

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

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

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

Схема дискретизации по времени



1. Решение задачи фильтрации в системе матрица+трещины:

$$\begin{cases} s_{\text{stor}} \frac{h^{n+1} - h^n}{\Delta t} = \nabla \cdot \vec{u}^{n+1}; \\ s_{\text{stor,fr}} \frac{h_{\text{fr}}^{n+1} - h_{\text{fr}}^n}{\Delta t} = \nabla' \cdot (b\vec{v}^{n+1}) - Q_{V,\text{fr}}^{n+1}. \end{cases}$$

2. Решение задачи переноса в системе матрица+трещины:

$$\begin{cases} \tilde{\varphi}^n \frac{C^{n+1,1} - C^n}{\Delta t} = -\nabla \cdot (\vec{u}^{n+1} C^n) + \nabla \cdot D^n \nabla C^{n+1}; \\ b \frac{C_{\text{fr}}^{n+1,1} - C_{\text{fr}}^n}{\Delta t} = -\nabla' \cdot (b\vec{v}^{n+1} C_{\text{fr}}^n) + \nabla' \cdot (bD_{\text{fr}} \nabla' C_{\text{fr}}^{n+1,1}) - Q_{C,\text{fr}}^{n+1}. \end{cases}$$

3. Расчет химического равновесия (PHREEQC): $(C^{n+1,2}, C_s^{n+1,2}) = \mathcal{C}(C^{n+1,1}, C_s^n)$.

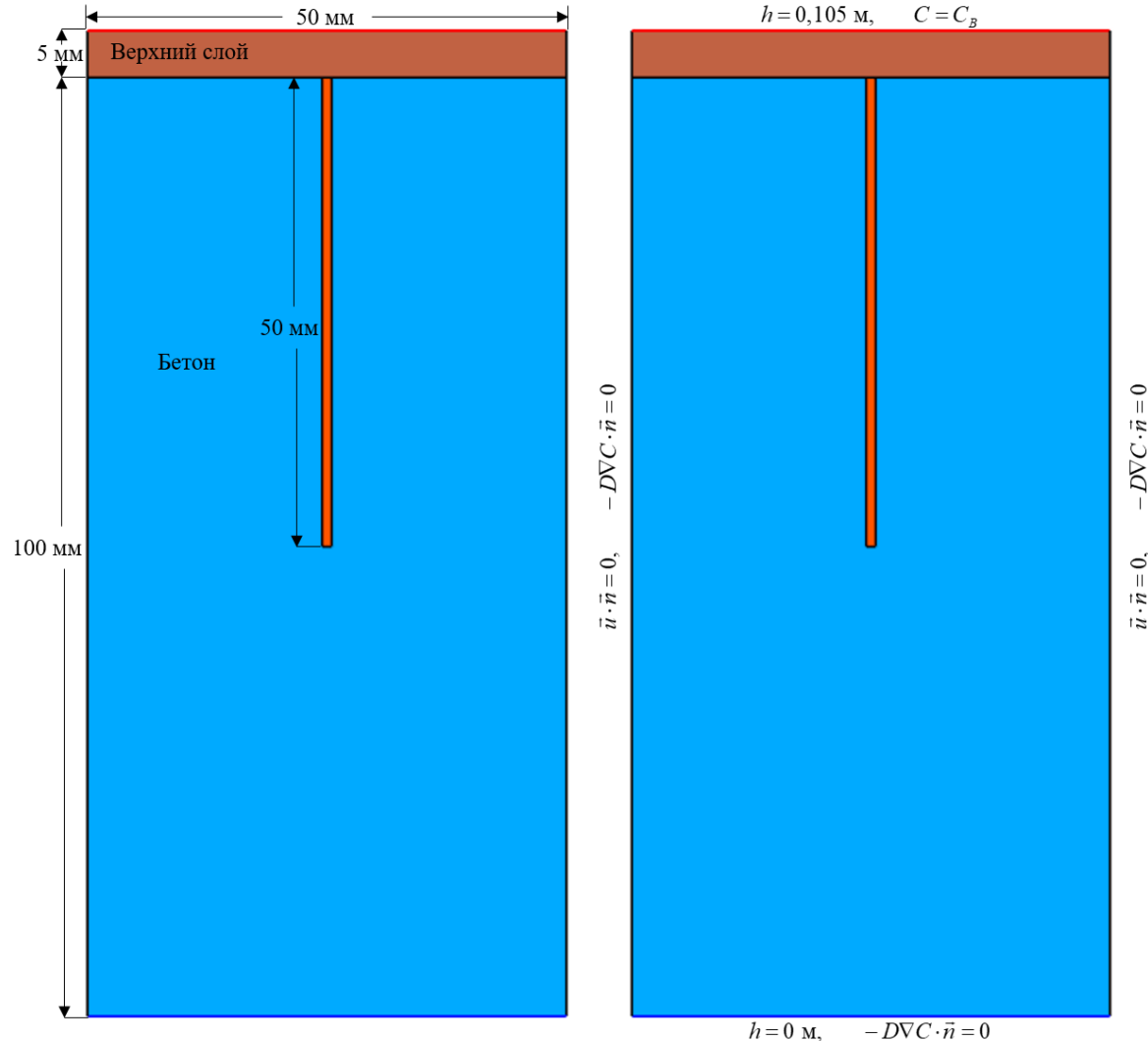
4. Пересчет пористости: $\tilde{\varphi}^{n+1} = \varphi_0 - \frac{C_s^{n+1,2}}{\rho_s}$.

5. Корректировка концентрации растворенных веществ в соответствии с ЗСМ:

$$\tilde{\varphi}^{n+1} C^{n+1} = \tilde{\varphi}^n C^{n+1,2}.$$

Численные эксперименты

Задача о декальцировании бетона в окрестностях трещины

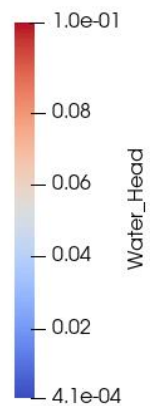
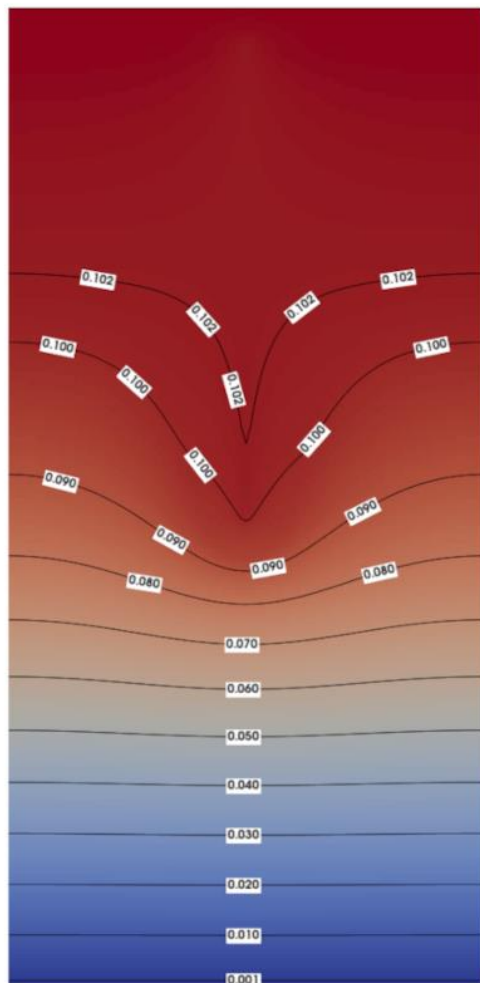


Раскрытие трещины: 1 мм
 Объемная доля портландита: 0,05
 Пористость бетона: 0,1
 Сверху – кислый раствор, pH=3

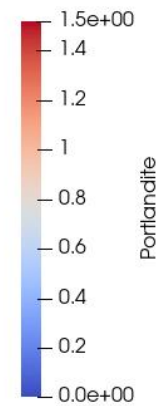
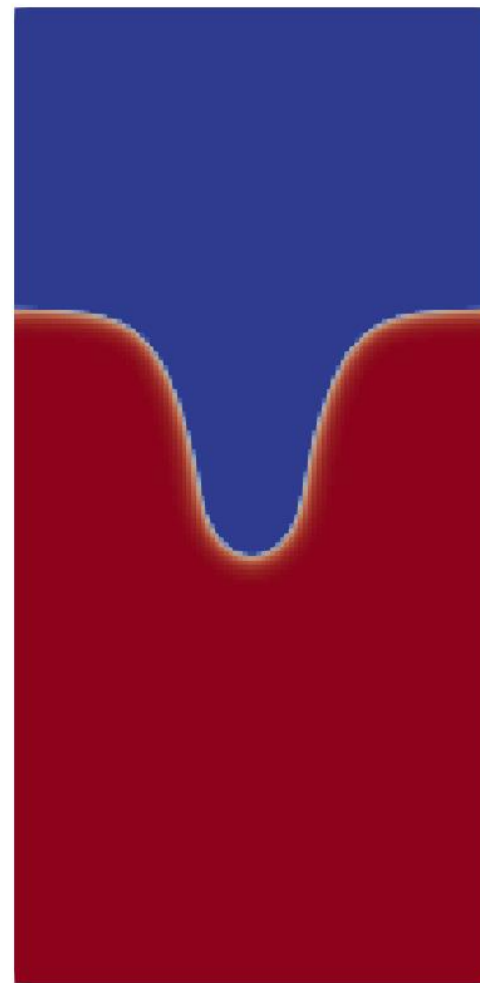
Состав растворов:

Компонент раствора	НУ в расчетной области	C_B на верхней границе
pH	12,48	3
pe	11,5386	21,0185
Ca, моль/л	0,0194224	0
N, моль/л	0	0,001
H ₂ O, моль/л	55,3452	55,3452

Результаты моделирования



Поле напоров



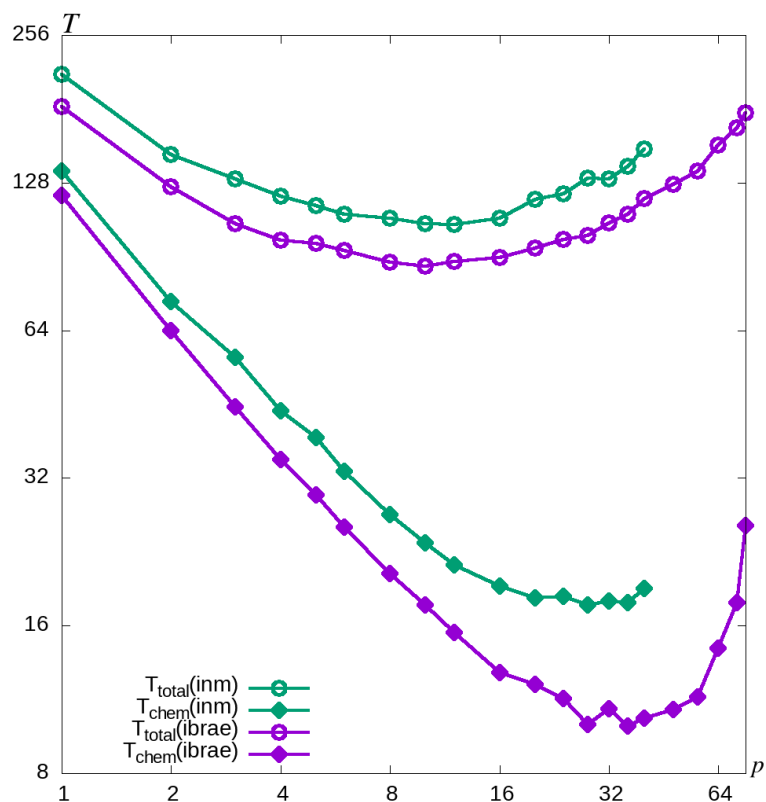
Концентрация
портландита

Ускорение на основе OpenMP

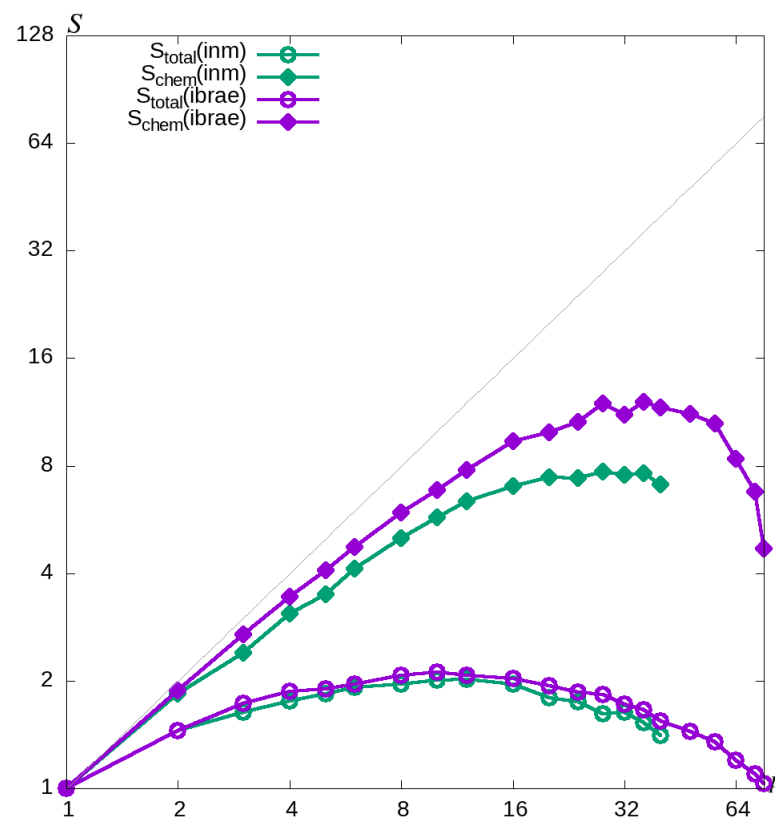


Кластер ИВМ РАН: один узел Arbyte Alkazar R2Q50 G5, в нем 2x20 Intel Xeon Gold 6230@2.10 GHz

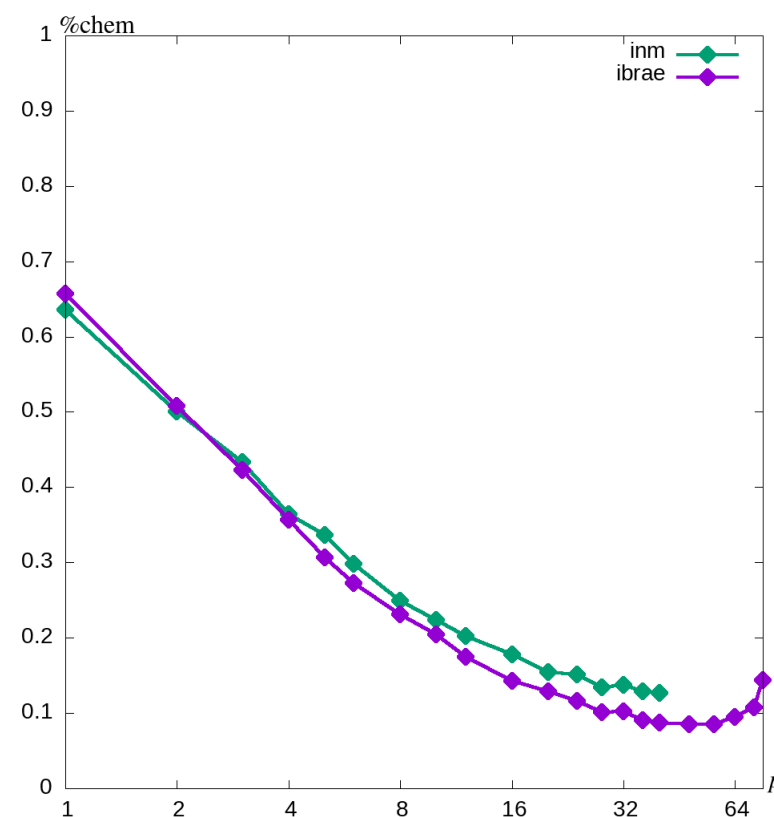
Кластер ИБРАЭ РАН: один узел, в нем 2x38 Intel Xeon Platinum 8368



Время счета – число нитей



Ускорение – число нитей



T_{chem}/T_{total} – число нитей

ИТОГИ

- Разработана модель, позволяющая учитывать влияние процессов растворения-осаждения на фильтрационные и миграционные свойства трещиновато-пористых пород;
- Исследовано параллельное ускорение OpenMP за счет встроенных возможностей геохимического модуля PhreeqcRM. Получены оптимальные числа нитей для расчетов на кластерах ИБРАЭ и ИВМ.

