

Řešení sdružené úlohy THC s využitím výsledků projektu Paretran

**BEZPEČNÝ A UDRŽITELNÝ KONEC PALIVOVÉHO CYKLU
(SSFC 2020)**

29.-30.9.2020

RNDr. Pavel Štrof



Oblasti našeho působení



Zemědělství a akvakultura



Energetika



Klimatická změna



Moře a pobřeží



Povrchové a podzemní vody



Městské vody



Průmysl



Životní prostředí a ekosystémy



Bezpečnost produktů a environmentální rizika

Paralelizovaný reakčně-transportní model šíření kontaminace v podzemních vodách

Technologická agentura České republiky, TH02030840

Příjemci podpory

- DHI a.s., Hlavní příjemce
- Masarykova univerzita, Ústav geologie
- Vysoká škola báňská - Technická univerzita Ostrava, IT4Innovations

Cílem projektu bylo zlepšit možnosti analýzy potenciálního rizika kontaminace životního prostředí v důsledku dlouhodobého šíření radioaktivních látek z hlubinného úložiště radioaktivních odpadů okolním horninovým prostředím.

Řada materiálových charakteristik je k dispozici se značnou mírou neurčitosti, jak je typické pro popis horninového prostředí ve značných hloubkách a pro dlouhodobé předpovědi vývoje prostředí. Analýza citlivosti pomocí numerických simulačních modelů je tak vysoce náročná na rozsah výpočtů. Stejně tak jsou výpočetně vysoce náročné samotné simulace pomocí reakčně-transportních modelů, jejichž paralelizace pro podmínky nasazení na systémy HPC (High Performance Computing) umožní provádění výpočtů reálných rozměrů v dostupném čase.

Financování projektu z prostředků TAČR podpořilo SÚRAO zasláním Dopisu o zájmu využití výsledků.

Paralelizovaný reakčně-transportní model šíření kontaminace v podzemních vodách

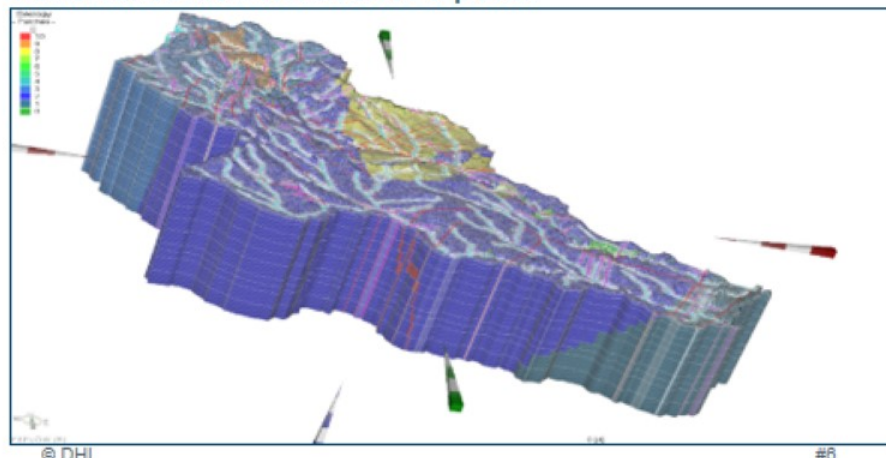
Výstupy projektu

- piChem
 - FEFLOW doplněk založený na PhreeqcRM (Reakční modul pro simulátory transportu kontaminantů založený na geochemickém modelu PHREEQC)
 - Pro Windows i Linux
- FePEST
 - Nástroj pro kalibraci a analýzu FEFLOW modelů
 - Projekty obvykle model spouští vícekrát (např. Analýza Monte Carlo, LHS 200x plus)
 - FePEST může distribuovat běhy modelu na více uzlů výpočetního clusteru
 - Využívá metodu místní analýzy citlivosti, která využívá přístup Latin Hypercube Sampling

FEFLOW vytváří robustní, přesné a prostorově detailní výsledky

FEFLOW je použitelný pro velké množství projektů proudění podzemní vody a tepla od místního až po regionální měřítko.

S FEFLOW lze vytvářet 3D vrstvy založené na vrstvách, částečně nestrukturované nebo zcela nestrukturované. Vytvářet přesné prostorové znázornění složitých geologických a geometrických nastavení, jako jsou řeky, zlomy, potrubí, tunely a umístění vrtů. Deaktivovat a znovu aktivovat prvky sítě v doméně modelu, aby se zohlednili časové změny, jako jsou výkopy tunelů nebo konstrukce důlních šachet a pater.



FEFLOW podporuje širokou škálu fyzikálních procesů.

OBEČNÉ

- Proměnné podmínky
- Podmínky ustáleného stavu

PROUDĚNÍ VODY

- Darcyho proudění v porézním prostředí
- 2D/3D nesaturované proudění
- Proudění v nesaturované zóně
- Proudění v závislosti na hustotě roztoku
- Proudění v puklinách a trubkách

TRANSPORT TEPLA

- Advekce-kondukce tepla
- Transport tepla v puklinách
- Thermohaline konvekce

TRANSPORT HMOTY

- Advekční-difusně/dispersní transport rozpuštěných složek
- Transport jednoho a více druhů rozpuštěných látek
- Rovnovážná sorpce
- Uživatelsky definované kinetické reakce
- Transport látek puklinovým systémem
- Propojení FEFLOW s **PhreeqcRM** pro geochemické modelování

piChem



PhreeqcRM

Reakční modul pro reaktivní transportní simulátory. Je založen na třídě `lphreeqc`, umožňuje přístup ke všem metodám reakčního prostředí PHREEQC. Obsahuje metody pro počáteční a okrajové podmínky, spouštění reakcí na všech buňkách modelu, přenos dat do a z modulu a paralelizaci pomocí MPI nebo OpenMP.

PhreeqcRM je geochemický reakční modul navržený speciálně k provádění výpočtů rovnováhy a kinetické reakce pro simulátory reaktivního transportu, které používají přístup dělení operátorů. Reakční metody jsou úplnou implementací reakčních funkcionalit PHREEQC. V každé buňce udržuje reakční modul složení všech reaktantů, které mohou zahrnovat minerály, výměnné kapacity, povrchové komplexy, plynné fáze, pevné roztoky a uživatelem definované kinetické reaktanty.



SOLUTION—definuje chemické složení roztoku.



EQUILIBRIUM_PHASES—seznam minerálů k výpočtu rovnováhy.



EXCHANGE—sady reakčních míst pro iontovou výměnu.



SURFACE—sady reakčních míst pro povrchovou komplexaci.



GAS_PHASE—plynné fáze reagující s roztokem.



KINETICS—nerovnovážné reakce s popisem reakční kinetické rovnice.

Schéma připojení PhreeqcRM modulu do systému FEFLOW

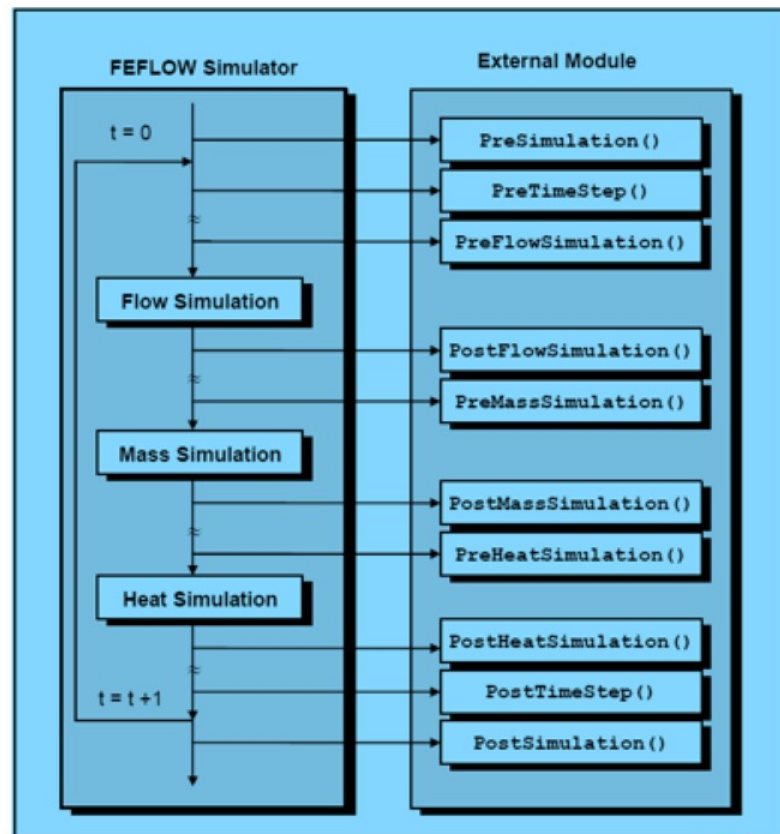
Realizace v prostředí C++

PhreeqcRM

- Transport mapovací složky
 - Inicializační hodnoty
 - Časově proměnné hodnoty okrajových podmínek

PHREEQC konfigurační soubory přiřazeny podle hodnoty mapovací složky v uzlech sítě popisující danou 3D doménu

Shluková analýza podle hodnot složek PHREEQC včetně vypočtených hodnot

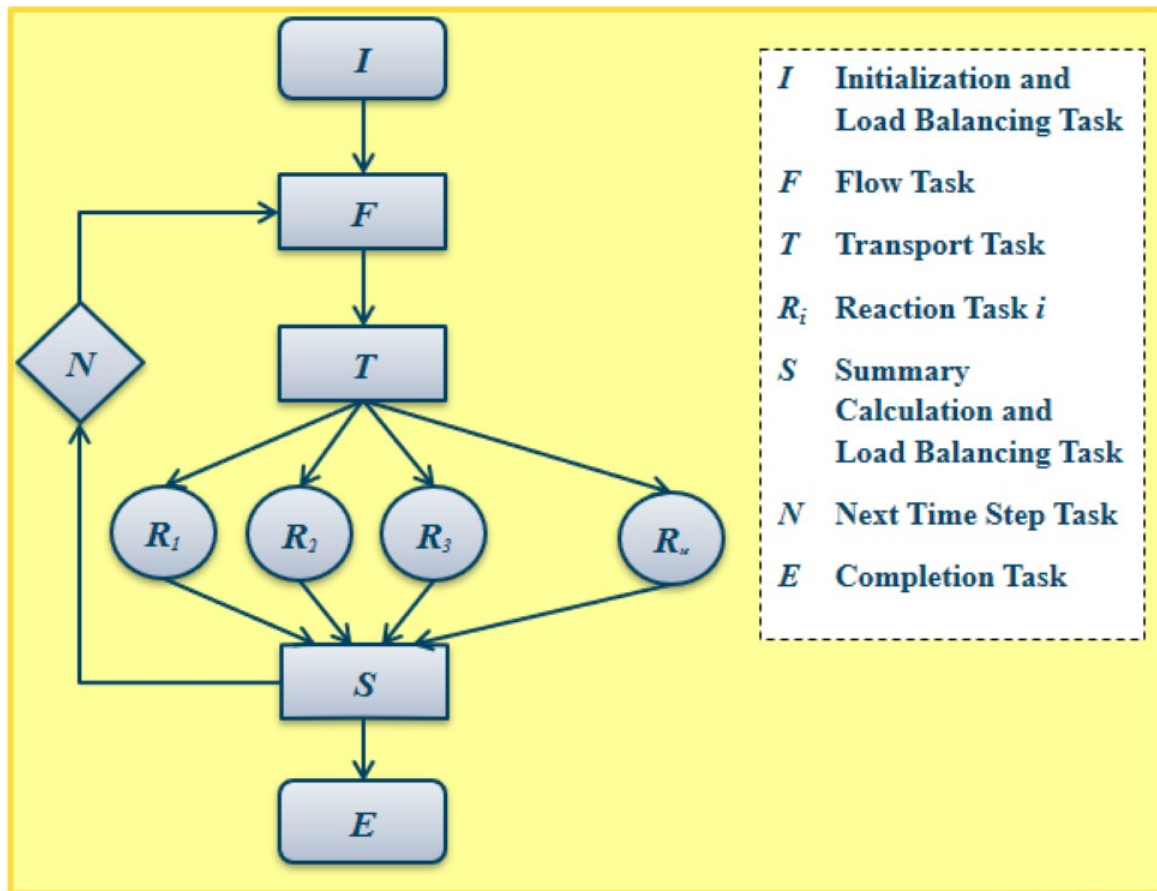


FEFLOW a PhreeqcRM

Paralelizace napojení běhu
reakčního modulu

OpenMP – využívá dostupný
počet jader na jednom uzlu

Nastavení konfigurace v
editaci vlastností piChem

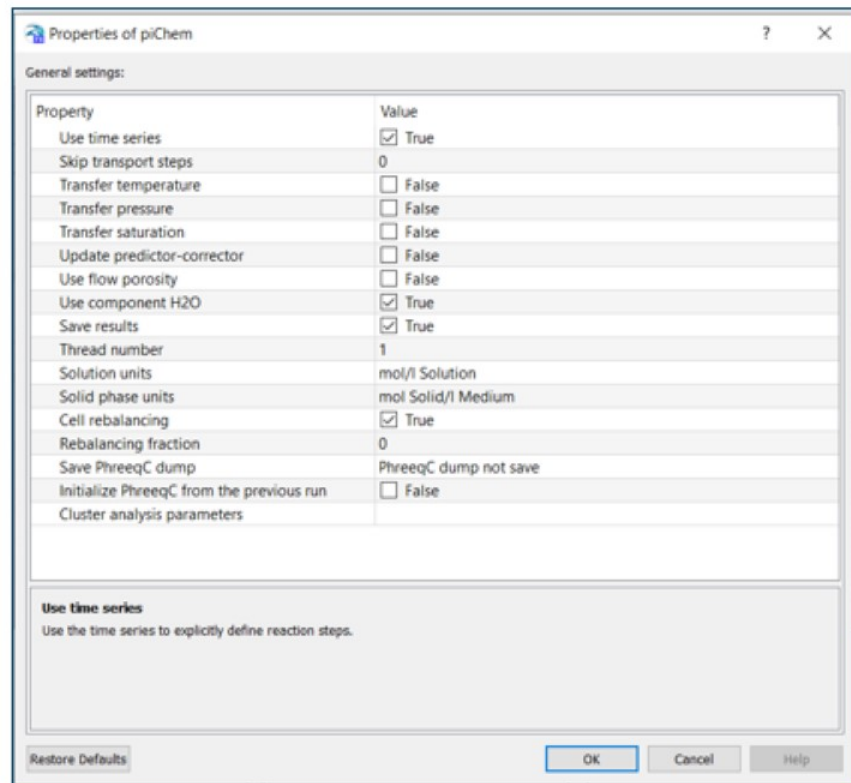
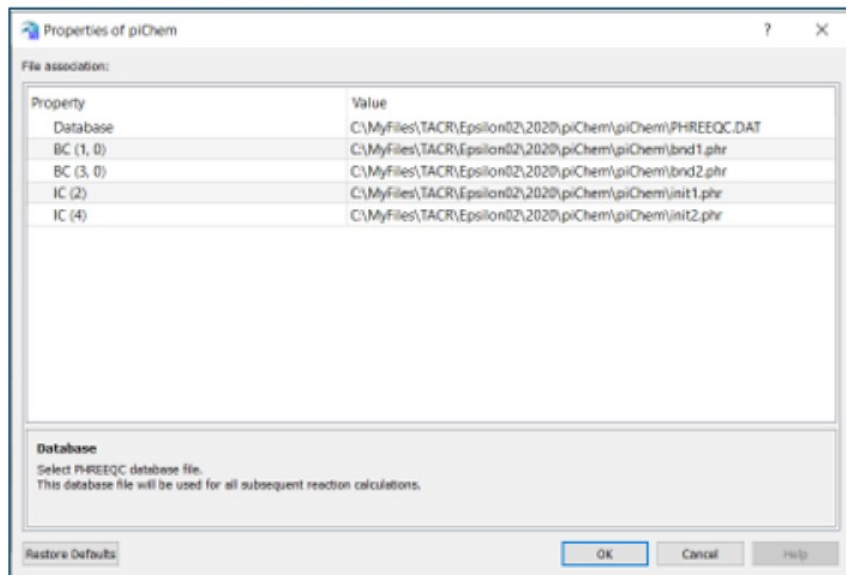


FEFLOW a PhreeqcRM

Paralelizace napojení běhu
reakčního modulu

OpenMP – využívá dostupný
počet jader na jednom uzlu

Nastavení konfigurace v
editaci vlastností piChem



IT4Innovations Hardware

IT4Innovations představuje strategickou výzkumnou infrastrukturu v České republice a společně s dalšími dvěma infrastrukturami CESNET a CERIT-SC tvoří jedinou e-infrastrukturu tzv. e-INFRA CZ.

Nejstarší z roku 2013 je superpočítač **Anselm** s teoretickým výkonem 94 TFlop/s. V roce 2015 byl uveden do provozu superpočítač **Salomon**, který v témže roce se svým teoretickým výkonem 2 PFlop/s obsadil 40. místo v seznamu TOP500 nejvýkonnějších superpočítačů světa.

Ve spolupráci s evropskou iniciativou EuroHPC, sdružující významná evropská superpočítačová centra, pracuje IT4Innovations na pořízení dalšího velkého superpočítače EURO_IT4I, který uvede do provozu začátkem roku 2021.



Spouštění úloh na clusteru IT4Innovations

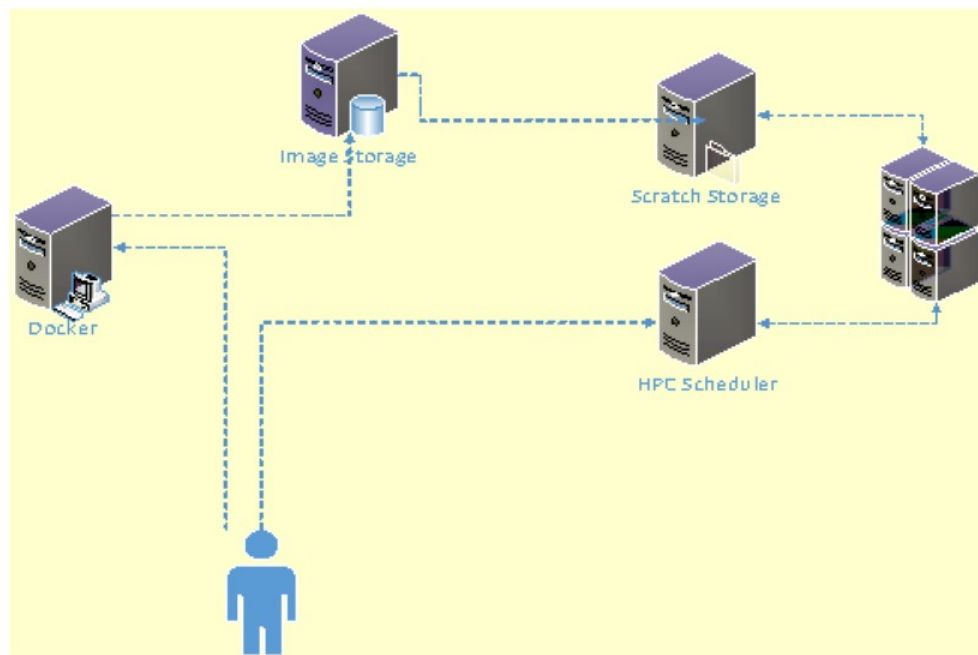
Software provozovaný na HPC clusteru, nebylo možné nainstalovat přímo na cluster. I když byl software určen pro platformu Linux, tak důvodem byla nekompatibilita systému FEFLOW s linuxovou distribucí clusteru Centos. Z toho důvodu byl software připraven jako kontejner v Dockeru a následně spouštěn v Singularitě na HPC clusteru.

První část je vytvoření image v Dockeru.

Druhá část se týká přenosu vytvořeného image z počítače na HPC cluster, kdy byl využíván Docker oficiální hub.

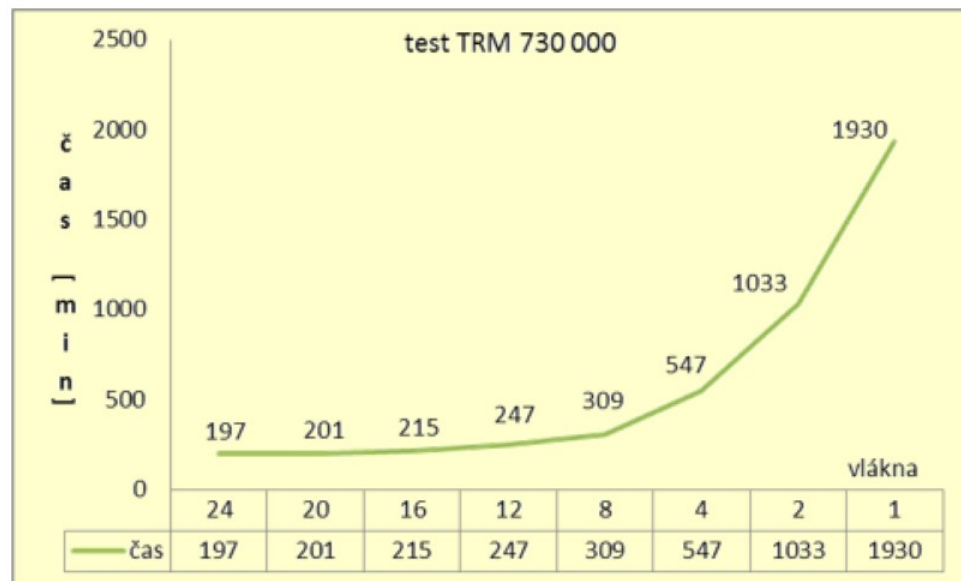
Třetím krokem bylo stažení image z hubu do scratch storage.

Pro spouštění úloh se uživatel připojil přes protokol SSH k HPC infrastruktuře a pak spustil úlohu. Prostředí WinSCP zajišťovalo přenos vstupních dat na HPC infrastrukturu a následné stažení výsledků.



Salomon – test škálovatelnosti

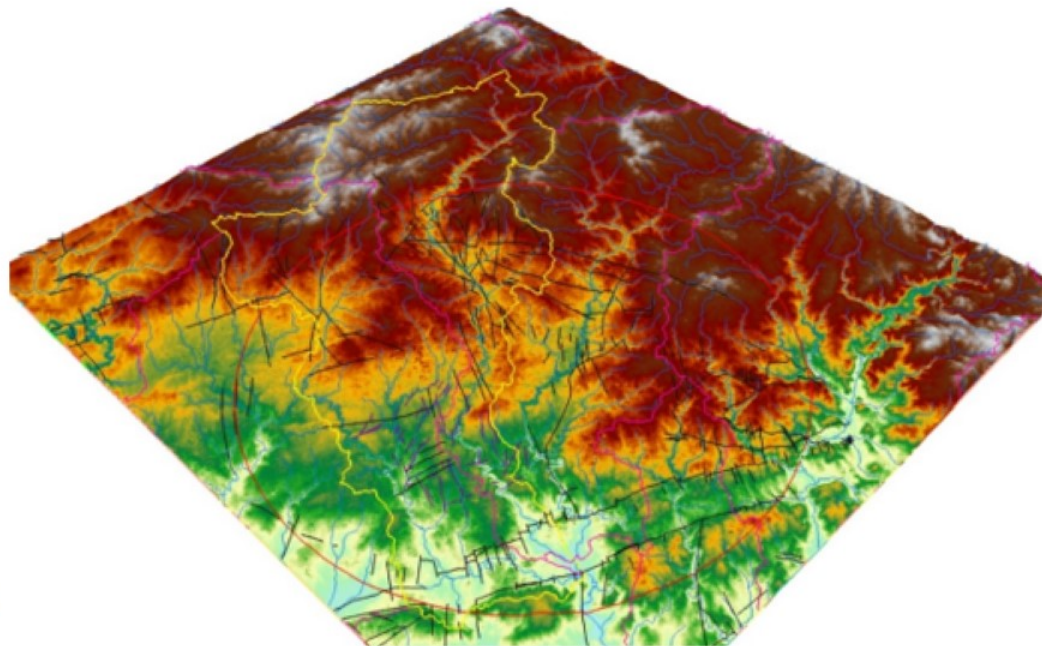
K téměř ideální škálovatelnosti docházelo při vláknech 1,2,4 a 8, kdy při dvojnásobném přidávání zdrojů docházelo k dvojnásobnému zrychlení simulace. Při přechodu z 8 vláken na 16 už však nedošlo k dvojnásobnému zrychlení a tedy můžeme usuzovat, že v těchto místech dochází ke zpomalení ideální škálovatelnosti. Testy na 20 a 24 vláknech už jen potvrdily, že piChem při podobných zdrojích už prakticky výrazně neškáluje a tím pádem se rychlost simulace s přidáním nových zdrojů nezrychluje.



Modelové doména testovacího modelu hypotetické lokality hlubinného úložiště

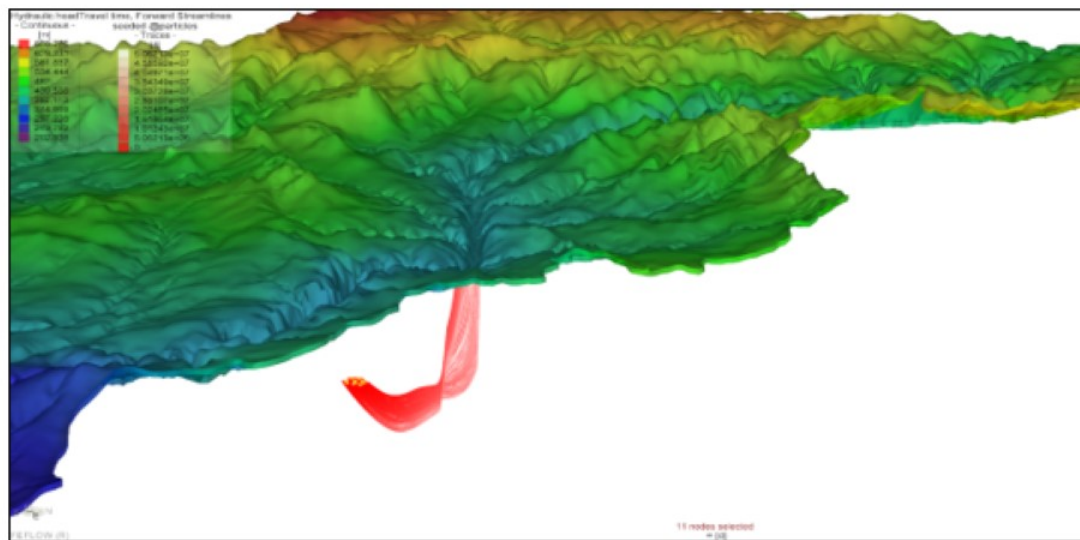
Na hypotetické lokalitě byla vytvořena síť hlavních tektonických zón a vedlejší tektoniky – obé bylo vytvořeno na podkladě strukturních směrů převládajících v Českém masívu.

Transport radionuklidů v horninovém prostředí je složitý komplex procesů, z nichž řídicím procesem je advekce (proudění v hydrodynamickém poli podzemních vod). Dále přistupují procesy hydrodynamické disperze, sorpce, radioaktivní rozpad a další geochemické reakce řešené prostředky PHREEQC.



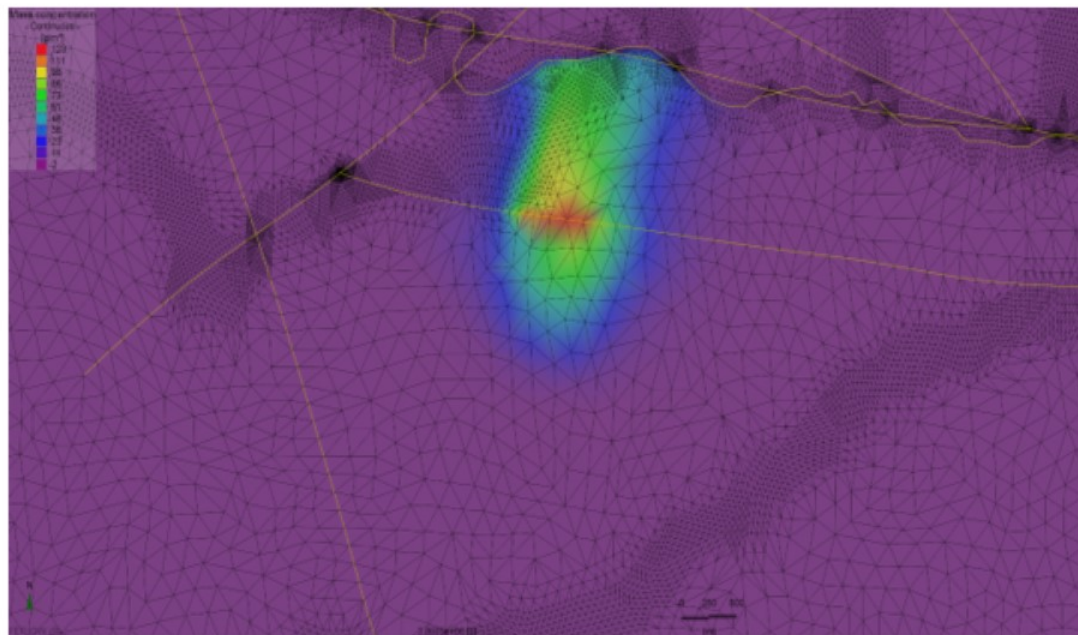
Vizualizace proudového pole technikou trasování částic

K vizualizaci proudového pole v části modelu bylo použita technika trasování částic advekcí. Obrázek ukazuje výsledky trasování části z místa 500 m pod terénem situovaném v neporušené části granitoidního masívu. Částice je trasována asi 1000 let advekcí v rámci neporušeného horninového masívu a poté dosáhne tektonické zóny, podél které migruje k drenážní bázi – řece.



Objemová aktivita (Bq/m³) vybraného radionuklidu v mělké zvodni (4. modelová vrstva), varianta 500 m pod terénem, čas 10 548 let po uzavření úložiště

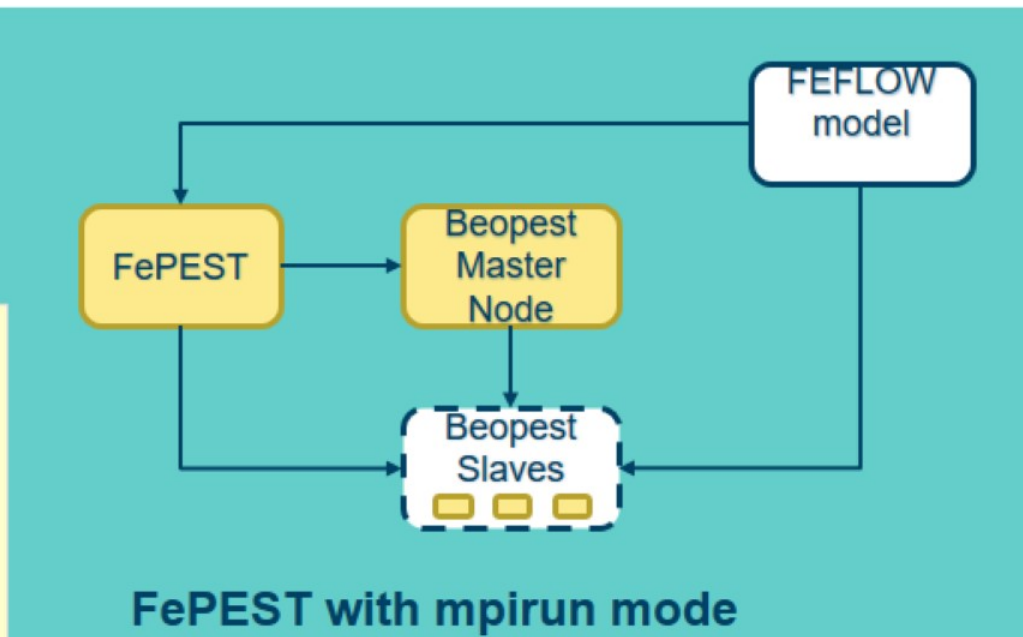
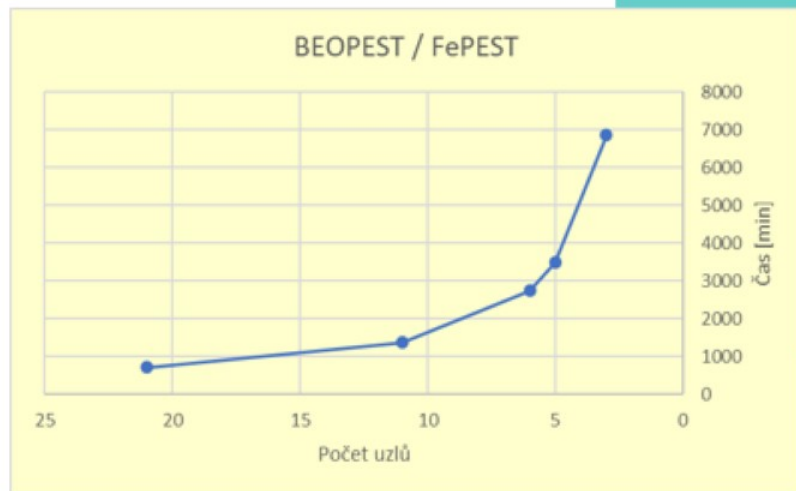
Výstupem reakčně-transportního modelu jsou mimo jiné koncentrace (objemové aktivity) radionuklidů v modelové doméně. Vzhledem k tomu, že nejsou k dispozici data pro spolehlivější řešení zdrojového členu, je důležité prezentované řešení transportu radionuklidů pojmout spíše na úrovni konceptní, včetně citlivostních analýz. Výsledek může být prospěšný pro identifikaci nejistot, jejich významu a další směřování výzkumů v předmětné oblasti na úrovni získávání vstupních dat do modelů i modelových řešení.



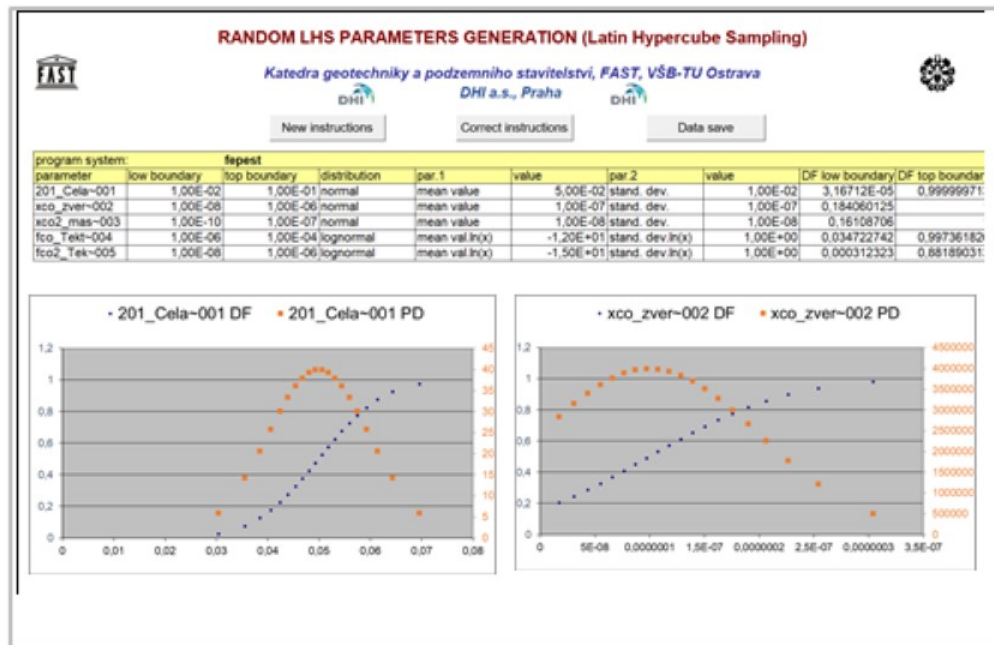
FePEST

FePEST propojení s BeoPEST

V rámci projektu bylo vyvinuto propojení software BeoPEST / FePEST. Úloha byla testována na předem vybraných počtech uzlů (každý uzel má 24 jader) a posílána do fronty qprod.

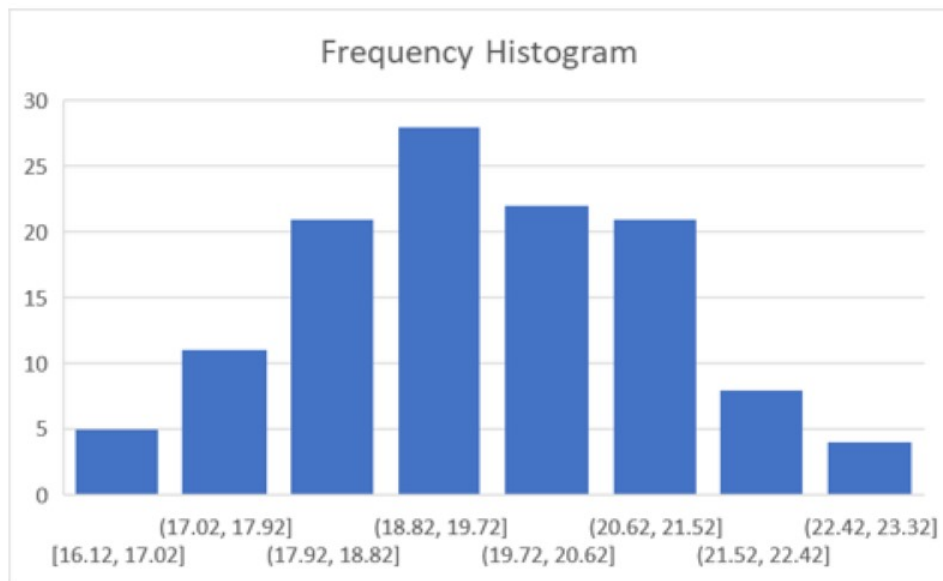


FePEST generování hodnot vstupních parametrů



Generování sad vstupních parametrů technikou LHS je založeno na statistickém rozdělení každého vstupního parametru. Vygenerované sady parametrů jsou dále exportovány do ASCII souborů typu *.PAR, s kterými již umí pracovat FePEST s použitím přepínače /f.

FePEST zpracování modelových výstupů



Po importu výsledků výpočtů do uživatelského rozhraní komponenty FePEST je možné provádět základní hodnocení citlivosti výstupů např. znázorněním histogramu hodnoty sledované simulované veličiny.

Děkuji za pozornost

RNDr. Pavel Štrof
Groundwater Senior Expert

www.dhi.cz
pas@dhigroup.com