

# ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ВЕРСИЯ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ НИМФА

*М. Н. Бардина, А. Ю. Алейников, В. В. Горев, И. В. Горев, В. А. Глазунов,  
Г. Н. Губкова, О. И. Кузьмина, И. Г. Новиков, А. И. Панов, С. Н. Полищук,  
А. А. Резяпов, Е. И. Рябов, И. Н. Чистякова*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

## Введение

Эта работа выполняется в кооперации с организациями Минобрнауки (СПбГУ, МГУ, КГУ), РАН (ИГЭ) и отраслевой науки (ГУП «ГеоцентрРТ», ОАО «ВНИМИ», ОАО «Энергоизыскания»).

Пакет программ НИМФА предназначен для решения задач многофазной многокомпонентной фильтрации с переносом примесей в подземном пространстве со сложной геологической структурой. Пакет предназначен для выполнения расчетов в трехмерной постановке, в параллельном режиме. Разработка такого пакета является наукоемкой проблемой, находящейся на стыке многих областей знаний (геофизика, химия, вычислительная математика, параллельное программирование, механика и др.).

Основные области применения и решаемые задачи на данный момент следующие.

### Горнодобывающая отрасль:

- моделирование извлечения больших объемов подземных вод для хозяйственно-питьевого водоснабжения и водопонижения при добыче полезных ископаемых, расчет ущерба поверхностному и подземному стоку;

- оценка эффективности мероприятий по снижению водопритоков к горным выработкам.

### Нефтегазодобыча:

- оптимизация схем разработки месторождений;
- прогнозирование повышения нефтеотдачи;
- контроль, планирование и обработка результатов комплексных гидродинамических и миграционных испытаний пластов и скважин.

### Атомная энергетика:

- расчетное обоснование выбора площадок для АЭС;

- прогноз последствий штатной эксплуатации и аварийного воздействия предприятий на подземное пространство;

- оценка эффективности мер по предотвращению загрязнения подземных вод.

### Геоэкология и природопользование:

- создание ПДМ для ведения мониторинга и прогноза изменения ресурсов и качества водных объектов.

### Предсказание ЧС и их последствий:

- прогноз последствий штатной эксплуатации и аварийного воздействия предприятий на поверхностные объекты и подземное пространство;

- оценка эффективности мер по предотвращению загрязнения поверхности и подземного пространства, например, при сооружении миграционных завес, оптимизации технологического цикла и т. п.

## 1. Базовые модели комплекса программ НИМФА

Фильтрационный перенос жидкостей и газов в пористых средах описывается уравнением неразрывности

$$\frac{\partial m\rho S}{\partial t} + \operatorname{div} v = \rho q$$

и законом Дарси

$$v = -\frac{k(S)}{\mu} K \operatorname{grad}(p + \gamma z),$$

где  $m$  – пористость,  $S$  – водонасыщенность,  $\gamma$  – удельный вес воды,  $K$  – тензор коэффициентов проницаемости,  $k(S)$  – фазовая проницаемость,  $q$  – мощность источников.

Насыщенность и компоненты тензора проницаемости, в общем случае, являются функциями, зависящими от давления. Для положительных давлений насыщенность равна 1. Для отрицательных капиллярных давлений используется полуэмпирическая быстро убывающая от 1 до 0 зависимость.

Остановимся кратко на основных реализованных моделях. В модели **фильтрации в зоне аэрации** уравнение неразрывности имеет вид

$$\eta(p) \frac{\partial h}{\partial t} = \operatorname{div} \frac{k(p)\gamma}{\mu} K \operatorname{grad} h + q,$$

где  $h = \frac{p}{\gamma} + z$  – гидравлический напор,

$k(p) = k(S(p))$ , откуда следует:

$$\eta(p) = \gamma \left[ (\beta_C + m\beta_W) S + m \frac{\partial S(p)}{\partial p} \right].$$

В последнем выражении  $m(p) = m_0 + \beta_C p$  – это зависимость пористости от давления,  $\rho(p) = \rho_0(1 + \beta_W p)$  – зависимость плотности воды от давления.

При **напорной фильтрации**  $p > 0$ , откуда следует  $S \equiv 1$ ,  $k(S) \equiv 1$ , поэтому уравнение неразрывности переписывается в виде

$$\eta \frac{\partial \eta}{\partial t} = \operatorname{div} \frac{\gamma}{\mu} K \operatorname{grad} h + q,$$

где  $\eta = \gamma(\beta_C + m\beta_W)$ .

В задачах **фильтрации газа** полагается  $p = R\rho T(t)$ . Выражая отсюда плотность, имеем

$$\rho = \frac{p}{RT(t)}.$$

Таким образом, уравнение неразрывности преобразуется к виду

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{p}{T(t)} = \operatorname{div} \frac{p}{\mu T(t)} K \operatorname{grad} p + \frac{p}{T(t)} q.$$

**Массоперенос** описывается следующими уравнениями:

$$\frac{\partial}{\partial t} mC_i + \frac{\partial a_i}{\partial t} + \operatorname{div}(C_i v) = \operatorname{div} D_i \operatorname{grad} C_i + q_i,$$

$$\frac{\partial a_i}{\partial t} = f(a_i, C_i), \quad i = \overline{1, n_C},$$

где  $C_i$  – концентрация  $i$ -й компоненты загрязнения,  $a_i$  – концентрация сорбции  $i$ -й компоненты,  $D_i$  – тензор коэффициентов молекулярной диффузии и дисперсии,  $f(a, C) = 0$  – изотерма сорбции (Генри).

В модели **двухфазной фильтрации нефти и воды без учета капиллярных сил** полагается  $p_1 = p_2 = p$ . Уравнения движения каждой фазы записываются в виде

$$\frac{\partial m\rho_W S_W}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_W v_W = \rho_W q_W,$$

$$v_W = -\frac{k_W^*}{\mu_W} K \operatorname{grad}(p + \rho_W gz),$$

$$\frac{\partial m\rho_O S_O}{\partial t} + \operatorname{div} \rho_O v_O = \rho_O q_O,$$

$$v_O = -\frac{k_O^*}{\mu_O} K \operatorname{grad}(p + \rho_O gz).$$

Отсюда можно записать уравнение для давления

$$\begin{aligned} \beta^* \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left( \frac{k_W^*}{\mu_W} + \frac{k_O^*}{\mu_O} \right) K \operatorname{grad} p = \\ = q + \operatorname{div} \left( \frac{k_W^*}{\mu_W} \gamma_W + \frac{k_O^*}{\mu_O} \gamma_O \right) Kk, \end{aligned}$$

введя обозначения  $\beta_W^* = \beta_C + m\beta_W$ ,  $\beta_O^* = \beta_C + m\beta_O$ ,  $\beta^* = \beta_W^* S_W + \beta_O^* S_O$ , и уравнение для насыщенности

$$m \frac{\partial S}{\partial t} + \beta_W^* S \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi(S)v + \psi(S)(\gamma_O - \gamma_W)Kk) = \varphi(S)q,$$

положив

$$\varphi(S) = \frac{\frac{k_W^*(S)}{\mu_W}}{\frac{k_W^*(S)}{\mu_W} + \frac{k_O^*(S)}{\mu_O}}, \quad \psi(S) = \frac{\frac{k_W^*(S)}{\mu_W} \frac{k_O^*(S)}{\mu_O}}{\frac{k_W^*(S)}{\mu_W} + \frac{k_O^*(S)}{\mu_O}}.$$

Модель **двухфазной фильтрации в трещиновато-пористых пластах** описывается следующим образом:

$$\begin{cases} \beta^* \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left( \frac{k_W^*}{\mu_W} + \frac{k_O^*}{\mu_O} \right) K \operatorname{grad} p = q + \operatorname{div} \left( \frac{k_W^*}{\mu_W} \gamma_W + \frac{k_O^*}{\mu_O} \gamma_O \right) Kk + Q; \\ m \frac{\partial S}{\partial t} + \beta_W^* S \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\varphi(S)v + \psi(S)(\gamma_O - \gamma_W)Kk) = \varphi(S)q + Q_W; \\ \bar{\beta}^* \frac{\partial p}{\partial t} - \operatorname{div} \left( \frac{\bar{k}_W^*}{\mu_W} + \frac{\bar{k}_O^*}{\mu_O} \right) \bar{K} \operatorname{grad} p = \bar{q} + \operatorname{div} \left( \frac{\bar{k}_W^*}{\mu_W} \gamma_W + \frac{\bar{k}_O^*}{\mu_O} \gamma_O \right) \bar{K}k - Q; \\ \bar{m} \frac{\partial \bar{S}}{\partial t} + \beta_W^* \bar{S} \frac{\partial p}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{\varphi}(\bar{S})\bar{v} + \bar{\psi}(\bar{S})(\gamma_O - \gamma_W)\bar{K}k) = \bar{\varphi}(\bar{S})\bar{q} - Q_W. \end{cases}$$

Здесь чертой сверху обозначены переменные и константы, отнесенные к блокам (ко второй среде), без черты – к трещинам (первой среде),  $Q_W = \lambda Q$ ,

$$\lambda = \begin{cases} \varphi(S), & Q \leq 0; \\ \bar{\varphi}(\bar{S}), & Q > 0. \end{cases}$$

## 2. Счетная сетка

К особенностям рассматриваемых задач можно отнести:

- сложность геометрии пластов,
- наличие гидрогеологических объектов,
- соседство областей с сильно отличающимися характеристиками.

Чтобы учесть эти особенности, в основу программы положен принцип сегментации счетной сетки с использованием, в общем случае, косоугольных ячеек.

Построение трехмерной сетки осуществляется в два этапа. Сначала строится двумерная нерегулярная сетка в плане задачи. Под планом понимается проекция счетной области на координатную плоскость  $XY$ . Двумерная сетка может состоять из нескольких четырехугольных фрагментов. В каждом из фрагментов независимым образом выбирается своя регулярная сетка. После чего отдельно рассчитанные сетки фрагментов превращаются в единую нерегулярную сетку плана. При этом на границах между фрагментами появляются узлы с тремя ребрами и ячейки с переменным числом вершин. Трехмерная сетка задачи получается при помощи послойного тиражирования двумерной сетки вдоль оси  $Z$ . Таким образом, получена единая блочно-регулярная сетка.

На рис. 1 представлены примеры счетной сетки методики НИМФА: снизу – плановая сетка, сверху – трехмерная. Рис. 1,а иллюстрирует сетку модельной задачи, рис. 1,б – сетку производственной задачи, где перепад высот составляет несколько километров.

### 3. Алгоритмы декомпозиции. Организация межпроцессорных обменов

Исходя из структуры сетки был выбран алгоритм декомпозиции «клетка».

Метод декомпозиции **клетки** применяется для двумерной сетки, а впоследствии трехмерная декомпозиция получается путем набора требуемого количества ячеек по оси OZ для каждой из клеток. Декомпозиция данных строится исходя из количества ячеек в задаче с равномерным их распределением по

процессам и не зависит от вычислительной нагрузки, приходящейся на каждую параобласть.

**Декомпозиция двумерной сетки** проводится построением полос в два этапа с использованием центров ячеек двумерной сетки НИМФА таким образом, чтобы число ячеек в каждой полосе было примерно одинаковым.

По количеству ячеек двумерной сетки определяется количество ячеек в каждой полоске. После того как все процессорные полосы вдоль оси OX созданы, производится независимое разбиение уже **каждой** из этих полос вдоль оси OY.

На рис. 2 представлены этапы двумерной декомпозиции. Первый этап, разбиение на полосы вдоль оси OX, – на рис. 2,а; второй этап, разбиение на полосы вдоль оси OY уже сформированных вдоль оси OX полос, – на рис. 2,б. В итоге получается разбиение на клетки. На рис. 3 показана трехмерная итоговая декомпозиция для числа разбиений  $N_x = 4$ ,  $N_y = 2$ ,  $N_z = 2$ .

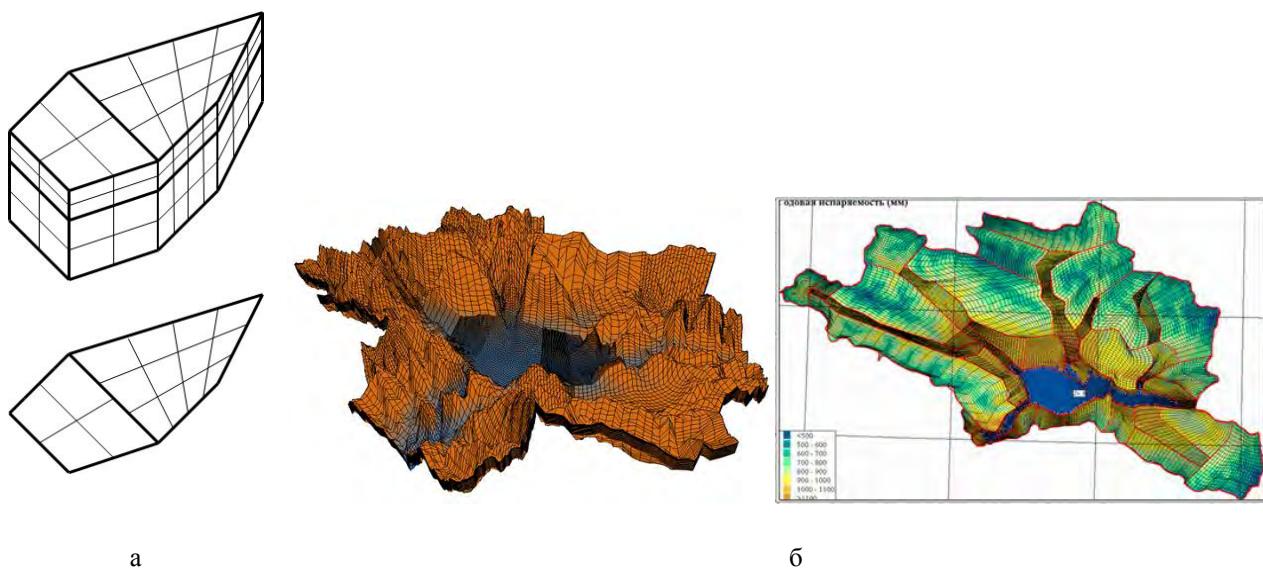


Рис. 1. Счетная сетка: а – модельный пример; б – производственная задача

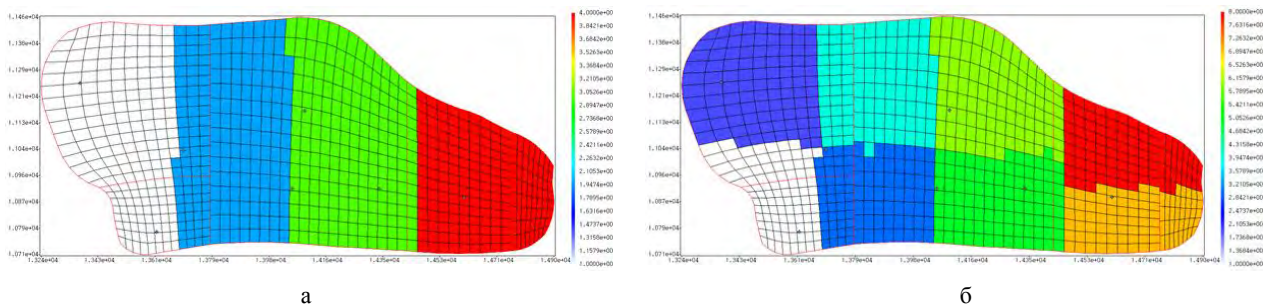


Рис. 2. Двумерная декомпозиция: а – разбиение на полосы вдоль оси OX; б – разбиение на полосы вдоль оси OY

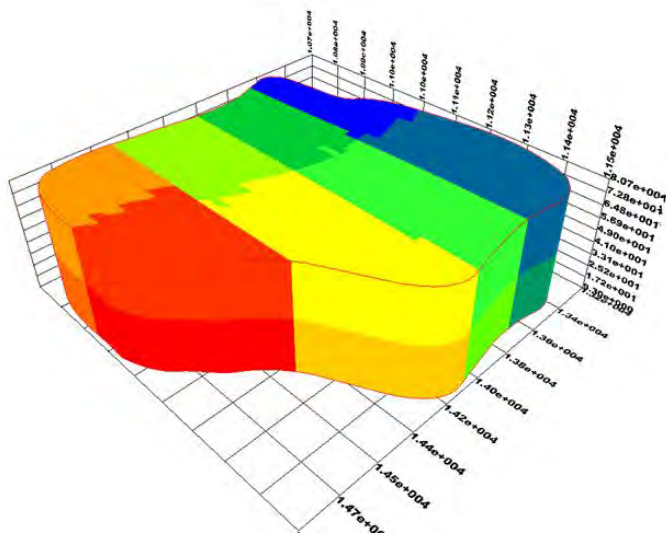


Рис. 3. Трехмерная декомпозиция

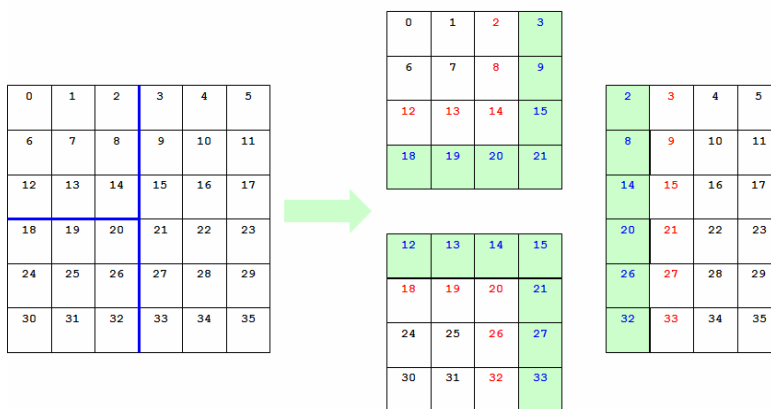


Рис. 4. Схематичное разбиение расчетной сетки

Каждая из параобластей окаймляется фиктивным слоем ячеек, узлов и граней. На рис. 4 представлено схематичное разбиение расчетной области на три параобласти. На рисунке цифрами обозначены глобальные номера ячеек.

На основе определенной связи осуществляется обмен полями величин, привязанных к центрам ячеек. Последовательность обменов определяется по правилу «старший -> младшему»: процессор с большим идентификатором посылает информацию процессорам с меньшим идентификатором и ждет от него пересылки, и наоборот процессор с меньшим идентификатором сначала ждет, а затем посылает.

#### 4. Исследование эффективности распараллеливания

Анализ эффективности распараллеливания комплекса программ НИМФА выполнялся как в режиме деления, так и в режиме умножения. Для расчета эффективности использовались стандартные формулы.

В режиме масштабирования эффективность определяется выражением

$$e = \frac{t_1}{t_n} \cdot 100\%,$$

где  $t_1$  – время расчета на 1-м процессоре,  $t_n$  – время расчета на  $n$  процессорах; в режиме деления – выражением

$$e = \frac{k}{n} \cdot 100\%,$$

где  $k = \frac{t_1}{t_n}$  – ускорение,  $n$  – число процессоров.

Для исследования эффективности распараллеливания был разработан специальный тест «задача нестационарной миграции загрязнения в однослойном изолированном пласте». На двух боковых поверхностях моделируемой области задан перепад напоров. На остальных границах задаются условия равенства потока нулю. На границе с большим напором задана ненулевая концентрация. При данных граничных условиях реализуется стационарный ре-

жим фильтрации с постоянным полем скоростей. На данном поле скоростей решается задача нестационарной миграции примеси.

На рис. 5 схематично приведена постановка задачи. Задача имеет аналитическое решение.

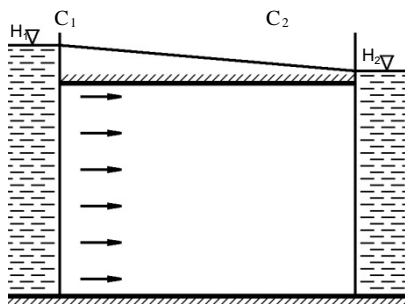


Рис. 5. Напорная фильтрация между двумя водоемами

Расчеты по этой задаче выполнялись в режиме масштабирования. Поэтому расчетная область задачи с увеличением числа процессоров пропорционально увеличивалась таким образом, чтобы количество точек на каждом процессоре во всех направлениях оставалось неизменным. Учитывая, что поток идет вдоль оси OX, и скорость его зависит от значений напоров на боковых границах области и от протяженности счетной области по оси OX, для сохранения однотипности расчетов на различном числе процессоров увеличение расчетной области задачи вдоль оси OX не проводилось. Следует отметить, что типичной декомпозицией для задач комплекса НИМФА является двумерная разбивка на параобласти поверхности XOY (двумерная процессорная решетка), поэтому увеличение счетной области задачи только по двум направлениям в режиме масштабирования в данном случае вполне допустимо. Количество точек для каждого расчета приведено в табл. 1.

Таблица 1

#### Результаты расчетов

Число процессоров	Декомпозиция	Размер задачи (количество ячеек)	Полное время счета, с	Эффективность, %	Время счета без учета LParSol, с	Эффективность распараллеливания без учета LParSol, %
1	1x1x1	27 000	309,05	100,00	302,61	100,00
4	1x2x2	108 000	319,86	96,62	309,37	97,81
16	1x4x4	432 000	333,29	92,73	317,68	95,26
64	1x8x8	1 730 000	360,39	85,75	344,37	87,87
256	1x16x16	6 910 000	369,06	83,74	353,06	85,71

Так как для решения СЛАУ в данных расчетах использовалась библиотека параллельных решателей LParSol, интерес представляет соотношение доли вычислений LParSol к общему объему вычислений в комплексе НИМФА, а также соотношение эффективности распараллеливания параллельного решателя к эффективности распараллеливания задачи в целом. На задачах фильтрации было показано, что па-

дение эффективности распараллеливания вызывает именно блок решения СЛАУ. Это связано с большим числом итераций при решении СЛАУ и сравнительно небольшим объемом информации, которое требуется для межпроцессорного обмена в комплексе НИМФА на стадии процесса фильтрации. При подключении модуля переноса возрастает объем передаваемой информации комплексом НИМФА при сравнительно небольшом росте вычислений. Поэтому эффективность распараллеливания блока решения СЛАУ близка к эффективности распараллеливания в целом по задаче. Так, например, на 256 процессорах эффективность расчета составила 83,74 %, а эффективность счета без учета LParSol (не учитываются вычисления и обмены, выполняемые решателем LParSol) – 85,71 %.

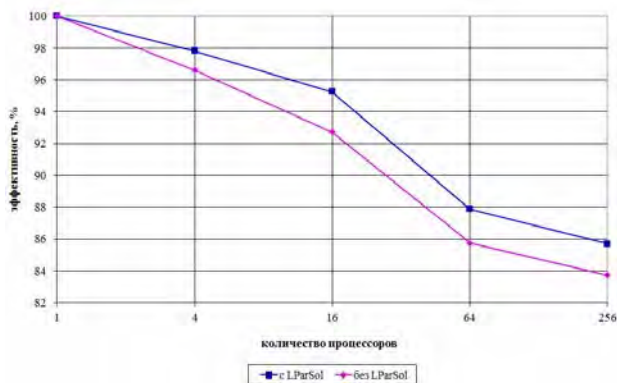


Рис. 6. Эффективность счета в режиме умножения (тестовая задача)

Сравнительный анализ эффективности расчетов задачи без подключения диффузии и дисперсии проиллюстрирован графиком рис. 6.

## 5. Производственные расчеты

Достигнутый уровень развития пакета программ НИМФА позволил решить следующие практически важные задачи предприятий:

- совместно с сотрудниками ГУП «Геоцентр РТ» создана гидрогеологическая фильтрационная модель территории Нижнекамского промышленного узла для обоснования технических мероприятий по локализации очага загрязнений (задача решена в параллельном режиме на 256 процессорах с числом ячеек ~8 млн);

- совместно с сотрудниками ОАО «НИИИ энергоизыскания» построена численная геофильтрационная модель участка Балтийской АЭС. Проведена калибровка. Показано, что при строительстве в долине р. Неман водозабора из трех эксплуатационных скважин понижения на скважинах не превысят предельно допустимых, а депрессионная воронка не достигнет площадки строительства АЭС (задача решена в параллельном режиме на 10 000 процессорах с числом ячеек ~98 млн);

• совместно с сотрудниками ОАО «ВНИМИ» построена численная геофильтрационная модель Илецкого месторождения соли. Проведена калибровка модели. Разработан ряд рекомендаций по обеспечению промышленной и экологической безопасности разработки месторождения (задача решена в параллельном режиме на 1024 процессорах с числом ячеек ~32 млн).

Задача об Илецком месторождении каменной соли исследовалась на предмет эффективности распараллеливания в режиме умножения и деления.

Для исследования эффективности распараллеливания в режиме умножения задача считалась на числе ячеек от 500 тыс. до 32 млн. на 16–1024 процессорах. Замеры времени расчетов с решателем HYPRE GMRES библиотеки параллельных решателей LParSol приведены в табл. 2, зависимость эффективности от числа процессоров – на рис. 7.

Таблица 2

Исследование эффективности распараллеливания в режиме умножения

Число процессоров	Декомпозиция	Размер задачи (количество ячеек)	Полное время счета, с	Эффективность, %	Время счета без учета LParSol, с	Эффективность распараллеливания без учета LParSol, %
16	4x4x1	490 656	14,71	100,00	5,97	100,00
64	8x8x1	1 962 624	13,53	108,72	6,46	92,41
256	16x16x1	8 005 632	14,56	101,03	7,65	78,04
1024	32x32x1	32 022 528	23,01	63,93	11,3	52,83

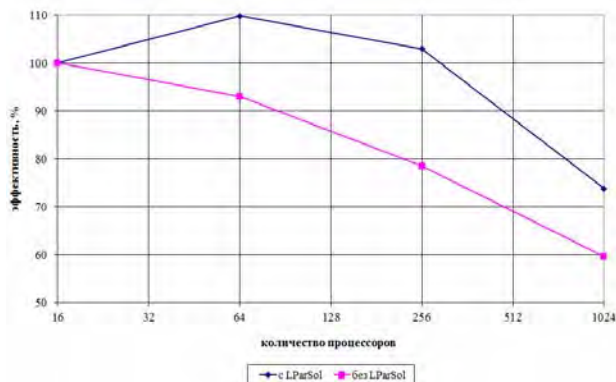


Рис. 7. Эффективность счета в режиме умножения (производственная задача)

График эффективности счета задачи по пакету НИМФА с решателем GMRES с предобусловливателем BoomerAMG из библиотек решателей LParSol (рис. 7) расположен выше графика эффективности счета без учета решателя (не учитываются вычисления и обмены, выполняемые решателем), т. е. решатель СЛАУ более эффективен, чем собственно НИМФА. Значение эффективности счета на 1024 процессора выше 70 %.

Для исследования эффективности распараллеливания в режиме деления было проведено две серии расчетов, в которых варьировались решатели библиотеки параллельных решателей LParSol и способы

разбиения на процессоры. В первой серии расчетов число ячеек составляет ~2 млн, во второй – ~32 млн. Графики зависимости времени расчета задачи от числа процессоров в сериях задач показаны на рис. 8, 9.

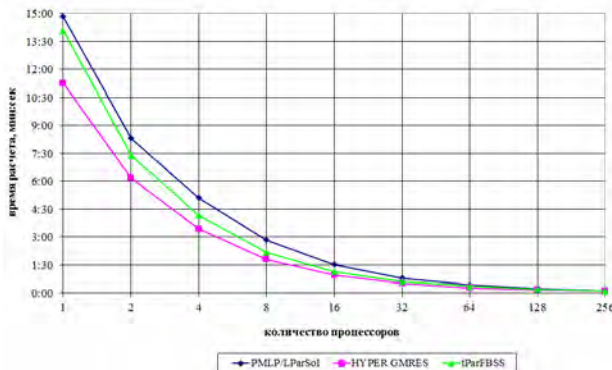


Рис. 8. Зависимость времени расчета от числа процессоров (~2 млн ячеек)

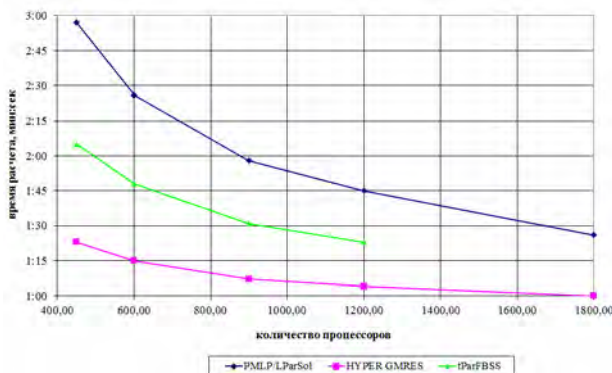


Рис. 9. Зависимость времени расчета от числа процессоров (~32 млн ячеек)

Из приведенных рисунков следует, что для данного типа задач выгоднее использовать решатель GMRES. Он показывает меньшее время, потраченное непосредственно на счет. Также во времени счета задач неплохо показал себя решатель tParFBSS, самое большее время требуется решателю PMLP/LParSol.

**Заключение**

Особенности задач гидрогеологии и порождаемых пакетом НИМФА СЛАУ позволяют сделать вывод о том, что для решения больших задач на большом числе процессоров пригодны как минимум три разных метода решения СЛАУ, имеющиеся в комплексе библиотек решателей LParSol, которые обладают неплохой эффективностью распараллеливания. Наиболее экономичным по времени счета показал себя решатель GMRES с предобусловливателем BoomerAMG библиотеки HYPRE.

К настоящему моменту имеется опыт решения производственных задач с числом ячеек до 100 млн в параллельном режиме на 10 000 процессорах с эффективностью распараллеливания не ниже 57 %.