

IMPLEMENTACIÓN DE UN CÓDIGO EN PARALELO PARA RESOLVER LA ECUACIÓN DE FLUJO SUBTERRÁNEO EN MEDIOS HETEROGÉNEOS Y ANISÓTROPAS

O. D. Álvarez-Villa¹, S. Ospina², K. Pérez¹, G. Monsalve² y J. I. Vélez²

¹Escuela Ambiental, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

²Escuela de Geociencias y Medio Ambiente, Universidad Nacional de Colombia sede Medellín.

E-mail: odavid.alvarez@udea.edu.co, sospinar@unal.edu.co, kevin.perez@udea.edu.co, gmonsalmem@unalmed.edu.co, jivelezu@unalmed.edu.co

Introducción

Durante los últimos años, la disponibilidad de fuentes hídricas superficiales para el abastecimiento de diferentes tipos de uso se ha reducido debido a la fuerte presión que se ha hecho sobre ellas. Las aguas subterráneas se consideran como una excelente opción para mitigar los desabastecimientos de recurso hídrico ya que, primero, la lenta respuesta de los acuíferos regula naturalmente su disponibilidad y, segundo, presentan una mejor calidad que las aguas superficiales y por lo tanto los tratamientos necesarios para su potabilización son menos costosos. En consecuencia, se hace necesario desarrollar herramientas potentes para gestionar adecuadamente el recurso hídrico subterráneo. Una de las formas más aceptada actualmente para evaluar la disponibilidad de las aguas subterráneas es a través de modelos computacionales de flujo y transporte. El éxito en la aplicación de estos modelos se fundamenta, entre otras cosas, en lograr la mejor representación posible de la variabilidad espacio-temporal de los parámetros en juego, puesto que el comportamiento de un soluto está fuertemente influenciado por la heterogeneidad y la anisotropía del medio geológico, lo cual se podría ver reflejado en la propagación anómala de la pluma y en cambios de su velocidad de dilución (Salamon, 2006). La heterogeneidad de los parámetros hidráulicos del acuífero afecta la dinámica de los procesos relacionados con el transporte, y la anisotropía de la conductividad hidráulica puede modificar el patrón espacio-temporal de las líneas de corriente, con lo cual se alterarían las direcciones preferenciales de avance de una pluma de soluto por efecto de la advección. De ello sigue que es crucial lograr una representación detallada de la dinámica de flujo subterráneo al momento de modelar el transporte. Sin embargo, tradicionalmente se ha utilizado el tensor diagonal de conductividades como una manera simplificada para considerar la anisotropía del medio. En este trabajo se presenta una implementación eficiente que resuelve en paralelo la Ecuación en Derivadas Parciales de Flujo Subterráneo (EDPFS) transitoria y 3D, linealizada aplicando diferentes esquemas de Diferencias Finitas (DF), considerando el tensor completo de anisotropía.

Metodología

Diferentes autores han desarrollado trabajos donde plantean una representación parcial o total de la anisotropía de la conductividad hidráulica. Anderman *et al.* (2002) desarrollan el paquete MODFLOW Layer Variable Direction Anisotropy (LDVA); esquema conceptual de modelación que considera únicamente la anisotropía por capas del modelo, pero sin incluir las componentes cruzadas del tensor de conductividades hidráulicas. Por su parte, Li *et al.* (2010) proponen la modelación del flujo subterráneo tridimensional para régimen permanente usando el tensor anisótropo de conductividades hidráulicas y un esquema de DF de 18 bloques adyacentes. En este trabajo se adoptó una metodología para solucionar la EDPFS considerando el tensor completo de anisotropía, el cual representa una modificación operacional del algoritmo propuesto por Li *et al.* (2010), dado que la resolución propuesta es transitoria. En un dominio espacial discretizado por DF

tridimensionales mediante n prismas rectangulares e incluyendo diferentes tipos de condiciones de contorno, se obtiene un Sistema de Ecuaciones Lineales Disperso (SELD) en cada paso temporal, el cual se plantea de la siguiente manera:

$$\left(A - \frac{D}{\Delta t}\right) \mathbf{h}^t + \mathbf{q} = -\frac{D}{\Delta t} \mathbf{h}^{t-1} \quad [1]$$

donde $\mathbf{A} \in R^{n \times n}$ es una matriz de conductividades equivalentes [L^2/T], $\mathbf{h}^t \in R^n$ es un vector con las alturas piezométricas al final del t -ésimo intervalo [L], $\mathbf{h}^{t-1} \in R^n$ es un vector con las alturas piezométricas al inicio de dicho intervalo, $\mathbf{D} \in R^{n \times n}$, es una matriz de almacenamientos específicos [L^2] y $\mathbf{q} \in R^n$ es el vector de flujos [L^3/T]. Una característica importante de la expresión [2] es que para los esquemas de resolución por DF considerados en este trabajo, las matrices resultantes son siempre simétricas definida positivas y dispersas con estructura invariante. Ello permite adoptar esquemas de resolución muy eficientes basados en el método del Gradiente Conjugado (GC) Pre-condicionado. Los pre-condicionamientos que se estudian en este trabajo son: (i) Jacobi, (ii) factorización LU incompleta (ILU), y (iii) métodos algebraicos multi-malla (ver Benzi, 2002).

Para efectos de ejecución computacional, se han adoptado las herramientas ofrecidas por la interfaz de altas prestaciones PETSc (Balay *et al.*, 2012), que ejecuta en paralelo el planteamiento de los sistemas de ecuaciones del modelo, la resolución en paralelo de dichos sistemas mediante el método del gradiente conjugado y el acceso a diferentes esquemas de pre-condicionamiento. El PETSc, desarrollado por el *Agronomie National Laboratory* de los Estados Unidos, es un software pensado como una herramienta para la computación científica portable y extensible compuesta por una colección de rutinas y estructuras de datos que proveen bloques de construcción para la implementación de códigos de gran escala en computadoras en paralelo. Una de las grandes ventajas de PETSc es que puede ser usado en sistemas de procesadores que trabajen en paralelo (clusters, supercomputadoras o computadoras personales). Ello se logra a través de librerías especializadas de programación paralela como MPICH u OpenMPI que se encargan de transmitir información entre procesadores de una forma ordenada y eficiente, a través de los lenguajes de programación tradicionales como FORTRAN, C, C++ y Python. Las librerías del PETSc permiten la creación de familias de objetos de matrices, vectores e índices de conjuntos, en las que el mismo PETSc se encarga de realizar operaciones eficientes entre ellos, incluso si se trabaja en paralelo, lo que permite crear códigos más limpios y eficientes para la solución de sistemas de ecuaciones.

Para probar la pertinencia y eficiencia de la implementación creada (FDPACK-ANISOFLOW) se realizaron tres experimentos computacionales. Primero, la modelación del flujo en un acuífero bidimensional homogéneo anisótropo, con el fin de evaluar la representación matemática de la anisotropía del medio. Segundo, la solución de la EDPFS para medio fracturado, considerando propiedades hidráulicas generadas a partir de un modelo estocástico equivalente de medio poroso. Tercero, un acuífero sintético en forma de cubo, heterogéneo y anisótropo con diferentes niveles de discretización espacial.

Resultados y análisis

Modelo bidimensional simple. Se estudiaron tres medios homogéneos con conductividad hidráulica uniforme y diferentes condiciones de anisotropía: (i) medio isótropo, (ii) medio anisótropo con ejes de anisotropía paralelos a los ejes cartesianos, y (iii) medio anisótropo con ejes de anisotropía rotados un ángulo de 45° con respecto al Norte, con conductividades cruzadas de 0.4 m/d. Las alturas piezométricas simuladas se presentan en la Figura 1, donde se observa la coherencia de la variabilidad espacial de las alturas piezométricas simuladas con respecto a los planteamientos de anisotropía en los modelos. Cabe notar que los ejes de la elipse de descensos se orienten de acuerdo a la dirección de anisotropía impuesta a los medios de prueba.

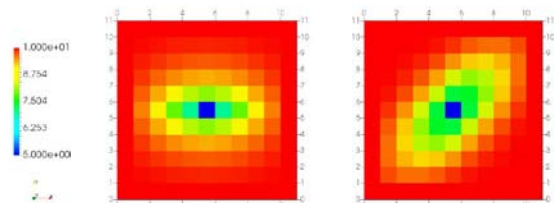


Figura 1.- Solución del modelo para medios anisótropo con ejes de anisotropía paralelos a los ejes cartesianos (centro) y rotados 45° .

Medio heterogéneo por facies. Los datos de campo hacen alusión a roca fracturada, donde las propiedades físicas del material parental, la geometría, la extensión y la conectividad de las fracturas fueron caracterizadas a partir de núcleos de perforación, pruebas hidráulicas, estudios geofísicos y datos de pozos. Las principales zonas de fractura identificadas tienen una transmisividad mayor de $1 \times 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$ y una extensión de varios cientos de metros. Con base a esta información se plantearon modelos estocásticos de facies para un medio poroso equivalente; planteamiento que ha requerido la definición de categorías de rocas, las cuales se obtuvieron analizando las conductividades hidráulicas obtenidas en los ensayos de interferencia y registros de densidad de fracturamiento. La EDPFS se solucionó en régimen permanente mediante ANISOFLOW para el medio heterogéneo por facies de roca fracturada el GC con pre-condicionamiento ILU y esquema dual por descarte ($\tau=0.0005$) y nivel de llenado ($p=2$); solución que se comparó con la obtenida aplicando el código MODFLOW. Los resultados obtenidos se presentan la Figura 2, donde se muestran los niveles piezométricos y los contornos de estos. Un análisis cuantitativo mostró que existe únicamente un error relativo máximo del 0.105 % entre ambas soluciones, el cual corresponde a una diferencia absoluta cercana a 0.016 m. Este resultado permite validar indirectamente la aplicación del código ANISOFLOW en medios heterogéneos y anisótropos.

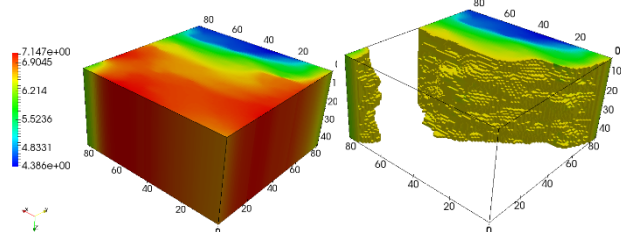


Figura 2.- Alturas piezométricas simuladas por ANISOFLOW para el modelo tridimensional de facies.

Medio altamente heterogéneo y anisótropo. Este modelo considera un acuífero cúbico de 400 m de lado, formado por un medio heterogéneo con zonas isótropas y anisótropas no paralelas a los ejes cartesianos, el cual fue generado pseudo-

aleatoriamente con una discretización regular, cuyo tamaño de bloque depende del caso de análisis. Con el fin de realizar los experimentos de escalabilidad computacional se generaron discretización de 25, 50, 100 y 200 bloques de lado que, respectivamente, son equivalentes a sistemas matriciales compuestos por 15625 (16K), 125000 (125K), 1000000 (1M) y 8000000 (8M) de ecuaciones. Se evaluó la influencia de los esquemas de pre-condicionamiento en el aumento o disminución de la eficiencia de resolución por el GCP de los SELD planteados por las diferentes soluciones de la EDPFS mediante las DF implementados en ANISOFLOW usando las herramientas de PETSc.

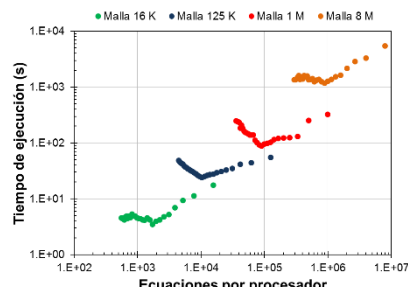


Figura 3.- Escalabilidad en la ejecución de los diferentes modelos con preconditionamiento por Jacobi clásico.

En la Figura 3 se muestran los resultados del tiempo de ejecución en función de la cantidad de ecuaciones almacenadas por cada procesador durante la ejecución, considerando únicamente el pre-condicionamiento por el método de Jacobi. El tiempo de ejecución disminuye potencialmente con la cantidad de transacciones por procesador, al aumentar la cantidad de procesadores disponibles de cero a doce; i.e., en este intervalo de disponibilidad de recurso computacional el escalamiento de la solución por efecto de la paralelización es adecuado.

Conclusiones

ANISOFLOW es un software flexible porque permite considerar explícitamente las diferentes características hidráulicas del medio hidrogeológico, la heterogeneidad y la anisotropía de la conductividad hidráulica y la heterogeneidad del coeficiente de almacenamiento. De la misma forma, permite representar la variabilidad espacio-temporal de las condiciones de contorno del acuífero y las acciones exteriores actuando sobre éste; al tiempo que abre la posibilidad de seleccionar diferentes esquemas de resolución de los modelos, de acuerdo con del PETSc.

Referencias

- Anderman, E.R., K.L. Kipp, M.C Hill, J. Valstar, R.M. Neupauer (2002) *Documentation of the Model-Layer Variable-Direction Horizontal Anisotropy (LVDA) Capability of the Hydrogeologic-Unit Flow (HUF) Package. MODFLOW-2000, the U.S. Geological Survey Modular Groundwater Model*. U.S. Geological Survey Open-File Report 02-409. Denver, Colorado.
- Balay S., S. Abhyankar, M. Adams, J. Brown, P. Brune, K. Buschelman, L. Dalcin, V. Eijkhout, W. Gropp, D. Karpeyev, D. Kaushik, M. Knepley, L. Curfman McInnes, K. Rupp, B. Smith, S. Zampini, H. Zhang, and H. Zhang Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory (2012) *PETSc User's Manual*. Revision 3.3. Argonne, Illinois.
- Benzi M. (2002) Preconditioning techniques for large linear systems: a survey. *Journal of Computational Physics*, 182(2), 418–477.
- Li L., H. Zhou, J.J. Gómez-Hernández (2010) Steady-state saturated groundwater flow modeling with full tensor conductivities using finite differences. *Computers and Geosciences*, 36(10), 1211–1223.
- Salamon P. (2006). *On Modeling Contaminant Transport in Complex Porous Media Using Random Walk Particle Tracking*. Tesis Doctoral. Universitat Politècnica de València.